

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 549 172**

51 Int. Cl.:

C07D 239/47 (2006.01)

A01N 43/54 (2006.01)

A01P 3/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **22.01.2009** **E 12192553 (1)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **19.08.2015** **EP 2562166**

54 Título: **Derivados de 5-fluoropirimidina como fungicidas**

30 Prioridad:

22.01.2008 US 11799 P
17.11.2008 US 115297 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
23.10.2015

73 Titular/es:

DOW AGROSCIENCES, LLC (100.0%)
9330 Zionsville Road
Indianapolis, Indiana 46268-1054, US

72 Inventor/es:

BENKO, ZOLTAN;
BOEBEL, TIMOTHY;
BREAUX, NNEKA;
BRYAN, KRISTY;
DAVIS, GEORGE;
EPP, JEFFREY;
LORSBACH, BETH;
MARTIN, TIMOTHY;
MEYER, KEVIN;
NADER, BASSAM;
OWEN, W.;
POBANZ, MARK;
RUIZ, JAMES;
SMITH, FRISBY D.;
SULLENBERGER, MICHAEL;
WEBSTER, JEFFERY;
YAO, CHENGLIN y
YOUNG, DAVID

74 Agente/Representante:

DE ELZABURU MÁRQUEZ, Alberto

ES 2 549 172 T3

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

Derivados de 5-fluoropirimidina como fungicidas

Campo de la invención

La presente descripción se refiere al campo de las 5-fluoropirimidinas y sus derivados y a al uso de estos compuestos como fungicidas.

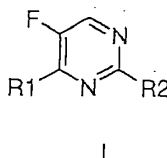
Antecedentes y resumen de la invención

Los fungicidas son compuestos, de origen natural o sintético, que actúan para proteger y curar las plantas frente al daño causado por hongos importantes en agricultura. En general, un solo fungicida no es útil en todas las situaciones. Por consiguiente, se está investigando para producir fungicidas que puedan tener un mejor rendimiento, sean más fáciles de usar y cuesten menos.

El documento EP 0332579 A2 describe amidas del ácido 2,6-dihalogenosustituido-isonicotínico para usar para el control de microorganismos fitopatógenos. En una realización, las amidas del ácido 2,6-dihalogenosustituido-isonicotínico tienen un resto de pirimidin-4-ilo unido al átomo de nitrógeno del grupo amida, cuyo resto de pirimidin-4-ilo puede estar sustituido, entre otros con halógeno y alcoxi C₁-C₆.

La presente descripción se refiere a compuestos de 5-fluoropirimidina y a su uso como fungicidas. Los compuestos de la presente descripción pueden ofrecer protección contra ascomicetos, basidiomicetos, deuteromicetos y oomicetos.

En un primer aspecto, la presente invención se refiere a compuestos de fórmula I:



en donde R¹ es -N(R³)R⁴;

R² es -OR²¹;

R³ es:

-C(=NR¹⁶)SR¹⁶;

R⁴ es:

H;

R⁸ es independientemente alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, amino, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰, o un anillo saturado o insaturado, de 5 o 6 miembros, que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

R¹¹ es independientemente halógeno, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alquiltio C₁-C₆, halogenoalquiltio C₁-C₆, amino, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, alcoxycarbonilo C₂-C₅, o alquilcarbonilo C₂-C₆;

R¹⁶ es H, alquilo C₁-C₆ o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

R²⁰ es independientemente halógeno, ciano, nitro, amino, alcoxialcoxi C₁-C₆, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, halogenoalquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquinilsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquinilsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, alcoxycarbonilo C₂-C₆, alquilcarbonilo C₂-C₆, trialquilsililo C₃-C₆, 2-[(E)-metoxiimino]-N-metil-acetamidilo, fenilo, bencilo, benciloxi, fenoxi o un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros, en donde cada fenilo, bencilo, benciloxi, fenoxi, o anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 sustituyentes independientemente seleccionados de R³¹;

R²¹ es:

- 5 H;
alquilo C₁-C₁₄;
halogenoalquilo C₁-C₆;
alquenilo C₂-C₄;
halogenoalquenilo C₂-C₄;
alquinilo C₃-C₄;
halogenoalquinilo C₃-C₄;
fenilo, naftilo o tetrahydroquinolinilo cada uno opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- 10 -(CHR²²)_mR²³;
-(CHR²⁴)_m(O)OR²⁵;
-(CHR²⁴)_mC(O)R²⁶;
-(CHR²⁴)_mC(O)N(R²⁷)R²⁸;
-(CHR²⁴)_mOR²⁹;
-(CHR²⁴)_mSR²⁹
- 15 -(CHR²⁴)_mN(R²⁷)R²⁸;
-C(=O)R³²;
-N=C(R³²)(R³⁶);
-NR²⁵C(=O)OR²⁵
-Si(R⁸)₃;
- 20 -SO₂R³³;
alcoxicarbonilo C₂-C₆;
alquilaminocarbonilo C₂-C₆;
alquilcarbonilo C₂-C₆;
- 25 azúcares seleccionados del grupo que consiste en beta-D-glucosa-tetraacetato, ramnosa, fructosa y pentosa; o
un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, triazolilo o isoxazolilo, en donde cada anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰;
- 30 en donde m es un número entero de 1-3;
R²² es independientemente:
H;
halógeno;
ciano;
- 35 nitro;
alquilo C₁-C₆;
halogenoalquilo C₁-C₆;
fenilo o bencilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

	hidroxialquilo C ₁ -C ₆ ;
	alcoxialquilo C ₂ -C ₆ ;
	halogenoalquino C ₃ -C ₆ ;
	alqueno C ₂ -C ₆ ;
5	halogenoalqueno C ₂ -C ₆ ;
	alquino C ₃ -C ₆ ;
	alcoxi C ₁ -C ₆ ;
	halogenoalcoxi C ₁ -C ₆ ;
	alquiltio C ₁ -C ₆ ;
10	alquilamino C ₁ -C ₆ ;
	dialquilamino C ₂ -C ₈ ;
	cicloalquilamino C ₃ -C ₆ ;
	(alquil)cicloalquilamino C ₄ -C ₆ ;
	alquilcarbonilo C ₂ -C ₆ ;
15	alcoxycarbonilo C ₂ -C ₆ ;
	alquilaminocarbonilo C ₂ -C ₆ ;
	dialquilaminocarbonilo C ₃ -C ₈ ;
	trialquilsililo C ₃ -C ₆ ;
20	anillo heteroarómicos condensados con anillo, seleccionado del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo y benzoimidazolilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R ²⁰ ; o
	un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionados del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo y tienilo;
25	R ²³ es:
	H;
	halógeno;
	alquilo C ₁ -C ₆ ;
	halogenoalquilo C ₁ -C ₆ ;
30	dialquilamino C ₂ -C ₆ ;
	fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R ²⁰ ;
35	anillos heteroarómicos condensados con anillo seleccionados del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo, benzofuranilo y benzoimidazolilo, 2,3-dihidrobencofuran-2-ilo, 4-metil-4H-tieno[3,2-b]pirrol-5-ilo, 1-metil-1H-indol-5-ilo, imidazo[1,2-a]piridin-2-ilo, imidazo[2,1-b]tiazol-6-ilo, benzotiazol-2-ilo, benzo[b]tiofen-7-ilo, y 1-metil-1H-indazol-3-ilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R ²⁰ ;
	naftilo;
	benzo[1,3]dioxolilo;
40	pirrolidinonilo;
	oxetanilo;

- alquiltio C₁-C₆ opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰;
- un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹; o
- 5 un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo, imidazolilo, tiofen-2-ilo y tiofen-3-ilo, en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, bencilo, o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- 10 R²⁵ es H, alquilo C₁-C₆, fenilo o bencilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- R²⁶ es:
- H;
- alquilo C₁-C₆;
- alcoxi C₁-C₆;
- 15 fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, triazolilo e isoxazolilo;
- R²⁷ y R²⁸ son independientemente:
- 20 H;
- alquilo C₁-C₆;
- bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- 25 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;
- R²⁹ es:
- H;
- alquilo C₁-C₆;
- halogenoalquilo C₁-C₆;
- 30 alcoxialquilo C₁-C₆;
- alquilcarbonilo C₂-C₆;
- bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- 35 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;
- R³⁰ es independientemente halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquinsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquinsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, trialkilsililo C₃-C₆, tiazolilo, fenilo, pirimidinilo, o piridilo, en donde el tiazolilo, fenilo, piridilo o pirimidinilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- 40 R³¹ es independientemente halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆,

C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinoxilo C₃-C₆, halogenoalquinoxilo C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alquinitio C₂-C₆, halogenoalquinitio C₂-C₆, halogenoalquinitiosulfonilo C₂-C₆, alquinitio C₃-C₆, alquinitiosulfonilo C₃-C₆, halogenoalquinitiosulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈ o trialquilsililo C₃-C₆;

R³² es independientemente:

alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinoxilo C₃-C₆, halogenoalquinoxilo C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alquinitio C₂-C₆, halogenoalquinitio C₂-C₆, halogenoalquinitiosulfonilo C₂-C₆, alquinitio C₃-C₆, alquinitiosulfonilo C₃-C₆, halogenoalquinitiosulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, trialquilsililo C₃-C₆;

fenilo en donde el anillo de fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o

un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

R³³ es independientemente:

alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, fenilo o tienilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o

un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

R³⁶ es H, ciano, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

alternativamente R³² y R³⁶ se pueden considerar juntos para formar:

un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹.

En un segundo aspecto, la presente invención se refiere a una composición fungicida para el control o la prevención del ataque fúngico, que comprende los compuestos del primer aspecto y un material vehículo fitológicamente aceptable.

En un tercer aspecto, la presente invención se refiere a un método para el control o la prevención del ataque fúngico en una planta, incluyendo el método las etapas de aplicar una cantidad eficaz como fungicida de uno o más de los compuestos del primer aspecto, a al menos uno de la planta, la zona adyacente a la planta, el suelo adaptado para soportar el crecimiento de la planta, una raíz de la planta, el follaje de la planta y la semilla adaptada para producir al menos uno de la planta y otra planta.

El término "alquilo" se refiere a una cadena de carbonos no ramificada, ramificada o cíclica, incluyendo metilo, etilo, propilo, butilo, isopropilo, isobutilo, butilo terciario, pentilo, hexilo, ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo y similares.

El término "alquenilo" se refiere a una cadena de carbonos ramificada, no ramificada o cíclica, que contiene uno o más dobles enlaces, incluyendo etenilo, propenilo, butenilo, isopropenilo, isobutenilo, ciclohexenilo, y similares.

El término "alquinilo" se refiere a una cadena de carbonos ramificada o no ramificada que contiene uno o más triples enlaces, incluyendo propinilo, butinilo y similares.

Como se usa a lo largo de esta memoria descriptiva, el término "R" se refiere al grupo que consiste en alquilo C₂₋₈, alquenilo C₃₋₈ o alquinilo C₃₋₈, salvo que se exponga otra cosa.

El término "alcoxi" se refiere a un sustituyente -OR.

El término "alcoxicarbonilo" se refiere a un sustituyente -C(O)-OR.

El término "alquilcarbonilo" se refiere a un sustituyente -C(O)-R.

El término "alquilsulfonilo" se refiere a un sustituyente -SO₂-R.

El término "halogenoalquilsulfonilo" se refiere a una sustitución sulfonilo en un alquilo que está parcialmente sustituido con átomos de halógeno.

- El término "alquiltio" se refiere a un sustituyente -S-R.
- El término "alquilaminocarbonilo" se refiere a un sustituyente -C(O)-N(H)-R.
- El término "dialquilaminocarbonilo" se refiere a un sustituyente -C(O)-NR₂.
- 5 El término "alquilcicloalquilamino" se refiere a un sustituyente cicloalquilamino que está sustituido con un grupo alquilo.
- El término "trialquilsililo" se refiere a -SiR₃.
- El término "ciano" se refiere a un sustituyente -C≡N.
- El término "hidroxilo" se refiere a un sustituyente -OH.
- El término "amino" se refiere a un sustituyente -NH₂.
- 10 El término "alquilamino" se refiere a un sustituyente -N(H)-R.
- El término "dialquilamino" se refiere a un sustituyente -NR₂.
- El término "alcoxialcoxi" se refiere a -O(CH₂)_nO(CH₂)_n donde n es un número entero 1-3
- El término "alcoxialquilo" se refiere a una sustitución alcoxi en un alquilo.
- 15 El término "halogenoalcoxialquilo" se refiere a una sustitución alcoxi en un alquilo que puede estar parcialmente sustituido con átomos de halógeno.
- El término "hidroxialquilo" se refiere a un alquilo que está sustituido con un grupo hidroxilo.
- El término "halogenoalcoxi" se refiere a un sustituyente -OR-X, en donde X es Cl, F, Br, o I, o cualquier combinación de los mismos.
- 20 El término "halogenoalquilo" se refiere a un alquilo, que está sustituido con Cl, F, I, o Br o cualquier combinación de los mismos.
- El término "halogenoalqueno" se refiere a un alqueno, que está sustituido con Cl, F, I, o Br o cualquier combinación de los mismos.
- El término "halogenoalquino" se refiere a un alquino, que está sustituido con Cl, F, I, o Br o cualquier combinación de los mismos.
- 25 El término "halógeno" o "halogeno-" se refiere a uno o más átomos de halógeno, definidos como F, Cl, Br y I.
- El término "hidroxicarbonilo" se refiere a un sustituyente -C(O)-OH.
- El término "nitro" se refiere a un sustituyente -NO₂.
- El término "tienilo" se refiere a un anillo aromático de 5 miembros con un átomo de azufre.
- 30 A lo largo de la descripción, la referencia a compuestos de fórmula I se lee como que incluye también isómeros ópticos y sales de la fórmula I, e hidratos de los mismos. Específicamente, cuando la fórmula I contiene un grupo alquilo de cadena ramificada, se entiende que dichos compuestos incluyen isómeros ópticos y racematos de los mismos. Las sales de ejemplo incluyen: hidrocloruro, hidrobromuro, hidroyoduro, y similares.
- Los expertos en la técnica también entienden que está permitida la sustitución adicional, salvo que se indique lo contrario, siempre que se cumplan las reglas de enlaces químicos y energía de tensión, y el producto todavía presente actividad fungicida.
- 35 La solicitud describe además el uso de un compuesto de fórmula I, para proteger una planta contra el ataque por un organismo fitopatógeno o el tratamiento de una planta infestada por un organismo fitopatógeno, que comprende la aplicación del compuesto de fórmula I, o una composición que comprende el compuesto, en el suelo, una planta, una parte de una planta, follaje y/o semillas.
- 40 La solicitud describe además una composición útil para proteger a una planta contra el ataque por un organismo fitopatógeno y/o el tratamiento de una planta infestada por un organismo fitopatógeno, que comprende un compuesto de fórmula I y un material vehículo fitológicamente aceptable.

Descripción detallada de la presente descripción

Los compuestos de la presente descripción se pueden aplicar por cualquiera de una variedad de técnicas conocidas, sea como los compuestos o como formulaciones que comprenden los compuestos. Por ejemplo, los compuestos se pueden aplicar a las raíces, semillas o el follaje de las plantas para el control de diferentes hongos, sin dañar el valor comercial de las plantas. Los materiales se pueden aplicar en forma de cualquiera de los tipos de formulaciones usadas en general, por ejemplo, como soluciones, polvos, polvos humectables, concentrados fluidos o concentrados emulsionables.

Preferiblemente, los compuestos de la presente descripción se aplican en forma de una formulación, que comprende uno o más de los compuestos de fórmula I, con un vehículo fitológicamente aceptable. Las formulaciones concentradas se pueden dispersar en agua u otros líquidos, para aplicar, o las formulaciones pueden ser de tipo polvo o granulares, las cuales se pueden aplicar sin más tratamiento. Las formulaciones se pueden preparar de acuerdo con procedimientos que son convencionales en la técnica de la química agrícola.

La presente descripción contempla todos los vehículos mediante los cuales pueden formularse uno o más de los compuestos para el suministro y uso como fungicida. Típicamente, las formulaciones se aplican como suspensiones o emulsiones acuosas. Dichas suspensiones o emulsiones se pueden producir a partir de formulaciones solubles en agua, suspendibles en agua o emulsionables, que son sólidas, normalmente conocidas como polvos humectables; o líquidas, normalmente conocidos como concentrados emulsionables, suspensiones acuosas o concentrados de suspensiones. Como se apreciará fácilmente, se puede usar cualquier material al que se puedan añadir estos compuestos, con la condición de que den la utilidad deseada sin interferencia significativa con la actividad de estos compuestos como agentes antifúngicos.

Los polvos humectables, que pueden estar compactados para formar gránulos dispersables en agua, comprenden una mezcla íntima de uno o más de los compuestos de fórmula I, un vehículo inerte y tensioactivos. La concentración del compuesto en el polvo humectable puede ser de aproximadamente 10 por ciento a aproximadamente 90 por ciento en peso, basado en el peso total del polvo humectable, preferiblemente de aproximadamente 25 por ciento en peso a aproximadamente 75 por ciento en peso. En la preparación de las formulaciones de polvo humectable, los compuestos se pueden mezclar con cualquier sólido finamente dividido tal como profilita, talco, tiza, yeso, tierra de Fuller, bentonita, atapulgita, almidón, caseína, gluten, arcillas de montmorillonita, tierras de diatomeas, silicatos purificados o similares. En dichas operaciones, el vehículo finamente dividido y los tensioactivos se mezclan típicamente con el o los compuestos y se muelen.

Los concentrados emulsionables de los compuestos de fórmula I pueden comprender una concentración conveniente, tal como de aproximadamente 10 por ciento en peso a aproximadamente 50 por ciento en peso del compuesto, en un líquido adecuado, basado en el peso total del concentrado. Los compuestos se pueden disolver en un vehículo inerte, que es un disolvente miscible con el agua o una mezcla de disolventes orgánicos inmiscibles con el agua, y emulsionantes. Los concentrados se pueden diluir con agua y aceite para formar mezclas de pulverización en forma de emulsiones de aceite en agua. Los disolventes orgánicos útiles incluyen compuestos aromáticos, en especial las partes naftalénica y olefínica de alto punto de ebullición del petróleo, tales como nafta aromática pesada. También se pueden usar otros disolventes orgánicos, por ejemplo, disolventes terpénicos, incluyendo derivados de colofonia, cetonas alifáticas, tales como ciclohexanona, y alcoholes complejos, tales como 2-etoxietanol.

Los emulsionantes que se pueden usar ventajosamente en la presente memoria, los pueden determinar fácilmente los expertos en la técnica e incluyen varios emulsionantes no iónicos, aniónicos, catiónicos y anfóteros, o una mezcla de dos o más emulsionantes. Los ejemplos de emulsionantes no iónicos útiles para preparar los concentrados emulsionables incluyen los éteres de polialquilenglicol y productos de condensación de alquil y aril-fenoles, alcoholes alifáticos, aminas alifáticas o ácidos grasos con óxido de etileno, óxidos de propileno tales como alquilfenoles etoxilados y ésteres carboxílicos solubilizados con el poliol o polioxilalquilenos. Los emulsionantes catiónicos incluyen compuestos de amonio cuaternario y sales de aminas grasas. Los emulsionantes aniónicos incluyen las sales solubles en aceite (p. ej., calcio) de ácidos alquilarilsulfónicos, sales solubles en aceite o éteres de poliglicol sulfatados y sales adecuadas de éter de poliglicol fosfatado.

Los líquidos orgánicos representativos que se pueden usar en la preparación de concentrados emulsionables de los compuestos de la presente invención son los líquidos aromáticos tales como xileno, fracciones de propilbenceno; o fracciones de naftaleno mixtas, aceites minerales, líquidos orgánicos aromáticos sustituidos tales como ftalato de dioctilo; queroseno; dialquilamidas de diferentes ácidos grasos, en particular las dimetilamidas de glicoles grasos y derivados de glicol, tales como éter de n-butilo, éter de etilo o éter de metilo del dietilenglicol, y el éter de metilo de trietilenglicol y similares. También se pueden usar mezclas de dos o más líquidos orgánicos en la preparación del concentrado emulsionable. Los líquidos orgánicos incluyen xileno y fracciones de propilbenceno, siendo el más preferido en algunos casos el xileno. Típicamente se usan agentes de dispersión tensioactivos en formulaciones líquidas y en una cantidad de 0,1 a 20 por ciento en peso, basado en el peso combinado del agente de dispersión con uno o más de los compuestos. Las formulaciones también pueden contener otros aditivos compatibles, por ejemplo, reguladores del crecimiento de la planta y otros compuestos biológicamente activos usados en agricultura.

Las suspensiones acuosas comprenden suspensiones de uno o más compuestos de fórmula I insolubles en agua, dispersas en un vehículo acuoso en una concentración en el intervalo de aproximadamente 5 a aproximadamente 50 por ciento en peso, basado en el peso total de la suspensión acuosa. Las suspensiones se preparan por molienda fina de uno o más de los compuestos, y mezclado enérgico del material molido en un vehículo compuesto de agua y tensioactivos elegidos de los mismos tipos discutidos antes. También se pueden añadir otros componentes, tales como sales inorgánicas y gomas sintéticas o naturales, para aumentar la densidad y la viscosidad del vehículo acuoso.

Los compuestos de fórmula I también se pueden aplicar como formulaciones granulares, que son particularmente útiles para aplicaciones en el suelo. Las formulaciones granulares contienen en general de aproximadamente 0,5 a aproximadamente 10 por ciento en peso, basado en el peso total de la formulación granular, del o de los compuestos dispersados en un vehículo inerte que consiste enteramente o en gran parte en un material inerte bastante dividido, tal como atapulgita, bentonita, diatomita, arcilla o una sustancia barata similar. Normalmente, dichas formulaciones se preparan resolviendo los compuestos en un disolvente adecuado y aplicándolo a un vehículo granular el cual se ha formado previamente con el tamaño de partículas adecuado, en el intervalo de aproximadamente 0,5 a aproximadamente 3 mm. Un disolvente adecuado es un disolvente en el que el compuesto es sustancial o completamente soluble. Dichas formulaciones también pueden prepararse haciendo una masa o pasta del vehículo y el compuesto y el disolvente, y machacando y secando para obtener la partícula granular deseada.

Los polvos que contienen los compuestos de fórmula I, se pueden preparar mezclando íntimamente uno o más de los compuestos en forma pulverulenta con un vehículo agrícola pulverulento adecuado, tal como, por ejemplo, arcilla caolín, roca volcánica molida y similares. Los polvos pueden convenientemente contener de aproximadamente 1 a aproximadamente 10 por ciento en peso del compuesto, basado en el peso total del polvo.

Las formulaciones pueden contener adicionalmente tensioactivos adyuvantes para potenciar la deposición, humectación y penetración de los compuestos sobre el cultivo y organismos objetivo. Estos tensioactivos adyuvantes se pueden usar opcionalmente como un componente de la formulación o como una mezcla de depósito. La cantidad de tensioactivo adyuvante típicamente variará de 0,01 a 1,0 por ciento en volumen, basado en un volumen de agua para pulverizar, preferiblemente de 0,05 a 0,5 por ciento en volumen. Los tensioactivos adyuvantes adecuados incluyen, pero no se limitan a nonilfenoles etoxilados, alcoholes sintéticos o naturales etoxilados, sales de los ésteres de ácidos sulfosuccínicos, organosiliconas etoxiladas, aminas grasas etoxiladas y mezclas de tensioactivos con aceites minerales o vegetales. Las formulaciones también pueden incluir emulsiones de aceite en agua tales como las descritas en la solicitud de patente de EE.UU. nº de Serie 11/495.228.

Las formulaciones pueden incluir opcionalmente combinaciones que contengan otros compuestos plaguicidas. Dichos compuestos plaguicidas adicionales pueden ser fungicidas, insecticidas, herbicidas, nematocidas, miticidas, artropodocidas, bactericidas o combinaciones de los mismos que sean compatibles con los compuestos de la presente invención en el medio seleccionado para la aplicación, y no sean antagonistas de la actividad de los presentes compuestos. Por consiguiente, en dichas realizaciones, el otro compuesto plaguicida se usa como un tóxico adicional del mismo o para un uso plaguicida diferente. Los compuestos de fórmula I y el compuesto plaguicida en la combinación pueden estar presentes, en general, en una relación en peso de 1:100 a 100:1.

Los compuestos de la presente descripción también se pueden combinar con otros fungicidas para formar mezclas fungicidas y mezclas sinérgicas de los mismos. Los compuestos fungicidas de la presente descripción se aplican con frecuencia junto con uno o más de otros fungicidas para controlar una variedad más amplia de enfermedades indeseables. Cuando se usan junto con otro u otros fungicidas, los compuestos presentes reivindicados pueden formularse con el o los otros fungicidas, mezclarse en un depósito con el o los otros fungicidas o aplicarse secuencialmente con el o los otros fungicidas. Dichos otros fungicidas pueden incluir 2-(tiocianato-metil)-benzotiazol, 2-fenilfenol, sulfato de 8-hidroxiquinolina, antimicina, Ampelomyces, quisqualis, azaconazol, azoxistrobina, Bacillus subtilis, benalaxilo, benomilo, bentiavalicarb-isopropilo, sal bencilaminobenceno-sulfonato (BABS), bicarbonatos, bifenilo, bismertiazol, bitertanol, bixafeno, blasticidina-S, bórax, mezcla de Burdeos, boscalid, bromuconazol, bupirimato, polisulfuro de calcio, captafol, captano, carbendazim, carboxin, carpropamid, carvona, cloroneb, clorotalonilo, clozolinato, Coniothyrium minitans, hidróxido de cobre, octanoato de cobre, oxiclورو de cobre, sulfato de cobre, sulfato de cobre (tribásico), óxido cuproso, ciazofamid, ciflufenamid, cimoxanilo, ciproconazol, ciprodinilo, dazomet, debacarb, etilenbis-(ditiocarbamato) de diamonio, diclofluanid, diclorofeno, diclocimet, diclomezina, diclorán, dietofencarb, difenoconazol, ion difenzoquat, diflumentorim, dimetomorf, dimoxistrobina, diniconazol, diniconazol-M, dinobutón, dinocap, difenilamina, ditianón, dodemorf, acetato de dodemorf, dodina, dodina base libre, edifenfós, enestrobina, epoxiconazol, etaboxam, etoxiquina, etridiazol, famoxadona, fenamidona, fenarimol, fenbuconazol, fenfuram, fenhexamid, fenoxanilo, fencpiclonilo, fenpropidin, fenpropimorf, fentina, acetato de fentina, hidróxido de fentina, ferbam, ferimzona, fluazinam, fludioxonilo, flumorf, fluopicolida, fluopiram, fluoroimida, fluoxastrobina, fluquinconazol, flusilazol, flusulfamida, flutolanilo, flutriafol, folpet, formaldehído, fosetil, fosetil-aluminio, fuberidazol, furalaxilo, furametpir, guazatina, acetato de guazatina, GY-81, hexaclorobenceno, hexaconazol, himexazol, imazalilo, sulfato de imazalilo, imibenconazol, iminocadina, triacetato de iminocadina, tris(albesilato) de iminocadina, ipconazol, iprobenfós, iprodiona, iprovalicarb, isoprotiolano, kasugamicina, hidrocloreto de kasugamicina hidrato, kresoximmethyl, mancozeb, mandipropamid, maneb, mepanipirim, mepronilo, cloruro mercúrico, óxido mercúrico, cloruro mercurioso, metalaxilo, mefenoxam, metalaxil-M,

metam, metam-amonio, metam-potasio, metam-sodio, metconazol, metasulfocarb, yoduro de metilo, isotiocianato de metilo, metiram, metominostrobina, metrafenona, mildiomicina, miclobutanol, nabam, nitroal-isopropilo, nuarimol, octilina, ofurace, ácido oleico (ácidos grasos), orisastrobina, oxadixilo, oxina-cobre, fumarato de oxpoconazol, oxicarboxina, pefurazolato, penconazol, pencicurón, pentaclorofenol, laurato de pentaclorofenilo, pentiopirad, acetato de fenilmercurio, ácido fosfónico, ftalida, picoxistrobina, polioxina B, polioxinas, polioxorim, bicarbonato de potasio, sulfato de potasio e hidroxiquinolina, probenazol, procloraz, procimidona, propamocarb, hidrocloreto de propamocarb, propiconazol, propineb, proquinazid, protioconazol, piraclostrobina, pirazofós, piribencarb, piributicarb, pirifenox, pirimetanilo, piroquilón, quinoclamina, quinoxifeno, quintozeno, extracto de *Reynoutria sachalinensis*, siltiofamo, simeconazol, 2-fenilfenóxido de sodio, bicarbonato de sodio, pentaclorofenóxido de sodio, espiroxamina, azufre, SYP-Z071, SYP-Z048, aceites de alquitrán, tebuconazol, tecnazeno, tetraconazol, tiabendazol, tifulazamida, tiofanato-metilo, tiram, tiadinilo, tolclorós-metilo, tolilfluanid, triadimefón, triadimenol, triazóxido, triciclazol, tridemorf, trifloxistrobina, triflumizol, triforina, triticonazol, validamicina, vinclozolina, zineb, ziram, zoxamida, *Candida oleophila*, *Fusarium oxysporum*, *Gladiolium* spp., *Phlebiopsis gigantea*, *Streptomyces griseoviridis*, *Trichoderma* spp., (RS)-N-(3,5-diclorofenil)-2-(metoximetil)-succinimida, 1,2-dicloropropano, 1,3-dicloro-1,1,3,3-tetrafluoroacetona hidrato, 1-cloro-2,4-dinitronaftaleno, 1-cloro-2-nitropropano, 2-(2-heptadecil-2-imidazolin-1-il)etanol, 1,1,4,4-tetraóxido de 2,3-dihidro-5-fenil-1,4-ditiina, acetato de 2-metoxietilmercurio, cloruro de 2-metoxietilmercurio, silicato de 2-metoxietilmercurio, 3-(4-clorofenil)-5-metilrodanina, tiocianato de 4-(2-nitroprop-1-enil)fenilo, ampropilfós, anilazina, azitiram, polisulfuro de bario, Bayer 32394, benodanilo, benquinox, bentalurón, benzamacril; benzamacril-isobutilo, benzamorf, binapacril, sulfato de bis(metilmercurio), óxido de bis(tributilestaño), butiobato, cromato-sulfato de cadmio, calcio, cobre y cinc, carbamorf,

CECA, clobentiazona, cloraniformetán, clorfenazol, clorquinox, climbazol, bis(3-fenilsalicilato) de cobre, cromato de cobre y cinc, cufraneb, hidrazinosulfato cúprico, cuprobam, ciclafuramid, cipendazol, ciprofuram, decafentín, diclona, diclozolina diclobutrazol, dimetirimol, dinocron, dinosulfón, dinoterbón, dipiritiona, ditalimfos, dodicina, drazoxolón, EBP, ESBP, etaconazol, etem, etirim, fenaminosulf, fenapanil, fenitropan, fluotrimazol, furcarbanil, furconazol, furconazol-cis, furmecyclox, furofanato, gliodina, griseofulvina, halacrinato, Hercules 3944, hexiltiofos, ICIA0858, isopamfos, isovaldion, mebenil, mecarbinzid, metazoxolón, metfuroxam, metilmercurio diciandiamida, metsulfovax, milneb, anhídrido mucoclórico, miclozolín, N-3,5-diclorofenilsuccinimida, N-3-nitrofenilitaconimida, natamicina, N-etilmercurio-4-toluenosulfonanilida, bis(dimetilditiocarbamato) de níquel, OCH, dimetilditiocarbamato de fenilmercurio, nitrato de fenilmercurio, fosdifeno, protiocarb; hidrocloreto de protiocarb, piracarbolid, piridinitrilo, piroxiclor, piroxifur, quinacetol; sulfato de quinacetol, quinazamid, quinconazol, rabenzazol, salicilanilida, SSF-109, sultropen, tecoram, tiadiflúor, ticofeno, tioclorfenim, tiofanato, tioquinox, tioximid, triamifos, triarimol, triazbutilo, triclamida, urbacid, XRD-563 y zarilamid, IK-1140, NC-224 y cualquier combinación de los mismos.

