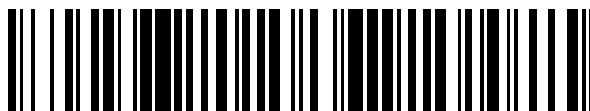


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 552 728**

51 Int. Cl.:

C07C 317/42 (2006.01)

C07C 323/36 (2006.01)

C07C 323/44 (2006.01)

C07C 323/63 (2006.01)

C07D 295/195 (2006.01)

A01N 41/10 (2006.01)

A01N 37/52 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **09.05.2007** **E 07725015 (7)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **30.09.2015** **EP 2099748**

54 Título: **Benzamidinas insecticidas**

30 Prioridad:

16.05.2006 JP 2006136726

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

01.12.2015

73 Titular/es:

BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH
(100.0%)

Alfred-Nobel-Strasse 10
40789 Monheim am Rhein, DE

72 Inventor/es:

YAMAZAKI, DAIEI;
ITO, MASAHITO;
GOMIBUCHI, TAKUYA;
SHIBUYA, KATSUHIKO;
SHIMOJO, EIICHI y
EMOTO, AKIRA

74 Agente/Representante:

CARPINTERO LÓPEZ, Mario

ES 2 552 728 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).

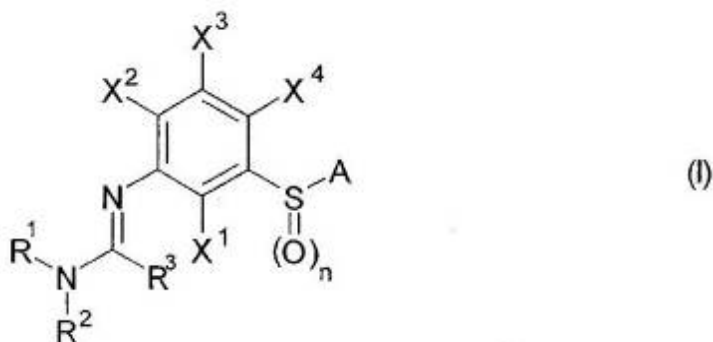
DESCRIPCIÓN

Benzamidinas insecticidas

La presente invención se refiere a nuevas benzamidinas y al uso de las mismas como insecticidas.

Es conocido que los derivados de benzamidas son útiles como insecticidas (véanse los documentos WO 99/55668 y WO 2006/043635).

Se han descubierto ahora nuevas benzimidinas de fórmula (I)



en la que R^1 representa hidrógeno, alquilo C_{1-12} lineal o ramificado, alquenilo C_{2-5} , alquinilo C_{2-3} , alcoxi, cicloalquilo C_{3-8} , haloalquilo, alcoxialquilo, fenilo, α - o β -naftilo, aralquilo, alquilaminocarbonilo, arilaminocarbonilo o dialquilaminoalquilo,

R^2 representa hidrógeno o alquilo C_{1-12} lineal o ramificado,

R^1 y R^2 pueden formar, junto con un átomo de N al que están unidos, pirrolidina, piperidina o morfolina,

R^3 representa hidrógeno, alquilo C_{1-12} lineal o ramificado, haloalquilo, ciano o fenilo, α - o β -naftilo,

R^1 y R^3 pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina o piperidina opcionalmente sustituidas con oxo,

X^1 , X^2 , X^3 y X^4 pueden ser iguales o diferentes y representan hidrógeno, halógeno, alquilo C_{1-12} lineal o ramificado, haloalquilo, haloalcoxi, alcoxicarbonilo, nitro o ciano,

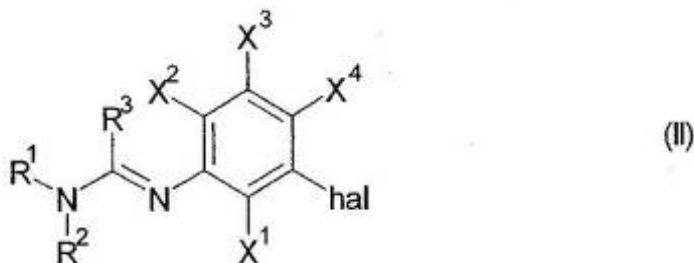
A representa trifluoroetilo, y

n representa 0 o 1.

Los compuestos de fórmula (I) según la presente invención pueden obtenerse, por ejemplo, mediante los siguientes procedimientos de producción (a) a (f).

Procedimiento de producción (a): {en la fórmula (I), al menos uno de X^2 y X^4 representa un grupo atractor de electrones, y n representa 0}

Los compuestos de fórmula (II)



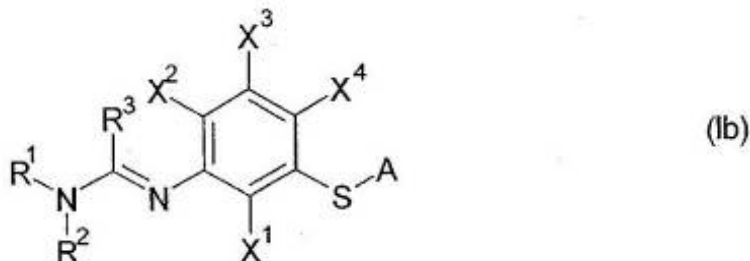
en la que, R^1 , R^2 , R^3 , X^1 , X^2 , X^3 y X^4 son como se definen anteriormente y al menos uno de X^2 y X^4 representa un grupo atractor de electrones, y hal representa un halógeno, se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (III)



en la que A es como se define anteriormente, en presencia de disolvente inerte y, siempre que sea apropiado, en presencia de una base.

Procedimiento de producción (b): {en la fórmula (I), n representa 1}

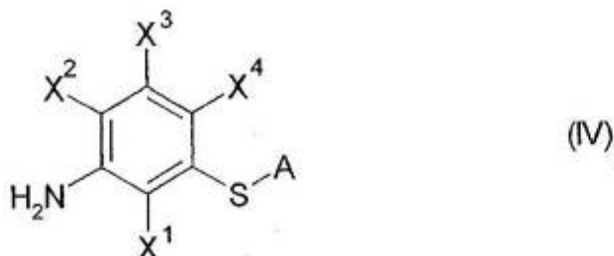
Los compuestos de fórmula (Ib)



5 en la que R^1 , R^2 , R^3 , X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, se oxidan en presencia de disolventes inertes.

Procedimiento de producción (c): {en la fórmula (I), R^3 representa hidrógeno, alquilo o arilo}

Los compuestos de fórmula (IV)



en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (V)

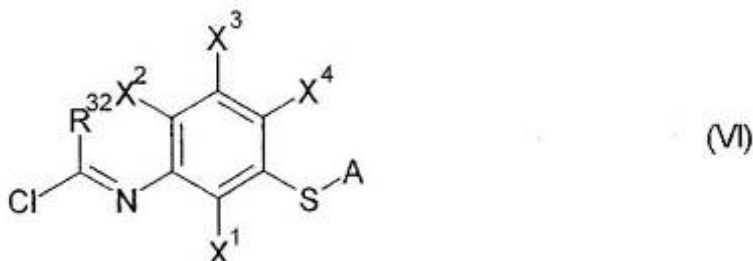


10

en la que, R^1 y R^2 son como se definen anteriormente, R^{31} representa hidrógeno, alquilo o arilo, en presencia de disolventes inertes.

Procedimiento de producción (d): {en la fórmula (I), R^3 representa perfluoroalquilo}

Los compuestos de fórmula (VI)



15

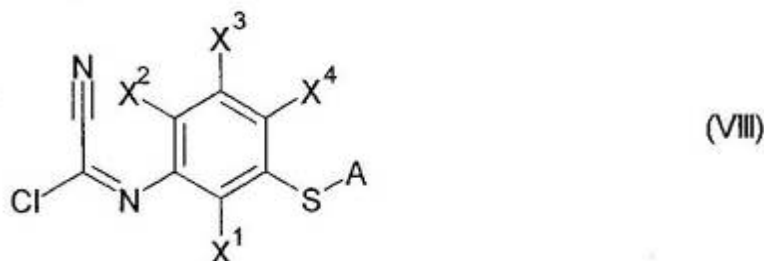
en la que, X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, y R^{32} representa perfluoroalquilo, se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (VII)



en la que R^1 y R^2 son como se definen anteriormente,
en presencia de disolventes inertes y, siempre que sea apropiado, en presencia de una base.

Procedimiento de producción (e): {en la fórmula (I), R^3 representa ciano}

Los compuestos de fórmula (VIII)

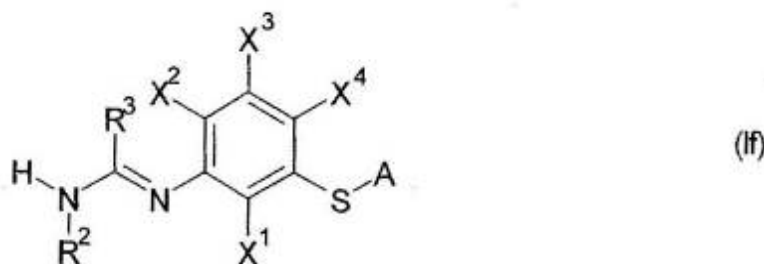


5

en la que, X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente,
se hacen reaccionar con compuestos de los compuestos de fórmula (VII) anteriormente mencionados en presencia de disolventes inertes.

Procedimiento de producción (f): {en la fórmula (I), R^1 representa alquilaminocarbonilo}

10 Los compuestos de fórmula (If)



en la que R^2 , R^3 , X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (X)



15 en la que R^{11} representa alquilaminocarbonilo,
en presencia de disolventes inertes y, siempre que sea apropiado, en presencia de una base.

Según la presente invención, las benzamidinas de fórmula (I) muestran una fuerte acción insecticida.

En esta memoria descriptiva,

20 "Alquilo" muestra un alquilo C_{1-12} lineal o ramificado tal como, por ejemplo, metilo, etilo, n- o iso-propilo, n-, iso-, *sec*- o *tert*-butilo, n-pentilo, n-hexilo, n-heptilo, n-octilo, n-nonilo, n-decilo, n-undecilo, n-dodecilo y similares, preferiblemente un alquilo C_{1-6} .

"Alquenilo" muestra un alquenilo C_{2-5} tal como, por ejemplo, vinilo, alilo, 1-propenilo, isopropenilo, 1-butenilo, 2-butenilo, 3-butenilo, 1,3-butanodienilo, 2-pentenilo y similares, preferiblemente un alquenilo C_{2-4} .

25 "Alquinilo" muestra un alquinilo C_{2-3} tal como, por ejemplo, etinilo, 1-propinilo, propargilo y similares, preferiblemente un alquinilo C_{2-3} .

Como cada porción alquilo en "alcoxi", "haloalquilo", "alcoxialquilo", "alquilaminocarbonilo", "dialquilaminoalquilo", "haloalcoxi", "alcoxicarbonilo", "alcoxicarbonilo" y "alcoxicarbonilalquilo", se ejemplifican las mismas porciones como se describen en el "alquilo" anteriormente mencionado.

30 "Cicloalquilo" muestra un cicloalquilo C_{3-8} tal como, por ejemplo, ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, cicloheptilo, ciclooctilo y similares, preferiblemente un cicloalquilo C_{3-6} .

"Ariilo" muestra fenilo, α - o β -naftilo, preferiblemente fenilo.

"Aralquilo" muestra, por ejemplo, bencilo, fenetilo o α -metilbencilo, preferiblemente bencilo.

"Halógeno" muestra flúor, cloro, bromo o yodo, preferiblemente flúor, cloro o bromo.

Como cada porción de halógeno en "haloalquilo" y "haloalcoxi", se ejemplifican las mismas porciones como se describen en el "halógeno" anteriormente mencionado.

El heteroanillo de 5 o 6 miembros que contiene un átomo de N y, en algunos casos, que contiene un átomo de O, muestra pirrolidina, piperidina o morfolina.

- 5 Un "grupo atractor de electrones" muestra, por ejemplo, flúor, cloro, metilo, fluoroalquilo, cloroalquilo, nitro o ciano.

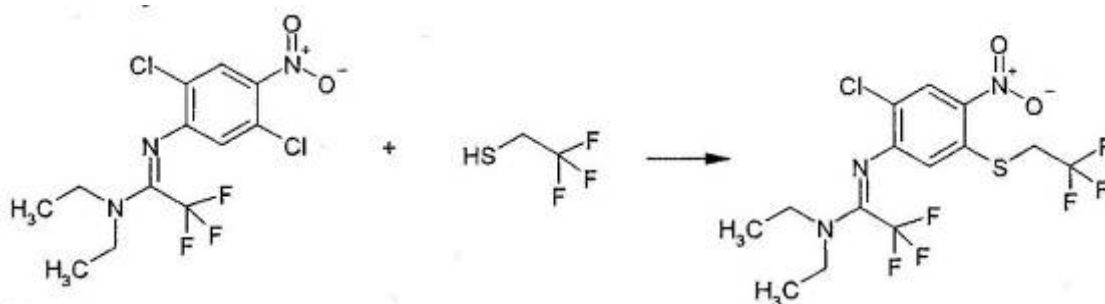
Como compuestos de fórmula (I) de la presente invención, se mencionan como ejemplos preferibles los compuestos en los que

- 10 R^1 representa hidrógeno, alquilo C_{1-6} , alquenoilo C_{2-4} , alquinilo C_{2-3} , alcoxi C_{1-4} , cicloalquilo C_{3-6} , haloalquilo C_{1-4} , alcoxialquilo C_{2-4} (número total de carbonos), fenilo, α o β naftilo, aralquilo C_{7-8} , alquil C_{1-2} -aminocarbonilo, aril C_{8-10} -aminocarbonilo o dialquilamino(alquilo C_{1-2}) C_{2-4} (número total de átomos de carbono),
 R^2 representa hidrógeno o alquilo C_{1-4} ,
 R^1 y R^2 pueden formar, junto con un átomo de N al que están unidos, pirrolidina, piperidina o morfolina,
 R^3 representa hidrógeno, alquilo C_{1-6} , haloalquilo C_{1-4} , ciano o fenilo,
 R^1 y R^3 pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina o piperidina
 15 opcionalmente sustituidas con oxo,
 X^1 , X^2 , X^3 y X^4 pueden ser iguales o diferentes y representan hidrógeno, halógeno, alquilo C_{1-2} , haloalquilo C_{1-2} , haloalcoxi C_{1-2} , alcoxi C_{1-2} -carbonilo, nitro o ciano.
 A fluoroetilo y
 n representa 0 o 1.

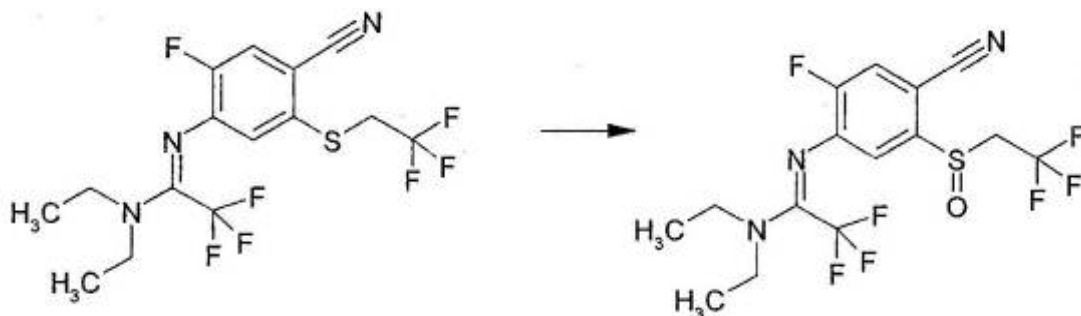
- 20 De ellos, son aún más preferibles los compuestos de fórmula (I) en la que
 R^1 representa hidrógeno, alquilo C_{1-3} , alilo, propargilo, alcoxi C_{1-2} , ciclopropilo, ciclohexilo, trifluoroetilo, metoxietilo, trifluorometilfenilo, fenilo, bencilo, etilaminocarbonilo, fenilaminocarbonilo o dimetilaminoetilo,
 R^2 representa hidrógeno o alquilo C_{1-2} ,
 R^1 y R^2 pueden formar, junto con un átomo de N al que están unidos, piperidina o morfolina,
 25 R^3 representa hidrógeno, alquilo C_1 , alquilo C_{1-3} sustituido con flúor, ciano o fenilo,
 R^1 y R^3 pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina o piperidina opcionalmente sustituidas con oxo,
 X^1 representa hidrógeno o cloro,
 X^2 representa hidrógeno, flúor, cloro, bromo, yodo, metilo, difluorometilo, trifluorometilo, nitro o ciano,
 30 X^3 representa hidrógeno,
 X^4 representa hidrógeno, cloro, bromo, yodo, metilo, difluorometilo, trifluorometilo, nitro o ciano,
 A representa trifluoroetilo, y
 n representa 0 o 1.

- De ellos, son los más preferibles los compuestos de fórmula (I) en la que
 35 R^1 representa hidrógeno, alquilo C_{1-3} , alilo, propargilo, metoxi, ciclopropilo, trifluoroetilo, trifluorometilfenilo, bencilo sustituido con trifluorometilo o etilaminocarbonilo,
 R^2 representa hidrógeno o alquilo C_{1-2} ,
 R^3 representa alquilo C_1 , alquilenilo C_1 , alquilo C_{1-3} sustituido con flúor, ciano o fenilo,
 R^1 y R^2 pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina,
 40 X^1 representa hidrógeno,
 X^2 representa hidrógeno o flúor,
 X^3 representa hidrógeno,
 X^4 representa difluorometilo o ciano,
 A representa alquilo C_3 o trifluoroetilo, y
 45 n representa 0 o 1.

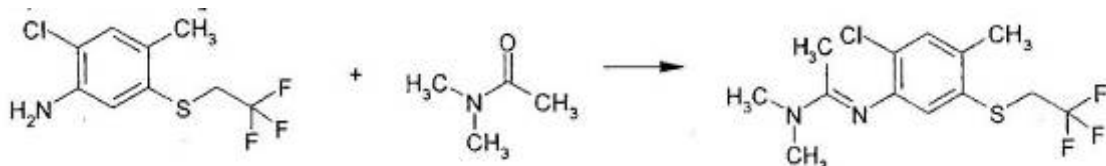
El procedimiento de producción (a) anteriormente mencionado puede representarse mediante la siguiente fórmula de reacción cuando, por ejemplo, se utilizan *N*-(2,5-dicloro-4-nitrofenil)-*N,N*-dietil-2,2,2-trifluoroetanimidamida y 2,2,2-trifluoroetanotiol como materiales de partida en bruto.



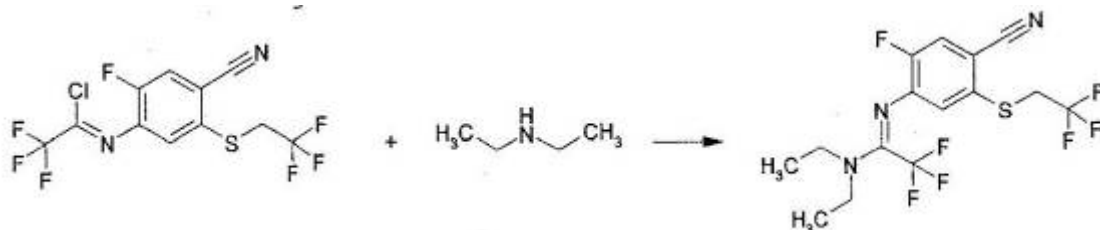
El procedimiento de producción (b) anteriormente mencionado puede representarse mediante la siguiente fórmula de reacción cuando, por ejemplo, se utilizan *N*-(4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil)-*N,N*-dietil-2,2,2-trifluoroetanimidamida y ácido *m*-cloroperbenzoico como oxidante, como materiales de partida en bruto.



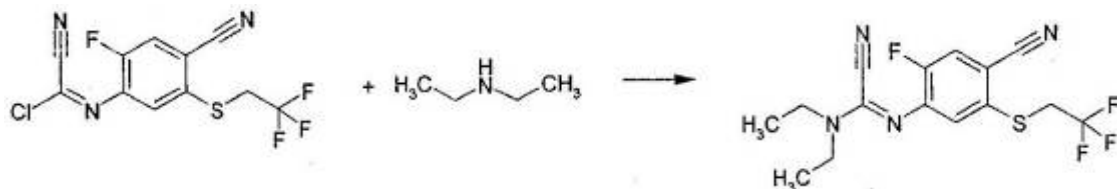
- 5 El procedimiento de producción (c) anteriormente mencionado puede representarse mediante la siguiente fórmula de reacción cuando, por ejemplo, se utilizan 2-cloro-4-metil-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]anilina y *N,N*-dimetilacetamida como materiales de partida en bruto.



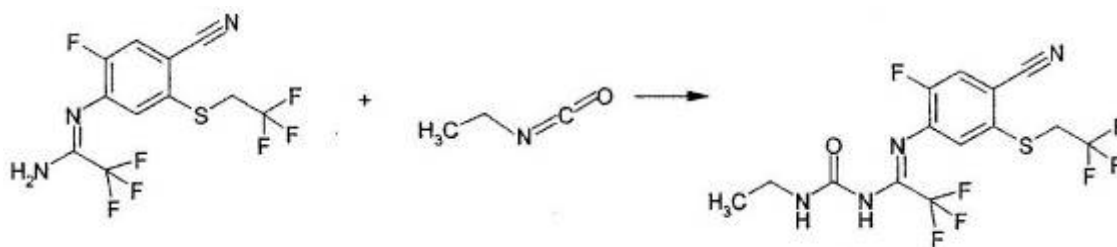
- 10 El procedimiento de producción (d) anteriormente mencionado puede representarse mediante la siguiente fórmula de reacción cuando, por ejemplo, se utilizan cloruro de *N*-(4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil)-2,2,2-trifluoroetanimidilo y dietilamina como materiales de partida en bruto.



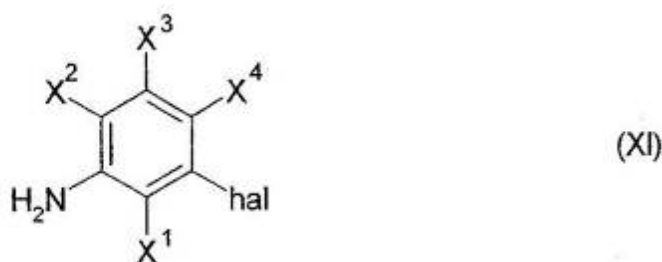
- 15 El procedimiento de producción (e) anteriormente mencionado puede representarse mediante la siguiente fórmula de reacción cuando, por ejemplo, se utilizan 1-[[cloro(ciano)metil]amino]-4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benceno y dietilamina como materiales de partida en bruto.



El procedimiento de producción (f) anteriormente mencionado puede representarse mediante la siguiente fórmula de reacción cuando, por ejemplo, se utilizan *N*-(4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil)-2,2,2-trifluoroetanimidamida y etilisocianato como materiales de partida en bruto.



Respecto a los compuestos de fórmula (II) utilizados como material en bruto en el procedimiento de producción (a) anteriormente mencionado, los compuestos de la siguiente fórmula (XI)



- 5 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y hal son como se definen anteriormente, pueden hacerse reaccionar como sustancia de partida con compuestos de fórmulas (V), (XXIX) o (XXX) según los procedimientos de producción (c), (d) o (e) descritos con detalle a continuación, para obtener finalmente los compuestos correspondientes a la fórmula (II).

Los compuestos de fórmula (XI) anteriormente mencionados incluyen, por ejemplo, 5-fluoro-2,4-dinitroanilina, 2,5-dicloro-4-nitroanilina, 5-cloro-2-nitro-4-trifluorometilanilina y similares, y todos ellos son compuestos comercialmente disponibles.

Los tioles de fórmula (III) anteriormente mencionados incluyen, por ejemplo, metanotiol, etanotiol, 1-propanotiol, 2-propanotiol, 1-butanotiol, 2-metil-1-propanotiol, ciclopropilmetanotiol, 2,2,2-trifluoroetanotiol, mercaptoacetato de metilo, fenilmetanotiol y similares, y todos ellos son compuestos comercialmente disponibles.

15 La reacción del procedimiento de producción (a) puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y los ejemplos de agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen éteres, por ejemplo, dioxano, dimetoxietano (DME), tetrahidrofurano (THF), dietilenglicoldimetiléter (DGM) y similares; cetonas, por ejemplo, acetona, metiletilcetona (MEK), metilisopropilcetona, metilisobutilcetona (MIBK) y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilos y similares; amidas de ácido, por ejemplo, dimetilformamida (DMF), dimetilacetamida (DMA), *N*-metilpirrolidona, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona, triamida del ácido hexametilfosfórico (HMPA) y similares.

20 El procedimiento de producción (a) puede llevarse a cabo en presencia de una base, y las bases inorgánicas como ejemplos de base incluyen hidróxidos, carbonatos, bicarbonatos y similares de metales alcalinos, por ejemplo, hidrogenocarbonato de sodio, hidrogenocarbonato de potasio, carbonato de sodio, carbonato de potasio, hidróxido de litio, hidróxido de sodio, hidróxido de potasio y similares.

25 El procedimiento de producción (a) puede llevarse a cabo en un intervalo de temperatura sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$ y aproximadamente $200\text{ }^{\circ}\text{C}$, preferiblemente de aproximadamente $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ a aproximadamente $100\text{ }^{\circ}\text{C}$. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

30 Al llevar a cabo el procedimiento de producción (a), se utilizan los compuestos de fórmula (III) en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso y carbonato de potasio como base en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso por mol de compuestos de fórmula (II) y se utiliza DMF como agente diluyente y se agitan a temperatura ambiente pudiendo obtenerse de este modo los compuestos diana.

Los compuestos de fórmula (Ib) en el procedimiento de producción (b) son un cuerpo de sulfuro incluido en los compuestos (I) de la presente invención, que pueden producirse mediante el procedimiento de producción (a), (c), (d), (e) o (f).

35 Se mencionan como el oxidante utilizado en la reacción de oxidación en el procedimiento de producción (b), por ejemplo, peróxido de hidrógeno, ácido *m*-cloroperbenzoico y similares.

La reacción del procedimiento de producción (b) puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado. Los ejemplos de agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen agua; hidrocarburos alifáticos, alifáticos cíclicos y aromáticos (opcionalmente clorados en algunos casos), por ejemplo, pentano, hexano, ciclohexano, éter

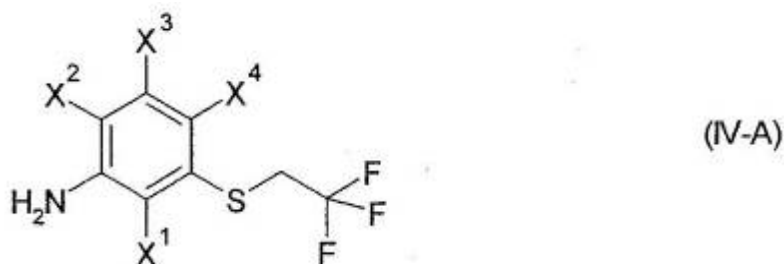
de petróleo, benceno, tolueno, xileno, diclorometano, dicloroetano y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilo y similares; ácidos orgánicos, por ejemplo, ácido fórmico, ácido acético, ácido trifluoroacético, ácido propiónico y similares.

- 5 El procedimiento de producción (b) puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente -40°C y aproximadamente 200°C , preferiblemente de aproximadamente 0°C a aproximadamente 100°C . Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

- 10 Al llevar a cabo el procedimiento de producción (b), se utilizan un oxidante en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso por mol de compuestos de fórmula (Ib) y diclorometano como agente diluyente, y se agitan a temperatura ambiente, pudiendo obtenerse de este modo los compuestos diana.