Adicionalmente, los compuestos de la presente invención se pueden combinar con otros plaguicidas, que incluyen insecticidas, nematocidas, miticidas, artropodocidas, bactericidas o combinaciones de los mismos que sean compatibles con los compuestos de la presente invención en el medio seleccionado para la aplicación, y no sean antagonistas con la actividad de los presentes compuestos para formar mezclas plaguicidas y mezclas sinérgicas de los mismos. Los compuestos fungicidas de la presente descripción se pueden aplicar junto con uno o más de otros plaguicidas para controlar una variedad más amplia de plagas indeseables. Cuando se usan junto con otros plaguicidas, los compuestos presentes reivindicados pueden formularse con el o los otros plaguicidas, mezclarse en un depósito con el o los otros plaguicidas o aplicarse secuencialmente con el o los otros plaguicidas. Los insecticidas típicos incluyen, pero no se limitan a: insecticidas antibióticos tales como alosamidina y turingiensina; insecticidas tipo lactonas macrocíclicas tales como espinosad; insecticidas tipo avermectina tales como abamectina, doramectina, emamectina, eprinomectina, ivermectina y selamectina; insecticidas tipo milbemicina tales como lepimectina, milbemectina, oxima de milbemicina y moxidectina; insecticidas de arsénico tales como arseniato de calcio, acetoarsenito de cobre, arseniato de cobre, arseniato de plomo, arsenito de potasio y arsenito de sodio; insecticidas botánicos tales como anabasina, azadirachtina, d-limoneno, nicotina, piretrinas, cinerinas, cinerina I, cinerina II, jasmolina I, jasmolina II, piretrina I, piretrina II, quassia, rotenona, riania y sabadilla; insecticidas carbamato tales como bendiocarb y carbarilo; insecticidas de metilcarbamato de benzofuranilo tales como benfuracarb, carbofuran, carbosulfán, decarbofuran y furatiocarb; insecticidas de dimetilcarbamato dimitán, dimetilán, hyquincarb y pirimicarb; insecticidas de carbamato de oxima tales como alanycarb, aldycarb, aldoxicarb, butocarboxima, butoxicarboxima, metomil, nitrilacarb, oxamil, tazimcarb, tiocarboxima, tiodicarb y tiofanox; insecticidas de metilcarbamato de fenilo tales como alixicarb, aminocarb, bufencarb, butacarb, carbanolato, cloetocarb, dicresilo, dioxacarb, EMPC, etiofencarb, fenetacarb, fenobucarb, isoprocarb, metiocarb, metolcarb, mexacarbato, promacil, promecarb, propoxur, trimetacarb, XMC y xililcarb; insecticidas de dinitrofenol tales como dinex, dinoprop, dinosam y DNOC; insecticidas de flúor tales como hexafluorosilicato de bario, criolita, fluoruro de sodio, hexafluorosilicato de sodio y sulfuramid; insecticidas de formamida tales como amitraz, clordimeform, formetanato y formparanato; insecticidas fumigantes tales como acrilonitrilo, disulfuro de carbono, tetracloreto de carbono, cloroformo, cloropirina, para-diclorobenceno, 1,2-dicloropropano, formiato de etilo, dibromuro de etileno, dicloruro de etileno, óxido de etileno, cianida de hidrógeno, yodometano, bromuro de metilo, metilcloroformo, cloruro de metileno, naftaleno, fosfina, fluoruro de sulfurilo y tetracloroetano; insecticidas inorgánicos tales como bórax, polisulfuro de calcio, oleato de cobre, cloruro mercurioso, tiocianato de potasio y tiocianato de sodio; inhibidores de la síntesis de quitina tales como bistriflurón, buprofezin, clorfluzurón, ciromazina, diflubenzurón, flucicloxurón, flufenoxurón, hexaflumurón, lufenurón, novalurón, noviflumurón, penflurón, teflubenzurón y triflumurón; imitadores de hormona juvenil tales como epofenonano, fenoxycarb, hidropreno, quinopreno, metopreno, piriproxifeno y tripreno;

hormonas juveniles tales como hormona juvenil I, hormona juvenil II y hormona juvenil III; agonistas de hormona de muda tales como cromafenozida, halofenozida, metoxifenozida y tebufenozida; hormonas de muda tales como α -ecdisona y ecdisterona; inhibidores de muda tales como diofenolán; precocenos tales como precoceno I, precoceno II y precoceno III; reguladores del crecimiento de los insectos no clasificados tales como diciclanilo; insecticidas análogos de nereistoxina tales como besultap, cartap, tiociclam y tiosultap; insecticidas nicotinoides tales como flonicamid; insecticidas de nitroguanidina tales como clotianidina, dinotefurán, imidacloprid y tiametoxam; insecticidas de nitrometileno tales como nitenpiram y nitiazina; insecticidas de piridilmetilamina tales como acetamiprid, imidacloprid, nitenpiram y tiacloprid; insecticidas organoclorados tales como bromo-DDT, camfeclor, DDT, pp'-DDT, etil-DDD, HCH, gamma-HCH, lindano, metoxiclor, pentaclorofenol y TDE; insecticidas de ciclodieno tales como aldrín, bromociclen, clorbiclen, clordano, clordecona, dieldrín, dilor, endosulfán, endrín, HEOD, heptaclor, HHDN, isobenzán, isodrín, keleván y mirex; insecticidas de organofosfato tales como bromfenvinfos, clorfenvinfos, croloxifos, diclorvos, dicrotofos, dimetilvinfos, fospirato, heptenofos, metocrolofos, mevinfos, monocrotofos, naled, naftalofos, fosfamidón, propafos, TEPP y tetraclovinfos; insecticidas de organotiofosfato tales como dioxabenzofos, fosmetilán y fentoato; insecticidas de organotiofosfato alifático tales como acetión, amitón, cadusafos, cloretixifos, clormefos, demefión, demefión-O, demefión-S, demetón, demetón-O, demetón-S, demetón-metilo, demetón-O-metilo, demetón-S-metilo, demetón-S-metilsulfón, disulfotón, etián, etoprofos, IPSP, isotioato, malatión, metacrifos, oxidemetónmetilo, oxideprofos, oxidisulfotón, forato, sulfotep, terbufos y tiometón; insecticidas de amida de organotiofosfato alifático tales como amiditián, ciantoato, dimetoato, etoato-metilo, formotián, mecarbam, ometoato, protoato, sofamida y vamidotián; insecticidas de oxima-organotiofosfato tales como clorfoxim, foxim y foxim-metilo; insecticidas de organotiofosfato heterocíclico tales como azametifos, cumafos, cumitoato, dioxatión, endotián, menazon, morfotián, fosalona, piraclofos, piridafentián y quinotián; insecticidas de organotiofosfato benzotiofopirano tales como diticofos y ticofos; insecticidas de organotiofosfato benzotriazina tales como azinfos-etilo y azinfos-metilo; insecticidas de organotiofosfato isoindol tales como dialifos y fosmet; insecticidas de organotiofosfato isoxazol tales como isoxatión y zolaprofos; insecticidas de organotiofosfato pirazolopirimidina tales como clorprazofos y pirazofos; insecticidas de organotiofosfato piridina tales como clorpirifos y clorpirifos-metilo; insecticidas de organotiofosfato pirimidina tales como butatofos, diazinón, etrimfos, lirimfos, pirimifos-etilo, pirimifos-metilo, primidofos, pirimitato y tebupirimfos; insecticidas de organotiofosfato quinoxalina tales como quinalfos y quinalfos-metilo; insecticidas de organotiofosfato tiadiazol tales como atidatián, litidatián, metidatián y protidatián; insecticidas de organotiofosfato triazol tales como isazofos y triazofos; insecticidas de organotiofosfato fenilo tales como azotoato, bromofos, bromofos-etilo, carbofenotián, clortiofos, cianofos, citioato, dicaptón, diclofentián, etafo, famfur, fenclorfos, fenitrotión fensulfotián, fentián, fentián-etilo, heterofos, jodfenfos, mesulfenfos, paratión, paratión-metilo, fenkaptón, fosniclor, profenofos, protiofos, sulprofos, temefos, triclometafos-3 y trifenofos; insecticidas de fosfonato tales como butonato y triclorfón; insecticidas de fosfonotioato tales como mecarfón; insecticidas de feniletilfosfonotioato tales como fonofos y tricloronat; insecticidas de fenil-fenilfosfonotioato tales como cianofenfos, EPN y leptofos; insecticidas de fosforamidato tales como crufomato, fenamifos, fostietán, mefosfolán, fosfolán y pirimetafos; insecticidas de fosforamidotioato tales como acefat, isocarbofos, isofenfos, metamidofos y propetamfos; insecticidas de oforodiamida tales como dimefox, mazidox, mipafox y schradán; insecticidas de oxadiazina tales como indoxacarb; insecticidas de ftalimida tales como dialifos, fosmet y tetrametrina; insecticidas de pirazol tales como acetoprol, etiprol, fipronil, pirafluprol, piriprol, tebufenpirad, tolfenpirad y vaniliprol; insecticidas de éster piretroide tales como acrinatrín, aletrina, bioaletrín, bartrín, bifentrín, bioetanometrín, cicletín, cicloprotrina, ciflutrin, beta-ciflutrin, cihalotrina, gamma-cihalotrina, lambda-cihalotrina, cipermetrina, alfa-cipermetrina, beta-cipermetrina, teta-cipermetrina, zeta-cipermetrina, cifenotrina, deltametrina, dimeflutrina, dimetrina, empenetrina, fenflutrina, fenpiritrina, fenpropatrina, fenvalerato, esfenvalerato, flucitrinato, flusalinato, tau-fluvalinato, furetrina, imiprotrina, metoflutrina, permetrina, biopermetrina, transpermetrina, fenotrina, pralletrina, proflutrina, piresmetrina, resmetrina, bioresmetrina, cismetrina, teflutrina, teralletrina, tetrametrina, tralometrina y transflutrina; insecticidas de éter piretroide tales como etofenprox, flufenprox, halfenprox, protrifenbuto y silafluofeno; insecticidas de pirimidinamina tales como flufenferim y pirimidifeno; insecticidas de pirrol tales como clorfenapir; insecticidas de ácido tetrónico tales como espiromesifeno; insecticidas de tiourea tales como diafentiurón; insecticidas de urea tales como flucofuron y sulcofuron; e insecticidas no clasificados tales como closantel, crotamitón, EXD, fenazaflor, fenoxacrim, flubendiamida, hidrametilnon, isoprotiolano, malonoben, metaflumizona, metoxadiazona, nifluridida, piridabén, piridililo, rafxanida, triaratenó y triazamato, y cualquier combinación de los mismos.

Adicionalmente, los compuestos de la presente descripción se pueden combinar con herbicidas que sean compatibles con los compuestos de la presente invención en el medio seleccionado para la aplicación, y no sean antagonistas con la actividad de los presentes compuestos para formar mezclas plaguicidas y mezclas sinérgicas de los mismos. Los compuestos fungicidas de la presente descripción se pueden aplicar junto con uno o más herbicidas para controlar una amplia variedad de plantas indeseables. Cuando se usan junto con herbicidas, los presentes compuestos reivindicados se pueden formular con el o los herbicidas, mezclas en depósito con el o los herbicidas o aplicadas secuencialmente con el o los herbicidas. Los herbicidas típicos incluyen, pero no se limitan a: herbicidas tipo amida dichos como alidocloro, beflubutamid, benzadox, benzipram, bromobutida, cafenstrol, CDEA, ciprazol, dimetenamid, dimetenamid-P, difenamid, epronaz, etnipromid, fentrazamida, flupoxam, fome-safeno, halosafeno, isocarbamid, isoxabeno, napropamida, naptalam, petoxamid, propizamida, quinonamid y tebutamo; herbicidas tipo anilida tales como cloranocrilo, cisanilida, clomeprop, cipromid, diflufenicano, etobenzanid, fenasulam, flufenacet, flufenicano, mefenacet, mefluidida, metamifop, monalida, naproanilida, pentanocloro, picolinafeno y propanilo; herbicidas tipo arilalanina tales como benzoilprop, flamprop y flamprop-M; herbicidas tipo cloroacetanilida tales como

acetocloro, alacloro, butacloro, butenacoloro, delacloro, dietatilo, dimetacloro, metazacloro, metolacloro, S-metolacloro, pretilacloro, propacloro, propisocloro, prinacloro, terbucloro, tenilcloro y xilacloro; herbicidas tipo sulfonanilida tales como benzofluoro, perfluidona, pirimisulfano y profluazol; herbicidas tipo sulfonamida tales como asulam, carbasulam, fenasulam y orizalina; herbicidas antibióticos dichos como bilanafós; herbicidas tipo ácido benzoico tales como cloramben, dicamba, 2,3,6-TBA y tricamba; herbicidas tipo ácido pirimidiniloxibenzoico tales como bispiribac y piriminobac; herbicidas tipo ácido pirimidiniltiobenzoico tales como piritiobac; herbicidas tipo ácido ftálico tales como clortal; herbicidas tipo ácido picolínico dichos como aminopirialid, clopiralid y picloram; herbicidas tipo ácido quinolinacarboxílico tales como quinclorac y quinmerac; herbicidas de arsénico tales como ácido cacodílico, CMA, DSMA, hexaflurato, MAA, MAMA, MSMA, arsenito de potasio y arsenito de sodio; herbicidas tipo benzoilciclohexanediona tales como mesotriona, sulcotriona, tefuriltriona y tembotriona; herbicidas tipo benzofuranilalquilsulfonato tales como benfuresato y etofumesato; herbicidas tipo carbamato tales como asulam, carboxazol, clorprocarb, diclormato, fenasulam, karbutilato y terbucarb; herbicidas tipo carbanilato tales como barbán, BCPC, carbasulam, carbetamida, CEPC, clorbufam, clorprofam, CPPC, desmedifam, fenisofam, fenmedifam, fenmedifam-etilo, profam y swep; herbicidas tipo oxima de ciclohexeno tales como aloxidim, butroxidim, cletodim, cloproxidim, cicloxidim, profoxidim, setoxidim, tepraloxidim y tralcoxidim; herbicidas tipo ciclopropilisoxazol tales como isoxaclortol e isoxaflutol; herbicidas tipo dicarboximida tales como benzfendizona, cinidón-etilo, flumezina, flumiclorac, flumioxazina y flumipropina; herbicidas tipo dinitroanilina tales como benfluralina, butralina, dinitramina, etalfluralina, flucloalinalina, isopropalina, metalpropalina, nitalina, orizalina, pendimetalina, prodiamina, profluralina y trifluralina; herbicidas tipo dinitrofenol tales como dinofenato, dinoprop, dinosam, dinoseb, dinoterb, DNOC, etnofeno y medinoterb; herbicidas tipo éter difenílico tales como etoxifeno; herbicidas tipo éter nitrofenílico tales como acifluorfen, aclonifeno, bifenox, clometoxifeno, clomitrofen, etnipromida, fluorodifeno, fluoroglicofeno, fluoronitrofen, fomesafeno, furiloxifeno, halosafeno, lactofeno, nitrofen, nitrofluorfen y oxifluorfen; herbicidas tipo ditiocarbamatos tales como dazomet y metam; herbicidas alifáticos halogenados tales como alorac, cloropón, dalapón, flupropanato, hexacloroacetona, yodometano, bromuro de metilo, ácido monocloroacético, SMA y TCA; herbicidas tipo imidazolinona tales como imazametabenz, imazamox, imazapic, imazapir, imazaquina e imazetapir; herbicidas inorgánicos tales como sulfamato de amonio, bórax, clorato de calcio, sulfato de cobre, sulfato ferroso, azida de potasio, cianato de potasio, azida de sodio, clorato de sodio y ácido sulfúrico; herbicidas tipo nitrilo tales como bromobonilo, bromoxinilo, cloroxinilo, diclobenilo, yodobonilo, ioxinilo y piraclonilo; herbicidas organofosforados tales como amiprofós-metilo, anilofós, bensulida, bilanafós, butamifós, 2,4-DEP, DMPA, EBEP, fosamina, glufosinato, glifosato y piperofós; herbicidas tipo fenoxi tales como bromofenoxim, clomeprop, 2,4-DEB, 2,4-DEP, difenopenteno, disul, erbón, etnipromid, fenteracol y trifopsima; herbicidas fenoxiacéticos tales como 4-CPA, 2,4-D, 3,4-DA, MCPA, MCPA-tioetilo y 2,4,5-T; herbicidas fenoxibutíricos tales como 4-CPB, 2,4-DB, 3,4-DB, MCPB y 2,4,5-TB; herbicidas fenoxipropiónicos tales como cloprop, 4-CPP, diclorprop, diclorprop-P, 3,4-DP, fenoprop, mecoprop y mecoprop-P; herbicidas ariloxifenoxipropiónicos tales como clorazifop, clodinafop, clofop, cihalofop, diclofop, fenoxaprop, fenoxaprop-P, fentiafop, fluzafop, fluzafop-P, haloxifop, haloxifop-P, isoxapirifop, metamifop, propaquizafop, quizalofop, quizalofop-P y trifop; herbicidas tipo fenilendiamina tales como dinitramina y prodiamina; herbicidas tipo pirazolilo tales benzofenap, pirasulfotol, pirazolinato, pirazoxifeno y topamezona; herbicidas tipo pirazolilfenilo tales como fluazolato y piraflufen; herbicidas tipo piridazina tales como credazina, piridafol y piridato; herbicidas tipo piridazinona tales como brompirazón, cloridazón, dimidazón, flufenpir, metflurazón, norflurazón, oxapirazón y pidanón; herbicidas tipo piridina tales como aminopirialid, clodinato, clopiralid, ditiopir, fluroxipir, haloxidina, picloram, picolinafeno, piriclor, tiazopir y triclopir; herbicidas tipo pirimidinadiazina tales como iprimidam y tioclorim; herbicidas de amonio cuaternario tales como ciperquat, dietamquat, difenzoquat, diquat, morfamquat y paraquat; herbicidas tipo tiocarbamato tales como butilato, cicloato, di-alato, EPTC, esprocarb, etiolato, isopolinato, metiobencarb, molinato, orbencarb, pebulato, prosulfocarb, piributicarb, sulfalato, tiobencarb, tiocarbazil, tri-alato y vernolato; herbicidas de tiocarbonato tales como dimexano, EXD y proxano; herbicidas tipo tiourea tales como metiurón; herbicidas tipo triazina tales como dipropetrina, indaziflam, triaziflam y trihidroxitriazina; herbicidas tipo clorotriazina tales como atrazina, clorazina, cianazina, ciprazina, eglinazina, ipazina, mesoprazina, prociazina, proglinazina, propazina, sebutilazina, simazina, terbutilazina y trietazina; herbicidas tipo metoxitriazina tales como atratona, metometona, prometona, secbumetona, simetona y terbumetona; herbicidas tipo metiltiotriazina tales como ametrina, aziprotrina, cianatrina, desmetrina, dimetametrina, metoprotina, prometrina, simetrina y terbutrina; herbicidas tipo triazinona tales como ametrindiona, amibuzina, hexazinona, isometiozina, metamitrona y metribuzina; herbicidas tipo triazol tales como amitrol, cafenstrol, epronaz y flupoxam; herbicidas tipo triazolona tales como amicarbazona, bencarbazona, carfentrazona, flucarbazona, propoxicarbazona, sulfentrazona y tiencarbazona-metilo; herbicidas derivados triazolopirimidina tales como cloransulam, diclosulam, florasulam, flumetsulam, metosulam, penoxsulam y piroxsulam; herbicidas tipo uracilo tales como butafenacilo, bromacilo, flupropacilo, isocilo, lenacilo, saflufenacilo y terbacilo; 3-feniluracilos; herbicidas tipo urea tales como benztiázurón, cumilurón, ciclurón, dicloralurea, diflufenzopir, isonorurón, isourón, metabenztiázurón, monisourón y norurón; herbicidas tipo fenilurea tales como anisurón, buturón, clorbromurón, cloreturón, clorotolurón, cloroxurón, daimurón, difenoxurón, dimefurón, diurón, fenurón, fluometurón, fluotiurón, isoproturón, linurón, metiurón, metildimurón, metobenzurón, metobromurón, metoxurón, monolinurón, monurón, neburón, paraflurón, fenobenzurón, sidurón, tetraflurón y tidiazurón; herbicidas tipo pirimidinilsulfonilurea tales como amidosulfurón, azimsulfurón, bensulfurón, clorimurón, ciclosulfamurón, etoxisulfurón, flazasulfurón, flucetosulfurón, flupirsulfurón, foramsulfurón, halosulfurón, imazosulfurón, mesosulfurón, nicosulfurón, ortosulfamurón, oxasulfurón, primisulfurón, propirisulfurón, pirazosulfurón, rimsulfurón, sulfometurón, sulfosulfurón y trifloxisulfurón; herbicidas tipo triazinilsulfonilurea tales como celsulfurón, cinosulfurón, etametsulfurón, yodosulfurón, metsulfurón, prosulfurón, tifensulfurón, triasulfurón, tribenurón, triflusulfurón y tritosulfurón; herbicidas tipo tiadiazolilurea tales como butiurón, etidimurón, tebutiurón, tiazafurón y tidiazurón; y

herbicidas no clasificados tales como acroleína, alcohol alílico, azafenidina, benazolina, bentazona, benzobiciclón, butidazol, cianamida de calcio, cambendicloro, clorfenac, clorfenprop, clorflurazol, clorflurenol, cinmetilina, clomazona, CPMF, cresol, orto-diclorobenceno, dimepiperato, endotal, fluoromidina, fluridona, flurocloridona, flurtamona, flutiacet, indanofano, metazol, isotiocianato de metilo, nipiraclufen, OCH, oxadiargil, oxadiazón, oxaziclomefona, pentaclorofenol, pentoxazona, acetato de fenilmercurio, pinoxaden, prosulfalina, piribenzoxim, piritalida, quinoclamina, rodetanilo, sulglicapina, tidiazimina, tridifano, trimeturón, tripropindán y tritac.

Otra realización de la presente descripción es un método para el control o la prevención de un ataque fúngico. Este método comprende aplicar al suelo, las plantas, las raíces, follaje, las semillas o al lugar en el que está el hongo, o a un lugar en el que se va a prevenir la infestación (por ejemplo, aplicar a plantas de cereales o a vides), una cantidad eficaz como fungicida de uno o más de los compuestos de fórmula I. Los compuestos son adecuados para el tratamiento de varias plantas en concentraciones fungicidas, a la vez que presentan una baja fitotoxicidad. Los compuestos pueden ser útiles tanto de un modo protector como/o de modo de erradicación.

Se ha encontrado que los compuestos tienen efecto fungicida significativo en particular para uso agrícola. Muchos de los compuestos son particularmente eficaces para usar con cultivos agrícolas o plantas hortícolas.

Los expertos en la técnica entenderán que la eficacia del compuesto respecto a los hongos precedentes establece la utilidad general de los compuestos como fungicidas.

Los compuestos tienen amplia variedad de actividad contra patógenos fungicidas. Los ejemplos de patógenos incluyen, pero no se limitan a tizón foliar del trigo (*Septoria tritici*, también conocido como *Mycosphaerella graminicola*), sarna del manzano (*Venturia inaequalis*), y mancha foliar de la remolacha azucarera (*Cercospora beticola*), mancha foliar del cacahuete (*Cercospora arachidicola* y *Cercosporidium personatum*) y otros cultivos, y la sigatoka negra del plátano (*Mycosphaerella fijiensis*). La cantidad exacta de material activo a aplicar depende no solo del material activo específico aplicado, sino también de la acción particular deseada, la especie fúngica a controlar, y la etapa de crecimiento del mismo, así como la parte de la planta u otro producto que se va a poner en contacto con el compuesto. Por lo tanto, todos los compuestos y formulaciones que lo contienen, pueden no ser igualmente eficaces en concentraciones similares o contra la misma especie de hongo.

Los compuestos son eficaces para usar con plantas en una cantidad que inhibe la enfermedad y fitológicamente aceptable. La expresión "cantidad que inhibe la enfermedad y fitológicamente aceptable" se refiere a un compuesto que mata o inhibe la enfermedad de la planta para la que se desea el control, pero no es significativamente tóxica para la planta. Esta cantidad en general será de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 1000 ppm (partes por millón), prefiriéndose de 1 a 500 ppm. La concentración exacta del compuesto requerida varía con la enfermedad fúngica que se va a controlar, el tipo de formulación usado, el método de aplicación, la especie de planta particular, las condiciones climáticas y similares. Una tasa de aplicación adecuada típicamente está en el intervalo de aproximadamente 0,01 a 0,45 gramos por metro cuadrado, g/m² (aproximadamente 0,10 a aproximadamente 4 libras/acre).

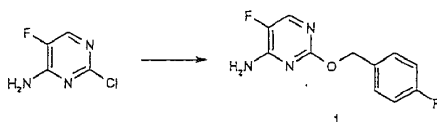
Cualquier intervalo o valor deseado dado en el presente documento se puede extender o alterar sin perder los efectos buscados, como es evidente para el experto, para la comprensión de las enseñanzas en el presente documento.

Los compuestos de fórmula I se pueden hacer por procedimientos químicos bien conocidos. Los compuestos intermedios no mencionados específicamente en esta descripción están disponibles en el comercio, se pueden hacer por rutas descritas en la bibliografía química, o se pueden sintetizar fácilmente a partir de materiales de partida comerciales usando procedimientos convencionales.

Los siguientes ejemplos se presentan para ilustrar los diferentes aspectos de los compuestos de la presente descripción.

Ejemplos:

Preparación de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-amina (1): Ejemplo comparativo



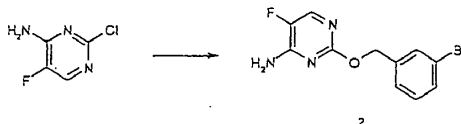
A una solución de alcohol 4-fluorobencílico (2,56 g, 20,3 mmol) en 1,4-dioxano (20 ml) se añadió NaH al 60% (0,813 g, 20,3 mmol) en varias porciones a lo largo de un periodo de 10 min. A la solución agitada con agitador magnético se añadió 2-cloro-5-fluoropirimidin-4-amina* (2,00 g, 13,6 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente hasta disminuir la evolución de gases. Después, la mezcla de reacción se calentó en un reactor de microondas CEM Discover a 120°C durante 90 min. La mezcla de reacción enfriada se repartió entre acetato de etilo y agua, la fase orgánica se concentró, y el producto se purificó por cromatografía en columna (gradiente de hexano / acetato de etilo) para dar la 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-amina (1,66 g, 52% de rendimiento) en forma de un sólido

blanco: p.f. 129-131°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,91 (d, *J* = 2,6 Hz, 1H), 7,42 (m, 2H), 7,03 (m, 2H), 5,27 (s, 2H), 5,05 (s ancho, 2H); MS (ESI) *m/z* 238 (M+H)⁺.

* La 4-Amino-2-cloro-5-fluoropirimidina se puede adquirir en el comercio o se puede preparar por métodos conocidos en la bibliografía.

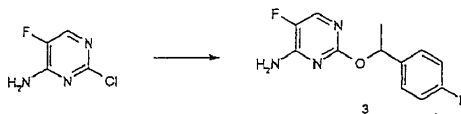
- 5 1. Hayashi, T.; Kawakami, T. patente JP 2005126389
2. Durr, G.J., *J. Med. Chem.* 1965, 8(2), 253.

2-(3-Bromobenciloxi)-5-fluoropirimidin-4-ilamina (2): Ejemplo comparativo



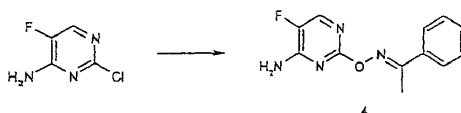
- 10 A una mezcla agitada con agitador magnético de KO^tBu (1,0 M en ^tBuOH, 1,36 ml, 1,36 mmol) se añadió (3-bromofenil)metanol (0,25 g, 1,36 mmol). A la solución resultante se añadió 2-cloro-5-fluoropirimidina-4-ilamina (0,10 g, 0,68 mmol) y la mezcla se tapó y se agitó a 90°C durante 4 h. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente, se diluyó con agua y el precipitado resultante se recogió por filtración. El sólido se lavó con agua, se lavó con ciclohexano y se secó en un horno con vacío. Se cargó una solución del compuesto en CH₂Cl₂ en una columna Biotage SCX y se eluyó con CH₂Cl₂ seguido de NH₃ 2,0 M en MeOH. El disolvente se evaporó a presión reducida para dar el compuesto del título (0,100 g, 49%) en forma de un sólido blanquecino: p.f. 143-145°C; RMN ¹H (400 MHz, DMSO-*d*₆) δ 7,90 (d, *J* = 2,5 Hz, 1H), 7,61 (s, 1H), 7,43 (d, *J* = 8,0 Hz, 1H), 7,36 (d, *J* = 7,7 Hz, 1H), 7,22 (t, *J* = 7,7 Hz, 1H), 5,28 (s, 2H), 5,20 (s ancho, 2H); GCMS (EI) *m/z* 297, 299 (M)⁺.