Entre los compuestos de fórmula (IV) en el procedimiento de producción (c), los derivados de anilina de la siguiente fórmula (IV-A) son novedosos.

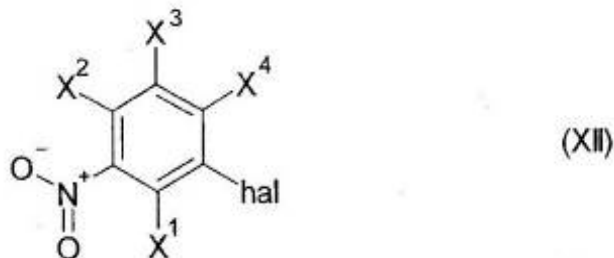
Fórmula (IV-A)



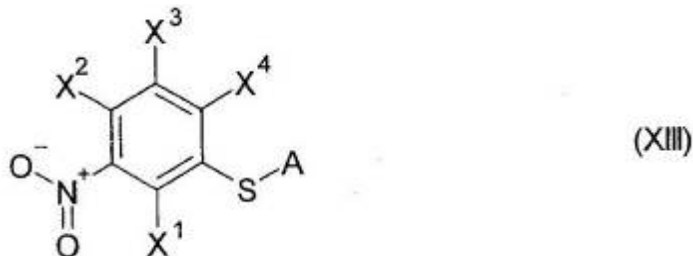
- 15 en la que X^1 , X^2 , X^3 y X^4 son como se definen anteriormente.

Los compuestos de fórmula (IV) pueden obtenerse, por ejemplo, mediante los siguientes procedimientos de producción (g) a (k). Procedimiento de producción (g):

Un procedimiento de producción de los compuestos de fórmula (IV) en el que los compuestos de fórmula (XII):



- 20 en la que, X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y hal son como se definen anteriormente, se hacen reaccionar con los compuestos de fórmula (III) en presencia de una base, para obtener compuestos de la siguiente fórmula (XIII)



en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, y después se reducen los compuestos de fórmula (XIII).

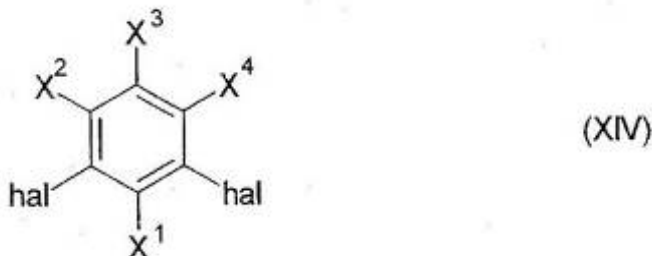
- 25 Los compuestos de fórmula (XII) incluyen, por ejemplo, 2-fluoro-1-metil-4-nitrobenceno, 4-fluoro-1-metil-2-nitrobenceno y similares, y estos son compuestos fácilmente disponibles.

La reacción de reducción anteriormente mencionada puede proporcionar los compuestos de fórmula (IV) según

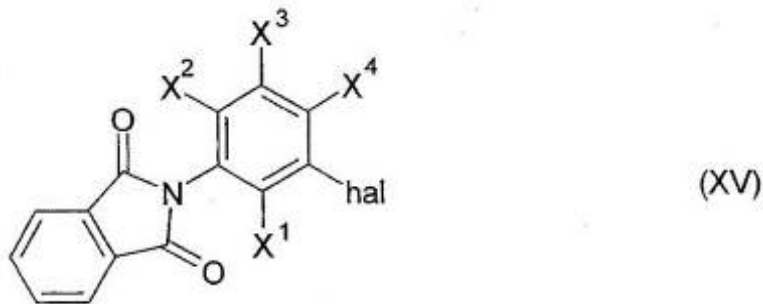
procedimientos ampliamente conocidos en el campo de la química orgánica tales como, por ejemplo, un procedimiento como se describe en Shin Jikken Kagaku Koza 14, III (editor; Maruzen K.K.), páginas 1333 a 1335, y similares.

Procedimiento de producción (h):

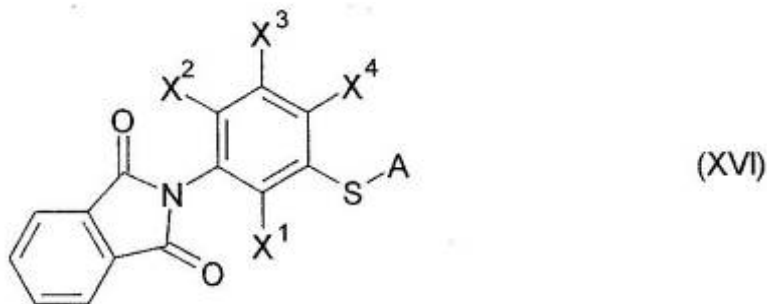
- 5 Un procedimiento de producción de compuestos de fórmula (IV) en el que los compuestos de fórmula (XIV):



en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y hal son como se definen anteriormente, se hacen reaccionar con ftalimida de potasio, para obtener compuestos de fórmula (XV):



- 10 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y hal son como se definen anteriormente, y después se hacen reaccionar los compuestos anteriormente mencionados de fórmula (XV) con los compuestos de fórmula (III) en presencia de una base, para obtener los compuestos de fórmula (XVI)



- 15 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, y después se hacen reaccionar los compuestos de fórmula (XVI) con hidrazina.

Los compuestos de fórmula (XIV) incluyen, por ejemplo, 2,4-difluorobenzonitrilo, 2,4,5-trifluorobenzonitrilo, 1-difluorometil-2,4-difluorobenceno y similares, y todos ellos son compuestos comercialmente disponibles. Estos compuestos pueden sintetizarse a partir del 2,4-difluorobenzaldehído conocido según procedimientos ampliamente conocidos en el campo de la química orgánica tales como un procedimiento descrito en J. Org. Chem., 40, 1975, 574-578 y similares.

- 20 La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XIV) con los compuestos de fórmula (XV) puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y como ejemplos de agente diluyente utilizado en este procedimiento pueden utilizarse éteres, por ejemplo, dioxano, dimetoxietano (DME), tetrahydrofurano (THF), dietilenglicoldimetiléter (DGM) y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilo y similares;
- 25 amidas de ácido, por ejemplo, dimetilformamida (DMF), dimetilacetamida (DMA), *N*-metilpirrolidona, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona, triamida del ácido hexametilfosfórico (HMPA) y similares.

Esta reacción puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente 50 °C y aproximadamente 200 °C, preferiblemente de aproximadamente 80 °C a aproximadamente 120 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

- 5 Al llevar a cabo esta reacción, puede calentarse con agitación la ftalimida de potasio en una cantidad de 1 mol o una cantidad ligeramente en exceso por mol de los compuestos de fórmula (XIV) utilizando DMF como agente diluyente, para obtener los compuestos de fórmula (XV).

10 La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XV) con los compuestos de fórmula (III) puede llevarse a cabo en las mismas condiciones que para el procedimiento de producción (a) anteriormente mencionado.

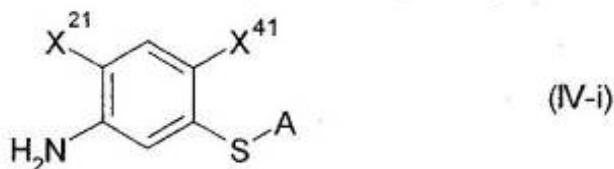
15 La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XVI) con hidrazina puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y pueden utilizarse como ejemplos del agente diluyente utilizado en este procedimiento hidrocarburos alifáticos, cíclicos alifáticos y aromáticos (opcionalmente clorados en algunos casos), por ejemplo, pentano, hexano, ciclohexano, éter de petróleo, benceno, tolueno, xileno, diclorometano, dicloroetano y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilo y similares; alcoholes, por ejemplo, metanol, etanol, isopropanol, butanol, etilenglicol y similares.

20 Esta reacción puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre de aproximadamente -20 °C y aproximadamente 120 °C, preferiblemente de aproximadamente 0 °C a aproximadamente 80 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

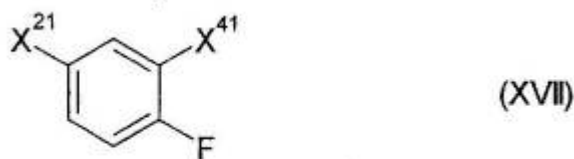
Al llevar a cabo esta reacción, puede calentarse con agitación un hidrato de hidrazina en una cantidad de 1 mol o una cantidad ligeramente en exceso por mol de los compuestos de fórmula (XVI) utilizando etanol como agente diluyente, para obtener los compuestos de fórmula (IV).

25 Procedimiento de producción (i): {en la fórmula (IV), X^1 y X^2 representan hidrógeno, y X^3 y X^4 representan un halógeno distinto de flúor}

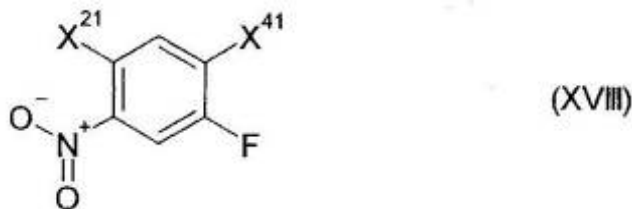
Un procedimiento de producción de compuestos de fórmula (IV-i)



en la que X^{21} , X^{41} y A son como se definen anteriormente, en el que los compuestos de fórmula (XVII)

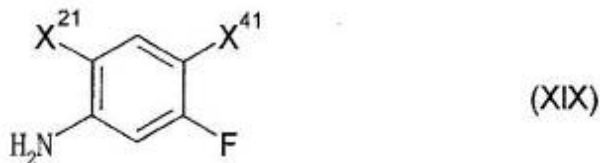


30 en la que X^{21} y X^{41} representan un halógeno distinto de flúor, se nitrán para obtener compuestos de fórmula (XVIII)

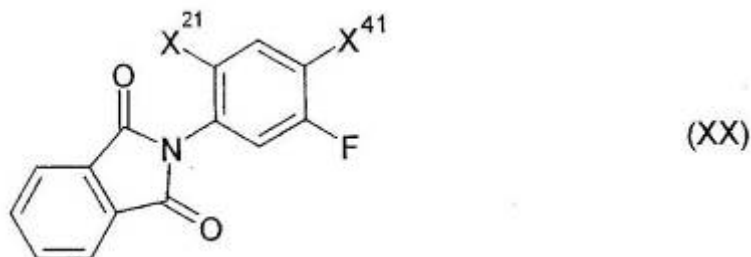


en la que X^{21} y X^{41} son como se definen anteriormente,

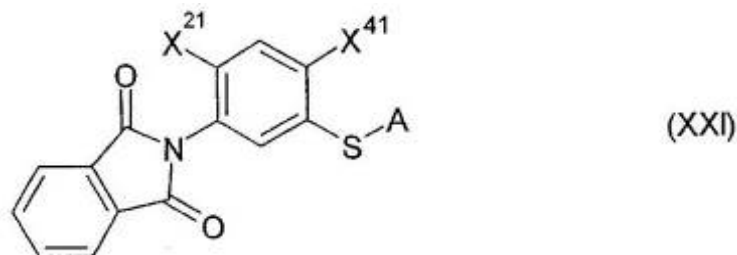
y después se reducen los compuestos anteriores de fórmula (XVIII), para obtener los compuestos de fórmula (XIX)



en la que X^{21} y X^{41} son como se definen anteriormente,
y después se hacen reaccionar los compuestos de fórmula (XIX) con anhídrido ftálico en condiciones ácidas, para
5 obtener compuestos de fórmula (XX)



en la que X^{21} y X^{41} son como se definen anteriormente,
y después se hacen reaccionar los compuestos de fórmula (XX) con los compuestos de fórmula (III), para obtener
los compuestos de fórmula (XXI)



en la que X^{21} , X^{41} y A son como se definen anteriormente,
y después se hacen reaccionar los compuestos de fórmula (XX) con hidrazina.

Los compuestos de fórmula (XVII) incluyen, por ejemplo, 2,4-dicloro-1-fluorobenceno, 4-bromo-2-cloro-1-fluorobenceno, 2,4-dibromo-1-fluorobenceno, 2-cloro-1-fluoro-4-yodobenceno y similares, y todos ellos son
15 compuestos comercialmente disponibles.

La reacción de nitración anteriormente mencionada puede llevarse a cabo, por ejemplo, según un procedimiento descrito en Shin Jikken Kagaku Koza 14, III (editor, Maruzen K.K.), páginas 1266 a 1277.

La reacción de reducción anteriormente mencionada puede llevarse a cabo, por ejemplo, según un procedimiento descrito en Shin Jikken Kagaku Koza 14, III (editor, Maruzen K.K.), páginas 1333 a 1335.

La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XIX) con anhídrido ftálico puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y los ejemplos de agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen ácidos orgánicos, por ejemplo, ácido fórmico, ácido acético, ácido trifluoroacético, ácido propiónico, ácido metanosulfónico, ácido benzenosulfónico, ácido p-toluenosulfónico y similares, o hidrocarburos aromáticos (opcionalmente clorados en algunos casos), por ejemplo, benceno, tolueno, xileno y similares, a los que pueden
25 añadirse un catalizador ácido y utilizarse.

Esta reacción puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente 20 °C y aproximadamente 150 °C, preferiblemente de aproximadamente 60 °C a aproximadamente 120 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

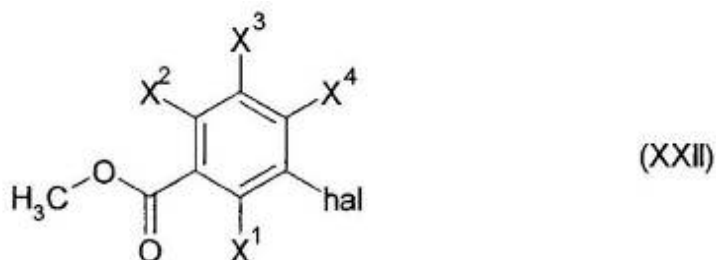
Al llevar a cabo esta reacción, puede calentarse con agitación anhídrido ftálico en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso por mol de los compuestos de fórmula (XIX) utilizando ácido acético como agente diluyente, para obtener los compuestos de fórmula (XX).