Preparación de 5-fluoro-2-[1-(4-fluorofenil)etoxi]pirimidin-4-ilamina (3): Ejemplo comparativo



- 20 A una mezcla agitada con agitador magnético de 4-amino-2-cloro-5-fluoropirimidina (11,10 g, 75,2 mmol) en 1-(4-fluorofenil)etanol (11,70 g, 82,8 mmol) se añadió una solución 1,0 M de KO^tBu en ^tBuOH (82,8 ml, 82,8 mmol) en una porción, y la mezcla resultante se calentó a temperatura de reflujo durante 24 h. El disolvente se separó a vacío y el aceite rojo-naranja resultante se purificó por cromatografía ultrarrápida (SiO₂, MeOH / CH₂Cl₂ 0→10%) para dar 5,5 g de aceite rojo-naranja. El aceite se suspendió en hexanos (100 ml) y se agitó durante 16 h. Se añadió agua (100 ml) a la mezcla sin cambiar, y el sistema bifásico se agitó enérgicamente durante 1 h. El sólido de color crema resultante se recogió por filtración a vacío, se lavó con agua caliente (55°C, 2 x 100 ml), y se secó a vacío a 55°C durante 16 h para dar la 5-fluoro-2-[1-(4-fluorofenil)etoxi]pirimidin-4-ilamina (3,30 g, 17,2% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 96-98°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,84 (d, *J* = 2,6 Hz, 1H), 7,42-7,38 (m, 2H), 7,03-6,97 (m, 2H), 5,99 (q, *J* = 6,6 Hz, 1H), 5,09 (s ancho, 2H), 1,61 (d, *J* = 6,6 Hz, 3H); MS (ESI) *m/z* 252 (M+H)⁺,
- 30 *m/z* 250 (M-H)⁻.

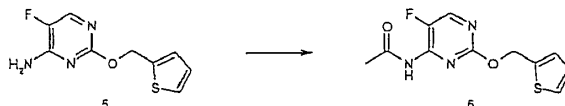
Preparación de O-(4-amino-5-fluoropirimidin-2-il)oxima de la 1-fenil-etanona (4): Ejemplo comparativo



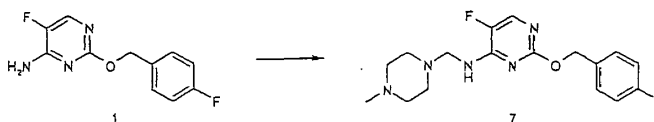
- 35 A una mezcla agitada con agitador magnético de 4-amino-2-cloro-5-fluoropirimidina (0,10 g, 0,68 mmol) y oxima de la acetofenona (0,092 g, 0,68 mmol) en DMF seca (3 ml) en un recipiente de microondas de 5 ml Biotage Initiator se añadió NaH (0,027 g de una suspensión al 60% en peso, 0,68 mmol) en una atmósfera de N₂. Tras cesar la evolución de gas, la mezcla resultante se selló con un tapón septum en el microondas Biotage Initiator y se calentó a 100°C en un microondas Biotage Initiator durante 60 min. El contenido se vertió en un vial con agua (5 ml) y CH₂Cl₂ (5 ml), y se neutralizó con unas gotas de HCl 2 N. Las fases se separaron y el extracto orgánico se secó sobre MgSO₄, se filtró y se evaporó bajo una corriente de nitrógeno. El contenido bruto se purificó en sílice (gradiente de EtOAc/hexanos) y la evaporación de las fracciones con producto dio 0,057 g (34%) de O-(4-amino-5-fluoro-pirimidin-2-il)oxima de la 1-fenil-etanona en forma de un sólido blanquecino: p.f. 163-165°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,04 (d, *J* = 2,6 Hz, 1H), 7,75 (m, 2H), 7,42 (m, 3H), 5,25 (s ancho, 2H), 2,51 (s, 3H); HPLC-MS (ESI) *m/z* 247 (M+H)⁺.
- 40

Preparación de 5-fluoro-2-(tiofen-2-ilmetoxi)-pirimidin-4-ilamina (5): Ejemplo comparativo

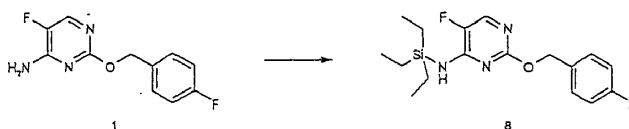
A una mezcla de 2-cloro-5-fluoropirimidin-4-ilamina (2,00 g, 13,5 mmol) y tiofen-2-ilmetanol (1,92 g, 16,9 mmol) con una barra agitadora magnética en un recipiente de reacción de microondas de 20 ml Biotage Initiator se añadió KO^tBu (17,0 ml de 1 M en ^tBuOH, 17,0 mmol). La mezcla resultante se selló con un tapón septum en el microondas Biotage Initiator y se calentó a 100°C en un microondas Biotage Initiator durante 30 min. Se repitió el ciclo de calentamiento (2x) durante un tiempo de reacción total de 90 min. El contenido se vertió en hielo-agua y se ajustó el pH a neutralidad con HCl 2 N. El sólido resultante se filtró y se lavó con agua (2x) y después éter/hexanos al 20% (100 ml). El sólido que quedaba se secó durante la noche a 50°C a vacío, para dar 4,17 g (68%) de 5-fluoro-2-(tiofen-2-ilmetoxi)pirimidin-4-ilamina en forma de un polvo amarillo pálido: p.f. 92-94°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,92 (d, *J* = 2,7 Hz, 1H), 7,29 (m, 1H), 7,13 (d, *J* = 3,6 Hz, 1H), 6,97 (m, 1H), 5,46 (s, 2H), 5,17 (s ancho, 2H); MS (ESI) *m/z* 226 (M+H)⁺.

Preparación de N-[5-fluoro-2-(tiofen-2-ilmetoxi)pirimidin-4-il]acetamida (6): Ejemplo comparativo

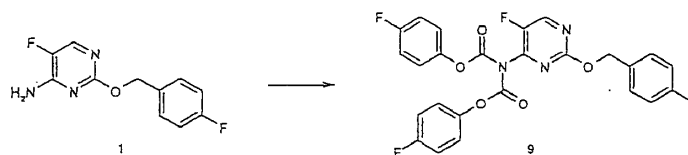
En un vial con tapón de rosca de 7 ml (2 dram), una solución de 5-fluoro-2-(tiofen-2-ilmetoxi)-pirimidin-4-ilamina (0,10 g, 0,4 mmol) en CH₂Cl₂ se trató con cloruro de acetilo (0,032 g, 0,4 mmol) y PS-NMM (0,42 g, 0,8 mmol), un equivalente unido a resina de *N*-metil-morfolina (NMM). La mezcla se agitó a t.a. durante 12 h. La mezcla de reacción se filtró y el disolvente se evaporó para dar 0,084 g (75%) del compuesto del título en forma de un sólido blanco: p.f. 134-136°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,24 (d, *J* = 2,6 Hz, 1H), 7,86 (s ancho, 1H), 7,31 (m, 1H), 7,23 (m, 1H), 7,00 (m, 1H), 5,54 (s, 2H), 2,58 (s, 3H); MS (ESI) *m/z* 268 (M+H)⁺.

Preparación de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-(4-metilpiperazin-1-ilmetil)amina (7): Ejemplo comparativo

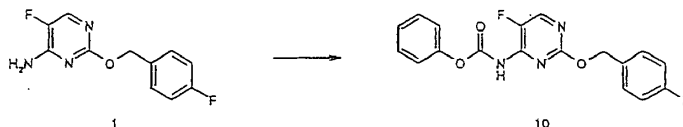
A una mezcla agitada con agitador magnético de paraformaldehído (0,24 g, 8 mmol) en CH₂Cl₂ (20 ml) se añadió *N*-metilpiperazina (0,80 g, 8,0 mmol). La suspensión se agitó durante la noche a temperatura ambiente en un agitador orbital, y después se añadió 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,47 g, 2,0 mmol). La mezcla resultante se agitó a lo largo del fin de semana a t.a. Se evaporó el disolvente y el residuo bruto se lavó dos veces con éter/éter de petróleo al 50% y se secó bajo una corriente de N₂ para dar 0,21 g (30%) de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-(4-metilpiperazin-1-ilmetil)amina en forma de un sólido de color beige: p.f. 125-126°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,83 (d, *J* = 2,3 Hz, 1H), 7,43 (m, 2H), 7,03 (t, *J* = 8,5 Hz, 2H), 5,40 (s ancho, 1H), 5,27 (s, 2H), 4,41 (d, *J* = 6,8 Hz, 2H), 2,63 (s ancho, 4H), 2,47 (s ancho, 4H), 2,30 (s, 3H); HPLC-MS (ESI) *m/z* 350 (M+H)⁺.

Preparación de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]triethylsilanilamina (8): Ejemplo comparativo

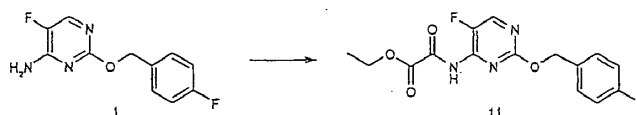
A una mezcla agitada con agitador magnético de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,25 g, 1,05 mmol) en THF seco (5 ml) a 0°C se añadió NaH (0,042 g de suspensión al 60% en peso en aceite mineral, 1,05 mmol). Cuando cesó el burbujeo se añadió cloruro de trietilsililo (0,158 g, 1,05 mmol) gota a gota (solo) mediante una jeringa. Después de agitar durante la noche a temperatura ambiente, la mezcla de reacción se vertió en éter y se lavó con una mezcla de solución acuosa saturada de bicarbonato sódico y salmuera. La capa orgánica se separó, se secó sobre Na₂SO₄, se filtró y se evaporó para dar un sólido blanco. Este material bruto se purificó en sílice por cromatografía en columna (gradiente de EtOAc/hexanos) para dar 0,121 g (33%) de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]triethylsilanilamina en forma de un aceite amarillo claro: RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,89 (d, *J* = 2,5 Hz, 1H), 7,39 (m, 2H), 7,03 (t, *J* = 8,6 Hz, 2H), 5,27 (s, 2H), 4,53 (s, 1H), 0,99 (m, 9H), 0,83 (m, 6H); HPLC-MS (ESI) *m/z* 352 (M+H)⁺.

Preparación del éster de 4-fluorofenilo del ácido [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]bis-carbámico (9): Ejemplo comparativo

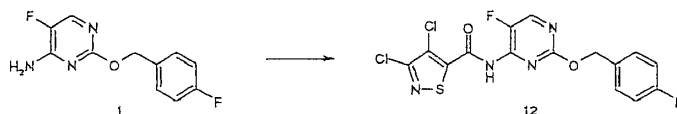
A una mezcla agitada con agitador magnético enfriada con hielo de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,25 g, 1,05 mmol) en THF seco (5 ml) se añadió NaH (0,042 g de una suspensión al 60% en peso en aceite mineral, 1,05 mmol). Tras cesar el burbujeo, se añadió gota a gota cloroformiato de 4-fluorofenilo (0,184 g, 1,05 mmol) como una solución en THF seco. Después de agitar 1 h, la reacción se repartió entre EtOAc y solución de salmuera. El extracto orgánico se secó sobre Na₂SO₄, se filtró y se evaporó. El material bruto se purificó en sílice usando un gradiente de EtOAc/Hex y después MeOH/EtOAc para dar 0,054 g (14%) del éster de 4-fluorofenilo del ácido [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]bis-carbámico en forma de un sólido blanco: p.f. 103-105°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,58 (d, J = 2,2 Hz, 1H), 7,43 (m, 2H), 7,08 (m, 10H), 5,40 (s, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 514 (M+H)⁺.

Preparación del éster fenílico del ácido [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]carbámico (10): Ejemplo comparativo

A una mezcla agitada de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,20 g, 0,84 mmol) en THF seco (3 ml) a temperaturas de baño de hielo, se añadió NaH (0,034 g de una suspensión al 60% en peso en aceite mineral, 0,84 mmol). Cuando cesó el burbujeo, la mezcla resultante se transfirió (gota a gota) mediante una cánula a una mezcla agitada, enfriada con hielo, de carbonato de difenilo (1,8 g, 8,4 mmol) en THF seco (5 ml). La mezcla se agitó durante la noche, se vertió en EtOAc, y se lavó con solución acuosa saturada de NH₄Cl seguido de solución de salmuera. La capa de EtOAc se separó, se secó sobre Na₂SO₄, se filtró y se evaporó. El material bruto se purificó en gel de sílice usando un gradiente de EtOAc y hexanos para dar 0,063 g (21 %) del éster fenílico del ácido [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]carbámico en forma de un sólido blanco: p.f. 129-131°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,28 (d, J = 2,3 Hz, 1H), 7,43 (m, 5H), 7,30-7,20 (m, 2H), 7,02 (t, J = 8,6 Hz, 2H), 5,38 (s, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 358 (M+H)⁺.

Preparación del éster etílico del ácido N-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]oxalámico (11): Ejemplo comparativo

A una mezcla de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,235 g, 0,99 mmol), N-metil-morfolina en poliestireno (0,538 g, 1,24 mmol), y CH₂Cl₂ (5 ml) se añadió éster etílico del ácido cloro-oxo-acético (0,135 g, 0,99 mmol) y la mezcla resultante se agitó en un agitador orbital durante 16 h. El contenido de la reacción se filtró en un cartucho de SPE ácido y se eluyó con CH₂Cl₂. El filtrado de CH₂Cl₂ se filtró y se evaporó para dar 0,165 g (50%) de éster etílico del ácido N-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]oxalámico en forma de un aceite transparente: RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 9,21 (s ancho, 1H), 8,38 (d, J = 2,3 Hz, 1H), 7,48 (m, 2H), 7,03 (t, J = 8,5 Hz, 2H), 5,40 (s, 2H), 4,48 (q, J = 7,1 Hz, 2H), 1,45 (t, J = 7,1 Hz, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 338 (M+H)⁺.

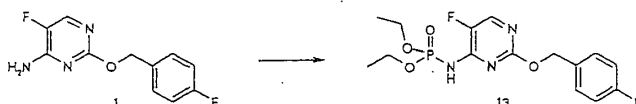
Preparación de [5-fluoro-2-(4-fluorobencil-oxi)pirimidin-4-il]amida del ácido 3,4-dicloroisotiazol-5-carboxílico (12): Ejemplo comparativo

A una suspensión de ácido 3,4-dicloroisotiazol-5-carboxílico (0,15 g, 0,76 mmol) en cloruro de oxalilo (2 ml) se añadió una cantidad catalítica de dimetilformamida (2 gotas) y la mezcla se calentó a 80°C y se agitó durante 2 h. El exceso de cloruro de oxalilo se separó en el rotavapor. Mientras se disolvió la 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)-pirimidin-4-ilamina (0,17 g, 0,68 mmol) en THF (1 ml), se trató con LiHMDS (1 M en THF, 0,76 ml, 0,76 mmol) y se agitó durante 10 min. Se añadió el cloruro de 3,4-diclorotiazol-5-carbonilo* recién preparado, disuelto en THF (1 ml), y la

reacción se tapó y se agitó durante 12 h. La reacción se diluyó con agua y el compuesto objetivo se extrajo con CH_2Cl_2 (3 x 5 ml). Los extractos combinados se secaron sobre MgSO_4 y después se evaporaron a presión reducida. La mezcla se eluyó con CH_2Cl_2 a través de una columna de extracción de fase sólida de intercambio aniónico, y se purificó más por cromatografía de fase inversa para dar la [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]amida del ácido 3,4-dicloroisotiazol-5-carboxílico (0,035 g, 12%) en forma de un sólido marrón: p.f. 87-90°C; RMN ^1H (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 11,78 (s, 1H), 8,67 (s, 1H), 7,51-7,48 (m, 2H), 7,24-7,19 (m, 2H), 5,25 (s, 2H); MS (ESI) m/z 417 ($\text{M}+\text{H}^+$), 415 ($\text{M}-\text{H}^-$).

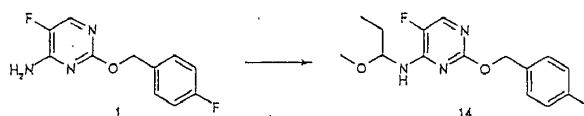
*Nagata, T.; Kogure, A.; Yonekura, N.; Hanai, R.; Kaneko, I.; Nakano, Y. documento JP 2007211002 A

Preparación del éster dietílico del ácido [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]fosforamídico (13): Ejemplo comparativo



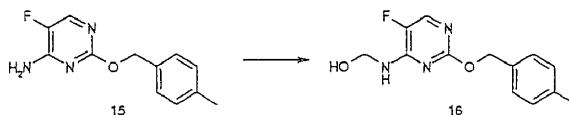
A una solución agitada con agitador magnético de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,10 g, 0,42 mmol) en THF seco (5 ml) en atmósfera de nitrógeno se añadió NaH (0,017 g de una suspensión al 60% en peso, 0,42 mmol) y la mezcla se agitó hasta que cesó el burbujeo. Se añadió gota a gota clorofosfato de dietilo (0,073 g, 0,42 mmol), y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 1 h. La mezcla de reacción se evaporó hasta sequedad y el residuo se disolvió en EtOAc y se lavó con solución acuosa saturada de NH_4Cl . La capa orgánica se separó, se secó sobre Na_2SO_4 , se filtró y se evaporó. El material bruto se purificó en sílice (gradiente de acetona/ CH_2Cl_2) para dar 0,017 g (11%) del éster dietílico del ácido [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]fosforamídico en forma de un sólido blanco: p.f. 109-111°C; RMN ^1H (300 MHz, CDCl_3) δ 8,10 (t, $J = 1,8$ Hz, 1H), 7,43 (m, 2H), 7,03 (t, $J = 8,5$ Hz, 2H), 6,18 (s ancho, 1H), 5,35 (s, 2H), 4,25 (m, 4H), 1,38 (t, $J = 7,1$ Hz, 6H); HPLC-MS (ESI) m/z 374 ($\text{M}+\text{H}^+$).

Preparación de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il](1-metoxipropil)amina (14): Ejemplo comparativo



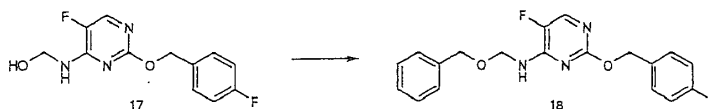
A una solución de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,10 g, 0,42 mmol) en propionaldehído (2 ml) se añadió una cantidad catalítica de ácido canforsulfónico. La mezcla se agitó en un agitador orbital a temperatura ambiente durante 4 h y después se evaporó hasta sequedad. Se añadió metanol (2 ml) y la solución resultante se calentó a 60°C durante 1 h. Después de evaporación, el producto bruto se purificó por cromatografía de fase inversa para dar el compuesto del título (0,030 g, 24% de rendimiento) en forma de un aceite incoloro transparente: RMN ^1H (300 MHz, CDCl_3) δ 7,91 (d, $J = 2,5$ Hz, 1H), 7,47-7,41 (m, 2H), 7,09-7,01 (m, 2H), 5,41 (dt, $J = 9,9$ y 6,0 Hz, 1H), 5,30 (s, 2H), 5,2 (d ancho, $J \sim 10$ Hz, 1H), 3,12 (s, 3H), 1,88-1,60 (m, 2H), 0,98 (t, $J = 7,1$ Hz, 3H). HPLC-MS 308 (ES^+), 310 (ES^-).

Preparación de [5-fluoro-2-(4-metilbenciloxi)pirimidin-4-ilamino]metanol (16): Ejemplo comparativo



A una solución de 5-fluoro-2-(4-metilbenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,10 g, 0,43 mmol) en dioxano (2 ml) se añadió paraformaldehído (0,060 g, 2 mmol) y la mezcla se agitó en un agitador orbital a 90°C durante 16 h, se enfrió y se evaporó hasta sequedad. La purificación por cromatografía de fase inversa dio 0,070 g (63%) del compuesto del título en forma de un sólido blanco: p.f. 97-98°C; RMN ^1H (CDCl_3) δ 7,94 (d, $J = 2,5$ Hz, 1H), 7,36 (d, $J = 7,9$ Hz, 2H), 7,19 (d, $J = 7,9$ Hz, 2H), 5,97 (s ancho, 1H), 5,33 (s, 2H), 5,04-4,99 (m, 2H), 3,39 (t, $J = 8,0$ Hz, 1H), 2,37 (s, 3H); MS (ESI) m/z 264 ($\text{M}+\text{H}^+$).

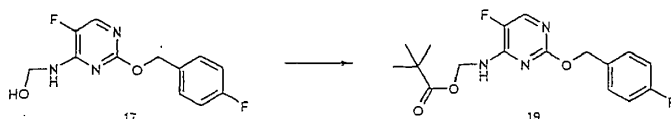
Preparación de benciloximetil[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]amina (18): Ejemplo comparativo



A una mezcla de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamino]metanol (0,10 g, 3,7 mmol) en alcohol bencílico (1 ml) se añadió una cantidad catalítica de ácido *p*-toluenosulfónico. Después de 30 min, la reacción se enfrió a

temperatura ambiente y se repartió entre acetato de etilo y solución saturada de bicarbonato sódico. Las fases se separaron y la parte orgánica se secó sobre Na_2SO_4 anhidro, se filtró y se evaporó para obtener el producto bruto. La purificación por cromatografía de fase inversa dio 0,094 g (70%) del compuesto del título en forma de un sólido blanco: p.f. 64-06°C; RMN^1H (CDCl_3) δ 7,93 (d, $J = 2,7\text{ Hz}$, 1H), 7,47-7,40 (m, 2H), 7,37-7,29 (m, 5H), 7,08-7,00 (m, 2H), 5,81-5,70 (m ancho, 1H), 5,29 (s, 2H), 5,12 (d, $J = 6,9\text{ Hz}$, 2H), 4,63 (s, 2H); MS (ESI) m/z 358 ($\text{M}+\text{H}$)⁺.

Preparación de éster de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamino]metilo del ácido 2,2-dimetilpropiónico (19): Ejemplo comparativo



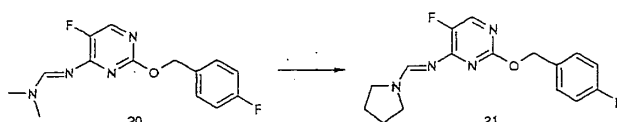
A una mezcla de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamino]metanol (0,10 g, 0,37 mmol) en piridina (2 ml) se añadió cloruro de trimetilacetilo (0,048 g, 0,40 mmol), y la mezcla se agitó en un agitador orbital a 60°C durante 4 h. La mezcla de reacción se enfrió, se evaporó hasta sequedad y se repartió entre EtOAc y agua. La capa orgánica se secó sobre Na_2SO_4 , se filtró y se evaporó para dar el compuesto del título (0,078 g, 60% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 134-135°C; RMN^1H (300 MHz, CDCl_3) δ 7,97 (d, $J = 2,5\text{ Hz}$, 1H), 7,49-7,44 (m, 2H), 7,11-7,03 (m, 2H), 6,17 (t ancho, $J = 7\text{ Hz}$, 1H), 6,17 (d, $J = 7,4\text{ Hz}$, 2H), 5,33 (s, 2H), 1,20 (s, 9H); HPLC-MS m/z 352 ($\text{M}+\text{H}$)⁺.

Preparación de N'-[5-Fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-N,N-dimetil-formamidina (20): Ejemplo comparativo



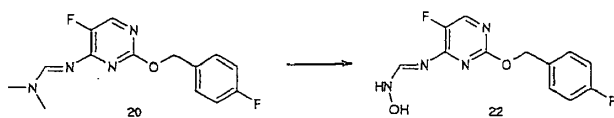
A una solución agitada con agitador magnético de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (1,00 g, 4,2 mmol) en *N,N*-dimetilformamida (DMF, 20 ml) se añadió acetal dimetilico de la *N,N*-dimetilformamida (0,55 g, 4,6 mmol) y se continuó agitando 16 h a t.a. La solución se vertió en 100 ml de agua con hielo, tras lo cual se produjo un precipitado. La mezcla se enfrió a 0°C durante 1 h y después se filtró para producir el compuesto del título (1,10 g, 89%) en forma de un sólido blanco: p.f. 113-115°C; RMN^1H (CDCl_3) δ 8,65 (s, 1H), 8,04 (d, $J = 2,6\text{ Hz}$, 1H), 7,46-7,40 (m, 2H), 7,07-6,98 (m, 2H), 5,30 (s, 2H), 3,17 (s, 3H), 3,16 (s, 3H); MS (ESI) m/z 292 ($\text{M}+\text{H}$)⁺. Análisis calculado para $\text{C}_{14}\text{H}_{14}\text{F}_2\text{N}_4\text{O}$: C, 57,53; H, 4,83; N, 19,17. Encontrado: C, 57,67; H, 4,84; N, 19,09.

Preparación de [5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)piridin-4-il]-[1-pirrolidin-1-il-metiliden]amina (21): Ejemplo comparativo

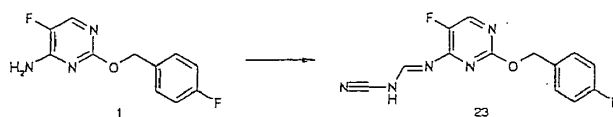


A una solución de N'-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-N,N-dimetilformamidina (0,10 g, 0,36 mmol) en tolueno (2 ml) se añadió pirrolidina (0,051 g, 0,72 mmol) y una cantidad catalítica de ácido canforsulfónico. El vial ventilado se puso en un agitador orbital, se agitó a 90°C durante 16 h, se enfrió y se evaporó hasta sequedad. La purificación por cromatografía de fase inversa dio el compuesto del título (0,060 g, 53% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 102-103°C; RMN^1H (300 MHz, CDCl_3) δ 8,87 (s, 1H), 8,06 (d, $J = 2,7\text{ Hz}$, 1H), 7,49-7,42 (m, 2H), 7,09-7,01 (m, 2H), 5,32 (s, 2H), 3,73-3,62 (m, 4H), 2,07-1,96 (m, 4H); HPLC-MS (ESI) m/z 319 ($\text{M}+\text{H}$)⁺.

Preparación de N-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-N'-hidroxi-formamidina (22): Ejemplo comparativo

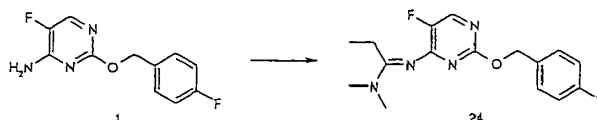


A una solución de N'-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-N,N-dimetil-formamidina (0,10 g, 0,34 mmol) en EtOH (2 ml) se añadió hidrocloreto de hidroxilamina (0,047 g, 0,68 mmol) y la mezcla se agitó en un agitador orbital durante 1,5 h a 50°C. La mezcla de reacción se enfrió y evaporó hasta sequedad. Se añadió agua para producir una suspensión que se filtró para aislar el compuesto del título (0,090 g, 94% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 169-171°C; RMN^1H (300 MHz, CDCl_3) δ 8,15 (d, $J = 2:2\text{ Hz}$, 1H), 8,02 (s ancho, 2H), 7,49-7,43 (m, 2H), 7,11-7,02 (m, 3H), 5,35 (s, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 281 ($\text{M}+\text{H}$)⁺, 279 ($\text{M}-\text{H}$)⁻.

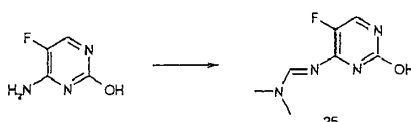
Preparación de N-[5-Fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-N'-cianoformamidina (23): Ejemplo comparativo

Se agitó cianamida (8,00 g, 190,0 mmol) a temperatura de reflujo en ortoformiato de trietilo (60 ml) durante 2 h. La reacción se enfrió a temperatura ambiente y se destiló para proporcionar el N-cianoimidato de etilo (12,5 g, p.e. = 110-112°C/45 mm de Hg). * A este imidato (1 ml) se le añadió 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,05 g, 0,2 mmol) y la mezcla se calentó a 90°C durante 4 h, se enfrió, se diluyó con cloroformo, se filtró y se evaporó. El producto bruto se purificó por cromatografía de fase inversa para proporcionar 0,053 g (17%) del compuesto del título en forma de un sólido blanquecino: p.f. 148-149°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 9,45 y 9,33 (d ancho, s ancho, J ≈ 10 Hz, 1H), 8,33 y 8,25 (2d, J ≈ 2Hz, 1H), 7,46-7,38 (m, 2H), 7,11-7,01 (m, 2H), 5,35 y 5,33 (2s, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 290 (M+H)⁺, 288 (M-H)⁻.

*Bridsen, Peter K., y Wang, Xiaodong, *Synthesis*, 1995, 855-8.

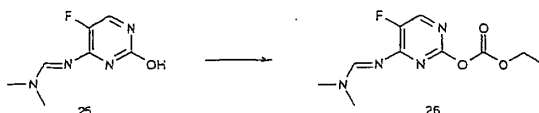
Preparación de N'-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]-N,N-dimetil-propionamidina (24): Ejemplo comparativo

A una solución de N,N-dimetilpropionamida (0,202 g, 2,0 mmol) en CHCl₃ (2 ml) se añadió oxiclورو de fósforo (POCl₃, 0,066 g, 0,43 mmol) y la mezcla se agitó en un agitador orbital a temperatura ambiente durante 1 h. Se añadieron trietilamina (0,22 g, 2,2 mmol) y 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,10 g, 0,40 mmol) y la mezcla se agitó a 50°C durante 3 h, se enfrió a temperatura ambiente, se repartió entre cloroformo y agua, se separaron las fases y los extractos orgánicos se evaporaron a presión reducida. La purificación por cromatografía de fase inversa dio el compuesto del título (0,042 g, 31% de rendimiento) en forma de un aceite amarillo: RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,87 (s, 1H), 8,04 (d, J = 2,5 Hz, 1H), 7,46-7,40 (m, 2H), 7,07-6,99 (m, 2H), 5,30 (s, 2H), 3,13 (s, 6H), 2,55 (q, J = 7,7 Hz, 2H), 1,15 (t, J = 7,7 Hz, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 321 (M+H)⁺.