La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XX) con los compuestos de fórmula (III) puede llevarse a cabo en las mismas condiciones que para el procedimiento de producción (a) anteriormente mencionado.

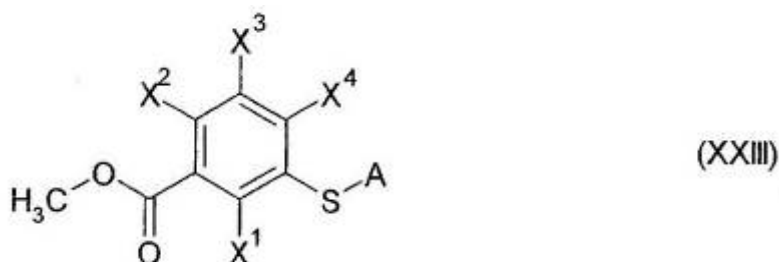
- 5 La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XXI) con hidrazina puede llevarse a cabo en las mismas condiciones que para la reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XVI) con hidrazina en el procedimiento de producción (h) anteriormente mencionado.

Procedimiento de producción (j)

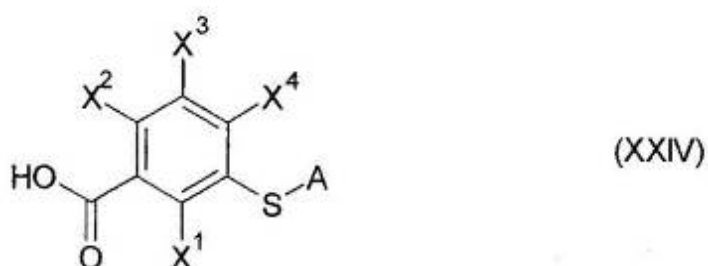
Un procedimiento de producción de compuestos de fórmula (IV) en el que los compuestos de fórmula (XXII):



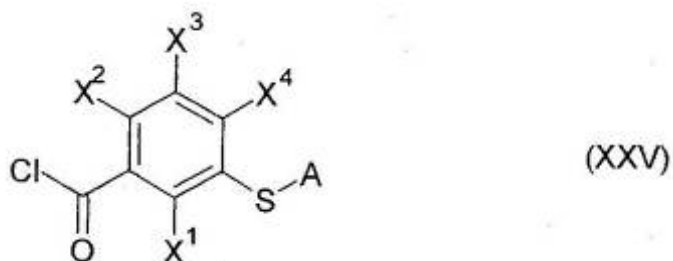
- 10 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y hal son como se definen anteriormente, se hacen reaccionar con los compuestos de fórmula (III) en presencia de una base, para obtener los compuestos de fórmula (XXIII):



- 15 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, y después se hidrolizan los compuestos de fórmula (XXIII), para obtener los compuestos de fórmula (XXIV)



en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente, y después se hacen reaccionar los compuestos de fórmula (XXIV) con un agente halogenante, para obtener compuestos de fórmula (XXV):



en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente,

y después se hacen reaccionar los compuestos de fórmula (XXV) con azida de sodio, para obtener compuestos de acilazida que se someten a una reacción de transposición (transposición de Curtius), y después se someten a una reacción de hidrólisis.

- 5 Los compuestos de fórmula (XXII) pueden obtenerse fácilmente a partir de compuestos de ácido benzoico tales como ácido 3-fluoro-4-trifluorometilbenzoico, ácido 5-fluoro-2-trifluorometilbenzoico y similares según un procedimiento habitual. Todos estos compuestos de ácido benzoico son compuestos bien conocidos.

La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (XXII) con los compuestos de fórmula (III) puede llevarse a cabo en las mismas condiciones que para el procedimiento (a) anteriormente mencionado.

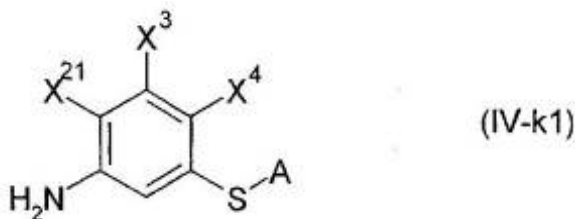
- 10 La reacción de hidrólisis anteriormente mencionada puede llevarse a cabo, por ejemplo, según un procedimiento descrito en Shin Jikken Kagaku Koza 14, II (editor; Maruzen K.K.), páginas 930 a 938.

La reacción de halogenación anteriormente mencionada puede llevarse a cabo, por ejemplo, según un procedimiento descrito en Shin Jikken Kagaku Koza 14, II (editor; Maruzen K.K.), páginas 1106 a 1111.

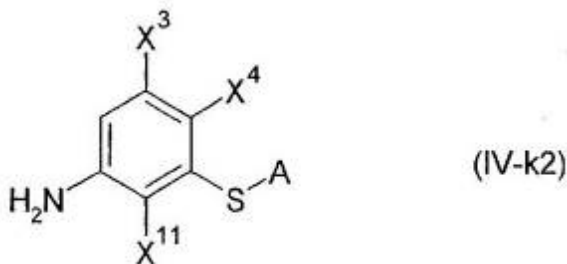
- 15 La reacción de transposición anteriormente mencionada puede llevarse a cabo, por ejemplo, según un procedimiento descrito en Shin Jikken Kagaku Koza 14, III (editor; Maruzen K.K.), páginas 1391 a 1393.

Procedimiento de producción (k): {en la fórmula (IV), X^1 representa hidrógeno y X^2 o X^4 representan un halógeno distinto de flúor o X^1 representa un halógeno distinto de flúor y X^2 o X^4 representan hidrógeno}.

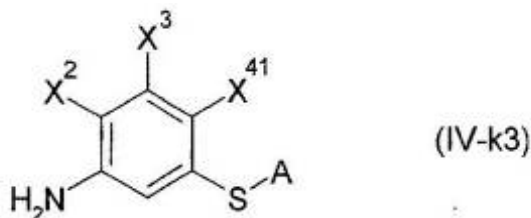
Un procedimiento de producción de compuestos de fórmula (IV-k1)



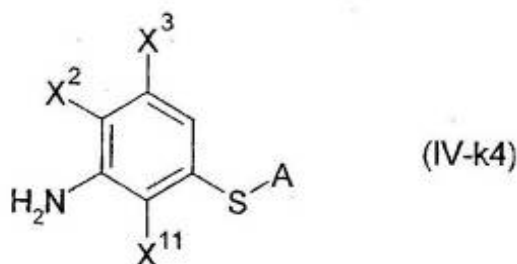
- 20 de fórmula (IV-k2)



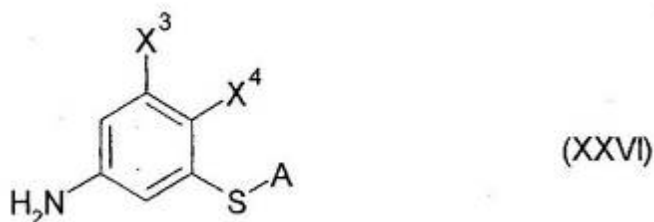
de fórmula (IV-k3)



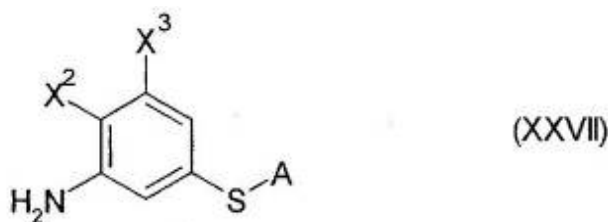
o de fórmula (IV-k4)



(en las que X^2 , X^3 , X^4 , X^{21} , X^{41} y A son como se definen anteriormente y X^{11} representa un halógeno distinto de flúor) en el que los compuestos de fórmula (XXVI):



- 5 (en la que X^3 , X^4 y A son como se definen anteriormente) o los compuestos de fórmula (XXVII):



(en la que X^2 , X^3 y A son como se definen anteriormente) se hacen reaccionar con un agente halogenante.

- 10 Los compuestos de las fórmulas (XXVI) o (XXVII) pueden sintetizarse mediante los procedimientos de producción (g), (h) o (j) anteriormente mencionados, y los ejemplos de los mismos incluyen
- 4-amino-2-(2,2,2-trifluoroetiltio)benzonitrilo,
2-amino-4-(2,2,2-trifluoroetiltio)benzonitrilo,
3-(2,2,2-trifluoroetiltio)-4-trifluorometilanilina,
15 5-(2,2,2-trifluoroetiltio)-2-trifluorometilanilina,
4-difluorometil-3-(2,2,2-trifluoroetiltio)anilina,
2-difluorometil-5-(2,2,2-trifluoroetiltio)anilina,
4-metil-3-(2,2,2-trifluoroetiltio)anilina,
2-metil-5-(2,2,2-trifluoroetiltio)anilina,
20 y similares.

Los ejemplos de agente halogenante utilizado en la reacción anteriormente mencionada incluyen cloro, bromo, yodo, *N*-clorosuccinimida, *N*-bromosuccinimida, *N*-yodosuccinimida y similares.

- La reacción anteriormente mencionada puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y como ejemplos del agente diluyente utilizado en este procedimiento pueden utilizarse hidrocarburos alifáticos halogenados, por ejemplo, diclorometano, dicloroetano, cloroformo, tetracloruro de carbono y similares; amidas de ácido, por ejemplo, dimetilformamida (DMF), dimetilacetamida (DMA), *N*-metilpirrolidona, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona, triamida del ácido hexametilfosfórico (HMPA) y similares.

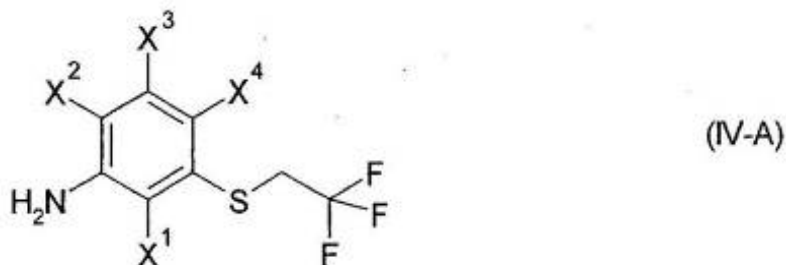
- Esta reacción puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente -40°C y aproximadamente 200°C , preferiblemente de aproximadamente 0°C a aproximadamente 100°C . Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

Al llevar a cabo esta reacción, puede agitarse a temperatura ambiente succinimida *N*-halogenada en una cantidad

de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso por mol de compuestos de fórmula (XXVI) o (XXVII) utilizando DMF como agente diluyente, para obtener compuestos de las fórmulas (IV-k1), (IV-k2), (IV-k3) o (IV-k4).

De los compuestos de fórmula (IV) en el procedimiento de producción (c), particularmente los compuestos de la siguiente fórmula son compuestos novedosos.

5 Fórmula (IV-A)



en la que X^1 , X^2 , X^3 y X^4 son como se definen anteriormente.

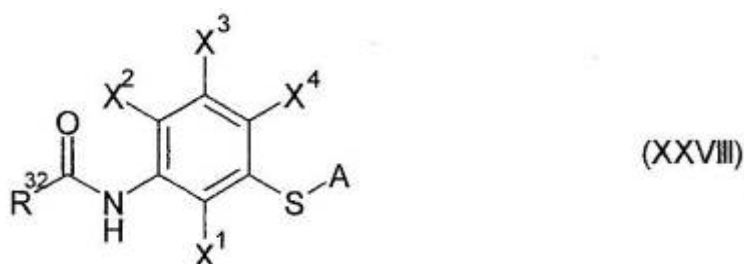
10 Los compuestos de fórmula (V), que son otro material en bruto en el procedimiento de producción (c), son compuestos conocidos y, en general, pueden obtenerse fácilmente mediante la reacción de un cloruro carboxílico con aminas.

La reacción del procedimiento de producción (c) puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y los ejemplos de agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen hidrocarburos aromáticos (opcionalmente clorados en algunos casos), por ejemplo, pentano, tolueno, xileno y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilo y similares.

15 El procedimiento de producción (c) puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente 50 °C y aproximadamente 150 °C, preferiblemente de aproximadamente 80 °C a aproximadamente 120 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

20 Al llevar a cabo el procedimiento de producción (c), pueden calentarse con agitación los compuestos de fórmula (V) en una cantidad de 1 mol o una cantidad ligeramente en exceso en una cantidad en exceso de oxiclورو de fósforo por mol de compuestos de fórmula (IV), para obtener los compuestos diana.

En el procedimiento de producción (d), se obtienen los compuestos de fórmula (VI) haciendo reaccionar compuestos de fórmula (XXVIII):



25 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 , R^{32} y A son como se definen anteriormente, con trifenilfosfina y tetracloruro de carbono.

Los compuestos de fórmula (XXVIII) se obtienen haciendo reaccionar los compuestos de fórmula (IV) con compuestos de fórmula (XXIX)



30 en la que R^{32} es como se define anteriormente, en presencia de una base.

Los ejemplos específicos de compuestos de fórmula (XXIX) incluyen, por ejemplo, anhídrido trifluoroacético,

anhídrido pentafluoropropiónico, anhídrido heptafluorobutanoico y similares.