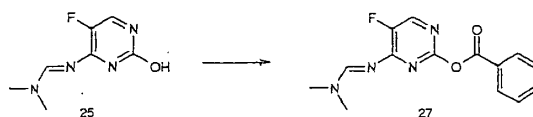
Preparación de N'-(5-fluoro-2-hidroxi-pirimidin-4-il)-N,N-dimetil-formamidina (25): Ejemplo comparativo

A una solución agitada con agitador magnético de 4-amino-5-fluoro-pirimidin-2-ol* (4,00 g, 31,0 mmol) en DMF (100 ml) se añadió acetal dimetilíco de la N,N-dimetilformamida (4,00 g, 34,0 mmol). La mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 72 h, se diluyó con éter dietílico (200 ml) y se filtró. El producto sólido se lavó con heptano para dar el compuesto del título (5,23 g, 92% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 240-243°C; RMN ¹H (300 MHz, DMSO-d₆) δ 10,7 (s ancho, 1H), 8,59 (s, 1H), 7,7 (d, J = 5,6 Hz, 1H), 3,18 (s, 3H), 3,06 (s, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 185 (M+H)⁺, 183 (M-H)⁻.

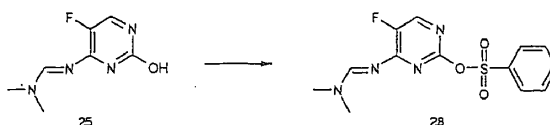
*El 4-amino-5-fluoro-pirimidin-2-ol se puede adquirir en el comercio.

Preparación de éster de etilo y 4-(dimetilamino-metilenamino)-5-fluoropirimidin-2-ilo del ácido carbónico (26): Ejemplo comparativo

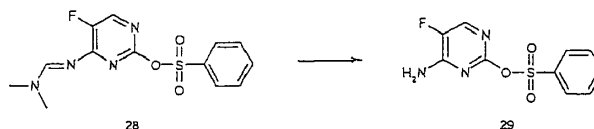
A una solución de N'-(5-fluoro-2-hidroxi-pirimidin-4-il)-N,N-dimetilformamidina (0,10, 0,54 mmol) en CH₂Cl₂ (2 ml) se añadió trietilamina (0,20 g, 2,0 mmol) y cloroformiato de etilo (0,065 g, 0,60 mmol), y la mezcla se agitó en un agitador orbital a temperatura ambiente durante la noche. La reacción se diluyó con CH₂Cl₂ y la solución se lavó con agua, se secó sobre MgSO₄, se filtró y se evaporó. El producto bruto se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice (gradiente de EtOAc/éter de petróleo) para dar 0,031 g (22%) del compuesto del título en forma de un sólido blanco: p.f. 124-126°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,67 (s, 1H), 8,19 (d, J = 2,2 Hz, 1H), 4,35 (q, J = 7,14 Hz, 2H), 3,21 (s, 6H), 1,40 (t, J = 7,14 Hz, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 258 (M+H)⁺.

Preparación de éster de 4-(dimetilamino-metilenamino)-5-fluoropirimidin-2-ilo del ácido benzoico (27): Ejemplo comparativo

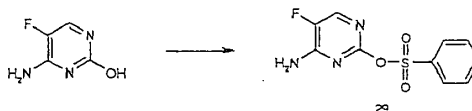
A una suspensión de N'-(5-fluoro-2-hidroxipirimidin-4-il)-N,N-dimetilformamidina (0,10 g, 0,54 mmol) en piridina (2 ml) se añadió cloruro de benzoilo (0,084 g, 0,60 mmol), y la mezcla se agitó en un agitador orbital durante 16 h a t.a. La mezcla de reacción se repartió entre EtOAc y solución acuosa saturada de NaHCO₃, y la fase orgánica se secó sobre MgSO₄ sólido, se filtró y se evaporó para dar el compuesto del título (0,147 g, 94%) en forma de un sólido blanco: p.f. 136-138°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,69 (s, 1H), 8,27 (d, J= 2,4 Hz, 2H), 8,25-8,20 (m, 2H), 7,69-7,63 (m, 1H), 7,56-7,49 (m, 2H), 3,23 (s, 3H), 3,20 (s, 3H); HPLC-MS(ESI) m/z 289 (M+H)⁺.

Preparación de éster de 4-(dimetilamino-metilenamino)-5-fluoro-pirimidin-2-ilo del ácido bencenosulfónico (28): Ejemplo comparativo

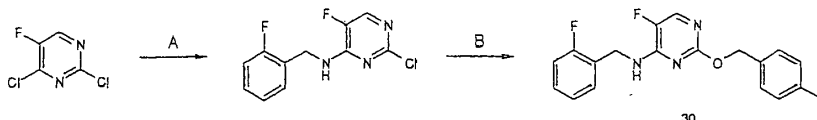
A una suspensión de N'-(5-fluoro-2-hidroxipirimidin-4-il)-N,N-dimetilformamidina (0,10 g, 0,54 mmol) en piridina (2 ml) se añadió cloruro de bencenosulfonilo (0,106 g, 0,60 mmol), y la mezcla se agitó en un agitador orbital durante 16 h a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se repartió entre EtOAc y solución acuosa saturada de NaHCO₃, y la fase orgánica se secó sobre MgSO₄ sólido, se filtró y se concentró a presión reducida. La purificación por cromatografía en fase inversa (gradiente de H₂O/MeCN) dio el compuesto del título (0,089 g, 46% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 124-125°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,54 (s, 1H), 8,12-8,07 (m, 3H), 7,73-7,66 (m, 1H), 7,62-7,56 (m, 2H), 3,21 (s, 6H); HPLC-MS (ESI) m/z 325 (M+H)⁺.

Preparación de éster de 4-amino-5-fluoropirimidin-2-ilo del ácido bencenosulfónico (29): Ejemplo comparativo

A una solución de HCl en dioxano (3 ml de solución al 10%) se añadió éster de 4-(dimetilamino-metilenamino)-5-fluoropirimidin-2-ilo del ácido bencenosulfónico (0,090, 0,3 mmol) y la mezcla se agitó en un agitador orbital a temperatura ambiente durante 1,5 h. El disolvente se separó por evaporación y el residuo se disolvió en una solución de dioxano y agua 1:1 (2,5 ml) y se trató con solución acuosa saturada de NaHCO₃ (0,5 ml). Después de 16 h, la mezcla de reacción se repartió entre EtOAc y agua y la fase orgánica se secó sobre Na₂SO₄, se filtró, y el disolvente se evaporó para dar el compuesto del título (0,059 g, 79% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 139-141°C; RMN ¹H (300 MHz, DMSO- d₆) δ 8,05-8,00 (m, 3H), 7,90-7,75 (m, 3H), 7,70-7,63 (m, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 268 (M-H)⁻, 270 (M+H)⁺.

Preparación de éster de 4-amino-5-fluoropirimidin-2-ilo del ácido bencenosulfónico (29): Ejemplo comparativo

A una suspensión de 5-fluorocitosina (0,177 g, 1,4 mmol) en piridina (5 ml) se añadió cloruro de bencenosulfonilo (0,284 g, 1,6 mmol) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 2 h. La mezcla de reacción se evaporó hasta sequedad y el material bruto se purificó por cromatografía de fase inversa para dar el compuesto del título (0,106 g, 29% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 145-146°C; ¹H RMN (300 MHz, DMSO- d₆) δ* 8,05-8,00 (m, 3H), 7,9-7,75 (m, 3H), 7,70-7,63 (m, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 270 (M+H)⁺, 268 (M-H)⁻.

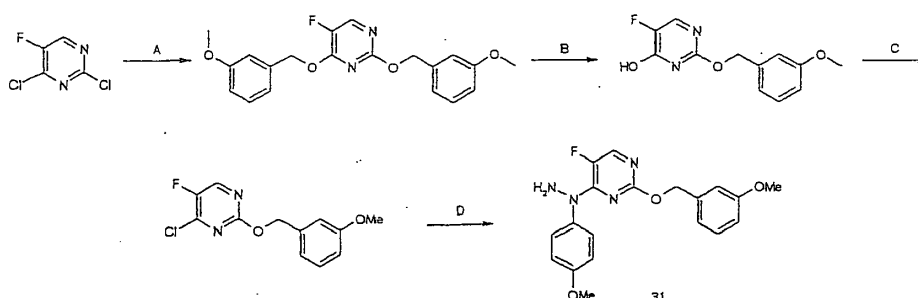
Preparación de (2-Fluorobencil)-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il]amina (30): Ejemplo comparativo

A) Una solución agitada con agitador magnético de 2,4-dicloro-5-fluoropirimidina* (0,105 g, 0,63 mmol) en 5 ml de THF seco se trató con 2-fluorobencilamina (0,085 g, 0,68 mmol) y trietilamina en exceso, y la mezcla resultante se calentó a 80°C durante 5 h. La mezcla de reacción se repartió entre CH₂Cl₂ y HCl diluido, y la fase orgánica se lavó con salmuera, se secó sobre Na₂SO₄, y se filtró. El disolvente se separó a presión reducida para dar 0,157 g (97%) del compuesto del título en forma de un sólido amarillo: p.f. 117-118°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,90 (d, *J* = 2,6, 1H), 7,47 - 7,27 (m, 2H), 7,21 - 7,01 (m, 2H), 5,54 (s, 1H), 4,76 (d, *J* = 5,9, 2H); MS (ESI) *m/z* 256 (M+H)⁺.

*La 2,4-Dicloro-5-fluoropirimidina se puede adquirir en el comercio.

B) Una solución de (2-cloro-5-fluoropirimidin-4-il)-(2-fluorobencil)amina* (0,103 g, 0,40 mmol) en 5 ml de THF seco se trató con alcohol 4-fluorobencilico (0,062 g, 0,49 mmol) y una solución 1,0 M de KO^tBu en ^tBuOH (0,4 ml, 0,4 mmol). La mezcla se calentó a 80°C en un vial sellado durante 18 h, se repartió entre CH₂Cl₂ y agua, y la fase orgánica se lavó con salmuera, se secó sobre Na₂SO₄, y se filtró. El disolvente se separó a presión reducida y el residuo se purificó por cromatografía en columna ultrarrápida (SiO₂, EtOAc/éter de petróleo 10→20%) para dar el compuesto del título (0,157 g, 42%) en forma de un sólido blanco: p.f. 83-84°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,83 (d, *J* = 2,8, 1H), 7,45 - 7,27 (m, 5H), 7,15 - 6,96 (m, 5H), 5,37 (s ancho, 1H), 5,29 (s, 3H), 4,74 (d, *J* = 5,9, 3H); MS (ESI) *m/z* 346 (M+H)⁺.

*Singh, R.; Argade, A.; Payan, D.G.; Clough, J.; Keim, H.; Sylvain, C.; Li, H.; Bhamidipati, S., documento WO 2004014382 A1 20040219

Preparación de 5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)-4-(1-(4-metoxifenil)-hidrazinil)pirimidina (31): Ejemplo comparativo

A) Se añadió una solución 1,0 M de KO^tBu en KO^tBu (66 ml, 66 mmol) a una mezcla de 2,4-dicloro-5-fluoropirimidina (5,04 g, 30,1 mmol) y alcohol 3-metoxibencilico (7,8 ml, 62,8 mmol) en un matraz de fondo redondo de 250 ml. Se observó una reacción exotérmica importante y la mezcla resultante se agitó a temperatura ambiente durante 2 h. La reacción se diluyó con EtOAc (100 ml) y se lavó con salmuera (50 ml x 2). La capa orgánica se secó sobre MgSO₄, se filtró y se concentró a presión reducida. La cristalización en EtOH caliente proporcionó un material que se recogió en un embudo con frita y se lavó con EtOH helado para dar el compuesto del título (7,94 g, 71%) en forma de un sólido blanco: p.f. 81-83°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 8,10 (d, *J* = 2,3 Hz, 1H), 7,29 (m, 2H), 7,02 (m, 4H), 6,87 (dt, *J* = 2,2, 7,8 Hz, 2H), 5,44 (s, 2H), 5,35 (s, 2H), 3,82 (s, 3H), 3,82 (s, 3H); MS (ESI) *m/z* 371 (M+H)⁺.

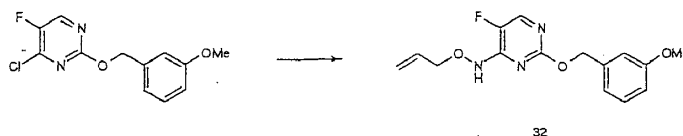
B) Se añadió una solución de KOH 2,0 N en agua (85 ml, 170 mmol) a una mezcla de 5-fluoro-2,4-bis(3-metoxibenciloxi)pirimidina (7,9 g, 21,3 mmol) y EtOH (21 ml) en un matraz de fondo redondo de 500 ml. Se unió un refrigerante de reflujo y la reacción se calentó a 95°C durante 16 h. Después de enfriar a temperatura ambiente, la mezcla de reacción se lavó con Et₂O (2 x 50 ml), y después se acidificó con HCl 1 N hasta pH 3. El material sólido resultante se recogió en un embudo con frita. La posterior extracción con EtOAc en exceso y concentración a presión reducida dio el compuesto del título (3,63 g, 68%) en forma de un sólido blanco: p.f. 136-139; RMN ¹H (300 MHz, DMSO-*d*₆) δ 12,97 (s ancho, 1H), 7,87 (d, *J* = 3,7 Hz, 1H), 7,30 (t, *J* = 7,9 Hz, 1H), 7,00 (m, 2H), 6,91 (dd, *J* = 1,8, 8,0 Hz, 1H), 5,29 (s, 2H), 3,74 (s, 3H); MS (ESI) *m/z* 251 (M+H)⁺.

C) Un matraz de Schlenk de 100 ml secado en horno, se cargó con 5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)pirimidin-4-ol (3,63 g, 14,5 mmol) y *N,N*-dimetilalanina (3,7 ml, 29,2 ml). Se añadió oxiclورو de fósforo (POCl₃, 40 ml, 429 mmol) y la solución resultante se calentó a 95°C en atmósfera de nitrógeno. Después de 2 h, la reacción se enfrió a temperatura ambiente y se concentró hasta volumen constante a presión reducida a 50°C. El residuo que quedaba se diluyó con Et₂O (50 ml) y se lavó con HCl 1 N (2 x 50 ml). La concentración a presión reducida proporcionó un sólido, que se lavó con agua y se recogió por filtración a vacío. El compuesto del título (4,09 g, 105%) se aisló en

forma de un sólido blanco: p.f. 96-100°C; RMN ^1H (300 MHz, DMSO- d_6) δ 8,81 (d, J = 0,8 Hz, 1H), 7,30 (t, J = 8,1 Hz, 1H), 7,02 (m, 2H), 6,91 (dd, J = 2,3, 8,3 Hz, 1H), 5,34 (s, 2H), 3,75 (s, 3H); MS (ESI) m/z 269 (M+H) $^+$.

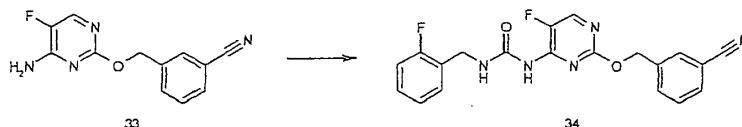
D) A una mezcla de 4-cloro-2-(3-metoxibencil)-5-fluoropirimidina (0,153 g, 0,568 mmol) e hidrocloreto de la 4-metoxifenil-hidrazina (0,324 g, 1,85 mmol) en etanol (5 ml) se añadió trietilamina (0,272, 2,69 mmol) y la mezcla se calentó a 50°C durante 16 h. La reacción se enfrió a temperatura ambiente y se diluyó con Et $_2$ O (50 ml). La solución de Et $_2$ O se lavó con agua (2 x 50 ml), se secó sobre MgSO $_4$, se filtró y se concentró. El residuo se trituró con Et $_2$ O para obtener la 5-fluoro-2-(3-metoxi-benciloxi)-4-(1-(4-metoxifenil)hidrazinil)pirimidina (0,113 g, 54% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 121-123,5°C; RMN ^1H (300 MHz, DMSO- d_6) δ 8,02 (d, J = 5,4 Hz, 1H), 7,28 (t, J = 8,1 Hz, 1H), 7,22 (d, J = 8,5 Hz, 2H), 6,99-6,93 (m, 2H), 6,93-6,85 (m, 3H), 5,25 (s, 2H), 3,75 (s, 3H), 3,74 (s, 3H); MS (ESI) m/z 371 (M+H) $^+$, 354 (M-NH $_2$) $^-$.

Preparación de O-alil-N-(5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxiloxi)pirimidin-4-il)hidroxilamina (32): Ejemplo comparativo



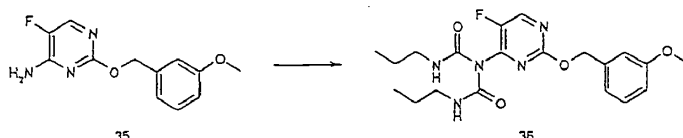
A una mezcla de 4-cloro-2-(3-metoxibencil)-5-fluoropirimidina (0,151 g, 0,558 mmol) e hidrocloreto de O-alil-hidroxilamina (0,201 g, 1,83 mmol) en MeOH:CH $_3$ CN 5:1 (5 ml) se añadió trietilamina (0,273 g, 2,70 mmol) y la mezcla se calentó a 50°C durante 18 h. La reacción se enfrió a temperatura ambiente y se diluyó con Et $_2$ O (50 ml). La solución orgánica se lavó con agua (2 x 50 ml), se secó sobre MgSO $_4$, se filtró y se concentró. La purificación por cromatografía ultrarrápida (SiO $_2$, EtOAc/hexano 17%→50%) dio la O-alil-N-(5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)-pirimidin-4-il)hidroxilamina (0,113 g, 66% de rendimiento) en forma de un aceite incoloro: RMN ^1H (300 MHz, DMSO- d_6) δ 10,94 (singlete ancho, 1H), 7,94 (singlete ancho, 1H), 7,28 (t, J = 8,0 Hz, 1H), 6,95-7,03 (m, 2H), 6,88 (dd, J = 2,5, 7,9 Hz, 1H), 5,97 (tdd, J = 5,8, 10,6, 17,0 Hz, 1H), 5,32 (dd, J = 1,5, 17,4 Hz, 1H), 5,24 (s, 2H), 5,22 (dd, J = 1,2, 10,6 Hz, 1H), 4,39 (d, J = 6,0 Hz, 2H), 3,74 (s, 3H); MS (ESI) m/z 306 (M+H) $^+$, 304 (M-H) $^-$.

Preparación de 1-[2-(3-cianobenciloxi)-5-fluoropirimidin-4-il]-3-(2-fluorobencil)urea (34): Ejemplo comparativo

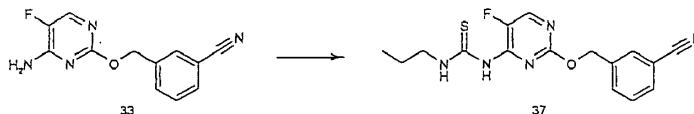


A una mezcla agitada con agitador magnético de 3-(4-amino-5-fluoropirimidin-2-iloximetil)-benzonitrilo (0,075 g, 0,31 mmol) e isocianato de 2-fluorobencil (0,59 ml, 0,46 mmol) en DMF seca (1,5 ml) se añadió LiHMDS (1,0 M en THF, 0,31 ml, 0,30 mmol). El vial se tapó y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 8 h. Se añadió solución acuosa saturada de NH $_4$ Cl (3 ml) y la mezcla se agitó durante 4 h. La mezcla heterogénea se filtró y el sólido se lavó con agua caliente, se lavó con Et $_2$ O, y después se secó a vacío para dar el compuesto del título (0,075 g, 62%) en forma de un sólido blanco: p.f. 177-178°C; RMN ^1H (400 MHz, DMSO- d_6) δ 10,04 (s, 1H), 8,90 (t, J = 5,7 Hz, 1H), 8,37 (d, J = 2,8 Hz, 1H), 7,85 (s ancho, 1H), 7,80 (d, J = 7,5 Hz, 1H), 7,74 (d, J = 8,0 Hz, 1H), 7,60 (t, J = 7,8 Hz, 1H), 7,42-7,38 (m, 1H), 7,35-7,29 (m, 1H), 7,20-7,14 (m, 2H), 5,33 (s, 2H), 4,49 (d, J = 5,8 Hz, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 396,3 (M+H) $^+$, 394,3 (M-H) $^-$.

Preparación de 1-[5-Fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)pirimidin-4-il](3'-propil-carbamoyl)-3-propil-urea (36): Ejemplo comparativo



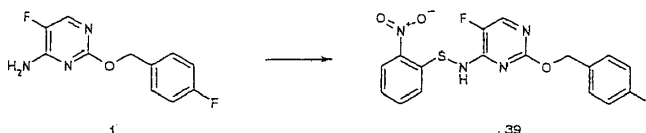
A una mezcla agitada con agitador magnético de 5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,075 g, 0,30 mmol) e isocianato de propilo (0,057 ml, 0,60 mmol) en DMF seca (1,5 ml) se añadió LiHMDS (1,0 M en THF, 0,60 ml, 0,60 mmol). El vial se tapó y la reacción se agitó a temperatura ambiente durante 8 h. El disolvente se evaporó a presión reducida y el material bruto se purificó por cromatografía en fase inversa para dar el compuesto del título (0,043 g, 10%) en forma de un sólido marrón: p.f. 75-78°C; RMN ^1H (400 MHz, DMSO- d_6) δ 12,34 (s, 1H), 8,49 (s, 1H), 7,89 (s, 1H), 7,29 (t, J = 7,8 Hz, 1H), 7,05-7,01 (m, 2H), 6,90 (dd, J = 6,9 Hz, J = 2,5 Hz, 1H), 5,30 (s, 2H), 3,75 (s, 3H), 3,74-3,68 (m, 2H), 3,15-3,10 (m, 2H), 1,58-1,44 (m, 4H), 0,89-0,85 (m, 6H); HPLC-MS (ESI) m/z 420,4 (M+H) $^+$, 418,4 (M-H) $^-$.

Preparación de 1-[2-(3-cianobenciloxi)-5-fluoropirimidin-4-il]-3-propiltiourea (37): Ejemplo comparativo

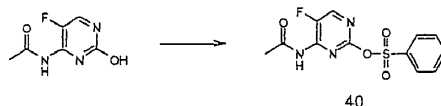
A una mezcla agitada con agitador magnético de 3-(4-amino-5-fluoropirimidin-2-iloxy)metil)-benzonitrilo (0,075 g, 0,31 mmol) e isotiocianato de propilo (0,047 ml, 0,46 mmol) en DMF (1,5 ml) se añadió LiHMDS (1,0 M en THF, 0,31 ml, 0,31 mmol). El vial se tapó y la reacción se agitó durante 8 h. Se añadió solución acuosa saturada de NH_4Cl (3 ml) al vial y la mezcla se agitó durante 4 h. La mezcla heterogénea se filtró y el sólido se lavó con agua caliente, se lavó con hexanos y se secó a vacío para dar el compuesto del título (0,055 g, 52%) en forma de un sólido amarillo pálido: p.f. 163-165°C; RMN ^1H (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) δ 10,77 (s, 1H), 10,38 (s, 1H), 8,47 (d, $J = 2,7$ Hz, 1H), 7,90 (s, 1H), 7,82 (d, $J = 7,5$ Hz, 1H), 7,78 (d, $J = 8,1$ Hz, 1H), 7,62 (t, $J = 7,7$ Hz, 1H), 5,42 (s, 2H), 3,55 (dd, $J = 12,4, 6,8$ Hz, 2H), 1,65-1,59 (m, 2H), 0,95 (t, $J = 7,5$ Hz, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 346,3 ($\text{M}+\text{H}$) $^+$, 344,2 ($\text{M}-\text{H}$) $^-$.

Preparación de N-[5-fluoro-2-(4-metilbenciloxi)pirimidin-4-il]metanosulfonamida (38): Ejemplo comparativo

A una solución de 5-fluoro-2-(4-metilbenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,100 g, 0,43 mmol) en THF anhidro (4 ml) se añadió gota a gota LiHMDS (1,07 ml de 1,0 M, 1,07 mmol) a temperatura ambiente, y la solución naranja resultante se agitó durante 20 min. Se añadió cloruro de metanosulfonilo (0,108 g, 0,94 mmol) en una porción y la solución naranja claro, turbia, se agitó durante 60 min. La reacción se inactivó con salmuera (5 ml) y se separó la fase de THF. La fase acuosa se extrajo con EtOAc (5 ml), y las orgánicas se combinaron, se secaron sobre Na_2SO_4 , se filtraron y se concentraron hasta un residuo gomoso naranja. El residuo se purificó por cromatografía ultrarrápida (SiO_2 , EtOAc / hexanos 0→100%) para dar 0,034 g (26%) del compuesto del título en forma de un sólido blanco: p.f. 145-148°C; RMN ^1H (400 MHz, CDCl_3) δ 8,19 (s, 1H), 7,33 (d, $J = 7,9$ Hz, 2H), 7,17 (d, $J = 7,9$ Hz, 2H), 5,35 (s, 2H), 3,37 (s, 3H), 2,35 (s, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 312 ($\text{M}+\text{H}$) $^+$, 310 ($\text{M}-\text{H}$) $^-$.

Preparación de N-[5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)-pirimidin-4-il]-S-(2-nitrofenil)-tiohidroxilamina (39): Ejemplo comparativo

A una solución de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilamina (0,05 g, 0,2 mmol) y una solución 1,0 M de KO^tBu en $^t\text{BuOH}$ (1,0 ml, 1,0 mmol) se añadió cloruro de nitrobenzenosulfenilo (0,044 g, 0,23 mmol) en una porción, y la solución marrón resultante se agitó durante 60 min. La reacción se diluyó con agua (2 ml) y se neutralizó a pH 7 con HCl 1 N. La fase acuosa se extrajo con EtOAc (5 ml), y las orgánicas se combinaron, se secaron sobre Na_2SO_4 , se filtraron y concentraron. El material bruto se purificó por cromatografía de fase inversa para dar el compuesto del título (0,020 g, 26%) en forma de un sólido amarillo: p.f. 184°C; RMN ^1H (300 MHz, CDCl_3) δ 8,36 (d, $J = 7,25$ Hz, 1H), 8,09 (d, $J = 2,3$ Hz, 1H), 7,59 (m, 1H), 7,36 (m, 2H), 7,29 (m, 2H), 6,88 (m, 2H), 6,23 (s ancho, 1H), 5,19 (s, 2H); HPLC-MS (ESI) m/z 391 ($\text{M}+\text{H}$) $^+$, 389 ($\text{M}-\text{H}$) $^-$.

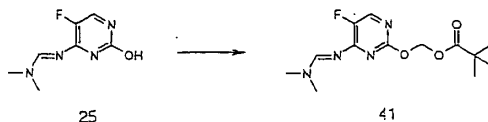
Preparación de éster de 4-acetilamino-5-fluoro-pirimidin-2-ilo del ácido bencenosulfónico (40): Ejemplo comparativo

La N-(5-fluoro-2-hidroxipirimidin-4-il)-acetamida* (200 mg, 1,17 mmol) se suspendió en piridina (5 ml) y se agitó a temperatura ambiente. A la suspensión agitada se añadió cloruro de bencenosulfonilo (226 mg, 1,29 mmol) y se continuó la agitación durante 16 horas. El disolvente se evaporó bajo corriente de nitrógeno y el residuo se suspendió en diclorometano (2-3 ml), se puso directamente en una columna de gel de sílice y se eluyó con acetato de etilo en éter de petróleo (gradiente de 0-50%) para aislar 180 mg, 0,58 mmol (49%) del compuesto del título en forma de un sólido blanco: p.f. 142-143°C; RMN ^1H ($\text{DMSO}-d_6$) δ 10,96 (s, 1H), 8,67 (d, $J = 2,6$ Hz, 1H), 8,12-8,06 (m, 2H), 7,86-7,79 (m, 1H), 7,73-7,65 (m, 2H), 2,98 (s, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 312 ($\text{M}+\text{H}$) $^+$, 310 ($\text{M}-\text{H}$) $^-$.

* La N-(5-fluoro-2-hidroxipirimidin-4-il)-acetamida se puede preparar por métodos conocidos de la bibliografía.

1. Duschinsky, R., Fells, E., Hoffer, M. Patente de EE.UU. 3.309.359

Preparación de éster de 4-(dimetilamino-metilenamino)-5-fluoro-pirimidin-2-iloximetilo del ácido 2,2-dimetilpropiónico (41): Ejemplo comparativo



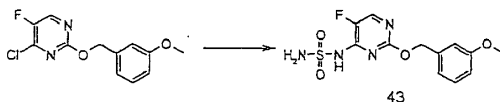
- 5 La N'-(5-fluoro-2-hidroxipirimidin-4-il)-N,N-dimetilformamidina (100 mg, 0,54 mmol), carbonato de cesio (196 mg, 0,60 mmol), y pivalato de clorometilo (90 mg, 0,6 mmol) se agitaron juntos en DMF (3 ml) a temperatura ambiente durante 16 horas. La mezcla de reacción se repartió entre acetato de etilo y agua, se secó sobre sulfato magnésico, se filtró y se evaporó para dar un aceite incoloro que se trató con éter dietílico (3-4 ml) para producir un sólido. El sólido se separó y la solución de éter se puso en una columna de gel de sílice y se eluyó con acetato de etilo en éter de petróleo (gradiente de 0-50%) para aislar 14 mg, 0,05 mmol (9%) del compuesto del título en forma de un sólido blanco: p.f. 86-88°C; RMN ¹H (CDCl₃) δ 8,73 (s, 1H), 8,06 (d, J = 2,6 Hz, 1H), 6,04 (s, 2H), 3,20 (s, 3H), 3,18 (s, 3H), 1,16 (s, 9H); HPLC-MS (ESI) m/z 299 (M+H)⁺.

Preparación de N'-(5-fluoro-2-metoximetoxipirimidin-4-il)-N,N-dimetil-formamidina (42): Ejemplo comparativo



- 15 La N'-(5-fluoro-2-hidroxipirimidin-4-il)-N,N-dimetilformamidina (100 mg, 0,54 mmol), carbonato de cesio (196 mg, 0,60 mmol), y éter de bromometilo y metilo (75 mg, 0,6 mmol) se agitaron juntos en DMF (3 ml) a temperatura ambiente durante 4 horas. La mezcla de reacción se repartió entre acetato de etilo y agua, se secó sobre sulfato magnésico, se filtró y se evaporó para dar un aceite incoloro que se puso directamente en una columna de gel de sílice y se eluyó con acetato de etilo en éter de petróleo (gradiente de 0-80%) para aislar 23 mg, 0,1 mmol (19%) del compuesto del título en forma de un aceite incoloro: RMN ¹H (CDCl₃) δ 8,66 (s, 1H), 8,05 (d, J = 2,6 Hz, 1H), 5,46 (s, 2H), 3,53 (s, 3H), 3,17 (s, 3H), 3,16 (s, 3H); HPLC-MS (ESI) m/z 229 (M+H)⁺.

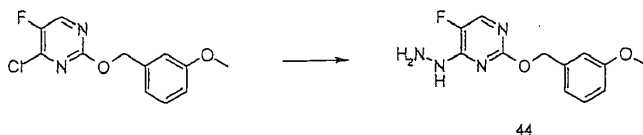
Preparación de [5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)pirimidin-4-il]sulfamida (43): Ejemplo comparativo



- 25 A una solución agitada con agitador magnético de 4-cloro-5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi) pirimidina* (1,3 g, 4,84 mmol) en DMF seca (5 ml) se añadió una suspensión previamente mezclada de NaH al 60% (0,45 g, 10,65 mmol) y sulfamida (0,93g, 9,68 mmol) en DMF seca (5 ml). La suspensión blanquecina resultante se agitó a temperatura ambiente durante 72 h. Después la suspensión naranja se calentó a 50°C durante 48 horas y se enfrió a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se repartió entre acetato de etilo y solución de salmuera. El extracto orgánico se secó sobre Na₂SO₄, se filtró y se evaporó. El material bruto se purificó por cromatografía en columna en sílice en fase normal usando un gradiente de EtOAc/Hex y en fase inversa usando un gradiente de H₂O/ACN para dar la [5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi) pirimidin-4-il]sulfamida (115 mg, 7,2% de rendimiento) en forma de un sólido blanco: p.f. 126-130°C; RMN ¹H (300 MHz, CD₃OD) δ 8,01 (d, J = 3,63 Hz, 1H), 7,25 (m, 1H), 7,01 (m, 2H), 6,88 (m, 1H), 5,37 (s, 2H), 3,78 (s, 3H); MS (ESI) m/z 326,9 (M-H)⁻.

*La 4-cloro-5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)pirimidina intermedia se preparó como se describe en la síntesis de 31.

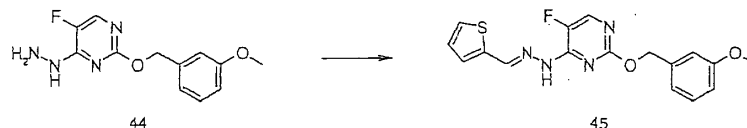
Preparación de 5-fluoro-4-hidrazinil-2-(3-metoxibenciloxi)pirimidina (44): Ejemplo comparativo



- 40 Un matraz erlenmeyer de 125 ml se cargó con 4-cloro-5-fluoro-2-(3-metoxibencil-oxi)pirimidina (1,50 g, 5,58 mmol) y EtOH (50 ml). Se añadió hidrazina monohidrato (900 µl, 18,5 mmol) y la mezcla resultante se dejó agitar a temperatura ambiente. Después de 22 h, la reacción se transfirió a un matraz erlenmeyer de 500 ml y se diluyó con agua (200 ml), tras lo cual empezó a precipitar un sólido blanco de la solución. Después de agitar durante 7 h, se recogió el producto sólido en un embudo con frita y se lavó con agua en exceso. Después de secar en la frita, se obtuvo el compuesto del título (1,23 g, 83%) en forma de un sólido blanco: p.f. 103-106°C; RMN ¹H (300 MHz,

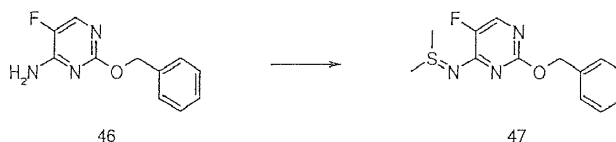
DMSO- d_6) δ 8,92 (s ancho, 1H), 7,86 (d, J = 3,6 Hz, 1H), 7,27 (t, J = 8,1 Hz, 1H), 6,94 - 7,01 (m, 2H), 6,87 (dd, J = 2,4, 7,9 Hz, 1H), 5,24 (s, 2H), 4,46 (s ancho, 2H), 3,74 (s, 3H); MS (ESI) m/z 265,2 (M+H) $^+$, 263,2 (M-H) $^-$.

Preparación de (E)-5-fluoro-2-(3-metoxibenciloxi)-4-(2-(tiofen-2-ilmetilen)-hidrazinil)pirimidina(45): Ejemplo comparativo



Un vial de 20 ml se cargó con 5-fluoro-4-hidrazinil-2-(3-metoxibenciloxi)-pirimidina (74,7 mg, 0,283 mmol), EtOH (2 ml), tiofeno-2-carbaldehído (26 μ l, 0,284 mmol) y HCl 1 M en Et₂O (14 μ l, 0,014 mmol) y se calentó a 50°C en un agitador. Después de 90 minutos, la reacción se enfrió a temperatura ambiente, se concentró con alto vacío para proporcionar el compuesto del título (77,8 mg, 77%) en forma de un sólido amarillo: p.f. 136-139°C; RMN 1 H (300 MHz, DMSO- d_6) δ 11,46 (s ancho, 1H), 8,50 (s ancho, 1H), 8,16 (d, J = 3,6 Hz, 1H), 7,64 (d, J = 5,0 Hz, 1H), 7,41 (d, J = 3,4 Hz, 1H), 7,28 (t, J = 8,0 Hz, 1H), 7,12 (dd, J = 3,8, 4,8 Hz, 1H), 7,04 (m, 2H), 6,88 (dd, J = 2,4, 8,3 Hz, 1H), 5,27 (s, 2H), 3,73 (s, 3H); MS (ESI) m/z 359,2 (M+H) $^+$, 357,2 (M-H) $^-$.

Preparación de 2-(benciloxi)-4-[(dimetil- λ^4 -sulfaniliden)amino]-5-fluoropirimidina (47): Ejemplo comparativo



Un matraz de Schlenk secado en horno de 10 ml, se cargó con 2-(benciloxi)-5-fluoropirimidin-4-amina (101 mg, 0,462 mmol), CH₂Cl₂ (2 ml), y sulfuro de dimetilo (75,0 μ l, 1,02 mmol) y se enfrió a 0°C en un baño de hielo. Se añadió *N*-clorosuccinimida (122 mg, 0,914 mmol) y la mezcla resultante se dejó agitar a 0°C durante 45 minutos, y después a temperatura ambiente durante 30 minutos. Se añadió una solución de NaOMe en MeOH (25%, 360 μ l, 1,35 mmol). Después de 20 minutos, la reacción se inactivó con agua (3 ml) y se dejó agitar durante 1 hora. La mezcla de reacción bruta se diluyó después con CH₂Cl₂ y se lavó con agua (50 ml x2), se secó sobre Na₂SO₄ anhidro, se filtró y se concentró por evaporación en rotavapor y después con alto vacío para dar el compuesto del título (120 mg, 93%) en forma de un sólido blanquecino: p.f. 125-129°C; RMN 1 H (300 MHz, DMSO- d_6) δ 7,70 (d, J = 3,9 Hz, 1H), 7,25-7,44 (m, 5H), 5,21 (s, 2H), 2,75 (s, 6H); MS (ESI) m/z 281,1 (M+H) $^+$.

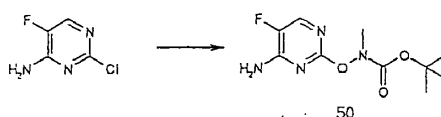
*Yamamoto, Y.; Yamamoto, H. *J. Am. Chem. Soc.* 2004, 126, 4128-4129.

Preparación de 1-[5-fluoro-2-(4-metilbenciloxi)-pirimidin-4-il]-2,3-dipropil-isotiurea (49)



A una solución agitada con agitador magnético de 1-[5-fluoro-2-(4-metil-benciloxi)-pirimidin-4-il]-3-propil-tiourea (0,50 g, 1,40 mmol) en CH₃CN (4 ml), se añadió carbonato potásico (0,20 g, 1,40 mmol) a temperatura ambiente y la mezcla se agitó durante 20 min. Se añadió bromuro de *N*-propilo (0,19 g, 1,40 mmol) a temperatura ambiente y la mezcla resultante se agitó durante 15 h. La mezcla de reacción se diluyó con H₂O y se extrajo con CH₂Cl₂ (3 x 20 ml). Las capas orgánicas combinadas se secaron sobre Na₂SO₄, se filtraron y se evaporó el disolvente. La mezcla bruta se purificó en sílice (gradiente de EtOAc/hexanos) y la evaporación de las fracciones con producto dio 0,335 g (63%) de 1-[5-fluoro-2-(4-metil-benciloxi)-pirimidin-4-il]-2,3-dipropil-isotiurea en forma de un líquido viscoso amarillo pálido: RMN 1 H (300 MHz, CDCl₃) δ 10,56 (s ancho, 1H), 8,09 (d, J = 2,6 Hz, 1H), 7,31 (m, 2H), 7,24 (m, 2H), 5,28 (s, 2H), 3,28 (dd, J = 13,6, 6,5 Hz, 4H), 2,36 (s, 3H), 1,62 (m, 4H), 1,0 (t, J = 7,4 Hz, 4H); HPLC-MS (ESI) m/z 377(M+H) $^+$.

Preparación de *N*-metil-*N*-hidroxicarbamato de O-(4-amino-5-fluoropirimidin-2-il)-*t*-butilo (50): Ejemplo comparativo



En un vial con tapón de rosca de 7 ml (2 dram), se trató una solución de 4-amino-2-cloro-5-fluoropirimidina (0,1 g, 0,68 mmol) y *N*-metil-*N*-hidroxicarbamato de *t*-butilo * (0,11 g, 0,75 mmol) con una solución 1,0 M de KO^{*t*}Bu en ^{*t*}BuOH (1,0 ml, 1,0 mmol) en una porción, y la solución amarilla resultante se calentó a 100°C y se agitó durante 24

h. La mezcla de reacción se enfrió, se extrajo con EtOAc (3 x 5 ml), y se evaporó el disolvente. La mezcla bruta se purificó por cromatografía en fase inversa para dar 0,10 g (56,9%) del compuesto del título en forma de un sólido amarillo: p.f. 123-125°C; RMN ¹H (300 MHz, CDCl₃) δ 7,96 (d, J = 2,3 Hz, 1H), 5,26 (s ancho, 2H), 3,32 (s, 3H), 1,43 (s, 9H); MS (ESI) m/z 259 (M+H)⁺

5 *El N-metil-N-hidroxicarbamato de t-butilo se puede preparar por métodos conocidos de la bibliografía:

1. Carrasco, M. R.; Brown, R. T.; Serafimova, I. M.; Silva O. J. *Org. Chem.*, 2003, 68 (1), 195.

Preparación de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilcarbamotioato de O-etilo (51): Ejemplo comparativo



La 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-amina (300 mg, 1,26 mmol) se agitó en cloroformo (25 ml) y agua (12 ml). Se añadió bicarbonato sódico (870 mg, 10,12 mmol) seguido por la adición gota a gota de tiofosgeno (218 mg, 1,9 mmol). La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 16 horas, después se diluyó con cloroformo (20 ml) y se separaron las fases. El extracto orgánico se secó sobre sulfato sódico, se filtró y se concentró por evaporación en rotavapor hasta 1/3 de volumen. A esta solución en cloroformo del isocianato bruto se añadió etanol absoluto (10 ml) y la mezcla se calentó en un tubo sellado durante 1 h. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente, se concentró y se purificó por cromatografía ultrarrápida en sílice, para dar 45 mg (11%) de 5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-ilcarbamotioato de O-etilo en forma de un sólido amarillo pálido: p.f. 109-119°C; RMN ¹H (CDCl₃) δ 8,30 (s ancho, 2H), 7,44 (m, 2H), 7,06 (m, 2H), 5,36 (s, 2H), 4,66 (q, J = 6 Hz, 2H), 1,45 (t, J = 6 Hz, 3H); HPLC-MS (ESI): m/z 326 (ES⁺).

Preparación de N-(5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il)etanotioamida (53): Ejemplo comparativo



La N-(5-fluoro-2-(4-fluorobenciloxi)pirimidin-4-il)acetamida (50 mg, 0,42 mmol) se agitó en un recipiente de microondas Biotage Initiator® con 1,2-dicloroetano (3 ml) y reactivo de Lawesson (170 mg, 0,42 mmol). El recipiente se calentó en un microondas Biotage Initiator® a 100°C durante 5 min, después se enfrió a temperatura ambiente, se filtró y se diluyó con CH₂Cl₂. Después, la mezcla de reacción se lavó con salmuera, y se separaron las capas. El extracto orgánico se secó en sílice y se purificó por cromatografía ultrarrápida. Las fracciones que contenían producto después se evaporaron hasta sequedad y se purificaron otra vez por HPLC de fase inversa para dar 4 mg de N-(5-fluoro-2-(4-fluorobencil-oxi)pirimidin-4-il)etanotioamida (4%) en forma de un vidrio amarillo: RMN ¹H (CDCl₃) δ 9,34 (ancho, 1H), 8,29 (d, J = 3 Hz, 1H), 7,41 (m, 2H), 7,06 (m, 2H), 5,33 (s, 2H), 3,13 (s, 3H); HPLC-MS (ESI): m/z 294 (ES⁻).

Protocolos de ensayos biológicos:

1. Evaluación de la actividad fungicida: Tizón foliar del trigo (*Mycosphaerella graminicola*; anamorfo: *Septoria tritici*; código Bayer SEPTTR):

Se hicieron crecer plantas de trigo (variedad Yuma) a partir de semillas en un invernadero en una mezcla 50%/50% de suelo mineral/Metro mix sin tierra hasta que brotó completamente la primera hoja, con 7-10 plantones por maceta. Se inoculó en las plantas una suspensión acuosa de esporas de *Septoria tritici* antes o después de los tratamientos con el fungicida. Después de la inoculación, las plantas se mantuvieron con una humedad relativa de 100% (un día en una cámara de rocío oscura seguido de dos a tres días en una cámara de rocío iluminada) para permitir que las esporas germinaran e infectaran a la hoja. Después las plantas se transfirieron a un invernadero para que se desarrollara la enfermedad.

2. Evaluación de la actividad fungicida: Mancha foliar de la remolacha azucarera (*Cercospora beticola*; código Bayer CERCBE):

Se hicieron crecer en un invernadero remolachas azucareras (variedad HH-88) en mezcla sin tierra Metro mix. Se recogieron las esporas de la superficie de hojas infectadas humedecidas lavando las hojas enteras en agua, y después se filtraron a través de dos capas de estopilla. Se inoculó la suspensión de esporas en los plantones jóvenes. Las plantas se mantuvieron en una cámara de rocío oscura durante 48 horas, y después se colocaron bajo una cubierta de plástico en un invernadero con una temperatura de 26°C.

3. Evaluación de la actividad fungicida: Mancha foliar del cacahuete (*Mycosphaerella arachidis*; código Bayer MYCOAR; anamorfo: *Cercospora arachidicola*):

- 5 Se hicieron crecer plántones de cacahuete (variedad Star) en mezcla sin tierra Metro mix. Se recogieron las esporas de la superficie de hojas infectadas humedecidas lavando las hojas enteras en agua, y después se filtraron a través de dos capas de estopilla. Se inoculó la suspensión de esporas en los plántones jóvenes. Las plantas se mantuvieron en una cámara de rocío oscura durante 48 horas, y después se colocaron bajo una cubierta de plástico en un invernadero con una temperatura de 26°C.

4. Evaluación de la actividad fungicida: Sarna del manzano (*Venturia inaequalis*; código Bayer VENTIN):

- 10 Se hicieron crecer en un invernadero plántones de manzano (McIntosh o Golden Delicious) en mezcla sin tierra Metro mix. Se recogieron esporas fúngicas de tejido de hojas infectadas. Se inoculó en las plantas la suspensión de esporas. Las plantas se pusieron en una cámara de rocío durante 24 h con una humedad relativa de 100% y después se transfirieron a un invernadero con una temperatura de 18°C para que se desarrollara la enfermedad.

5. Evaluación de la actividad fungicida: Sigatoka negra del plátano (*Mycosphaerella fijiensis*; código BAYER MYCOFP):

- 15 Se ensayó la eficacia contra *Mycosphaerella fijiensis* usando hojas recién brotadas de plantas de plátano dejadas crecer en el campo. Se pulverizaron 20 ml de una formulación diluida del compuesto 1 de la concentración requerida sobre cada hoja de ensayo en un área delimitada de 20 x 20 cm. Posteriormente, se dejó que las hojas fueran infectadas por un inóculo natural, y el tanto por ciento de control de la enfermedad se evaluó visualmente ~ 40-45 días después.

La siguiente tabla presenta la actividad de compuestos típicos de la presente descripción cuando se evaluaron en estos experimentos. La eficacia de los compuestos de ensayo en las enfermedades que se controlaban se determinó evaluando la gravedad de la enfermedad en las plantas tratadas, y después convirtiendo la gravedad en tanto por ciento de control basado en el nivel de enfermedad en las plantas tratadas, no inoculadas.

- 25 En cada caso de las tablas I-III la escala de clasificación es la siguiente:

% de control de la enfermedad	Clasificación
76-100	A
51-75	B
26-50	C
0-25	D
No ensayado	E