La reacción anteriormente mencionada de los compuestos de fórmula (IV) con los compuestos de fórmula (XXIX) puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y los ejemplos de agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen hidrocarburos alifáticos, alifáticos cíclicos y aromáticos (opcionalmente clorados en algunos casos), por ejemplo, pentano, hexano, ciclohexano, éter de petróleo, benceno, tolueno, xileno, diclorometano, dicloroetano y similares; éteres, por ejemplo, etiléter, metiletiléter, isopropiléter, butiléter, dioxano, dimetoxietano (DME), tetrahidrofurano (THF), dietilenglicoldimetiléter (DGM) y similares; cetonas, por ejemplo, acetona, metiletilcetona (MEK), metilisopropilcetona, metilisobutilcetona (MIBK) y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilos y similares; ésteres, por ejemplo, acetato de etilo, acetato de amilo y similares; amidas de ácido, por ejemplo, dimetilformamida (DMF), dimetilacetamida (DMA), *N*-metilpirrolidona, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona, triamida del ácido hexametilfosfórico (HMPA) y similares.

Esta reacción puede llevarse a cabo en presencia de una base, y como ejemplos de base, las bases inorgánicas incluyen hidróxidos, carbonatos, bicarbonatos y similares de metales alcalinos, por ejemplo, hidrogenocarbonato de sodio, hidrogenocarbonato de potasio, carbonato de sodio, carbonato de potasio, hidróxido de litio, hidróxido de sodio, hidróxido de potasio y similares; y las bases orgánicas incluyen alcoholatos, aminas terciarias, dialquilaminoanilinas y piridinas, por ejemplo, trietilamina, 1,1,4,4-tetrametiletilendiamina (TMEDA), *N,N*-dimetilaniлина, *N,N*-dietilaniлина, piridina, 4-dimetilaminopiridina (DMAP), 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octano (DABCO) y 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-eno (DBU) y similares.

Esta reacción puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente -40 °C y aproximadamente 100 °C, preferiblemente de aproximadamente 0 °C a aproximadamente 40 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

Al llevar a cabo la reacción, se utilizan los compuestos de fórmula (XXIX) en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso y trietilamina como base en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso por mol de los compuestos de fórmula (IV) y se utiliza diclorometano como agente diluyente y se agitan a temperatura ambiente, pudiendo obtenerse de este modo los compuestos de fórmula (XXVIII).

La reacción de los compuestos de fórmula (XXVIII) con trifenilfosfina y tetracloruro de carbono puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y los ejemplos del agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen hidrocarburos alifáticos halogenados, por ejemplo, diclorometano, dicloroetano, cloroformo y similares.

Esta reacción puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente 0 °C y aproximadamente 100 °C, preferiblemente de aproximadamente 20 °C a aproximadamente 60 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

Al llevar a cabo la reacción, puede calentarse con agitación trifenilfosfina en cantidad ligeramente en exceso y tetracloruro de carbono en cantidad ligeramente en exceso por mol de compuestos de fórmula (XXVIII) utilizando diclorometano como agente diluyente, para obtener los compuestos de fórmula (VI).

Los compuestos de fórmula (VII), que son otro material en bruto en el procedimiento de producción (d), son compuestos bien conocidos, y los ejemplos de los mismos incluyen amoniaco, metilamina, dimetilamina, etilamina, 2,2,2-trifluoroetilamina, *n*-propilamina, isopropilamina, metiletilamina, dietilamina, ciclopropilamina, alilamina, propargilamina, pirrolidina, piperidina, morfolina, ciclohexiletilamina, anilina, 4-trifluoroanilina, bencilamina, 4-trifluorobencilamina, *O*-metilhidroxilamina, *N,O*-dimetilhidroxilamina, 2-metoxietilamina, *N,N*-dimetiletilendiamina y similares.

La reacción en el procedimiento de producción (d) puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y los ejemplos del agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen hidrocarburos alifáticos, alifáticos cíclicos y aromáticos (opcionalmente clorados en algunos casos), por ejemplo, pentano, hexano, ciclohexano, éter de petróleo, benceno, tolueno, xileno, diclorometano, dicloroetano y similares; éteres, por ejemplo, etiléter, metiletiléter, isopropiléter, butiléter, dioxano, dimetoxietano (DME), tetrahidrofurano (THF), dietilenglicoldimetiléter (DGM) y similares; cetonas, por ejemplo, acetona, metiletilcetona (MEK), metilisopropilcetona, metilisobutilcetona (MIBK) y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilos y similares; ésteres, por ejemplo, acetato de etilo, acetato de amilo y similares; amidas de ácido, por ejemplo, dimetilformamida (DMF), dimetilacetamida (DMA), *N*-metilpirrolidona, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona, triamida del ácido hexametilfosfórico (HMPA) y similares.

La reacción en el procedimiento de producción (d) puede llevarse a cabo en presencia de una base, y como ejemplos de base, las bases inorgánicas incluyen hidruros, hidróxidos, carbonatos, bicarbonatos y similares de metales alcalinos, por ejemplo, hidruro de sodio, hidruro de litio, hidrogenocarbonato de sodio, hidrogenocarbonato de potasio, carbonato de sodio, carbonato de potasio, hidróxido de litio, hidróxido de sodio, hidróxido de potasio y similares; y las bases orgánicas incluyen alcoholatos, aminas terciarias, dialquilaminoanilinas y piridinas, por ejemplo, trietilamina, 1,1,4,4-tetrametiletilendiamina (TMEDA), *N,N*-dimetilaniлина, *N,N*-dietilaniлина, piridina, 4-dimetilaminopiridina (DMAP), 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octano (DABCO) y 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-eno (DBU) y

similares, y utilizando los compuestos de fórmula (VII) en una cantidad de 2 equivalentes o más, puede utilizarse una porción equivalente como base.

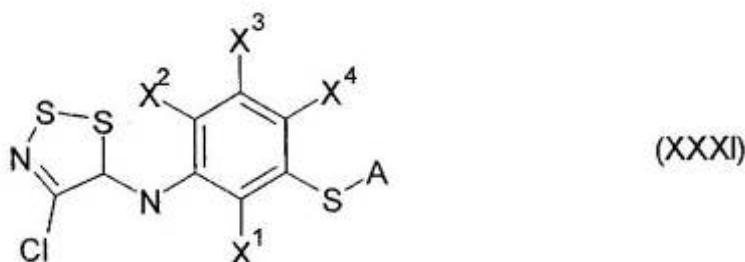
El procedimiento de producción (d) puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente -40 °C y aproximadamente 100 °C, preferiblemente de aproximadamente 0 °C a aproximadamente 40 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, también puede operarse a presión elevada o presión reducida.

Al llevar a cabo el procedimiento de producción (d), los compuestos de fórmula (VII) pueden agitarse en una cantidad en exceso de 2 mol o más por mol de los compuestos de fórmula (VI) a temperatura ambiente utilizando acetonitrilo como agente diluyente, para obtener los compuestos diana.

- 10 Los compuestos de fórmula (VIII) en el procedimiento de producción (e) se obtienen haciendo reaccionar compuestos de fórmula (IV) con compuestos de fórmula (XXX):



en presencia de una base, para obtener los compuestos de fórmula (XXXI):



- 15 (en la que X¹, X², X³, X⁴ y A son como se definen anteriormente), después descomponiendo térmicamente los compuestos anteriormente mencionados de fórmula (XXXI). Los compuestos anteriormente mencionados de fórmula (XXX) se obtienen mediante un procedimiento descrito en Chem. Ber., 118, 1985, 1632-1643.

- La reacción anteriormente mencionada de compuestos de fórmula (IV) con compuestos de fórmula (XXX) puede llevarse a cabo en un agente diluyente adecuado, y los ejemplos de agente diluyente utilizado en este procedimiento incluyen hidrocarburos alifáticos, alifáticos cíclicos y aromáticos (opcionalmente clorados en algunos casos), por ejemplo, pentano, hexano, ciclohexano, éter de petróleo, benceno, tolueno, xileno, diclorometano, dicloroetano y similares; éteres, por ejemplo, etiléter, metiletiléter, isopropiléter, butiléter, dioxano, dimetoxietano (DME), tetrahidrofurano (THF), dietilenglicoldimetiléter (DGM) y similares; cetonas, por ejemplo, acetona, metiletilcetona (MEK), metilisopropilcetona, metilisobutilcetona (MIBK) y similares; nitrilos, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, acrilonitrilos y similares; ésteres, por ejemplo, acetato de etilo, acetato de amilo y similares.

Esta reacción puede llevarse a cabo en presencia de una base, y las bases orgánicas como ejemplos de base incluyen piridinas, por ejemplo, piridina, 4-dimetilaminopiridina (DMAP) y similares.

- Esta reacción puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente -40 °C y aproximadamente 100 °C, preferiblemente de aproximadamente 0 °C a aproximadamente 40 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

- Al llevar a cabo la reacción, los compuestos de fórmula (XXX) pueden agitarse en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso y piridina como base en una cantidad de 2 mol o cantidad ligeramente en exceso por mol de compuestos de fórmula (IV) a temperatura ambiente, utilizando diclorometano como agente diluyente, para obtener compuestos de fórmula (XXXI).

La reacción de descomposición térmica puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente 150 °C y aproximadamente 300 °C, preferiblemente de aproximadamente 180 °C a aproximadamente 220 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

Al llevar a cabo la reacción, los compuestos de fórmula (XXXI) pueden calentarse directamente con agitación sin utilizar un agente diluyente, para obtener los compuestos de fórmula (VIII).

La reacción en el procedimiento de producción (e) puede llevarse a cabo en las mismas condiciones que para el procedimiento de producción (c) anteriormente mencionado.

- 5 Los compuestos de fórmula (If), que son un material en bruto en el procedimiento de producción (f), se incluyen en los compuestos (I) de la presente invención que pueden producirse mediante los procedimientos de producción (a), (c), (d) o (e).

Los compuestos de fórmula (IX), que son otro material en bruto, son compuestos bien conocidos y los ejemplos de los mismos incluyen etilisocianato, fenilisocianato y similares.

- 10 La reacción del procedimiento de producción (f) puede llevarse a cabo en un agente de dilución adecuado, y los ejemplos de agente de dilución utilizado en este procedimiento incluyen éteres, por ejemplo, tetrahidrofurano (THF) y similares; amidas de ácido, por ejemplo, dimetilformamida (DMF), dimetilacetamida (DMA), *N*-metilpirrolidona, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona, triamida del ácido hexametilfosfórico (HMPA) y similares.

- 15 El procedimiento de producción (f) puede llevarse a cabo en presencia de una base, y pueden utilizarse bases inorgánicas como ejemplos de base, hidruros y similares de metales alcalinos, por ejemplo, hidruro de sodio, hidróxido de litio y similares.

- 20 El procedimiento de producción (f) puede llevarse a cabo en un intervalo de temperaturas sustancialmente amplio. En general, puede llevarse a cabo a entre aproximadamente -20 °C y aproximadamente 200 °C, preferiblemente de aproximadamente 0 °C a aproximadamente 100 °C. Es deseable que la reacción se lleve a cabo a presión normal, sin embargo, puede operarse también a presión elevada o presión reducida.

Al llevar a cabo el procedimiento de producción (f), los compuestos de fórmula (IX) pueden agitarse en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso e hidruro de sodio en una cantidad de 1 mol o cantidad ligeramente en exceso por mol de los compuestos de fórmula (If) a temperatura ambiente, utilizando DMF como agente diluyente, para obtener los compuestos diana.

- 25 Los compuestos de fórmula (I) según la presente invención muestran una fuerte acción insecticida. Por lo tanto, los compuestos de fórmula (I) pueden utilizarse como insecticidas. En caso apropiado, los compuestos de fórmula (I) pueden estar presentes en diferentes formas polimórficas o como una mezcla de diferentes formas polimórficas. Se proporcionan por la invención tanto los polimorfos puros como las mezclas polimórficas y pueden utilizarse según la invención.

- 30 Los principios activos según la invención, en combinación con buena fitotolerancia, favorable toxicidad para animales de sangre caliente y ser bien tolerados por el ambiente, son adecuados para la protección de plantas y órganos de planta, para aumentar los rendimientos de recolección, mejorar la calidad del producto recolectado y para controlar plagas animales, particularmente insectos, arácnidos, helmintos, nematodos y moluscos que se encuentran en agricultura, horticultura, cría de animales, en bosques, en jardines e instalaciones de ocio, en la protección de productos almacenados y de materiales, y en el sector de la higiene. Pueden emplearse preferiblemente como agentes fitoprotectores. Son activos contra especies normalmente sensibles y resistentes y contra todos o algunos estados de desarrollo. Las plagas anteriormente mencionadas incluyen: Del orden de los *Anoplura* (*Phthiraptera*), por ejemplo, *Damalinia* spp., *Haematopinus* spp., *Linognathus* spp., *Pediculus* spp., *Trichodectes* spp.

- 40 De la clase de los *Arachnida*, por ejemplo, *Acarus siro*, *Aceria sheldoni*, *Aculops* spp., *Aculus* spp., *Amblyomma* spp., *Argas* spp., *Boophilus* spp., *Brevipalpus* spp., *Bryobia praetiosa*, *Chorioptes* spp., *Dermanyssus gallinae*, *Eotetranychus* spp., *Epitrimerus pyri*, *Eutetranychus* spp., *Eriophyes* spp., *Hemitarsonemus* spp., *Hyalomma* spp., *Ixodes* spp., *Latrodectus mactans*, *Metatetranychus* spp., *Oligonychus* spp., *Ornithodoros* spp., *Panonychus* spp., *Phyllocoptruta oleivora*, *Polyphagotarsonemus latus*, *Psoroptes* spp., *Rhipicephalus* spp., *Rhizoglyphus* spp., *Sarcoptes* spp., *Scorpio maurus*, *Stenotarsonemus* spp., *Tarsonemus* spp., *Tetranychus* spp., *Vasates lycopersici*.

- 45 De la clase de los *Bivalva*, por ejemplo, *Dreissena* spp. Del orden de los *Chilopoda*, por ejemplo, *Geophilus* spp., *Scutigera* spp.