TABLA I: 3 DC y 1 DP Actividad de los compuestos en SEPTTR con 25 y 100 ppm

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
1		A	A	A	A	sólido blanco	130-132	238	236	
2		A	A	A	A	polvo blanquecino	143-145			297, 298
3		A	A	A	A	producto aceite			250	
4		A	A	A	A	sólido blanquecino	163-165	247		
5		A	A	A	A	sólido blanco	90-92	226		
6		A	A	A	A	sólido blanco	134-136	268	266	
7		A	A	A	A	sólido beige	125-126	350	348	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
8		A	A	A	A	aceite amarillo claro		352	350	
9		A	A	A	A	sólido blanco	103-105	514		
10		A	A	A	A	sólido blanco	129-131	358	356	
11		A	A	A	A	aceite transparente		338	336	
12		A	A	A	A	sólido marrón	87-90	417	415	
13		D	D	C	B	sólido blanco	109-111	374	372	
14		A	A	A	A	aceite transparente incoloro		310	308	
15		A	A	A	A	sólido blanco	135-137	234	232	
16		A	A	A	A	sólido blanco	97-98	264	262	
17		A	A	A	A	sólido blanco	108-	268	266	
18		B	B	B	A	sólido blanco	64-66	358	356	
19		B	A	A	A	sólido blanco	134-135	352		
20		A	A	A	A	polvo blanco	115-116	293		
21		A	A	A	A	sólido blanquecino	102-103	319		
22		A	A	A	A	sólido blanco	169-171	281	279	
23		A	A	A	A	sólido blanquecino	148-149	290	288	
24		A	A	A	A	aceite amarillo claro		321		
25		A	A	A	A	sólido marrón	240-243	243 183	183	
26		A	A	A	A	sólido blanco	124-126	258		
27		A	A	A	A	sólido blanco cristalino	136-138	289		
28		A	A	A	A	sólido blanco	124-125	325		
29		B	A	A	A	sólido blanco	139-140	270	268	
30		B	A	B	A	sólido blanco	88-90	346	344	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
31		D	D	D	D	sólido blanquecino	121-123,5	371	354	
32		D	A	C	A	aceite incoloro		306	304	
33		A	A	A	A	sólido blanco esponjoso	184-186	243	245	
34		D	D	D	D	sólido blanco	177-178	396	394	
35		A	A	A	A	sólido amarillo	104-106	250	248	
36		B	A	C	A	sólido marrón	75-78	420	418	
37		A	A	A	A	agujas blancas	150-151	339	337	
38		D	C	C	C	sólido blanco	145-148	312	310	
39		D	D	A	A	sólido amarillo	184	391	389	
40		E	E	E	E	sólido blanco	142-143	312	310	
41		E	E	E	E	sólido blanco	86-88	299		
42		E	E	E	E	aceite incoloro		229		
43		B	B	C	B	sólido amarillo vítreo	126-130		327	
44		B	A	D	A	sólido blanquecino	102-105	265	263	
45		C	C	B	A	sólido amarillo	136-139	359	357	
46		A	A	A	A	sólido naranja-blanco		220	218	
47		E	E	E	E	sólido blanquecino	125-129	281		
48		A	A	A	A	sólido blanquecino	149-150	335	333	
49		E	E	E	E	líquido viscoso amarillo pálido		377		
50		C	A	C	A	sólido amarillo pálido	123-125	259		
51		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		326		
52		B	B	A	A	sólido blanco	160-162	280	278	
53		A	A	A	A	vidrio amarillo			294	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
54		D	D	B	A	sólido blanco	118-121	417	415	
55		A	A	A	A	sólido blanco	124	224		
56		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		388		
57		A	A	A	A	sólido blanco	122-124		282	
58		A	A	A	A	sólido blanco	170 (desc.)	307		
59		D	C	D	D	sólido blanco	190-191	371	369	
60		A	A	A	A	sólido blanco	143	306	304	
61		D	D	A	A	sólido blanco	111-113		326	
62		E	E	E	E	sólido blanquecino		234		
63		E	E	E	E	aceite amarillo		325		
64		D	C	D	D	sólido blanco	170-172	375	373	
65		C	B	C	B	sólido naranja/marrón	60-64	383	381	
66		A	A	A	A	sólido amarillo	76-79	264	262	
67		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		459		
68		D	B	D	B	blanco	128-130	269		
69		B	A	A	A	cera beige		300	298	
70		C	A	C	A	sólido blanco	94-97		312	
71		A	A	A	A			292	290	
72		A	A	A	A	sólido beige	155-156	265	263	
73		E	E	E	E	líquido gomoso		310		
74		D	D	B	A	sólido blanco		245	243	
75		A	A	C	A	sólido blanquecino	164-166	435	433	
76		C	C	C	C	semisólido negro			277	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
77		C	A	D	A	aceite incoloro		348	346	
78		A	A	A	A	sólido blanco	125-127	234		
79		A	A	A	A	sólido blanco	134-135	319		
80		D	B	D	D	sólido blanco	63-69*	272		
81		D	D	D	D	sólido blanquecino	187-189	361	359	
82		D	C	C	C	aceite naranja			325	
83		A	A	A	A	aceite transparente			278	
84		E	E	E	E	líquido gomoso			262	
85		A	A	C	A	sólido amarillo	151-156	403	401	
86		D	D	C	B	sólido blanco		368	366	
87		D	A	B	A	sólido amarillo	154-155	379	377	
88		C	A	C	A	aceite transparente incoloro		282	280	
89		A	A	A	A	sólido marrón	129-130	331		
90		C	B	A	A	sólido amarillo	180-187	441	439	
91		E	E	E	E	líquido gomoso		276 [M+Na]		
92		E	E	E	E	sólido blanquecino		381		
93		A	A	A	A	sólido blanco	122	274	272	
94		A	A	A	A	sólido blanquecino	63-65	291		
95		A	A	A	A	sólido amarillo	118-120	292		
96		D	D	D	D	aceite marrón		334		
97		D	D	D	B	sólido blanco	104-107	348	345	
98		D	D	D	D	sólido blanco	168-169	389	387	
99		D	B	D	A	sólido blanco	74-77	244		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
100		D	D	D	D	sólido blanco	163-164	254	252	
101		D	D	B	B	sólido blanco	127-129	338		
102		D	C	D	D	sólido marrón oscuro	118-122	325		
103		B	A	A	A	sólido amarillo	90-92		312	
104		A	A	A	A	sólido amarillo	179-181	277	275	
105		D	D	D	D	sólido marrón	143-148	238	285	
106		D	C	D	D	aceite amarillo claro		240	238	
107		A	A	A	A	sólido blanco		280	278	
108		A	A	A	A	sólido blanco	123-124	321		
109		E	E	E	E	sólido blanco	188-192	276	274	
110		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		338		
111		D	D	D	D	aceite amarillo pálido		347		
112		A	A	A	A	sólido blanco	128-131	340,8 (Na+)		
113		D	C	B	A	sólido gomoso amarillo pálido		266		
114		D	D	D	D	sólido blanco	133-135	389	307	
115		A	A	A	A	cera blanco-amarilla		271		
116		D	D	D	D	sólido blanco	162-164	377	375	
117		C	C	C	B	sólido amarillo	173-178	391	389	
118		E	E	E	E	sólido blanquecino		338		
119		B	A	C	A	polvo blanco	122-123	351	349	
120		A	A	A	A	sólido blanquecino	173-174	270	268	
121		B	A	B	A	aceite amarillo pálido transparente		372	370	
122		C	A	D	B	sólido blanco	107-108	325	323	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
123		C	A	D	C	aceite amarillo claro		356	354	
124		E	E	E	E	líquido amarillo pálido		294		
125		D	D	C	C	sólido amarillo	175-180	509	507	
126		A	A	A	A	aceite marrón		405	403	
127		A	A	A	A	sólido blanco	126	284	282	
128		E	E	E	E	sólido blanquecino		363		
129		A	A	C	A	sólido blanco	119-120	302	300	
130		A	A	A	A	sólido blanco	139-141	269		
131		C	A	C	B	cristales blancos	133-134	263		
132		A	A	A	A	sólido beige	171-173	316 (M+Na)		
133		B	A	B	A	sólido blanco	120-123		248	
134		B	A	D	B			350	348	
135		B	A	A	A	sólido blanquecino	144-146	391	389	
136		A	A	A	A	sólido blanquecino	103-105	286	284	
137		C	A	C	A	sólido blanco	55-57	214	212	
138		A	A	A	A	sólido blanquecino	111-116	254	252	
139		D	C	C	B	sólido blanco	106	356	354	
140		A	A	A	A	sólido blanco	120-125	317		
141		B	C	D	A	sólido beige	175-176	290		
142		D	D	D	D	sólido blanquecino	204-205	382	380	
143		E	E	E	E	sólido blanquecino		296		
144		A	A	A	A	sólido blanco	101	306	304	
145		A	A	A	A	aceite transparente			260	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
146		A	A	A	A	sólido blanco		295		
147		C	C	D	B	sólido blanquecino	146,8-149,4	297	294	
148		D	D	B	B	sólido amarillo	125-129	374	372	
149		D	B	C	A	aceite amarillo		356	354	
150		C	A	D	A			322	320	
151		C	C	D	D	aceite amarillo		417	415	
152		C	A	C	A	sólido blanco	157-161	341	339	
153		A	A	A	A	sólido blanco	144-145	275	273	
154		A	A	A	A	sólido blanco	158	335		
155		A	A	B	A	sólido blanco	94-96		330	
156		A	A	A	A	sólido blanco	128-130	318	316	
157		C	C	C	A	sólido amarillo	170-175	379	377	
158		A	A	A	A	sólido blanco	91-93	342	340	
159		C	D	D	D	sólido blanquecino		327		
160		A	A	A	A	aceite amarillo claro		333		
161		C	A	A	A	sólido blanco	121,5-125	267	264	
162		D	D	C	A	sólido blanco	71-73	354	352	
163		D	D	D	D	sólido blanquecino	161-162	330	328	
164		D	B	C	B	aceite transparente		360		
165		E	E	E	E	sólido blanquecino		397		
166		A	A	A	A	semisólido marrón		291		
167		D	D	D	C	sólido blanco pegajoso		365	363	
168		D	C	D	C			334		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
169		D	D	B	A	sólido blanquecino	154-155	393	391	
170		D	D	D	D	sólido blanquecino	169-171	353	351	
171		A	A	A	A	sólido blanquecino	85-87	248	246	
172		D	D	D	D	sólido blanco	77-78	188	186	
173		D	B	B	A	sólido blanco	141-147		322	
174		A	A	A	A			322	320	
175		D	D	A	A	sólido amarillo	177-179		388	
176		A	A	B	A				362	
177		A	A	A	A	sólido blanco	119-120	342		
178		A	A	A	A	sólido blanco	153	264	262	
179		A	A	A	A	sólido blanco	155-156	276	274	
180		D	D	D	B	sólido blanco	163-165	417	415	
181		A	A	A	A	sólido blanco	203-305	259	257	
182		A	A	A	A	sólido blanco	160-161	307	305	
183		D	D	D	D	sólido blanco	175-177	378	376	
184		B	A	A	A	sólido blanco	147-148	289		
185		A	A	A	A	vidrio amarillo pálido		268		
186		D	D	B	B	sólido blanco esponjoso	172-173	323	321	
187		D	B	D	D	sólido verde claro	90-92	291		
188		A	A	A	A	sólido blanco	92-94	234	232	
189		B	A	B	A	sólido blanco	163-164	279		
190		D	D	D	D	sólido blanco	74-75	312	310	
191		A	A	A	A	aceite amarillo viscoso		354	352	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
192		B	A	A	A	espuma blanca sólida				
193		A	A	A	A	sólido amarillo	120	326	324	
194		A	A	A	A	sólido blanco	154	274	272	
195		C	A	B	A	sólido amarillo claro	51-53	387	385	
196		A	A	A	A	sólido blanco	93-95	256	254	
197		B	A	B	A	sólido blanco	65-66	262	260	
198		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		441		
199		B	A	D	A			368	366	
200		D	D	D	C	sólido amarillo	181-186	421	419	
201		D	D	D	D	sólido blanco	161-162	401	399	
202		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		380		
203		D	B	D	D	sólido blanco	159-161	-	303	
204		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		368		
205		D	B	D	D	aceite amarillo pálido		321	318	
206		E	E	E	E	sólido blanquecino			352	
207		D	D	D	C	sólido marrón	142-147	298	296	
208		D	C	D	D	sólido blanco	196-198	371	369	
209		A	A	A	A	sólido blanco	84-85	275		
210		A	A	A	A	sólido blanco	121-123	256	254	
211		A	A	A	A	sólido blanquecino	173-174	326	324	
212		A	A	A	A	sólido blanquecino	122-124	346	344	
213		A	A	A	A	sólido blanco	90-92	226		
214		D	D	D	D	sólido blanco	110-113	291		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
215		E	E	E	E	sólido blanquecino		248		
216		B	A	A	A	sólido blanco	108-112	298	296	
217		E	E	E	E	líquido amarillo pálido		376		
218		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		473		
219		D	B	B	A	sólido blanquecino	141-143	262	260	
220		A	A	A	A			372	370	
221		E	E	E	E	sólido blanco	113-115	215		
222		E	E	E	E	líquido viscoso amarillo pálido			423	
223		A	A	A	A	sólido blanco	132-134	236	234	
224		D	C	C	A	sólido blanco	184	347	345	
225		E	E	E	E				306	
226		A	A	A	A	vítreo blanco	68-77	370		
227		A	A	A	A	sólido blanco	56-57	324	322	
228		B	A	C	A	sólido amarillo claro		362	360	
229		E	E	E	E	sólido blanquecino		322		
230		D	D	A	A	sólido amarillo	159-163	403	401	
231		D	D	D	D	sólido blanco	193-194	375	373	
232		A	A	A	A	sólido blanco	105-107	252	250	
233		A	A	B	A	sólido blanco	114-115			
234		A	A	A	A	sólido amarillo pálido		357		
235		B	A	A	A	aceite amarillo viscoso		345	342	
236		A	A	A	A	sólido blanco	111-113	238		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
237		D	D	D	D	sólido blanco	62-65	240	238	
238		D	C	D	B	aceite incoloro		515	513	
239		B	A	A	A	sólido blanco	165-166	403	401	
240		D	D	D	C	sólido blanco	86-87	268	266	
241		A	B	A	A	sólido blanco	164-165	365		
242		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		320		
243		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		429		
244		D	A	D	A	sólido amarillo pálido	138-142	332	329	
245		B	A	B	A	sólido blanco	145-148	254	252	
246		E	E	D	D	sólido blanco	157-158	254	252	
247		A	A	A	A	sólido blanquecino	94-95	295		
248		A	A	D	A	sólido blanquecino	102-104	304		
249		C	B	C	A	sólido blanquecino	92-93	358	356	
250		E	E	E	E	sólido blanco	117-118	254	252	
251		A	A	A	A	sólido beige	120-122	300		
252		D	D	C	C	sólido blanco	132-135			
253		B	A	C	A	aceite amarillo		263	261	
254		E	E	E	E	líquido gomoso		268		
255		E	E	E	E	sólido blanquecino		200		
256		D	C	D	D	sólido blanco	83-84	184	182	
257		B	A	B	A	sólido blanco	90-91	296	294	
258		C	B	B	A	sólido blanquecino	80-82	236	233	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
259		A	A	B	A	sólido blanco	103-105	310		
260		A	A	A	A	sólido blanquecino	95 (desc.)	357		
261		B	A	B	A	aceite ámbar pálido		340		
262		A	A	B	A	sólido blanco	101-105			
263		E	E	E	E	sólido blanquecino		270 M+Na		
264		A	A	B	A	sólido blanco	131-133	356		
265		E	E	E	E	sólido amarillo			344	
266		D	A	A	A	sólido blanco	137-138	391	389	
267		D	D	D	D	sólido blanco	104-105	172	170	
268		C	B	D	C	sólido blanco	126-127		247	
269		D	D	D	D	sólido verde pálido	91-94	265	237	
270		D	D	D	D	sólido blanco	111-112		239	
271		B	A	A	A	sólido blanco	119	306	304	
272		A	A	A	A	aceite amarillo claro		349		
273		A	A	B	A			340	338	
274		A	A	A	A	sólido blanquecino	84-86	319		
275		A	A	A	A	sólido beige	136	227		
276		A	A	A	A			322	320	
277		E	E	E	E				290	
278		E	E	E	E	sólido blanquecino		411		
279		A	A	B	A	sólido gomoso amarillo		316		
280		A	A	A	A			340	338	
281		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		427		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
282		C	B	D	C	sólido marrón oscuro	158-163	312	309	
283		D	C	B	A	sólido amarillo	166-176	441	439	
284		D	D	D	D	sólido blanco	196-198	236	234	
285		C	C	B	A	sólido marrón pálido	118-120	331	329	
286		B	A	A	A	sólido blanquecino	121-123	248	246	
287		A	A	A	A	sólido blanco	115-116	363	361	
288		D	D	D	D	sólido blanco	188-190	401	399	
289		A	A	A	A	sólido blanco	128		254	
290		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		425		
291		D	C	D	D	sólido blanquecino	198-200	357	355	
292		A	A	A	A	aceite incoloro		369		
293		D	D	D	D	sólido blanco	200-202	340	337	
294		D	A	D	A	aceite amarillo		347		
295		A	A	A	A				366	
296		D	C	D	D	sólido blanco		235	233	
297		E	E	E	E	líquido amarillo pálido			368	
298		A	A	A	A			354	352	
299		E	E	E	E	sólido blanquecino	83-88	562		
300		A	A	A	A	sólido blanco	106-107	250	248	
301		B	A	C	C	sólido marrón	136-139	386	384	
302		A	A	A	A	sólido gris	105-107		286	
303		B	A	C	A	aceite espeso		290		
304		E	E	E	E	líquido amarillo		276 [M+Na]		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
305		E	E	E	E	sólido blanco		292	290	
306		C	C	D	A	sólido marrón	108-112	341	339	
307		A	A	A	A	sólido blanco	161-163	261	258	
308		A	A	A	A	sólido amarillo	182-183	256		
309		A	A	A	A	sólido blanco		292	290	
310		E	E	E	E	aceite incoloro		400	398	
311		A	A	A	A	sólido blanco	160-161	286		
312		A	A	A	A	sólido blanco	196-200	309	307	
313		A	A	A	A	sólido blanco	99-102		246	
314		A	A	A	A			317	315	
315		A	A	B	A	sólido blanco	64-65	202	200	
316		A	A	A	A	sólido amarillo	138-140	303		
317		C	A	B	A	aceite ámbar pálido		345		
318		E	E	E	E				314	
319		E	E	E	E	líquido viscoso amarillo pálido		393		
320		C	C	D	D	sólido amarillo	209		377	
321		A	A	A	A	sólido amarillo claro	112-114	244		
322		D	D	D	D	sólido amarillo	235-237	267	265	
323		A	A	A	A	sólido blanco	153	248	246	
324		D	C	A	A	sólido amarillo	185-189	409	407	
325		A	A	A	A	sólido blanquecino	138-141	250	248	
326		B	A	A	A	aceite ámbar pálido		333		
327		B	A	B	A	aceite ámbar pálido		345		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
328		A	A	A	A	sólido blanquecino	116-117	264	262	
329		D	D	D	D	sólido blanco	187-188	387	385	
330		D	C	D	A	sólido blanco	75-77	340	338	
331		A	A	A	A	aceite transparente incoloro		308	306	
332		B	C	A	A	sólido blanco-amarillo	121-123	356	354	
333		E	E	E	E	líquido gomoso		388		
334		A	A	A	A	sólido blanco	79-80	301		
335		A	A	A	A	aceite naranja			282	
336		E	E	E	E	líquido gomoso		262		
337		C	C	C	A	sólido blanco	191-192	208	206	
338		A	A	A	A	sólido blanco	102-103	349		
339		C	B	D	C	sólido blanco	63-65	264	262	
340		C	A	D	A	aceite amarillo		294	291	
341		A	A	A	A	sólido blanco	129	268	266	
342		A	A	A	A	cristales blanquecinos	147-149	305	303	
343		A	A	C	A	sólido blanco	55-57	284	282	
344		D	C	C	C	sólido blanquecino	117-121	363	361	
345		A	A	A	A	sólido blanco	154-156	276		
346		A	A	A	A	aceite transparente		352	350	
347		A	A	A	A	sólido blanco	134-135	317		
348		A	A	A	A	sólido blanco	128-130			
349		E	E	E	E	líquido amarillo pálido		278		
350		A	A	A	A	sólido blanco	117	314	312	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
351		A	A	A	A	sólido blanco	151	220	278	
352		D	D	D	D	líquido incoloro		310	307	
353		D	D	D	D	sólido blanco	68-72	335	333	
354		C	A	B	A	aceite amarillo pálido transparente		370	368	
355		A	A	A	A	sólido blanco	150- 152		330	
356		C	B	C	B	aceite naranja			301	
357		D	B	C	C	sólido blanquecino	173- 177	313	311	
358		C	A	D	B	sólido marrón	120- 123	293	291	
359		A	C	A	A	sólido blanco	172- 174	360		
360		A	A	A	A	sólido blanco	105- 106	390	388	
361		A	A	B	A	sólido blanco	150- 153	339		
362		B	A	B	A	sólido blanco	115- 116	282	280	
363		E	E	E	E	líquido viscoso amarillo pálido		441		
364		A	A	A	A	sólido blanco	114- 115	342	340	
365		A	A	A	A	vidrio amarillo pegajoso		252		
366		B	A	A	A	sólido amarillo	186- 192	377	375	
367		D	D	D	D	sólido blanquecino	94- 97,5	341		
368		A	A	A	A	sólido marrón	95-96	286	284	
369		A	A	A	A	sólido blanco	138- 139	323		
370		D	D	D	D	sólido blanco	93-94	212	210	
371		D	D	D	D	sólido blanco	168- 169	371	369	
372		E	E	C	A	sólido blanco	138- 139	263	261	
373		C	B	D	D	sólido marrón	44-50	313	310	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
374		A	A	B	A	aceite amarillo pálido transparente		282	280	
375		C	A	D	D	aceite amarillo		322	320	
376		D	C	D	D	polvo lavanda	214- 216	363	361	
377		B	A	A	A	aceite ámbar pálido		329		
378		A	A	B	A	sólido blanco	177- 179	290	288	
379		B	A	A	A	sólido blanco	84-85	310	308	
380		D	A	A	A	sólido blanquecino	73-76	343		
381		A	A	A	A	sólido amarillo claro	173- 175	276	274	
382		D	A	A	A	sólido blanco	149- 152		336	
383		C	D	D	D	sólido amarillo	118- 120	-	299	
384		C	A	B	A	aceite oscuro		241	239	
385		A	A	A	A	sólido marfil	104- 105	292	290	
386		A	A	A	A	sólido blanco	124	264	262	
387		A	A	A	A	aceite naranja			274	
388		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		384		
389		A	A	A	A	sólido amarillo claro	88,5- 89-5	308,8 (Na+)		
390		A	A	A	A	sólido blanquecino	96- 100	236	234	
391		C	A	B	A	sólido blanquecino	132- 135	346	344	
392		A	A	A	A	sólido blanquecino		210		
393		C	A	C	A	aceite transparente			277	
394		A	A	A	A	sólido blanco	177- 179	356	354	
395		C	B	D	D	aceite amarillo		249	247	
396		A	A	A	A	sólido blanquecino	181- 183	274	272	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
397		D	D	D	D	aceite incoloro		282	279	
398		D	C	D	D	sólido blanco	176-178	385	383	
399		A	A	B	A	sólido blanco	174	249	247	
400		A	A	A	A	sólido blanquecino	154-156	264	262	
401		A	A	A	A	sólido blanquecino		271		
402		A	A	A	A	sólido blanco	121-122	331		
403		C	A	A	A	sólido blanco	93-94		292	
404		A	A	A	A	sólido blanco		289	287	
405		A	A	A	A	aceite amarillo pálido transparente		305		
406		A	A	A	A	sólido blanco	134-138		312	
407		D	D	D	D	aceite amarillo		318		
408		D	A	D	A	sólido amarillo	144-145	377	375	
409		A	A	A	A	sólido marrón		210		
410		B	A	B	A	sólido blanco	114-115	336		
411		C	C	A	A	sólido blanco	138-142	400	398	
412		D	B	D	A	aceite incoloro		344	342	
413		A	A	A	A	sólido blanco	245-247	234	232	
414		E	E	E	E	sólido blanco	125 (desc.)	319		
415		A	A	B	A			384	382	
416		D	C	D	D			358		
417		A	A	A	A	sólido blanco	105-115 (dec)	253		
418		A	A	A	A	aceite marrón		300		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
419		A	A	A	A			336	334	
420		A	A	A	A	sólido blanco	93-94	255		
421		A	A	A	A	aceite ámbar pálido		315		
422		A	A	A	A	sólido blanco	111- 112	317		
423		D	D	D	D	sólido blanco		236	234	
424		B	A	B	A	sólido ámbar claro	93- 100	347		
425		A	A	A	A	sólido blanco	95-99	372		
426		E	E	E	E	líquido incoloro		324		
427		A	A	A	A	sólido blanco- amarillo	125- 126	302		
428		C	A	B	B	sólido amarillo claro		309	307	
429		A	A	A	A	sólido beige	168- 169	261	259	
430		A	A	A	A	sólido marrón oscuro	128- 130	235	233	
431		A	A	A	A	amarillo transparente		238		
432		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		411		
433		D	D	D	D	sólido amarillo		214	212	
434		A	A	A	A	aceite transparente		338		
435		B	A	A	A	sólido blanco	115- 117	324	322	
436		A	A	A	A	sólido blanco	115	241		
437		D	B	D	B	sólido marrón	182- 183	246	244	
438		D	D	B	A	sólido blanco	162- 164	387	385	
439		E	E	E	E	sólido amarillo		298 [M+Na]		
440		C	D	D	D	sólido amarillo	172- 179	401	399	
441		A	A	A	A	sólido amarillo claro	61-62	278	276	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
442		A	A	A	A	sólido blanquecino esponjoso	195-196	297	293	
443		C	C	A	A	sólido amarillo	173-177	387	385	
444		A	A	A	A	sólido blanco	121-123	336		
445		A	A	B	A	aceite marrón		408	406	
446		E	E	E	E	sólido blanco	152-153	347	345	
447		E	E	E	E	líquido amarillo pálido		214		
448		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		364		
449		E	E	E	E	sólido blanquecino		489		
450		A	B	A	A	sólido blanco	155	294	292	
451		D	D	D	D	sólido blanco	158-160	263	261	
452		A	A	A	A	sólido blanco	108-109	326	324	
453		B	A	A	A	vidrio amarillo claro		344	342	
454		C	D	D	A	sólido blanquecino	153,5-157,9	337	334	
455		C	A	B	A	sólido blanco	101-103	268	266	
456		D	A	B	A	aceite amarillo		377		
457		B	A	B	A	sólido amarillo claro	53-55	257		
458		D	D	D	B	sólido blanco pegajoso		358	356	
459		A	A	B	A			352	350	
460		A	A	A	A	sólido blanco		304	302	
461		E	E	E	E	líquido gomoso			290	
462		B	C	B	A	sólido blanco	143-144	278	276	
463		C	B	D	B	aceite incoloro		308	306	
464		D	C	D	D	sólido blanquecino	171-174	419	417	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
465		A	A	A	A	sólido marrón	155-157	271	269	
466		D	D	D	D	vidrio amarillo claro		386	384	
467		A	A	A	A	sólido blanco	120-121	292,8 (Na+)		
468		A	A	A	A	polvo blanco	143-145	254		
469		A	A	A	A	sólido blanco	98-99	288		
470		C	C	D	D	sólido rosa pálido	154,4 157,2	342	340	
471		E	E	E	E	líquido gomoso		282		
472		A	A	A	A	sólido amarillo	58-61	266	264	
473		C	A	C	A	sólido blanco esponjoso	123-124	253	251	
474		A	A	A	A	aceite transparente			324	
475		B	A	B	A	sólido blanco	170-171	349	351	
476		A	A	A	A	sólido blanco	123-125	318	316	
477		D	B	D	D	sólido blanco	189-191	389	387	
478		A	A	B	A			372	370	
479		B	B	A	A	sólido amarillo	143-150	488		
480		D	D	D	D	sólido amarillo pálido	150-154	324	322	
481		A	A	A	A	sólido blanco	169-174 (desc.)			
482		D	C	D	D	sólido blanquecino	111-115	312	309	
483		A	A	A	A	aceite amarillo claro		307		
484		A	A	A	A	aceite amarillo		323		
425		D	D	D	D	sólido blanco	206-207	357	355	
486		C	C	D	D	sólido marfil	188-189	302	300	
487		D	A	D	A	sólido blanco	153,8-157,1	268	266	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
488		D	D	D	D	sólido blanco	191-192	238	236	
489		A	A	D	B	sólido blanco	122-123	182	180	
490		A	A	A	A			306	304	
491		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		411		
492		D	C	D	C	sólido marrón pálido	139-143	335	333	
493		D	D	D	C	sólido amarillo pálido	95-98	313	315	
494		A	A	A	A	sólido blanquecino	77-78	293		
495		E	E	E	E	sólido amarillo		350		
496		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		463		
497		D	C	B	A	sólido blanco	123-124	352	350	
498		A	A	A	A	sólido blanco	56-58	296	294	
499		E	E	E	E				292	
500		A	A	A	A	sólido blanco	147-150	306	304	
501		A	A	A	A	semisólido viscoso		316	314	
502		D	D	D	D	sólido blanco	130-134		336	
503		A	A	A	A	aceite transparente		341	339	
504		D	D	D	B	sólido blanquecino	165-166	412	410	
505		E	E	E	E	líquido marrón		294		
506		D	D	C	A	sólido blanco	95-97	346	344	
507		D	A	B	A	sólido gomoso amarillo		382		
508		A	A	A	A	sólido marrón		226		
509		C	D	D	D	sólido marrón	72-77	220	218	
510		B	A	B	A	sólido blanco	150	262	260	

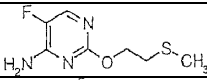
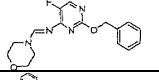
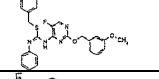
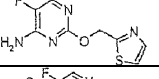
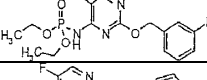
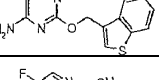
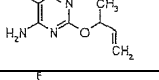
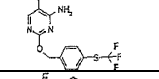
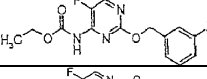
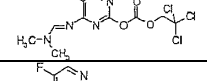
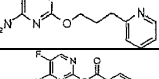
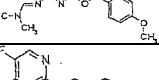
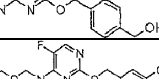
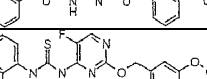
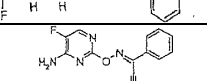
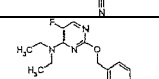
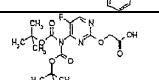
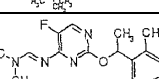
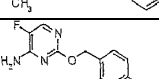
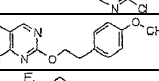
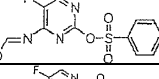
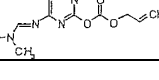
Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
511		C	C	B	B	aceite amarillo			271	
512		D	D	D	B	sólido blanquecino	63-67	318		
513		A	A	A	A	sólido pegajoso			264	
514		A	A	A	A	aceite amarillo			288	
515		D	D	D	A	sólido marrón	123-129	363	361	
516		A	A	A	A	aceite amarillo pálido transparente		303	301	
517		A	A	A	A	sólido blanco	125-127	243		
518		A	A	A	A	aceite marrón		335		
519		D	D	D	D	sólido blanco	208-211	405	403	
520		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		308		
521		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		278		
522		D	D	D	C	sólido óxido	188-189	246	244	
523		A	A	A	A	sólido blanco	127-130	356,8 (Na+)		
524		D	B	D	B	sólido blanco	100-101	264	262	
525		A	A	A	A	sólido amarillo	154-160	427	425	
526		D	D	D	B	sólido amarillo	216-218		404	
527		D	D	B	A	sólido amarillo	178-182	459	457	
528		D	B	A	A	sólido marrón	121-124	327	325	
529		D	D	D	D	sólido blanquecino	188-190			
530		B	A	A	A	aceite ámbar pálido		321		
531		A	A	A	A			384	382	
532		D	C	C	B	sólido blanquecino	157-162	343	341	
533		D	C	B	B	sólido blanco	120-123	331	329	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
534		D	C	D	C	sólido blanco	147-148	335	333	
535		D	D	D	D	sólido blanco	182-183	387	385	
536		C	C	D	D	sólido blanco	171-172	319	317	
537		A	A	A	A	sólido blanquecino	112-113	292	290	
538		B	A	C	B	sólido biege pálido	103-107	250	247	
539		D	D	A	A	sólido blanco	142-144	373	371	
540		A	A	A	A	sólido blanco	185	289	287	
541		A	A	A	A	sólido blanco	99-100	347		
542		E	E	E	E	sólido blanquecino		266		
543		A	A	A	A	aceite incoloro			276	
544		D	D	D	C	sólido blanco	134-140		322	
545		D	B	D	C	sólido blanco	134-135		199	
546		B	D	B	B	sólido blanco	235-238		360	
547		A	A	A	A	sólido blanco	130-132	273	271	
548		D	D	D	D	sólido blanco	196-198	330	328	
549		D	D	C	D	sólido blanco	187-188	241	239	
550		A	A	A	A	sólido blanco	105-106	292	290	
551		E	E	D	C	sólido blanco	155-156	240	238	
552		D	A	D	A	sólido blanquecino	148-149	369	367	
553		A	A	A	A	aceite transparente		334	332	
554		C	A	C	A	sólido blanco	123-124	260	258	
555		D	D	D	D	sólido blanco	203-205 (desc.)	364	362	
556		D	A	C	A	sólido blanco	100-103	323		

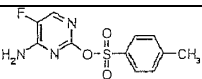
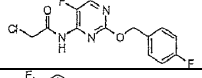
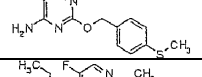
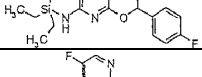
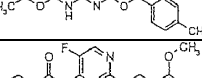
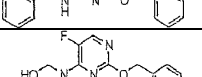
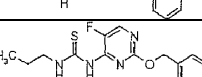
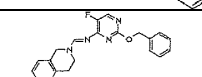
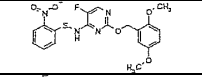
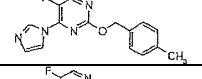
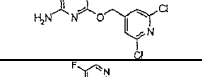
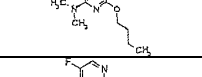
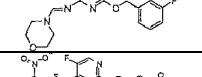
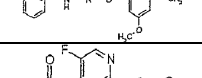
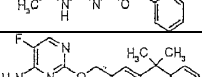
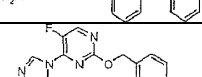
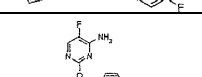
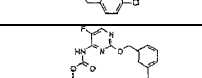
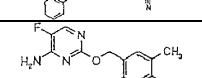
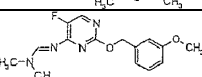
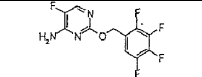
Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
557		D	D	C	D	sólido blanco	208-210	343	341	
558		C	C	A	A	sólido amarillo	167-171	373	371	
559		A	A	B	A	sólido amarillo pálido		212		
560		D	A	D	C	sólido amarillo		261	259	
561		A	A	A	A	aceite transparente		349		
562		D	C	D	D	aceite amarillo		333	331	
563		E	E	E	E	líquido incoloro		290		
564		C	A	B	A	sólido blanco	109	248	246	
565		E	E	E	E	sólido blanco		445		
566		D	D	D	D	sólido blanco	158-159	323	321	
567		C	A	C	B	aceite amarillo claro		388	386	
568		A	A	B	A	sólido blanquecino	125-126	339	337	
569		B	A	A	A	sólido blanco	90	320	318	
570		A	A	A	A	sólido blanquecino	101-102	281		
571		A	A	A	A	sólido blanco	132-133	280	278	
572		C	B	C	A	sólido blanquecino	178-179	405	403	
573		D	D	C	B	sólido blanco	201-202	236	234	
574		A	A	A	A	sólido blanco	131	289	287	
575		E	E	E	E	aceite amarillo		321		
576		C	A	C	A	sólido blanco	117-122		277	
577		A	A	A	A	sólido blanquecino	86-88	240		
578		A	A	A	A	sólido amarillo pálido	140-142	277		
579		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		262		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
580		D	B	B	A	sólido blanco	185-187	256		
581		A	A	A	A	sólido blanco	120	268	266	
582		A	A	A	A	sólido blanquecino	162	290	288	
583		A	A	D	A	sólido blanco	108-109	249	247	
584		D	A	D	A	sólido blanquecino	153-154	224	222	
585		A	A	A	A	sólido blanco	125 (desc.)	323		
586		D	D	D	D	aceite incoloro		320		
587		C	A	D	D	sólido blanco	200-201	363	361	
588		D	D	D	D	sólido blanco	86,3-89,8	335		
589		D	D	D	D	sólido blanco	>200	294	292	
590		A	A	A	A	sólido blanco	154	268	266	
591		E	E	E	E	sólido blanquecino		282		
592		A	A	A	A	aceite amarillo			260	
593		E	E	D	B	sólido blanco	134-135	240	238	
594		D	C	D	B	sólido blanco	104,4-107	356	354	
595		D	D	C	A	sólido blanquecino	160-161	391	389	
596		A	A	A	A	sólido blanquecino	105-107	305	302	
597		A	A	A	A	aceite transparente			280	
598		A	A	B	A	sólido blanco	156-160	356		
599		A	A	B	A	aceite transparente		359	357	
600		A	A	A	A	aceite transparente		365		
601		A	A	A	A	sólido blanco	53-54	308	306	
602		D	D	D	B	sólido blanco	144		247	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
603		D	D	C	A	sólido blanquecino	173-176	374	372	
604		A	A	A	A	sólido blanquecino	106-108	####	####	
605		D	A	B	A	sólido blanco	64-67	350		
606		E	E	E	E			316		
607		D	C	D	D	sólido blanco	112-113		334	
608		B	A	B	A	rojo oscuro		279	262	
609		A	A	A	A	sólido blanco	112	280	278	
610		C	B	A	A	sólido blanco	157-159	319		
611		A	A	A	A	sólido blanco	143-145			
612		A	A	A	A	sólido amarillo	165-172	398	396	
613		A	A	A	A			368	366	
614		A	A	A	A	sólido blanco	75-76	310	308	
615		A	A	C	A	sólido amarillo	58-60	237		
616		A	A	A	A	sólido blanco	149-151		287	
617		A	A	A	A	aceite transparente			228	
618		E	E	E	E	sólido blanquecino		429		
619		E	E	E	E	líquido gomoso		306		
620		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		350		
621		E	E	E	E	sólido blanquecino		266		
622		E	E	E	E	líquido amarillo pálido		296		
623		B	A	A	A	sólido blanco	112	280	278	
624		B	A	B	A	sólido marrón claro	128-130	310		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
625		D	C	D	C	sólido blanco	114-115		202	
626		A	A	A	A	sólido blanco	130-131	317		
627		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		475		
628		B	A	C	A	sólido beige	101-103	227		
629		D	B	D	B	sólido amarillo claro		374	372	
630		A	A	A	A	sólido blanco	167-169	276		
631		D	D	D	D	aceite amarillo claro		184	182	
632		A	A	A	A	sólido blanco	128-131	320	318	
633		A	A	A	A	sólido blanco			308	
634		A	A	A	A	sólido blanco	130-133	359		
635		D	A	C	A	sólido blanco	117-118		247	
636		A	A	A	A	sólido blanco	132-135	319		
637		A	A	A	A	sólido blanco	158-160		249	
638		D	B	B	A	sólido blanco	77-78	370	368	
639		B	A	A	A	sólido blanco	136-137	403	401	
640		A	A	A	A	sólido blanco-amarillo	218-220	258		
641		E	E	E	E	líquido amarillo pálido		276		
642		E	E	E	E	espuma blanca	61-65	410 (M+Na)		
643		A	A	A	A	sólido blanquecino pastoso				
644		A	A	A	A	sólido blanco	164-166	255		
645		D	B	C	A	sólido blanco	117-118	264	262	
646		A	A	B	A	sólido blanco	185-187	298	296	
647		A	A	A	A	sólido blanco	89-90	290,8 (Na+)		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
648		A	A	A	A	sólido blanco	132	344	342	
649		D	A	D	C	sólido amarillo claro	130-132	278		
650		A	A	A	A	sólido amarillo	108	322	320	
651		D	B	D	D	sólido blanco		381	379	
652		D	A	D	B	aceite amarillo		350	348	
653		C	A	D	D	sólido blanco	58-59	184		
654		A	A	A	A	sólido blanco	118-121	324		
655		B	C	B	A	sólido amarillo	144-146	461	459	
656		A	A	A	A	aceite transparente		334		
657		E	E	E	E	sólido blanquecino		459		
658		D	B	D	B	sólido gomoso amarillo				
659		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		477		
660		C	D	A	A	sólido blanco	160-161			
661		E	E	E	E	sólido blanquecino		280		
662		C	C	D	A	sólido amarillo	176	409	407	
663		A	A	A	A	sólido amarillo	123-124	323		
664		D	D	D	C	sólido blanquecino	125-127	356		
665		E	E	E	E	líquido incoloro		242		
666		E	E	E	E	sólido amarillo		248		
667		D	A	D	A	sólido marrón	108-111	357	355	
668		A	A	C	A			347	345	
669		A	A	A	A	sólido blanco	135-136	305		
670		B	A	B	A	sólido blanquecino	188-190	401	399	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
671		A	A	A	A	sólido blanco	153-154			
672		A	A	A	A	sólido blanquecino	127-129	314		
673		A	A	A	A	sólido blanquecino	94-95	266	264	
674		A	A	A	A	aceite transparente		366	364	
675		A	A	A	A	sólido céreo marrón claro		292	290	
676		D	D	C	A	aceite amarillo		354	352	
677		A	A	A	A	sólido blanco	113-114	250	248	
678		C	A	D	A	cristales blanquecinos	128-129	321	319	
679		A	A	A	A	sólido blanquecino	98-99	363		
680		C	C	D	D	sólido amarillo	175-182	433	431	
681		A	A	A	A	sólido blanco	86-88	285		
682		A	A	A	A	sólido blanquecino	153-155	290		
683		E	E	E	E	líquido incoloro		236 [M+Na]		
684		A	A	A	A	sólido blanco	94-95	335		
685		D	D	D	A	sólido amarillo	175-183	433	431	
686		E	E	E	E	sólido blanco	160-161	262	260	
687		D	D	C	A	sólido amarillo	122	338	336	
688		A	A	A	A	sólido blanco	93-95	289		
689		A	A	A	A	sólido blanco	126-128	254	252	
690		A	A	B	A			379	377	
691		B	A	B	A	sólido amarillo	162	262	260	
692		A	A	A	A	aceite amarillo claro		305		
693		A	A	A	A	sólido blanco	127-130	292	290	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
694		D	C	D	C	sólido blanco	181-183	451	449	
695		D	C	D	A	sólido blanco	100-102	256		
696		B	A	A	A	sólido blanquecino	98-102	276	274	
697		C	C	D	D	sólido amarillo claro		393		
698		A	A	A	A	sólido blanco	117	314	312	
699		B	A	A	A	sólido marronoso		222		
700		C	A	D	B	sólido marrón	185-187	375	373	
701		D	A	D	A	sólido amarillo pálido	138-142	332	329	
702		A	A	A	A	aceite transparente		382	380	
703		D	D	D	C	sólido blanco	116-117	435	433	
704		A	A	A	A	sólido blanco	76-77	347		
705		B	A	A	A	sólido blanco	117-119	288	286	
706		D	B	D	A	sólido amarillo claro	163-165	346	344	
707		A	A	A	A	sólido naranja	156	299	297	
708		A	A	A	A	sólido blanco	89-90	292	290	
709		D	B	D	A	aceite transparente incoloro		388	386	
710		B	A	B	A	aceite incoloro		262	260	
711		C	A	B	A	sólido blanco	138-139	379	377	
712		E	E	E	E	sólido blanquecino		415		
713		B	A	A	A	sólido marrón	95-98	238		
714		A	A	A	A	aceite amarillo		294	292	
715		D	D	C	B	sólido blanco	198-201	251	249	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P. f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
716		A	A	A	A	sólido amarillo	93	326	324	
717		A	A	B	A			338		
718		C	C	C	A	sólido amarillo pálido	135- 139	356	353	
719		E	E	D	B	sólido blanco	103- 104	300	298	
720		A	A	A	A	sólido blanco	115	299		
721		E	E	E	E			370	368	
722		D	C	D	D	sólido amarillo claro	58-59	184	182	
723		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		400		
724		D	D	D	C	sólido blanco	170- 171	335	333	
725		A	A	A	A	sólido amarillo	146- 147	346	344	
726		A	A	A	A	sólido blanco	109- 110	305		
727		A	A	A	A	aceite amarillo claro		307	305	
728		E	E	E	E	líquido marrón		228		
729		B	B	B	C	sólido amarillo claro	178- 180	307		
730		A	A	A	A	aceite amarillo claro		279		
731		D	D	D	D	sólido blanco	84-85	200	198	
732		B	A	A	A	aceite ámbar pálido		362		
733		A	A	A	A	sólido blanco	96-98	234	232	
734		A	A	A	A	sólido blanco	110- 111	250	248	
735		A	A	A	A	sólido blanco			278	
736		D	D	D	D	sólido blanco		370	368	
737		D	D	D	D	sólido amarillo		361		

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
738		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		334		
739		A	A	A	A	sólido blanco	87-88	295	293	
740		E	E	D	D	aceite amarillo		242	240	
741		A	A	C	A	aceite transparente incoloro		280	278	
742		E	E	E	E	sólido amarillo pálido		284 [M+Na]		
743		A	A	A	A	sólido amarillo	93		320	
744		A	A	A	A	aceite marrón		335		
745		A	A	A	A	sólido blanco	158-160	224		
746		D	A	D	D	sólido naranja	106-108	168	166	
747		B	A	D	A	aceite marrón		-	196	
748		E	E	D	D	sólido blanco	112-113	250	248	
749		A	A	A	A			324	322	
750		C	B	C	A			328		
751		C	A	B	A	aceite ámbar pálido		319		
752		A	A	A	A	aceite incoloro		308	306	
753		A	A	A	A	aceite amarillo pálido transparente		278	276	
754		D	C	D	D	aceite incoloro		336	333	
755		D	D	C	C	aceite amarillo pálido		331		
756		C	D	D	D	sólido blanco	199-200	348	346	
757		A	A	A	A	agujas amarillo claro	127-129	299	297	
758		C	B	C	A	sólido amarillo	163-170	459	457	
759		C	A	B	A	aceite amarillo		330	328	

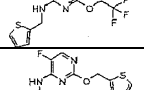
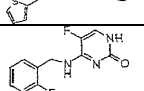
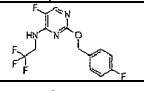
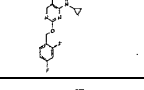
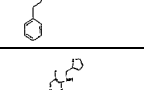
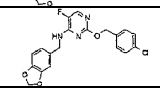
Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
760		E	E	E	E	sólido blanquecino			356	
761		E	E	E	E	líquido marrón		306		
762		A	A	A	A	sólido blanco	61-62	352	350	
763		A	A	A	A	sólido blanquecino		221		
764		D	D	D	D	sólido blanco	145-146	278	276	
765		D	D	D	C	sólido blanco	44-49	335	333	
766		D	C	D	B	sólido marrón oscuro	132-140	325	323	
767		A	A	A	A	sólido blanco	110 (desc.)	319		
768		D	C	D	C	sólido blanco	183-184	249	247	
769		D	A	B	A	sólido blanquecino	150-152	421	419	
770		A	A	A	A	aceite amarillo			306	
771		A	A	A	A			386	384	
772		A	A	A	A	sólido amarillo	180-181	255		
773		D	D	C	A	sólido blanco	132-134	368	366	
774		D	D	D	D	sólido amarillo claro		339		
775		D	D	D	D	sólido blanco	77-80	310	307	
776		D	D	D	D	sólido blanco	157-158	311	309	
777		D	C	D	D	sólido blanco		404	402	
778		A	A	A	A	sólido blanco	146 147	387	385	
779		A	A	A	A	sólido blanco	118-120			201
780		A	A	A	A	sólido blanco	107-108	268	266	
781		D	C	D	B	sólido amarillo claro	160-162	398	396	
732		C	A	D	C			375	373	

Comp.	Estructura	SEPTTR 3DC 25 ppm	SEPTTR 3DC 100 ppm	SETTTR 1DP 25 ppm	SEPTTR 1DP 100 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GC- MS
783		A	A	A	A	sólido blanquecino	51-54	278	276	
784		D	D	D	D	sólido blanco	112-115		250	
785		A	A	A	A	sólido blanco	163-164	340		
786		E	E	E	E	semisólido amarillo pálido		370		
787		A	A	A	A	sólido blanco	171	286	284	
788		A	A	A	A	sólido blanco	59-60	285		
789		A	A	A	A	sólido blanco	134-141	353		
790		A	A	A	A	aceite transparente			304	
791		E	E	E	E	aceite transparente		365		
792		C	B	A	A	sólido blanco	123-125	338	336	
793		D	D	D	D	sólido blanquecino	158-166	323	321	
794		A	A	A	A	sólido blanco	108		266	
795		A	A	A	A	sólido blanco	124-125	335		
796		A	A	A	A	sólido blanco	149	286	284	
797		C	A	B	A	sólido blanquecino	167-168	417	415	
798		A	A	A	A	aceite transparente			358	
799		D	D	D	D	sólido blanco	200-202	363	361	
800		A	A	A	A	sólido marrón		238		
801		E	E	E	E	sólido blanquecino			338	
802		D	D	D	D	sólido blanco	98-99	230	228	

Compuestos 1-48, 50-91, 93-127, 129-164, 166-280, 282-318, 320-490, 492-711, 713-802: Ejemplos comparativos

TABLA II: 1 DP Actividad de los compuestos en SEPTTR con 50 y 200 ppm

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
803		D	B			320		
804		C	B			360		
805		B	A			342		
806		E	A			384		
807		E	A			294		
808		A	A			350		
809		B	A			345		
810		E	A			350		
811		A	A			412		
812		E	A			290		
813		A	A			412		
814		E	A			384		
815		A	A	sólido blanco	115- 118	354	352	
816		A	A			378		
817		C	A			318		
818		D	D			317		
819		E	A	sólido blanquecino		328		
820		C	A			362		
821		E	A			290		
822		C	A			332		

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
823		E	A			290		
824		A	A			346		
825		B	A			364		
826		E	A			328		
827		D	C			314		
828		D	D			304		
829		C	A			428		
830		D	D			308		
831		B	A			322		
832		D	D	sólido blanco	167- 169	238	236	
833		C	B				318	
834		E	A			296		
835		E	A			384		
836		B	A			304		
837		D	D			316		
838		E	A			384		
839		E	A			360		
840		B	A			362		
841		B	A			346		
842		A	A			388		

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
843		C	A			330		
844		A	A				357	
845		A	A			296		
846		D	C	sólido blanco	108- 110	226	224	
847		A	E	sólido blanco	155- 157	288	286	
848		D	D	sólido blanco		212	210	
849		A	A			316		
850		D	B	sólido blanco- amarillo	189- 191	144		
851		A	A			380		
852		B	A			278		
853		D	D	sólido blanco	112- 114	158		
854		B	A			368		
855		E	A			344		
856		E	A	sólido blanquecino		221		
857		B	A			397		
858		D	C				335	
859		A	A			344		
860		E	A			400		
861		D	C			316		
862		B	A			338		

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
863		A	A			398		
864		D	C	sólido blanco	115- 117	212	210	
865		C	A			358		
866		D	A			266		
867		A	A			334		
868		B	A			414		
869		E	A			346		
870		E	A			330		
871		D	C			338		
872		C	B			316		
873		D	D			335		
874		D	D			351		
875		D	A			316		
876		D	D			249		
877		E	A			330		
878		A	A	sólido gomoso amarillo		312	310	
879		A	A			380		
880		D	C			359		
881		A	A			274		
882		A	A			372		

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
883		A	A			398		
884		A	A	aceite naranja		350	348	
885		C	B				334	
886		A	A			360		
887		E	A			294		
888		D	B			329		
839		A	A			397		
890		E	A			352		
891		A	A	sólido amarillento		221		
892		B	A			358		
893		A	A			362		
894		D	D			320		
895		A	A			294		
896		E	A			384		
897		D	B			308		
898		D	D			250		
899		C	A			306		
900		B	A			344		
901		B	A			363		
902		E	A			317		

ES 2 549 172 T3

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
903		D	A			336		
904		D	C			368		
905		C	B			336		
906		E	A			346		
907		B	A			398		
908		A	A			358		
909		E	A			328		
910		E	A			334		
911		D	D			358		
912		E	A			350		
913		A	A			329		
914		D	A			314		
915		D	D			337		
916		A	A			340		
917		D	B	sólido blanco- amarillo	54- 56	278	276	
918		A	A			362		
919		E	A			304		
920		A	A			359		
921		A	A			364		
922		B	C			330		

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
923		E	A			352		
924		A	A			362		
925		D	D			324		
926		A	A			338		
927		B	A			278		
928		A	A			372		
929		B	A			374		
930		D	A			342		
931		E	A			346		
932		A	A	sólido blanco	49- 51	170	168	
933		C	B	sólido blanco	145- 149		223	
934		D	C			340		
935		C	A			345		
936		A	A	sólido blanco	88- 91	234	232	
937		A	A			330		
938		E	A			296		
939		D	A	sólido blanquecino		225		
940		D	D			274		
941		D	D			282		
942		A	A			414		

Comp.	Estructura	SEPTTR 1DP 50 ppm	SEPTTR 1DP 200 ppm	Aspecto físico	P.f.	Espec. masas (ES+)	Espec. masas (ES-)	GCMS
943		B	A			398		
944		D	D			280		
945		A	A			350		
946		B	A			334		
947		A	A	sólido blanco	144- 146	330	328	
948		D	D			342		
949		B	A			330		
950		D	D			346		
951		B	A			342		
952		E	C			261		
953		C	A			412		
Compuestos 803-953: Ejemplos comparativos								

TABLA III: 1 DP Actividad de los compuestos en CERCBE, VENTIN, y MYCOFI

Comp. nº	CERCBE 1DP 25 ppm	CERCBE 1DP 75 ppm	VENTIN 1DP 25 ppm	VENTIN 1DP 75 ppm	MYCOFI 1DP 50 ppm	MYCOFI 1DP 200 ppm
1	C	C	A	A	C	B
3	E	E	D	A	E	E
4	A	A	A	A	E	E
5	E	E	A	A	E	E
7	B	B	A	A	E	E
9	D	D	A	C	E	E
10	D	D	B	A	E	E
11	D	D	A	A	E	E
14	D	D	A	A	E	E
15	E	E	A	A	E	E
20	E	E	B	A	E	E
23	D	B	B	A	E	E
24	D	D	C	A	E	E
35	E	E	A	A	E	E
36	B	B	B	A	E	E
46	E	E	A	A	E	E
61	D	D	A	B	E	E
68	B	B	B	A	E	E
69	D	C	B	A	E	E
79	D	C	C	C	E	E
121	D	D	A	C	E	E
122	C	C	A	A	E	E
125	C	C	C	A	E	E

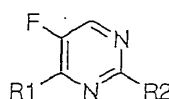
ES 2 549 172 T3

Comp. n°	CERCBE 1DP 25 ppm	CERCBE 1DP 75 ppm	VENTIN 1DP 25 ppm	VENTIN 1DP 75 ppm	MYCOFI 1DP 50 ppm	MYCOFI 1DP 200 ppm
135	C	C	B	B	E	E
137	D	D	D	A	E	E
141	D	D	D	C	E	E
155	D	D	C	D	E	E
158	D	D	B	B	E	E
163	D	D	D	C	E	E
164	D	D	C	B	E	E
169	D	D	B	C	E	E
180	D	C	C	D	E	E
187	D	C	B	C	E	E
189	C	D	B	B	E	E
190	C	C	C	C	E	E
207	D	D	D	C	E	E
209	E	E	B	A	E	E
211	D	D	C	B	E	E
214	B	B	A	A	E	E
221	C	B	D	C	E	E
226	D	C	C	A	E	E
233	D	D	D	B	E	E
236	E	E	A	A	E	E
248	D	D	D	B	E	E
251	D	B	A	A	E	E
260	A	B	A	A	E	E
270	C	C	D	C	E	E
271	C	C	C	B	E	E
288	D	C	B	C	E	E
311	C	C	C	C	E	E
313	E	E	C	B	E	E
316	B	A	A	A	E	E
335	C	A	A	A	E	E
337	B	A	B	A	E	E
341	D	D	C	D	E	E
342	C	A	A	A	E	E
343	A	A	A	B	E	E
345	E	E	B	A	E	E
347	E	E	A	C	E	E
352	D	D	D	C	E	E
353	C	C	C	A	E	E
356	B	D	B	C	E	E
370	C	C	C	C	E	E
373	D	D	D	C	E	E
384	D	D	B	D	E	E
410	C	C	C	B	E	E
411	C	C	B	B	E	E
418	D	D	B	B	E	E
436	B	C	A	A	E	E
452	D	D	D	C	E	E
469	E	E	B	A	E	E
481	C	A	A	A	E	E
483	D	D	C	A	E	E
488	D	D	C	C	E	E
510	E	E	A	A	E	E
524	D	D	B	B	E	E
538	D	D	C	B	E	E
554	D	B	A	A	E	E
560	D	C	D	A	E	E
569	C	A	A	A	E	E
570	D	C	C	A	E	E
582	B	B	A	A	E	E
584	C	C	C	C	E	E
593	C	B	A	A	E	E

Comp. n°	CERCBE 1DP 25 ppm	CERCBE 1DP 75 ppm	VENTIN 1DP 25 ppm	VENTIN 1DP 75 ppm	MYCOFI 1DP 50 ppm	MYCOFI 1DP 200 ppm
626	D	D	C	A	E	E
630	D	D	B	A	E	E
631	D	D	D	C	E	E
635	C	C	C	A	E	E
649	D	D	C	C	E	E
651	C	C	D	D	E	E
687	D	D	C	B	E	E
694	C	C	C	B	E	E
707	B	C	B	B	E	E
710	D	D	C	C	E	E
719	D	C	B	B	E	E
720	D	B	B	A	E	E
730	C	C	B	B	E	E
732	C	A	C	A	E	E
734	E	E	A	A	E	E
739	D	D	C	B	E	E
741	D	D	B	A	E	E
764	C	D	C	C	E	E
800	A	A	A	A	E	E
804	D	D	D	D	E	E
845	D	D	C	C	E	E
849	C	C	A	B	E	E
858	C	C	C	D	E	E
860	D	C	C	B	E	E
894	D	D	D	C	E	E
933	C	C	D	C	E	E
941	D	D	B	C	E	E
952	D	D	D	D	E	E

La solicitud describe además los siguientes asuntos:

Asunto 1. Un compuesto de fórmula I



I

5 en donde R¹ es -N(R³)R⁴;

R² es -OR²¹;

R³ es:

H;

alquilo C₁-C₆ opcionalmente sustituido con 1 a 3 R⁵;

10 alqueno C₂-C₆ opcionalmente sustituido con 1-3 R⁵;

un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo, estando cada anillo heteroaromático opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰;

15 imidazol condensado con un anillo aromático o heteroaromático seleccionado del grupo que consiste en benceno, oxazol, isoxazol, furano, tiazol, pirimidina, piridina, pirrol, pirazina, tiofeno, estando cada anillo aromático o heteroaromático opcionalmente sustituido con 1 a 3 R³⁰;

benzo[1,3]dioxolilo;

3H-isobenzofuran-1-onilo;

ciano;

alquinilo C₃-C₆ opcionalmente sustituido con 1-3 R⁵;

-C(=O)R⁶;

-C(=O)OCH₂C(=O)R⁸;

-C(=S)R⁶;

-C(=S)NHR⁸;

-C(=O)N(R⁸)R¹⁰;

-OR⁷;

-P(O)(OR¹⁵)₂;

-S(O)₂R⁸;

-SR⁸;

-Si(R⁸)₃;

-N(R⁹)R¹⁰;

-N=C(R¹⁵)R¹⁶;

-(CHR²²)_mR³⁷;

-(CHR²⁴)OR²⁹; o

-C(=NR¹⁶)SR¹⁶;

en donde m es un número entero de 1-3;

R⁴ es:

H;

alquilo C₁-C₆ opcionalmente sustituido con 1-3 R⁵;

-C(=O)R⁶; o

-C(=O)N(R⁸)R¹⁰;

alternativamente R³ y R⁴ se pueden considerar juntos para formar:

un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

=C(R¹²)N(R¹³)R¹⁴;

=C(R¹³)(R¹⁴);

=C(R¹⁵)OR¹⁵;

=S(R³⁴)₂; o

=NR³⁵;

R⁵ es independientemente halógeno, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄, halogenoalcoxi C₁-C₄, alquiltio C₁-C₄, halogenoalquiltio C₁-C₄, amino, alquilamino C₁-C₃, alcoxycarbonilo C₂-C₆, alquilcarbonilo C₂-C₆, alquilaminocarbonilo C₂-C₆, -OH, N-metil-piperazina o trialkilsililo C₃-C₆;

R⁶ es independientemente H, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, halogenoalcoxi C₁-C₅, alcoxycarbonilo C₂-C₆, alcoxialcoxi C₁-C₄, alquilaminocarbonilo C₂-C₆; 1-benzo[1,2,3]tiadiazol-7-ilo, tiazolilo, bencilo, fenilo, fenoxi, o benciloxi en donde el tiazolilo, bencilo, fenilo, fenoxi, o benciloxi puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros, que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

- R^7 es H, alquilo C_1-C_6 , alquenilo C_2-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , bencilo que puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} , $CHR^{18}C(O)OR^{19}$, o un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros, que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} ;
- 5 R^8 es independientemente alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , amino, alquilamino C_1-C_6 , dialquilamino C_2-C_6 , fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , o un anillo saturado o insaturado, de 5 o 6 miembros, que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} ;
- R^9 es H, alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^{17}$, o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ;
- R^{10} es H o alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ;
- 10 R^{11} es independientemente halógeno, alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , halogenoalcoxi C_1-C_6 , alquiltio C_1-C_6 , halogenoalquiltio C_1-C_6 , amino, alquilamino C_1-C_6 , dialquilamino C_2-C_6 , alcoxicarbonilo C_2-C_6 , o alquilcarbonilo C_2-C_6 ;
- R^{12} es H o alquilo C_1-C_4 ;
- R^{13} y R^{14} son independientemente H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , alquilcarbonilo C_2-C_6 , fenilo, o bencilo, en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ;
- 15 alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar:
- un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , o 3,4-dihidro-1H-isoquinolin-2-ilo;
- alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar:
- 20 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} ;
- R^{15} es H o alquilo C_1-C_6 ;
- R^{16} es H, alquilo C_1-C_6 o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ;
- alternativamente R^{15} y R^{16} se pueden considerar juntos como $-(CH_2)_4-$ o $-(CH_2)_5-$;
- 25 R^{17} es H, alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, fenoxi, o benciloxi en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ;
- R^{18} es H, alquilo C_1-C_6 , o halogenoalquilo C_1-C_6 ;
- R^{19} es H, alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , o bencilo;
- 30 R^{20} es independientemente halógeno, ciano, nitro, amino, alcóxialcoxi C_1-C_6 , alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , hidroxialquilo C_1-C_6 , alcóxialquilo C_2-C_6 , halogenoalcóxialquilo C_2-C_6 , alquenilo C_2-C_6 , halogenoalquenilo C_2-C_6 , alquinilo C_3-C_6 , halogenoalquinilo C_3-C_6 , hidroxilo, alcoxi C_1-C_6 , halogenoalcoxi C_1-C_6 , alqueniloxi C_2-C_6 , halogenoalqueniloxi C_2-C_6 , alquiniloxi C_3-C_6 , halogenoalquiniloxi C_3-C_6 , alquiltio C_1-C_6 , halogenoalquiltio C_1-C_6 , alquilsulfonilo C_1-C_6 , halogenoalquilsulfonilo C_1-C_6 , alqueniltio C_2-C_6 , halogenoalqueniltio C_2-C_6 , halogenoalquenilsulfonilo C_2-C_6 , alquiniltio C_3-C_6 , alquinilsulfonilo C_3-C_6 , halogenoalquinilsulfonilo C_3-C_6 , alquilamino C_1-C_6 , dialquilamino C_2-C_6 , dialquilaminocarbonilo C_3-C_8 , alcoxicarbonilo C_2-C_6 , alquilcarbonilo C_2-C_6 , trialquilsililo C_3-C_6 , 2-[(E)-metoxiimino]-N-metil-acetamidilo, fenilo, bencilo, benciloxi, fenoxi o un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros, en donde cada fenilo, bencilo, benciloxi, fenoxi, o anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 sustituyentes independientemente seleccionados de R^{31} ;
- 35 R^{21} es:
- 40 H;
- alquilo C_1-C_{14} ;
- halogenoalquilo C_1-C_6 ;
- alquenilo C_2-C_4 ;
- halogenoalquenilo C_2-C_4 ;
- 45 alquinilo C_3-C_4 ;

- halogenoalquinilo C₃-C₄;
- fenilo, naftilo o tetrahidroquinolinilo cada uno opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- (CHR²²)_mR²³;
- (CHR²⁴)_mC(O)OR²⁵;
- 5 -(CHR²⁴)_mC(O)R²⁶;
- (CHR²⁴)_mC(O)N(R²⁷)R²⁸;
- (CHR²⁴)_mOR²⁹;
- (CHR²⁴)_mSR²⁹
- (CHR²⁴)_mN(N²⁷)R²⁸;
- 10 -C(=O)R³²;
- N=C(R³²)(R³⁶);
- NR²⁵C(=O)OR²⁵
- Si(R⁸)₃;
- SO₂R³³;
- 15 alcóxicarbonilo C₂-C₆;
- alquilaminocarbonilo C₂-C₆;
- alquilcarbonilo C₂-C₆;
- azúcares seleccionados del grupo que consiste en beta-D-glucosa-tetraacetato, ramnosa, fructosa y pentosa; o
- 20 un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, tiazolilo o isoxazolilo, en donde cada anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰;
- R²² es independientemente:
- 25 H;
- halógeno;
- ciano;
- nitro;
- alquilo C₁-C₆;
- 30 halogenoalquilo C₁-C₆;
- fenilo o bencilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- hidroxialquilo C₁-C₆;
- alcóxialquilo C₂-C₆;
- halogenoalquinilo C₃-C₆;
- 35 alquenilo C₂-C₆;
- halogenoalquenilo C₂-C₆;
- alquinilo C₃-C₆;
- alcoxi C₁-C₆;

	halogenoalcoxi C ₁ -C ₆ ;
	alquiltio C ₁ -C ₆ ;
	alquilamino C ₁ -C ₆ ;
	dialquilamino C ₂ -C ₈ ;
5	cicloalquilamino C ₃ -C ₆ ;
	(alquil)cicloalquilamino C ₄ -C ₆ ;
	alquilcarbonilo C ₂ -C ₆ ;
	alcoxycarbonilo C ₂ -C ₆ ;
	alquilaminocarbonilo C ₂ -C ₆ ;
10	dialquilaminocarbonilo C ₃ -C ₈ ;
	trialquilsililo C ₃ -C ₆ ;
	anillo heteroaromáticos condensados con anillo, seleccionados del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo y benzoimidazolilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R ²⁰ ; o
15	un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionados del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo y tienilo;
	R ²³ es:
	H;
20	halógeno;
	alquilo C ₁ -C ₆ ;
	halogenoalquilo C ₁ -C ₆ ;
	dialquilamino C ₂ -C ₆ ;
	fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R ²⁰ ;
25	anillos heteroaromáticos condensados con anillo seleccionados del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo, benzofuranilo y benzoimidazolilo, 2,3-dihidrobencofuran-2-ilo, 4-metil-4H-tieno[3,2-b]pirrol-5-ilo, 1-metil-1H-indol-5-ilo, imidazo[1,2-a]piridin-2-ilo, imidazo[2,1-b]tiazol-6-ilo, benzotiazol-2-ilo, benzo[b]tiofen-7-ilo, y 1-metil-1H-indazol-3-ilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R ²⁰ ;
30	naftilo;
	benzo[1,3]dioxolilo;
	pirrolidinonilo;
	oxetanilo;
35	alquiltio C ₁ -C ₆ opcionalmente sustituido con 1-5 R ²⁰ ;
	un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos
	en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R ¹¹ ; o
40	un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de pirdinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo, imidazolilo, tiofen-2-ilo y tiofen-3-ilo, en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R ²⁰ ;

R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, bencilo, o fenilo, en donde cada uno de los bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

R²⁵ es H, alquilo C₁-C₆, fenilo o bencilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

R²⁶ es:

- 5 H;
alquilo C₁-C₆;
alcoxi C₁-C₆;
fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- 10 un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionados del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, triazolilo e isoxazolilo;

R²⁷ y R²⁸ son independientemente:

- H;
alquilo C₁-C₆;
- 15 bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

R²⁹ es:

- 20 H;
alquilo C₁-C₆;
halogenoalquilo C₁-C₆;
alcoxialquilo C₁-C₆;
alquilcarbonilo C₂-C₆;
- 25 bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

- 30 R³⁰ es independientemente halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquinsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquinsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, trialquilsililo C₃-C₆, tiazolilo, fenilo, pirimidinilo, o piridilo, en donde el tiazolilo, fenilo, piridilo o pirimidinilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

- 40 R³¹ es independientemente halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquinsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquinsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈ o trialquilsililo C₃-C₆;

R³² es independientemente:

- 45 alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆,

- 5 halogenoalquínilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alquénilo C₂-C₆, halogenoalquénilo C₂-C₆, alquínilo C₃-C₆, halogenoalquínilo C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alquéniltio C₂-C₆, halogenoalquéniltio C₂-C₆, halogenoalquénilsulfonilo C₂-C₆, alquíniltio C₃-C₆, alquínilsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquínilsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, trialquilsililo C₃-C₆;
- fenilo en donde el anillo de fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;
- R³³ es independientemente:
- 10 alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, fenilo o tienilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o
- un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;
- R³⁴ es:
- alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, alquilamino C₁-C₆; o
- 15 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;
- R³⁵ es:
- alquilo C₁-C₆, alquilcarbonilo C₂-C₆; o
- 20 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;
- R³⁶ es H, ciano, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- alternativamente R³² y R³⁶ se pueden considerar juntos para formar:
- 25 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹; y
- R³⁷ es independientemente:
- H, halógeno o fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰;
- alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, o halogenoalcoxi C₁-C₆; o
- 30 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹.
- Asunto 2. El compuesto de la fórmula I, en donde R³ es alquilo C₁-C₆, -C(=O)R⁶, -(CHR²²)_mR³⁷, -(CHR²⁴)OR²⁹, -OR⁷, -C(=S)NHR⁸, -Si(R⁸)₃, -C(=O)OCH₂C(=O)R⁸, R⁴ es H, R⁶ es alquilo C₁-C₆, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, alcoxicarbonilo C₂-C₆, fenilo, bencilo, alcoxialcoxi C₁-C₄, tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R⁷ es H, alquilo C₁-C₆, R⁸ es alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, o fenilo
- 35 opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰, R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, R²⁹ es H, alquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₁-C₆, R³⁰ es halógeno, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R²⁰ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, R³⁷ es halógeno, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3
- 40 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹, R²¹ es (-CHR²²)_mR²³, m es 1, R²² es H, R²³ es un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹. R¹¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆.
- Asunto 3. El compuesto de la fórmula I, en donde R³ es alquilo C₁-C₆, -C(=O)R⁶, -(CHR²²)_mR³⁷, -(CHR²⁴)OR²⁹, -OR⁷, -C(=S)NHR⁸, -Si(R⁸)₃, -C(=O)OCH₂C(=O)R⁸, R⁴ es H, R⁶ es alquilo C₁-C₆, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, alcoxicarbonilo C₂-C₆, fenilo, bencilo, alcoxialcoxi C₁-C₄, tiazolilo en donde el tiazol puede estar
- 45 opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R⁷ es H, alquilo C₁-C₆, R⁸ es alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰, R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, R²⁹ es H, alquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₁-C₆, R³⁰ es halógeno, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, fenilo en donde cada fenilo
- 50 puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R²⁰ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-