- 50 Del orden de los *Coleoptera*, por ejemplo, *Acanthoscelides obtectus*, *Adoretus* spp., *Agelastica alni*, *Agriotes* spp., *Amphimallon solstitialis*, *Anobium punctatum*, *Anoplophora* spp., *Anthonomus* spp., *Anthrenus* spp., *Apogonia* spp., *Atomaria* spp., *Attagenus* spp., *Bruchidius obtectus*, *Bruchus* spp., *Ceuthorrhynchus* spp., *Cleonus mendicus*, *Conoderus* spp., *Cosmopolites* spp., *Costelytra zealandica*, *Curculio* spp., *Cryptorhynchus lapathi*, *Dermestes* spp., *Diabrotica* spp., *Epilachna* spp., *Faustinus cubae*, *Gibbium psylloides*, *Heteronychus arator*, *Hylamorphia elegans*, *Hylotrupes bajulus*, *Hypera postica*, *Hypothenemus* spp., *Lachnosterna consanguinea*, *Leptinotarsa decemlineata*, *Lissorhoptrus oryzophilus*, *Lixus* spp., *Lyctus* spp., *Meligethes aeneus*, *Melolontha melolontha*, *Migdolus* spp., *Monochamus* spp., *Naupactus xanthographus*, *Niptus hololeucus*, *Oryctes rhinoceros*, *Oryzaephilus surinamensis*, *Otiorrhynchus sulcatus*, *Oxycetonia jucunda*, *Phaedon cochleariae*, *Phyllophaga* spp., *Popillia japonica*,

Premnotrypes spp., *Psylliodes chrysocephala*, *Ptinus* spp., *Rhizobius ventralis*, *Rhizopertha dominica*, *Sitophilus* spp., *Sphenophorus* spp., *Sternechus* spp., *Symphyletes* spp., *Tenebrio molitor*, *Tribolium* spp., *Trogoderma* spp., *Tychius* spp., *Xylotrechus* spp., *Zabrus* spp.

Del orden de los *Collembola*, por ejemplo, *Onychiurus armatus*.

- 5 Del orden de los *Dermaptera*, por ejemplo, *Forficula auricularia*.

Del orden de los *Diplopoda*, por ejemplo, *Blaniulus guttulatus*.

- Del orden de los *Diptera*, por ejemplo, *Aedes* spp., *Anopheles* spp., *Bibio hortulanus*, *Calliphora erythrocephala*, *Ceratitis capitata*, *Chrysomya* spp., *Cochliomyia* spp., *Cordylobia anthropophaga*, *Culex* spp., *Cuterebra* spp., *Dacus oleae*, *Dermatobia hominis*, *Drosophila* spp., *Fannia* spp., *Gastrophilus* spp., *Hylemyia* spp., *Hyppobosca* spp., *Hypoderma* spp., *Liriomyza* spp., *Lucilia* spp., *Musca* spp., *Nezara* spp., *Oestrus* spp., *Oscinella frit*, *Pegomyia hyoscyami*, *Phorbia* spp., *Stomoxys* spp., *Tabanus* spp., *Tannia* spp., *Tipula paludosa*, *Wohlfahrtia* spp.

- 10

De la clase de los *Gastropoda*, por ejemplo, *Arion* spp., *Biomphalaria* spp., *Bulinus* spp., *Deroceas* spp., *Galba* spp., *Lymnaea* spp., *Oncomelania* spp., *Succinea* spp.

- 15 De la clase de los helmintos, por ejemplo, *Ancylostoma duodenale*, *Ancylostoma ceylanicum*, *Acylostoma braziliensis*, *Ancylostoma* spp., *Ascaris lubricoides*, *Ascaris* spp., *Brugia malayi*, *Brugia timori*, *Bunostomum* spp., *Chabertia* spp., *Clonorchis* spp., *Cooperia* spp., *Dicrocoelium* spp., *Dictyocaulus filaria*, *Diphylobothrium latum*, *Dracunculus medinensis*, *Echinococcus granulosus*, *Echinococcus multilocularis*, *Enterobius vermicularis*, *Faciola* spp., *Haemonchus* spp., *Heterakis* spp., *Hymenolepis nana*, *Hyostromgulus* spp., *Loa Loa*, *Nematodirus* spp., *Oesophagostomum* spp., *Opisthorchis* spp., *Onchocerca volvulus*, *Ostertagia* spp., *Paragonimus* spp., *Schistosomen* spp., *Strongyloides fuelleborni*, *Strongyloides stercoralis*, *Strongyloides* spp., *Taenia saginata*, *Taenia solium*, *Trichinella spiralis*, *Trichinella nativa*, *Trichinella britovi*, *Trichinella nelsoni*, *Trichinella pseudopsiralis*, *Trichostrongylus* spp., *Trichuris trichuria*, *Wuchereria bancrofti*.

- 20

Además, es posible controlar protozoos tales como *Eimeria*. Del orden de los *Heteroptera*, por ejemplo, *Anasa tristis*, *Antestiopsis* spp., *Blissus* spp., *Calocoris* spp., *Campylomma livida*, *Cavelerius* spp., *Cimex* spp., *Creontiades dilutus*, *Dasyneus piperis*, *Dichelops furcatus*, *Diconocoris hewetti*, *Dysdercus* spp., *Euschistus* spp., *Eurygaster* spp., *Heliopeltis* spp., *Horcias nobilillus*, *Leptocoris* spp., *Leptoglossus phyllopus*, *Lygus* spp., *Macropes excavatus*, *Miridae*, *Nezara* spp., *Oebalus* spp., *Pentomidae*, *Piesma quadrata*, *Piezodorus* spp., *Psallus seriatus*, *Pseudacysta persea*, *Rhodnius* spp., *Sahlbergella singularis*, *Scotinophora* spp., *Stephanitis nashi*, *Tibraca* spp., *Triatoma* spp.

- 25

Del orden de los *Homoptera*, por ejemplo, *Acyrtosiphon* spp., *Aeneolamia* spp., *Agonoscena* spp., *Aleurodes* spp., *Aleurolobus barodensis*, *Aleurothrixus* spp., *Amrasca* spp., *Anuraphis cardui*, *Aonidiella* spp., *Aphanostigma piri*, *Aphis* spp., *Arboridia apicalis*, *Aspidiella* spp., *Aspidiotus* spp., *Atanus* spp., *Aulacorthum solani*, *Bemisia* spp., *Brachycaudus helichrysi*, *Brachycolus* spp., *Brevicoryne brassicae*, *Calligypona marginata*, *Carneiocephala fulgida*, *Ceratovacuna lanigera*, *Cercopidae*, *Cercoplastes* spp., *Chaetosiphon fragaefolii*, *Chionaspis tegalensis*, *Chlorita onukii*, *Chromaphis juglandicola*, *Chrysomphalus ficus*, *Cicadulina mbila*, *Coccomytilus halli*, *Coccus* spp., *Cryptomyzus ribis*, *Dalbulus* spp., *Dialeurodes* spp., *Diaphorina* spp., *Diaspis* spp., *Doralis* spp., *Drosicha* spp., *Dysaphis* spp., *Dysmicoccus* spp., *Empoasca* spp., *Eriosoma* spp., *Erythroneura* spp., *Euscelis bilobatus*, *Geococcus coffeae*, *Homalodisca coagulata*, *Hyalopterus arundinis*, *Icerya* spp., *Idiocerus* spp., *Idioscopus* spp., *Laodelphax striatellus*, *Lecanium* spp., *Lepidosaphes* spp., *Lipaphis erysimi*, *Macrosiphum* spp., *Mahanarva fimbriolata*, *Melanaphis sacchari*, *Metcalfiella* spp., *Metopolophium dirhodum*, *Monellia costalis*, *Monelliopsis pecanis*, *Myzus* spp., *Nasonovia ribisnigri*, *Nilaparvata lugens*, *Oncometopia* spp., *Orthezia praelonga*, *Parabemisia myricae*, *Paratioria* spp., *Parlatoria* spp., *Pemphigus* spp., *Peregrinus maidis*, *Phenacoccus* spp., *Phloeomyzus passerinii*, *Phorodon humuli*, *Phylloxera* spp., *Pinnaspis aspidistrae*, *Planococcus* spp., *Protopulvinaria pyramiformis*, *Pseudaulacaspis pentagona*, *Pseudococcus* spp., *Psylla* spp., *Pteromalus* spp., *Pyrilla* spp., *Quadrastidiotus* spp., *Quesada gigas*, *Rastrococcus* spp., *Rhopalosiphum* spp., *Saissetia* spp., *Scaphoides titanus*, *Schizaphis graminum*, *Selenaspis articulatus*, *Sogata* spp., *Sogatella furcifera*, *Sogatodes* spp., *Stictocephala festina*, *Tenalaphara malayensis*, *Tinocallis caryaefoliae*, *Tomaspsis* spp., *Toxoptera* spp., *Trialeurodes vaporariorum*, *Trioza* spp., *Typhlocyba* spp., *Unaspis* spp., *Viteus vitifolii*.

- 30
- 35
- 40
- 45

Del orden de los *Hymenoptera*, por ejemplo, *Diprion* spp., *Hoplocampa* spp., *Lasius* spp., *Monomorium pharaonis*, *Vespa* spp. Del orden de los *Isopoda*, por ejemplo, *Armadillidium vulgare*, *Oniscus asellus*, *Porcellio scaber*.

- 50 Del orden de los *Isoptera*, por ejemplo, *Reticulitermes* spp., *Odontotermes* spp.

Del orden de los *Lepidoptera*, por ejemplo, *Acronicta major*, *Aedia leucomelas*, *Agrotis* spp., *Alabama argillacea*, *Anticarsia* spp., *Barathra brassicae*, *Bucculatrix thurberiella*, *Bupalus piniarius*, *Cacoecia podana*, *Capua reticulana*, *Carpocapsa pomonella*, *Cheimatobia brumata*, *Chilo* spp., *Choristoneura fumiferana*, *Clysia ambiguella*, *Cnaphalocerus* spp., *Earias insulana*, *Ephestia kuehniella*, *Euproctis chrysorrhoea*, *Euxoa* spp., *Feltia* spp., *Galleria mellonella*, *Helicoverpa* spp., *Heliothis* spp., *Hofmannophila pseudospretella*, *Homona magnanima*, *Hyponomeuta padella*, *Laphygma* spp., *Lithocolletis blancardella*, *Lithophane antennata*, *Loxagrotis albicosta*, *Lymantria* spp., *Malacosoma neustria*, *Mamestra brassicae*, *Mocis repanda*, *Mythimna separata*, *Oria* spp., *Oulema oryzae*, *Panolis*

- 55

flammea, *Pectinophora gossypiella*, *Phyllocnistis citrella*, *Pieris* spp., *Plutella xylostella*, *Prodenia* spp., *Pseudaletia* spp., *Pseudoplusia includens*, *Pyrausta nubilalis*, *Spodoptera* spp., *Thermesia gemmatilis*, *Tinea pellionella*, *Tineola bisselliella*, *Tortrix viridana*, *Trichoplusia* spp. Del orden de los Orthoptera, por ejemplo, *Acheta domesticus*, *Blatta orientalis*, *Blattella germanica*, *Gryllotalpa* spp., *Leucophaea maderae*, *Locusta* spp., *Melanoplus* spp., *Periplaneta americana*, *Schistocerca gregaria*.

Del orden de los Siphonaptera, por ejemplo, *Ceratophyllus* spp., *Xenopsylla cheopis*.

Del orden de los Symphyla, por ejemplo, *Scutigera* spp.

Del orden de los Thysanoptera, por ejemplo, *Baliothrips biformis*, *Enneothrips flavens*, *Frankliniella* spp., *Heliethrips* spp., *Hercinothrips femoralis*, *Kakothrips* spp., *Rhipiphorothrips cruentatus*, *Scirtothrips* spp., *Taeniothrips cardamoni*, *Thrips* spp.

Del orden de los Thysanura, por ejemplo, *Lepisma saccharina*.

Los nematodos parásitos de plantas incluyen, por ejemplo, *Anguina* spp., *Aphelenchoides* spp., *Belonoaimus* spp., *Bursaphelenchus* spp., *Ditylenchus dipsaci*, *Globodera* spp., *Heliocotylenchus* spp., *Heterodera* spp., *Longidorus* spp., *Meloidogyne* spp., *Pratylenchus* spp., *Radopholus similis*, *Rotylenchus* spp., *Trichodorus* spp., *Tylenchorhynchus* spp., *Tylenchulus* spp., *Tylenchulus semipenetrans*, *Xiphinema* spp.

Siempre que sea apropiado, los principios activos según la invención pueden utilizarse a ciertas concentraciones o tasas de aplicación también como herbicidas, protectores, reguladores del crecimiento o agentes para mejorar las propiedades de las plantas, o como microbicidas, por ejemplo, como fungicidas, antimicóticos, bactericidas, viricidas (incluyendo agentes contra viroides) o como agentes contra MLO (organismos similares a *Mycoplasma*) y RLO (organismo similar a *Rickettsia*). Siempre que sea apropiado, pueden emplearse también como intermedios o precursores para la síntesis de otros principios activos.

Los principios activos pueden convertirse en las formulaciones habituales, como disoluciones, emulsiones, polvos humectables, suspensiones basadas en agua y aceite, polvos, productos para espolvorear, pastas, polvos solubles, gránulos solubles, gránulos para dispersar, concentrados de suspensión-emulsión, materiales naturales impregnados con principio activo, materiales sintéticos impregnados con principio activo, fertilizantes y microencapsulaciones en sustancias poliméricas.

Estas formulaciones se preparan de modo conocido, por ejemplo, mediante mezclado de los principios activos con agentes extensores, es decir, disolventes líquidos y/o vehículos sólidos, opcionalmente con el uso de agentes tensioactivos, es decir, agentes emulsionantes y/o dispersantes y/o agentes espumantes. Las formulaciones se preparan en plantas adecuadas o además antes o durante la aplicación.