- C₆, R³⁷ es halógeno, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹, R¹¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, R²¹ es $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{23}$, m es 1, R²² es H, alquilo C₁-C₄, fenilo, R²³ es un anillo heteroaromático condensado con anillo seleccionado del grupo que consisten en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo, benzofuranilo y benzoimidazolilo, 2,3-dihidro-benzofuran-2-ilo, 4-metil-4H-tieno[3,2-b]pirrol-5-ilo, 1-metil-1H-indol-5-ilo, imidazo[1,2-a]piridin-2-ilo, imidazo[2,1-b]tiazol-6-ilo, benzotiazol-2-ilo, benzo[b]tiofen-7-ilo, 1-metil-1H-indazol-3-ilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R²⁰.
- Asunto 4. El compuesto de la fórmula I, en donde R³ es alquilo C₁-C₆, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^6$, $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{37}$, $(-\text{CHR}^{24})\text{OR}^{29}$, $-\text{OR}^7$, $-\text{C}(=\text{S})\text{NHR}^8$, $-\text{Si}(\text{R}^8)_3$, $-\text{C}(=\text{O})\text{OCH}_2\text{C}(=\text{O})\text{R}^8$, R⁴ es H, R⁶ es alquilo C₁-C₆, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, alcóxicarbonilo C₂-C₆, fenilo, bencilo, alcóxialcoxi C₁-C₄, tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R⁷ es H, alquilo C₁-C₆, R⁸ es alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰, R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, R²⁹ es H, alquilo C₁-C₆, alcóxialquilo C₁-C₆, alquilcarbonilo C₂-C₆, R³⁰ es halógeno, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R³⁷ es halógeno, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹, R¹¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, R²¹ es $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{23}$, m es 1, R²² es H, R²³ es naftilo, benzo[1,3]dioxolilo, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰, R²⁰ es halógeno, ciano, nitro, amino, alcóxialcoxi C₁-C₆, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcóxialquilo C₂-C₆, halogenoalcóxialquilo C₂-C₆, alquilenilo C₂-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alquiltio C₁-C₆, halogenoalquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, alquilamino C₁-C₆, benciloxi, fenoxi, en donde cada benciloxi, fenoxi, puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 sustituyentes independientemente seleccionados de R³¹, R³¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆.
- Asunto 5. El compuesto de la fórmula I, en donde R³ es alquilo C₁-C₆, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^6$, $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{37}$, $(-\text{CHR}^{24})\text{OR}^{29}$, $-\text{OR}^7$, $-\text{C}(=\text{S})\text{NHR}^8$, $-\text{Si}(\text{R}^8)_3$, $-\text{C}(=\text{O})\text{OCH}_2\text{C}(=\text{O})\text{R}^8$, R⁴ es H, R⁶ es alquilo C₁-C₆, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, alcóxicarbonilo C₂-C₆, fenilo, bencilo, alcóxialcoxi C₁-C₄, tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R⁷ es H, alquilo C₁-C₆, R⁸ es alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰, R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, R²⁹ es H, alquilo C₁-C₆, alcóxialquilo C₁-C₆, alquilcarbonilo C₂-C₆, R³⁰ es halógeno, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R²⁰ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alcóxialcoxi C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcóxialquilo C₂-C₆, halogenoalcóxialquilo C₂-C₆, hidroxilo, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R³¹, anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R³¹, R³¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, R³⁷ es halógeno, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹, R¹¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, R²¹ es $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{23}$, m es 1, R²² es $-\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$, bencilo, 4-fluoro-fenilo, R²³ es fenilo, 4-fluoro-fenilo, p-tolilo.
- Asunto 6. El compuesto de la fórmula I, en donde R³ es alquilo C₁-C₆, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^6$, $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{37}$, $(-\text{CHR}^{24})\text{OR}^{29}$, $-\text{OR}^7$, $-\text{C}(=\text{S})\text{NHR}^8$, $-\text{Si}(\text{R}^8)_3$, $-\text{C}(=\text{O})\text{OCH}_2\text{C}(=\text{O})\text{R}^8$, R⁴ es H, R⁶ es alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, alcóxicarbonilo C₂-C₆, fenilo, bencilo, alcóxialcoxi C₁-C₄, tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R⁷ es H, alquilo C₁-C₆, R⁸ es alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰, R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, R²⁹ es H, alquilo C₁-C₆, alcóxialquilo C₁-C₆, alquilcarbonilo C₂-C₆, R³⁰ es halógeno, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R²⁰ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alcóxialcoxi C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcóxialquilo C₂-C₆, halogenoalcóxialquilo C₂-C₆, hidroxilo, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R³¹, anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R³¹, R³¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, R³⁷ es halógeno, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹, R¹¹ es halógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, R²¹ es $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{23}$, m es 1, R²² es H, alquilo C₁-C₆, R²³ es fenilo, p-tolilo, 4-fluoro-fenilo, 4-metoxi-fenilo, 3-metoxi-fenilo, tiofen-2-ilo, tiofen-3-ilo, 3-fluoro-fenilo, 3-bromo-fenilo, benzotiofen-2-ilo, 2,4,6-trimetil-fenilo, 1-etil-2-metoxi-fenilo, 3-benzonitrilo, 3-fluoro-4-metoxi-fenilo.
- Asunto 7. El compuesto de la fórmula I, en donde R³ es alquilo C₁-C₆, $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^6$, $(-\text{CHR}^{22})_m\text{R}^{37}$, $(-\text{CHR}^{24})\text{OR}^{29}$, $-\text{OR}^7$, $-\text{C}(=\text{S})\text{NHR}^8$, R⁴ es H, R²¹ es $-\text{C}(=\text{O})\text{R}^{32}$, $-\text{N}=\text{C}(\text{R}^{32})(\text{R}^{36})$, $-\text{SO}_2\text{R}^{33}$, $-\text{NR}^{25}\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{25}$, alcóxicarbonilo C₂-C₆; alquilaminocarbonilo C₂-C₆; alquilcarbonilo C₂-C₆, R⁶ es alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, alcóxicarbonilo C₂-C₆, fenilo, bencilo, alcóxialcoxi C₁-C₄, tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰, R⁷ es H, alquilo C₁-C₆, R⁸ es alquil C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, o fenilo opcionalmente

- sustituido con 1-3 R^{30} , R^{24} es H, alquilo C_1-C_6 , R^{29} es H, alquilo C_1-C_6 , alcóxialquilo C_1-C_6 , alquilcarbonilo C_2-C_6 , R^{30} es halógeno, nitro, alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 , fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{25} es H, alquilo C_1-C_6 , R^{33} es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , fenilo o tienilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{32} es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcóxialquilo, halogenoalcóxialquilo C_2-C_6 , R^{36} es H, ciano, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , bencilo, o fenilo en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{20} es halógeno, alcóxialcói C_1-C_6 , alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , hidroxialquilo C_1-C_6 , alcóxialquilo C_2-C_6 , halogenoalcóxialquilo C_2-C_6 , hidroxilo, alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 , alquilamino C_1-C_6 , dialquilamino C_2-C_8 , fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R^{31} , anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{31} , R^{31} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 , R^{37} es halógeno, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} , alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , hidroxilo, alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 , un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 .
- Asunto 8. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=O)N(R^8)R^{10}$, R^4 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=O)N(R^8)R^{10}$, R^6 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_5 , alcóxi C_1-C_5 , alcóxicarbonilo C_2-C_6 , fenilo, bencilo, alcóxialcói C_1-C_4 , tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^8 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{30} , R^{10} es H, alquilo C_1-C_6 , fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{21} es $-C(=C)R^{32}$, $-N=C(R^{32})(R^{36})$, $-SO_2R^{33}$, $NR^{25}C(=O)OR^{25}$, alcóxicarbonilo C_2-C_6 ; alquilaminocarbonilo C_2-C_6 ; alquilcarbonilo C_2-C_6 , R^{30} es halógeno, nitro, alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 , fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{25} es H, alquilo C_1-C_6 , R^{33} es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , fenilo o tienilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{32} es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcóxialquilo, halogenoalcóxialquilo C_2-C_6 , R^{36} es H, ciano, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , bencilo, o fenilo en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{20} es halógeno, alcóxialcói C_1-C_6 , alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , hidroxialquilo C_1-C_6 , alcóxialquilo C_2-C_6 , halogenoalcóxialquilo C_2-C_6 , hidroxilo, alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 , alquilamino C_1-C_6 , dialquilamino C_2-C_8 , fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R^{31} , anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{31} , R^{31} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 .
- Asunto 9. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=O)N(R^8)R^{10}$, R^4 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=O)N(R^8)R^{10}$, R^6 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_5 , alcóxi C_1-C_5 , alcóxicarbonilo C_2-C_6 , fenilo, bencilo, alcóxialcói C_1-C_4 , tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^8 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{30} , R^{30} es halógeno, nitro, alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , halogenoalcóxi C_1-C_6 , fenilo en donde cada fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{10} es H, alquilo C_1-C_6 , fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} .
- Asunto 10. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=C)N(R^8)R^{10}$, R^4 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=O)N(R^8)R^{10}$, R^6 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_5 , alcóxi C_1-C_5 , alcóxicarbonilo C_2-C_6 ; fenilo, bencilo, alcóxialcói C_1-C_4 , tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^8 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{30} , R^{10} es H, alquilo C_1-C_6 , fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es $-CH_3$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CH_2CH_3$, bencilo, 4-fluoro-fenilo, R^{23} es fenilo, 4-fluoro-fenilo, p-tolilo, R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 .
- Asunto 11. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=O)N(R^8)R^{10}$, R^4 es alquilo C_1-C_6 , $-C(=O)R^6$, $-C(=O)N(R^8)R^{10}$, R^6 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_5 , alcóxi C_1-C_5 , alcóxicarbonilo C_2-C_6 , fenilo, bencilo, alcóxialcói C_1-C_4 , tiazolilo en donde el tiazol puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^8 es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{30} , R^{10} es H, alquilo C_1-C_6 , fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es fenilo, p-tolilo, 4-fluoro-fenilo, 4-metoxi-fenilo, 3-metoxi-fenilo, tiofen-2-ilo, tiofen-3-ilo, 3-fluoro-fenilo, 3-bromo-fenilo, benzotiofen-2-ilo, 2,4,6-trimetil-fenilo, 1-etil-2-metoxi-fenilo, 3-benzonitrilo, 3-fluoro-4-metoxi-fenilo.
- Asunto 12. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar: un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} .
- Asunto 13. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $-C(=O)R^{32}$, $-N=C(R^{32})(R^{36})$, $-SO_2R^{33}$, $NR^{25}C(=O)OR^{25}$, alcóxicarbonilo C_2-C_6 ; alquilaminocarbonilo C_2-C_6 ; alquilcarbonilo C_2-C_6 , R^{25} es H, alquilo C_1-C_6 , R^{33} es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , fenilo o tienilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{32} es alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , alcóxialquilo, halogenoalcóxialquilo C_2-C_6 , alquenilo C_2-C_6 , R^{36} es H, ciano, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 , bencilo, o fenilo en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcóxi C_1-C_6 .

Asunto 14. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar: un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es $-CH_3$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CH_2CH_3$, bencilo, 4-fluoro-fenilo, R^{23} es fenilo, 4-fluoro-fenilo, p-tolilo.

5 Asunto 15. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es fenilo, p-tolilo, 4-fluoro-fenilo, 4-metoxi-fenilo, 3-metoxi-fenilo, tiofen-2-ilo, tiofen-3-ilo, 3-fluoro-fenilo, 3-bromo-fenilo, benzotiofen-2-ilo, 2,4,6-trimetil-fenilo, 1-etil-2-metoxi-fenilo, 3-benzonitrilo, 3-fluoro-4-metoxi-fenilo.

10 Asunto 16. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar, $=C(R^{12})N(R^{13})R^{14}$, R^{12} es H, alquilo C_1-C_4 , R^{13} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{14} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ,
15 alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $-C(=O)R^{32}$, $-N=C(R^{32})(R^{36})$, $-SO_2R^{33}$, $NR^{25}C(=O)OR^{25}$, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , R^{25} es H, alquilo C_1-C_6 , R^{32} es alquilo C_1-C_6 , fenilo en donde el fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} . R^{33} es alquilo C_1-C_6 , fenilo o tienilo; opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{31} es ciano, alquilo C_1-C_6 , fenilo en donde el fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , y R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 17. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar, $=C(R^{12})N(R^{13})R^{14}$, R^{12} es H, alquilo C_1-C_4 , R^{13} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{14} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 ,
25 alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} ,
30 R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, alquilo C_1-C_4 , fenilo, R^{23} es un anillo heteroaromático condensado con anillo seleccionado del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo, benzofuranilo y benzoimidazolilo, 2,3-dihidro-benzofuran-2-ilo, 4-metil-4H-tieno[3,2-b]pirrol-5-ilo, 1-metil-1H-indol-5-ilo, imidazo[1,2-a]piridin-2-ilo, imidazo[2,1-b]tiazol-6-ilo, benzotiazol-2-ilo, benzo[b]tiofen-7-ilo, 1-metil-1H-indazol-3-ilo, en donde cada uno de los anillo puede estar además sustituido con 1-3 R^{20} , R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 18. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar, $=C(R^{12})N(R^{13})R^{14}$, R^{12} es H, alquilo C_1-C_4 , R^{13} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{14} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 ,
40 alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} ,
45 R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 19. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar, $=C(R^{11})N(R^{13})R^{14}$, R^{12} es H o alquilo C_1-C_4 , R^{13} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{14} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 ,
50 alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} ,
55 R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo, imidazolilo, tiofeno-2-il y tiofen-3-ilo, 1-metil-1H-pirazol-3-ilo, en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

60 Asunto 20. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar, $=C(R^{12})N(R^{13})R^{14}$, R^{12} es H, alquilo C_1-C_4 , R^{13} es H, ciano, $-OH$, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en

donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{14} es H, ciano, -OH, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} , R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 21. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar, $=C(R^{12})N(R^{13})R^{14}$, R^{12} es H o alquilo C_1-C_4 , R^{13} es H, ciano, -OH, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{14} es H, ciano, -OH, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, bencilo, 4-fluoro-fenilo, R^{23} es fenilo, 4-fluoro-fenilo, p-tolilo.

Asunto 22. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 y R^4 se pueden considerar juntos para formar, $=C(R^{12})N(R^{13})R^{14}$, R^{12} es H o alquilo C_1-C_4 , R^{13} es H, ciano, -OH, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{14} es H, ciano, -OH, alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_6 , fenilo, o bencilo en donde el fenilo o bencilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , alternativamente R^{13} y R^{14} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , alternativamente R^{12} y R^{13} se pueden considerar juntos para formar un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} , R^{11} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es fenilo, p-tolilo, 4-fluoro-fenilo, 4-metoxi-fenilo, 3-metoxi-fenilo, tiofen-2-ilo, tiofen-3-ilo, 3-fluoro-fenilo, 3-bromo-fenilo, benzotiofen-2-ilo, 2,4,6-tiimetil-fenilo, 1-etil-2-metoxi-fenilo, 3-benzonitrilo, 3-fluoro-4-metoxi-fenilo.

Asunto 23. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $-C(=O)R^{32}$, $-N=C(R^{32})(R^{36})$, $-SO_2R^{33}$, $NR^{25}C(=O)OR^{25}$, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , R^{25} es H, alquilo C_1-C_6 , R^{32} es alquilo C_1-C_6 , fenilo en donde el fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{33} es alquilo C_1-C_6 , fenilo o tienilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{36} es ciano, alquilo C_1-C_6 , fenilo en donde el fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , y R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 24. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, alquilo C_1-C_4 , fenilo, R^{23} es un anillo heteroaromático condensado con anillo seleccionado del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo, benzofuranilo y benzoimidazolilo, 2,3-dihidro-benzofuran-2-ilo, 4-metil-4H-tieno[3,2-b]pirrol-5-ilo, 1-metil-1H-indol-5-ilo, imidazo[1,2-a]piridin-2-ilo, imidazo[2,1-b]tiazol-6-ilo, benzotiazol-2-ilo, benzo[b]tiofen-7-ilo, 1-metil-1H-indazol-3-ilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R^{20} , R^{20} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 25. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} .

Asunto 26. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo, imidazolilo, tiofeno-2-ilo y tiofen-3-ilo, 1-metil-1H-pirazol-3-ilo, en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} , R^{20} es halógeno, nitro, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 27. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es alquilo C_1-C_6 , fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} , R^{23} es naftilo, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} , R^{20} es halógeno, nitro, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , fenoxi, fenilo en donde cada fenoxi, fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 sustituyentes independientemente seleccionados de R^{31} , R^{31} es halógeno, alquilo C_1-C_5 , halogenoalquilo C_1-C_6 , bencilo, piridilo.

Asunto 28. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $(-CHR^{22})_mR^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es naftilo, benzo[1,3]dioxolilo, fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} , R^{20} es halógeno, ciano, nitro, amino, alcoxialcoxi C_1-C_6 , alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , hidroalquilo C_1-C_6 , alcoxialquilo C_2-C_6 , halogenoalcoxialquilo C_2-C_6 , alquenilo C_2-C_6 , hidroxilo, alcoxi C_1-C_6 , halogenoalcoxi C_1-C_6 , alquiltio C_1-C_6 , halogenoalquiltio C_1-C_6 , alquilsulfonilo C_1-C_6 , alquilamino C_1-C_6 , benciloxi, fenoxi, en donde cada benciloxi, fenoxi,

puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 sustituyentes independientemente seleccionados de R^{31} , R^{31} es halógeno, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 .

Asunto 29. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $(-CHR^{22})_m R^{23}$, m es 1, R^{22} es $-CH_3$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CH_2CH_3$, bencilo, 4-fluoro-fenilo, R^{23} es fenilo, 4-fluoro-fenilo, p-tolilo.

- 5 Asunto 30. El compuesto de la fórmula I, en donde R^3 es H; R^4 es H, R^{21} es $(-CHR^{22})_m R^{23}$, m es 1, R^{22} es H, R^{23} es fenilo, p-tolilo, 4-fluoro-fenilo, 4-metoxi-fenilo, 3-metoxi-fenilo, tiofen-2-ilo, tiofen-3-ilo, 3-fluoro-fenilo, 3-bromo-fenilo, benzotiofen-2-ilo, 2,4,6-trimetil-fenilo, 1-etil-2-metoxi-fenilo, 3-benzonitrilo, 3-fluoro-4-metoxi-fenilo.

Asunto 31. Una composición para el control de un patógeno fúngico, que incluye el compuesto del asunto 1 y un material vehículo fitológicamente aceptable.

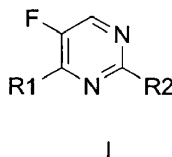
- 10 Asunto 32. La composición del asunto 31, en donde el patógeno fúngico es uno de la sarna del manzano (*Venturia inaequalis*), tizón foliar del trigo (*Septoria tritici*), mancha foliar de la remolacha (*Cercospora beticola*), mancha foliar del cacahuete (*Cercospora arachidicola*), y Sigatoka negra (*Mycosphaerella fijiensis*).

Asunto 33. Un método para el control y prevención de un ataque fúngico en una planta, incluyendo el método las etapas de:

- 15 aplicar una cantidad eficaz como fungicida de al menos uno de los compuestos del asunto 1 a al menos uno de la planta, una zona adyacente a la planta, suelo adaptado para soportar el crecimiento de la planta, una raíz de la planta, follaje de la planta, y una semilla adaptada para producir al menos uno de la planta y otra planta.

REIVINDICACIONES

1.- Un compuesto de fórmula I



en donde R¹ es -N(R³)R⁴;

5 R² es -OR²¹;

R³ es:

-C(=NR¹⁶)SR¹⁶;

R⁴ es:

H;

10 R⁸ es independientemente alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, amino, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R³⁰, o un anillo saturado o insaturado, de 5 o 6 miembros, que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

15 R¹¹ es independientemente halógeno, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alquiltio C₁-C₆, halogenoalquiltio C₁-C₆, amino, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, alcoxycarbonilo C₂-C₆, o alquilcarbonilo C₂-C₆;

R¹⁶ es H, alquilo C₁-C₆ o fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

20 R²⁰ es independientemente halógeno, ciano, nitro, amino, alcoxialcoxi C₁-C₆, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, halogenoalquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquinilsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquinilsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, alcoxycarbonilo C₂-C₆, alquilcarbonilo C₂-C₆, trialquilsililo C₃-C₆, 2-[(E)-metoxiimino]-N-metil-acetamidilo, fenilo, bencilo, benciloxi, fenoxi o un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros, en donde cada fenilo, bencilo, benciloxi, fenoxi, o anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 sustituyentes independientemente seleccionados de R³¹;

R²¹ es:

H;

30 alquilo C₁-C₁₄;

halogenoalquilo C₁-C₆;

alquenilo C₂-C₄;

halogenoalquenilo C₂-C₄;

alquinilo C₃-C₄;

35 halogenoalquinilo C₃-C₄;

fenilo, naftilo o tetrahydroquinolinilo cada uno opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

-(CHR²²)_mR²³;

-(CHR²⁴)_mC(O)OR²⁵;

-(CHR²⁴)_mC(O)R²⁶;

40 -(CHR²⁴)_mC(O)N(R²⁷)R²⁸;

- 5
- $(\text{CHR}^{24})_m \text{OR}^{29}$;
 - $(\text{CHR}^{24})_m \text{SR}^{29}$
 - $(\text{CHR}^{24})_m \text{N}(\text{R}^{27})\text{R}^{28}$;
 - $\text{C}(=\text{O})\text{R}^{32}$;
 - $\text{N}=\text{C}(\text{R}^{32})(\text{R}^{36})$;
 - $\text{NR}^{25}\text{C}(=\text{O})\text{OR}^{25}$
 - $\text{Si}(\text{R}^8)_3$;
 - SO_2R^{33} ;
- 10
- alcoxicarbonilo $\text{C}_2\text{-C}_6$;
 - alquilaminocarbonilo $\text{C}_2\text{-C}_6$;
 - alquilcarbonilo $\text{C}_2\text{-C}_6$;
 - azúcares seleccionados del grupo que consiste en beta-D-glucosa-tetraacetato, ramnosa, fructosa y pentosa; o
- 15
- un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, triazolilo o isoxazolilo, en donde cada anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros puede estar opcionalmente sustituido con 1-5 R^{20} ;
 - en donde m es un número entero de 1-3;
- R^{22} es independientemente:
- 20
- H;
 - halógeno;
 - ciano;
 - nitro;
 - alquilo $\text{C}_1\text{-C}_6$;
- 25
- halogenoalquilo $\text{C}_1\text{-C}_6$;
 - fenilo o bencilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ;
 - hidroxialquilo $\text{C}_1\text{-C}_6$;
 - alcoxialquilo $\text{C}_2\text{-C}_6$;
 - halogenoalquinilo $\text{C}_3\text{-C}_6$;
- 30
- alquenilo $\text{C}_2\text{-C}_6$;
 - halogenoalquenilo $\text{C}_2\text{-C}_6$;
 - alquinilo $\text{C}_3\text{-C}_6$;
 - alcoxi $\text{C}_1\text{-C}_6$;
 - halogenoalcoxi $\text{C}_1\text{-C}_6$;
- 35
- alquiltio $\text{C}_1\text{-C}_6$;
 - alquilamino $\text{C}_1\text{-C}_6$;
 - dialquilamino $\text{C}_2\text{-C}_8$;
 - cicloalquilamino $\text{C}_3\text{-C}_6$;

- (alquil)cicloalquilamino C₄-C₆;
- alquilcarbonilo C₂-C₆;
- alcoxicarbonilo C₂-C₆;
- alquilaminocarbonilo C₂-C₆;
- 5 dialquilaminocarbonilo C₃-C₈;
- trialquilsililo C₃-C₆;
- anillo heteroarómicos condensados con anillo, seleccionados del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo y benzoimidazolilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R²⁰; o
- 10 un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionados del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo y tienilo;
- R²³ es:
- H;
- 15 halógeno;
- alquilo C₁-C₆;
- halogenoalquilo C₁-C₆;
- dialquilamino C₂-C₆;
- fenilo opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰;
- 20 anillos heteroarómicos condensados con anillo seleccionados del grupo que consiste en benzotiofenilo, quinolinilo, isoquinolinilo, tieno[2,3-b]piridilo, 1-metil-1H-tieno[2,3-c]pirazolilo, benzofuranilo y benzoimidazolilo, 2,3-dihidrobenzofuran-2-ilo, 4-metil-4H-tieno[3,2-b]pirrol-5-ilo, 1-metil-1H-indol-5-ilo, imidazo[1,2-a]piridin-2-ilo, imidazo[2,1-b]tiazol-6-ilo, benzotiazol-2-ilo, benzo[b]tiofen-7-ilo, y 1-metil-1H-indazol-3-ilo, en donde cada uno de los anillos puede estar además sustituido con 1-3 R²⁰;
- 25 naftilo;
- benzo[1,3]dioxolilo;
- pirrolidinonilo;
- oxetanilo;
- 30 alquiltio C₁-C₆ opcionalmente sustituido con 1-5 R²⁰;
- un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹; o
- un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionado del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, pirazolilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, triazolilo, imidazolilo, tiofen-2-ilo y tiofen-3-ilo, en donde cada anillo heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- 35 R²⁴ es H, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, bencilo, o fenilo, en donde cada uno de los bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- R²⁵ es H, alquilo C₁-C₆, fenilo o bencilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;
- 40 R²⁶ es:
- H;
- alquilo C₁-C₆;
- alcoxi C₁-C₆;

fenilo opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o

un anillo heteroaromático de 5 o 6 miembros seleccionados del grupo que consiste en furanilo, piridinilo, N-óxido de piridinilo, pirimidinilo, piridazinilo, pirazinilo, tiazolilo, triazinilo, tiadiazolilo, oxazolilo, triazolilo o isoxazolilo;

5 R²⁷ y R²⁸ son independientemente:

H;

alquilo C₁-C₆;

bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o

10 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

R²⁹ es:

H;

alquilo C₁-C₆;

15 halogenoalquilo C₁-C₆;

alcoxialquilo C₁-C₆;

alquilcarbonilo C₂-C₆;

bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o

20 un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

R³⁰ es independientemente halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquilsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, trialquilsililo C₃-C₆, tiazolilo, fenilo, pirimidinilo, o piridilo, en donde el tiazolilo, fenilo, piridilo o pirimidinilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰;

30 R³¹ es independientemente halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquilsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈ o trialquilsililo C₃-C₆;

R³² es independientemente:

alquilo C₁-C₆, halogenoalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, halogenoalcoxialquilo C₂-C₆, alquenilo C₂-C₆, halogenoalquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, halogenoalquinilo C₃-C₆, hidroxilo, alcoxi C₁-C₆, halogenoalcoxi C₁-C₆, alqueniloxi C₂-C₆, halogenoalqueniloxi C₂-C₆, alquiniloxi C₃-C₆, halogenoalquiniloxi C₃-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₁-C₆, alqueniltio C₂-C₆, halogenoalqueniltio C₂-C₆, halogenoalquenilsulfonilo C₂-C₆, alquiniltio C₃-C₆, alquilsulfonilo C₃-C₆, halogenoalquilsulfonilo C₃-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₈, dialquilaminocarbonilo C₃-C₈, trialquilsililo C₃-C₆;

45 fenilo en donde el anillo de fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R²⁰; o

un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R¹¹;

R^{33} es independientemente:

alquilo C_1-C_6 , halogenoalquilo C_1-C_6 , fenilo o tienilo opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ; o

un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} .

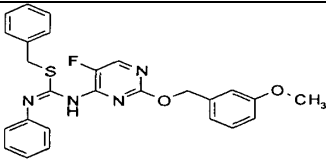
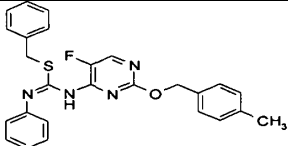
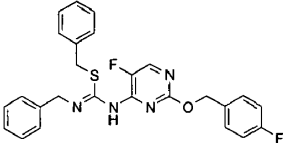
5 R^{36} es H, ciano, alquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 , bencilo o fenilo, en donde cada uno del bencilo o fenilo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{20} ;

alternativamente R^{32} y R^{36} se pueden considerar juntos para formar:

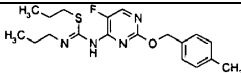
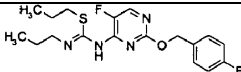
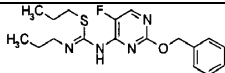
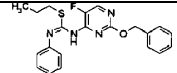
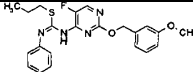
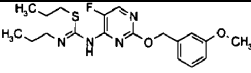
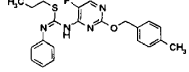
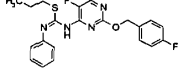
un anillo saturado o insaturado de 5 o 6 miembros que contiene 1-3 heteroátomos, en donde cada anillo puede estar opcionalmente sustituido con 1-3 R^{11} .

10 o un compuesto seleccionado de los compuestos:

67	
198	
218	
222	
243	
278	
290	
363	
449	
496	
618	

627	
657	
659	

2. El compuesto de la fórmula I según la reivindicación 1, seleccionado de los compuestos:

49	
92	
128	
165	
281	
319	
491	
712	

3. Una composición para el control de un patógeno fúngico, que incluye el compuesto de la reivindicación 1 o reivindicación 2, y un material vehículo fitológicamente aceptable.

4. La composición de la reivindicación 3, en donde el patógeno fúngico es uno de la sarna del manzano (*Venturia inaequalis*), tizón foliar del trigo (*Septoria tritici*), mancha foliar de la remolacha (*Cercospora beticola*), mancha foliar del cacahuate (*Cercospora arachidicola*), y Sigatoka negra (*Mycosphaerella fijiensis*)

5. Un método para el control y prevención de un ataque fúngico en una planta, incluyendo el método las etapas de:

10 aplicar una cantidad eficaz como fungicida de al menos uno de los compuestos de la reivindicación 1 o reivindicación 2 a al menos uno de la planta, una zona adyacente a la planta, suelo adaptado para soportar el crecimiento de la planta, una raíz de la planta, follaje de la planta, y una semilla adaptada para producir al menos uno de la planta y otra planta.