Son adecuadas para uso como adyuvantes sustancias que sean adecuadas para conferir propiedades particulares a los principios activos en sí mismos y/o a preparaciones derivadas de los mismos (por ejemplo líquidos de pulverización, desinfectantes de semilla), tales como técnicas y/o también propiedades biológicas particulares. Son coadyuvantes típicos adecuados: extensores, disolventes y vehículos.

Son extensores adecuados, por ejemplo, agua, líquidos químico-orgánicos polares y no polares, por ejemplo, de las clases de hidrocarburos aromáticos y no aromáticos (tales como parafinas, alquilbencenos, alquilnaftalenos, clorobencenos), los alcoholes y polioles (que, siempre que sea apropiado, pueden estar también sustituidos, eterificados y/o esterificados), las cetonas (como acetona, ciclohexanona), ésteres (incluyendo grasas y aceites) y (poli)éteres, las aminas amidas, lactamas (como *N*-alquilpirrolidonas) y lactonas no sustituidas y sustituidas, las sulfonas y los sulfóxidos (como dimetilsulfóxido).

Si el agente extensor utilizado es agua, también es posible emplear, por ejemplo, disolventes orgánicos como disolventes adyuvantes. Esencialmente, son disolventes líquidos adecuados: compuestos aromáticos tales como xileno, tolueno o alquilnaftalenos, compuestos aromáticos clorados e hidrocarburos alifáticos clorados tales como clorobencenos, cloroetilenos o cloruro de metileno, hidrocarburos alifáticos tales como ciclohexano o parafinas, por ejemplo, fracciones de petróleo, aceites minerales y vegetales, alcoholes tales como butanol o glicol, y también sus éteres y ésteres, cetonas tales como acetona, metiletilcetona, metilisobutilcetona o ciclohexanona, disolventes polares fuertes tales como dimetilsulfóxido, y también agua.

Son vehículos sólidos adecuados:

por ejemplo, sales de amonio y minerales naturales molidos tales como caolines, arcillas, talco, creta, cuarzo, atapulgita, montmorillonita o tierra de diatomeas y minerales sintéticos molidos tales como sílice finamente dividido, alúmina y silicatos; son vehículos sólidos adecuados para gránulos: por ejemplo, rocas naturales trituradas y fraccionadas tales como calcita, mármol, piedra pómez, sepiolita y dolomita, y también gránulos sintéticos de polvos inorgánicos y orgánicos, y gránulos de material orgánico tales como papel, serrín, cáscaras de coco, mazorcas de maíz y tallos de tabaco; son agentes emulsionantes y/o espumantes adecuados: por ejemplo, agentes emulsionantes no iónicos y aniónicos tales como ésteres de ácidos grasos de polioxietileno,

- éteres de alcohol graso de polioxietileno, por ejemplo, alquilarilpoliglicoléteres, alquilsulfonatos, alquilsulfatos, arilsulfonatos y también hidrolizados de proteína; son agentes dispersantes adecuados sustancias no iónicas y/o iónicas, por ejemplo, de las clases de aductos de alcohol-POE y/o alcohol-POP-éteres, ácido y/o POP-POE-ésteres, alquilarilo y/o POP-POE-éteres, grasa y/o POP-POE, derivados de POE-poliol y/o POP-poliol, aductos de POE-sorbitán y/o POP-sorbitán o -azúcar, alquil- o arilsulfatos, alquil- o arilsulfonatos y alquil- o arilfosfatos, o los correspondientes aductos de PO-éter. Además, los oligómeros o polímeros adecuados, por ejemplo, aquellos derivados de monómeros vinílicos, de ácido acrílico, de EO y/o de PO solos o en combinación con, por ejemplo, (poli)alcoholes o (poli)aminas. También es posible emplear lignina y sus derivados de ácido sulfónico, celulosas no modificadas y modificadas, ácidos sulfónicos aromáticos y/o alifáticos y sus aductos con formaldehído.
- 10 Pueden usarse en las formulaciones adhesivos tales como carboximetilcelulosa y polímeros naturales y sintéticos en forma de polvos, gránulos o látex, tales como goma arábica, alcohol (polivinílico) y poli(acetato de vinilo), así como fosfolípidos naturales como cefalinas y lecitinas y fosfolípidos sintéticos. Es posible utilizar colorantes tales como pigmentos inorgánicos, por ejemplo, óxido de hierro, óxido de titanio, azul de Prusia y tintes orgánicos tales como tintes de alizarina, tintes azoicos y tintes de ftalocianina metálica, y oligonutrientes tales como sales de hierro,
- 15 manganeso, boro, cobre, cobalto, molibdeno y cinc.
- Son otros aditivos posibles aromatizantes, aceites minerales o vegetales opcionalmente modificados, ceras y nutrientes (incluyendo oligonutrientes) tales como sales de hierro, manganeso, boro, cobre, cobalto, molibdeno y cinc.
- 20 Pueden estar presentes también estabilizadores tales como estabilizadores de baja temperatura, conservantes, antioxidantes, fotoestabilizantes u otros agentes que mejoren la estabilidad química y/o física.
- Las formulaciones comprenden en general entre el 0,01 y el 98% en peso de principio activo, preferiblemente entre el 0,5 y el 90%. El principio activo según la invención puede utilizarse en sus formulaciones comercialmente disponibles y en las formas de uso preparadas a partir de estas formulaciones, mezclado con otros principios activos tales como insecticidas, cebos, agentes esterilizadores, bactericidas, acaricidas, nematocidas, fungicidas, sustancias reguladoras del crecimiento, herbicidas, protectores, fertilizantes o semioquímicos.
- 25 Son componentes de mezcla particularmente favorables, por ejemplo, los siguientes compuestos:
- Fungicidas:
- Inhibidores de la síntesis de ácidos nucleicos, benalaxilo, benalaxilo-M, bupirinato, quiralaxilo, clozilacón, dimetirimol, etirimol, furalaxilo, himexazol, metalaxilo, metalaxilo-M, ofurace, oxadixilo, ácido oxolínico. Inhibidores de la mitosis y la división celular benomilo, carbendazim, dietofencarb, fuberidazol, pencicurón, tiabendazol, tiofanato de metilo, zoxamida. Inhibidores del complejo I de la cadena respiratoria diflutorim. Inhibidores del complejo II de la cadena respiratoria boscalid, carboxina, fenfuram, flutolanilo, furametpir, mepronilo, oxicarboxina, pentiopirad, tipluzamida. Inhibidores del complejo III de la cadena respiratoria azoxistrobina, ciazofamida, dimoxistrobina, enestrobina, famoxadona, fenamidona, fluoxastrobina, cresoxim-metilo, metominostrobin, orisastrobina, piraclostrobina, picoxistrobina, trifloxistrobina. Desacopladores dinocap, fluazinam. Inhibidores de la producción de ATP acetato de fentina, cloruro de fentina, hidróxido de fentina, siltiofam. Inhibidores de la biosíntesis de aminoácidos y la biosíntesis de proteínas andoprim, blastidina-S, ciprodinilo, casugamicina, clorhidrato de casugamicina hidrato, mepanipirim, pirimetanilo. Inhibidores de la transducción de señal fenpiclonilo, fludioxonilo, quinoxifeno. Inhibidores de la síntesis de lípidos y membrana clozolinato, iprodiona, procimidona, vinclozolina, ampropilfos, ampropilfos de potasio, edifenfos, iprobenfos (IBP), isoprotiolano, pirazofos, tolclorós-metilo, bifenilo, yodocarb, propamocarb, clorhidrato de propamocarb. Inhibidores de la biosíntesis de ergosterol fenhexamida, azaconazol, biteranol, bromuconazol, ciproconazol, diclobutrazol, difenoconazol, diniconazol, diniconazol-M, epoxiconazol, etaconazol, fenbuconazol, fluquinconazol, flusilazol, flutriafol, furconazol, furconazol-cis, hexaconazol, imibenconazol, ipconazol, metconazol, miclobutanilo, paclobutrazol, penconazol, propiconazol, protriocanazol, simeconazol, tebuconazol, tetraconazol, triadimefón, triadimenol, triticonazol, uniconazol, voriconazol, imazalilo, sulfato de imazalilo, oxpoconazol, fenarimol, flurprimidol, nuarimol, pirifenox, triforina, pefurazoato, procloraz, triflumizol, viniconazol, aldimorf, dodemorf, acetato de dodemorf, fenpropimorf, tridemorf, fenpropidina, espiroamina, naftifina, piributicarb, terbinafina. Inhibidores de la síntesis de pared celular bentiazalicarb, bialafos, dimetomorf, flumorf, iprovalicarb, polioxin, polioxirim, validamicina A. Inhibidores de la biosíntesis de melanina capropamida, diclocimet, fenoxanilo, ftalida, piroquilón, triciclazol. Inductores de resistencia acibenzolar-S-metilo, probenazol, tiadinilo. Multisitio captan, captán, clorotalonilo, sales de cobre tales como: hidróxido de cobre, naftenato de cobre, oxiclورو de cobre, sulfato de cobre, óxido de cobre, oxina de cobre y mezcla Bordeaux, diclofluanida, ditianón, dodina, base libre de dodina, ferbam, folpet, fluorofolpet, guazatina, acetato de guazatina, iminocadina, albesilato de iminocadina, triacetato de iminocadina, mancozeb, mancozeb, maneb, metiram, metiram de cinc, propineb, azufre y preparaciones de azufre que contienen polisulfuro de calcio, tiram, tolilfluanida, zineb, ziram. Mecanismo desconocido amibromdol, bentiazol, betoxazina, capsamicina, carvona, quinometionato, cloropicrina, cufranab, ciflufenamida, cimoxanilo, dazomet, debacarb, diclomezina, diclorofeno, diclorán, difenzocuat, metilsulfato de difenzocuat, difenilamina, etaboxam, ferimzona, flumetover, flusulfamida, fluopicolida, fluorimida, hexaclorobenceno, sulfato de 8-hidroxiquinolona, irumamicina, metasulfocarb, metrafenona, metilisotiocianato,
- 60

mildiomicina, natamicina, dimetilditiocarbamato de níquel, nitroal-isopropilo, octilina, oxamocarb, oxifentiina, pentaclorofenol y sales, 2-fenifenol y sales, piperlina, propanosina de sodio, proquinazida, pirrolnitrina, quintoceno, tecloftalam, tecnaceno, triazóxido, triclámda, zarilámda y 2,3,5,6-tetracloro-4-(metilsulfonil)piridina, *N*-(4-cloro-2-nitrofenil)-*N*-etil-4-metilbenceno-sulfonámda, 2-amino-4-metil-*N*-fenil-5-tiazolcarboxámda, 2-cloro-*N*-(2,3-dihidro-1,1,3-trimetil-1*H*-inden-4-il)-3-piridincarboxámda, 3-[5-(4-clorofenil)-2,3-dimetilisoxazolidin-3-il]piridina, *cis*-1-(4-clorofenil)-2-(1*H*-1,2,4-triazol-1-il)cicloheptanol, 2,4-dihidro-5-metoxi-2-metil-4-[[[1-[3-(trifluorometil)fenil]-etiliden]amino]oxi]metil]fenil]-3*H*-1,2,3-triazol-3-ona (185336-79-2), 1-(2,3-dihidro-2,2-dimetil-1*H*-inden-1-il)-1*H*-imidazol-5-carboxilato de metilo, 3,4,5-tricloro-2,6-piridindicarbonitrilo, 2-[[[ciclopropil-[(4-metoxifenil)imino]-metil]tio]metil]- α -(metoximetilen)-benzoacetato de metilo, 4-cloro- α -propinilo-*N*-[2-[3-metoxi-4-(2-propinilo)fenil]etil]benzoacetámda, (2*S*)-*N*-[2-[4-[[3-(4-clorofenil)-2-propinil]oxi]-3-metoxifenil]etil]-3-metil-2-[(metilsulfonil)amino]butanámda, 5-cloro-7-(4-metilpiperidin-1-il)-6-(2,4,6-trifluorofenil)[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidina, 5-cloro-6-(2,4,6-trifluorofenil)-*N*-[1(*R*)-1,2,2-trimetilpropil][1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidin-7-amina, 5-cloro-*N*-[1(*R*)-1,2-dimetilpropil]-6-(2,4,6-trifluorofenil)[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidin-7-amina, *N*-[1-(5-bromo-3-cloropiridin-2-il)etil]-2,4-dicloronicotinámda, *N*-(5-bromo-3-cloropiridin-2-il)metil-2,4-dicloronicotinámda, 2-butoxi-6-yodo-3-propilbenzopirano-4-ona, *N*-{(Z)-[ciclopropilmetoxi]imino]-[6-(difluorometoxi)-2,3-difluorofenil]metil]-2-benzoacetámda, *N*-(3-etil-3,5,5-trimetilciclohexil)-3-formilamino-2-hidroxibenzámda, 2-[[[1-[3-(1-fluoro-2-feniletil)oxi]fenil]etiliden]amino]oxi]metil]- α -(metoxiimino)-*N*-metil- α -E-benzoacetámda, *N*-[2-[3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-il]etil]-2-(trifluorometil)-benzámida, *N*-(3',4'-dicloro-5-fluorobifenil-2-il)-3-(difluorometil)-1-metil-1*H*-pirazol-4-carboxámda, *N*-(6-metoxi-3-piridinil)ciclopropanocarboxámda, ácido 1-[(4-metoxifenoxi)metil]-2,2-dimetilpropil-1*H*-imidazol-1-carboxílico, ácido O-[1-[(4-metoxifenoxi)metil]-2,2-dimetilpropil]-1*H*-imidazol-1-carbotioico, 2-(2-[[6-(3-cloro-2-metilfenoxi)-5-fluoropirimidin-4-il]oxi]fenil)-2-(metoxiimino)-*N*-metilacetámda.

Bactericidas:

bronopol, diclorofeno, nitrapirina, dimetilditiocarbamato de níquel, casugamicina, octilina, ácido furanocarboxílico, oxitetraciclina, probenazol, estreptomina, tecloftalam, sulfato de cobre y otras preparaciones de cobre.

Insecticidas/acaricidas/nematicidas:

Inhibidores de acetilcolinesterasa (AChE) carbamatos, por ejemplo alanícarb, aldícarb, aldoxícarb, alixícarb, aminícarb, bendícarb, benfurícarb, bufenícarb, butícarb, butocarboxim, butoxícarb, carbarilo, carbofurano, carbosulfano, cloetícarb, dimetilán, etiofenícarb, fenobucícarb, fenotícarb, formetanato, furatícarb, isoprocícarb, metam de sodio, metícarb, metomilo, metolcarb, oxamilo, pirimícarb, promecícarb, propoxur, tiodícarb, tiofanox, trimetacarb, XMC, xilícarb, triazamato, organofosfatos, por ejemplo acefato, azametifos, azinfos (-metilo, -etilo), bromofos-etilo, bromfenvinfos (-metilo), butatíofos, cadusafos, carbofenotión, cloretoxifos, clorfenvinfos, clormefos, clorpirifos (-metilo/-etilo), cumafos, cianofenfos, cianofos, clorfenvinfos, demetón-S-metilo, demetón-S-metilsulfona, dialifos, diazinón, diclofentión, diclorvos/DDVP, dicrotofos, dimetoato, dimetilvinfos, dioxabenzofos, disulfotón, EPN, etión, etoprofos, etrimfos, famfur, fenamifos, fenitrotión, fensulfotión, fentión, flupirazofos, fonofos, formotión, fosmetilán, fostiazato, heptenofos, yodofenfos, iprobenfos, isazofos, isofenfos, O-salicilato de isopropilo, isoxatión, malatión, mecarbám, metacrifos, metamidofos, metidatión, mevinfos, monocrotofos, naled, ometoato, oxidemetón-metilo, paratión (-metilo/-etilo), fentoato, forato, fosalona, fosmet, fosfamidón, fosfocarb, foxim, pirimifos (-metilo/-etilo), profenofos, propafos, propetamfos, protíofos, protoato, piraclofos, piridafentión, piridatión, quinalfos, sebufos, sulfotep, sulprofos, tebupirimfos, temefos, terbufos, tetraclorvinfos, tiometón, triazofos, triclorfón, vamidotión. Moduladores de canal de sodio / bloqueantes de canal de sodio dependientes del voltaje piretroides, por ejemplo, acrinatrina, aletrina (d-*cis-trans*, d-*trans*), beta-ciflutrina, bifentrina, bioaletrina, isómero S-ciclopentilo de bioaletrina, bioetanometrina, biopermetrina, bioresmetrina, clovaportrina, *cis*-cipermetrina, *cis*-resmetrina, *cis*-permetrina, clocitrina, cicloprotrina, ciflutrina, cihalotrina, cipermetrina (α -, β -, γ -, δ -, ϵ -), cifenotrina, deltametrina, empentrina (isómero 1*R*), esfenvalerato, etofenprox, fenflutrina, fenpropatrina, fenpiritrina, fenvalerato, flubrocitrinato, flucitrinato, flufenprox, flumetrina, fluvalinato, fubfenprox, gamma-cihalotrina, imiprotina, cadertrina, lambda-cihalotrina, metoflutrina, permetrina (*cis*-, *trans*-), fenotrina (isómero 1*R-trans*), praletrina, proflutrina, protrifenbuto, piresmetrina, resmetrina, RU 15525, silafluofeno, tau-fluvalinato, teflutrina, teraletrina, tetrametrina (isómero 1*R*), tralometrina, transflutrina, ZVI 8901, piretrinas (piretro);

DDT;

oxadiazinas,

por ejemplo, indoxacarb

semicarbazonas,

por ejemplo, metaflumizona (BAS3201) Agonistas/antagonistas de receptor de acetilcolina cloronicotinilos, por ejemplo, acetamiprid, clotianidina, dinotefurán, imidacloprid, nitenpiram, nitiazina, tiacloprid, imidacloz, AKD-1022, tiametoxam, nicotina, bensultap, cartap. Moduladores de receptor de acetilcolina espinosinas, por ejemplo, espinosad, espinetoram (XDE-175) Antagonistas de canal de cloruro controlados por GABA organocloruros, por ejemplo, camfeclor, clordano, endosulfán, gamma-HCH, HCH, heptaclor, lindano, metoxíclor; fiproles,

por ejemplo, acetoprol, etiprol, fipronilo, pirafluprol, piriprol, vaniliprol Activadores de canal de cloruro mectinas, por ejemplo, abamectina, emamectina, benzoato de emamectina, ivermectina, lepimectina, milbemicina. Miméticos de hormona juvenil,

por ejemplo, diofenolano, epofenonano, fenoxicarb, hidropreno, quinopreno, metopreno, piriproxifeno, tripreno Agonistas/desestabilizadores de ecdisona diacilhidrazinas, por ejemplo, cromafenozida, halofenozida, metoxifenoza, tebufenozida Inhibidores de la biosíntesis de quitina benzoilureas, por ejemplo, bistriflurón, clofluazurón, diflubenzurón, fluazurón, flucicloxurón, flufenoxurón, hexaflumurón, lufenurón, novalurón, noviflumurón, penflurón, teflubenzurón, triflumurón, buprofezina, ciromazina Inhibidores de la fosforilación oxidativa, desestabilizadores de ATP diafenturón, compuestos organoestánicos, por ejemplo, azociclotina, cihexatina, óxido de fenbutatina Desacoplantes de la fosforilación oxidativa mediante interrupción del gradiente de protón H de pirroles, por ejemplo, clorfenapir, dinitrofenoles, por ejemplo, binapacril, dinobutón, dinocap, DNOC Inhibidores del transporte de electrones de sitio I METI, por ejemplo, fenazaquina, fenpiroximato, pirimidifén, piridabén, tebufenpirad, tolfenpirad, hidrametilnón, dicofol. Inhibidores del transporte de electrones de sitio II rotenona Inhibidores del transporte de electrones de sitio III acequinocilo, fluacipirim Desestabilizadores microbianos de la membrana intestinal de insectos cepas de *Bacillus thuringiensis*. Inhibidores de la síntesis de lípidos ácidos tetránicos, por ejemplo, espiroclorfen, espiromesifeno, ácidos tetránicos, por ejemplo, espirotetramat, carboxamidas, por ejemplo, flonicamida, agonistas octopaminérgicos, por ejemplo, amitraz Inhibidores de la ATPasa estimulada por magnesio, propargita, análogos de nereistoxina, por ejemplo, tiociclam hidrogenoxalato, tiosultap de sodio Agonistas de receptor de rianodina dicarboxamidas del ácido benzoico, por ejemplo, flubendiamida, antronilamidas, por ejemplo, pinaxipir (3-bromo-N-(4-cloro-2-metil-6-[(metilamino)carbonil]fenil)-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-carboxamida) Productos biológicos, hormonas o feromonas azadiractina, *Bacillus spec.*, *Beauveria spec.*, codlemona, *Metarrhizium spec.*, *Paecilomyces spec.*, turingiensina, *Verticillium spec.* Principios activos con mecanismos de acción desconocidos o no específicos de agentes de fumigación, por ejemplo, fosfuro de aluminio, bromuro de metilo, fluoruro de sulfurilo, inhibidores de la alimentación, por ejemplo, criolita, flonicamida, pimetozina, inhibidores del crecimiento de ácaros, por ejemplo, clofentezina, etoxazol, hexitiazox, amidoflomet, benclotiaz, benzoximato, bifenazato, bromopropilato, buprofezina, quinometionato, clordimeform, clorobenzilato, cloropirina, clotiazobeno, ciclopreno, ciflumetofeno, diciclanilo, fenoxacrim, fentrifanilo, flubenzimina, flufenimer, flutenzina, Gossyplure, hidrametilnona, japoniluro, metoxadiazona, petróleo, butóxido de piperonilo, oleato de potasio, piridililo, sulfluramida, tetradifón, tetrasul, triaraten, verbutina, también es posible la mezcla de verbutina A con otros principios activos conocidos, tales como herbicidas, fertilizantes, reguladores del crecimiento, protectores, semioquímicos o además con agentes para mejorar las propiedades de las plantas.

Cuando se utilizan como insecticidas, los principios activos según la invención pueden estar presentes además en sus formulaciones comercialmente disponibles y en las formas de uso preparadas a partir de estas formulaciones, como una mezcla con agentes sinérgicos. Los agentes sinérgicos son compuestos que aumentan la acción de los principios activos, sin que sea necesario que el agente sinérgico añadido sea activo por sí mismo.

Cuando se utilizan como insecticidas, los principios activos según la invención pueden estar presentes además en sus formulaciones comercialmente disponibles y en las formas de uso preparadas a partir de estas formulaciones, como una mezcla con inhibidores que reducen la degradación del principio activo después del uso en el entorno de la planta, sobre la superficie de partes de la planta o en los tejidos de la planta.

El contenido de principio activo de las formas de uso preparadas a partir de las formulaciones comercialmente disponibles puede variar dentro de límites amplios. La concentración de principio activo de las formas de uso puede ser del 0,00000001 al 95% en peso del principio activo, preferiblemente entre un 0,00001 y un 1% en peso.

Los principios activos se emplean de modo habitual apropiado para las formas de uso.

Todas las plantas y partes de planta pueden tratarse según la invención. Como significado de plantas, deben entenderse en el presente contexto todas las plantas y poblaciones de plantas tales como plantas silvestres deseadas y no deseadas o plantas de cultivo (incluyendo plantas de cultivo de aparición natural). Las plantas de cultivo pueden ser plantas que pueden obtenerse mediante procedimientos de cultivo y optimización convencionales o mediante procedimientos biotecnológicos y de ingeniería genética o combinaciones de estos procedimientos, incluyendo las plantas transgénicas e incluyendo las variedades de plantas protegibles o no protegibles por los derechos de los cultivadores de plantas. Como significado de partes de planta, debe entenderse todas las partes y órganos de planta aéreos y subterráneos, tales como un brote, hoja, flor y raíz, pudiendo mencionarse, por ejemplo, hojas, agujas, tallos, troncos, flores, cuerpos frutales, frutos, semillas, raíces, tubérculos y rizomas. Las partes de planta incluyen también material recolectado y material de propagación vegetativa y generativa, por ejemplo, esquejes, tubérculos, rizomas, ramas y semillas. El tratamiento según la invención de plantas y partes de planta con los principios activos se lleva a cabo directamente o permitiendo que los compuestos actúen sobre el entorno, hábitat o espacio de almacenamiento mediante procedimientos de tratamiento habituales, por ejemplo, mediante

inmersión, pulverización, vaporización, nebulización, dispersión, deposición, inyección, y en el caso de material propagativo, particularmente en el caso de semillas, además aplicando uno o más recubrimientos.

Los principios activos según la invención son particularmente adecuados para el tratamiento de semillas. A este respecto, pueden mencionarse como preferidos los principios activos según la invención mencionados anteriormente como preferidos o particularmente preferidos. Así, una gran parte de los daños causados por plagas sobre plantas de cultivo aparece tan pronto como cuando la semilla es atacada durante el almacenamiento y después de introducir la semilla en el suelo, durante e inmediatamente después de la germinación de las plantas. Esta fase es particularmente crítica, ya que las raíces y brotes de la planta en crecimiento son particularmente sensibles, e incluso un pequeño daño puede conducir a la muerte de toda la planta. Es por lo tanto de un interés particularmente grande proteger la semilla y la planta en germinación mediante el uso de principios activos adecuados.

El control de plagas mediante el tratamiento de la semilla de plantas es conocido desde hace mucho tiempo y es objeto de mejoras continuas. Sin embargo, el tratamiento de semillas engloba una serie de problemas que no siempre pueden solucionarse de un modo satisfactorio. Así, es deseable desarrollar procedimientos para la protección de semillas y de plantas en germinación que hagan prescindible la aplicación adicional de agentes protectores del cultivo después de la siembra o después de la emergencia de las plantas. Además, es deseable optimizar la cantidad de principio activo empleado de tal modo que se proporcione la máxima protección para la semilla y la planta en germinación frente al ataque por plagas, pero sin dañar la planta misma con el principio activo empleado. En particular, los procedimientos para el tratamiento de semilla deben tomar en consideración también las propiedades fungicidas intrínsecas de plantas transgénicas para conseguir una protección óptima de la semilla y la planta en germinación empleando un mínimo de agentes protectores del cultivo.

La presente invención se refiere por lo tanto particularmente también a un procedimiento para la protección de semillas y plantas en germinación frente al ataque de plagas, tratando la semilla con un principio activo según la invención. La invención se refiere igualmente al uso de los principios activos según la invención para el tratamiento de semillas para la protección de las semillas y de las plantas resultantes frente a plagas. Además, la invención se refiere a una semilla que se ha tratado con un principio activo según la invención para proporcionar protección frente a plagas.

Una de las ventajas de la presente invención es que las propiedades sistémicas especiales de los principios activos según la invención significan que el tratamiento de la semilla con estos principios activos no solo protege frente a plagas a la semilla misma, sino también a las plantas resultantes después de la emergencia. De este modo, puede suprimirse el tratamiento inmediato del cultivo en el momento de la siembra o poco después de ello.

Además, debe considerarse como ventajoso que los principios activos según la invención puedan emplearse particularmente también en una semilla transgénica, siendo capaces las plantas procedentes de esta semilla de expresar una proteína dirigida contra plagas. Al tratar dicha semilla con los principios activos según la invención, pueden controlarse ciertas plagas simplemente mediante la expresión de, por ejemplo, la proteína insecticida, y adicionalmente preservarse de daños por los principios activos según la invención.

Los principios activos según la invención son adecuados para la protección de semilla de cualquier variedad de planta como ya se ha mencionado anteriormente que se emplee en agricultura, en el invernadero, en bosques o en horticultura. En particular, ésta toma la forma de semilla de maíz, cacahuate, canola, colza, amapola, soja, algodón, remolacha (por ejemplo, remolacha azucarera y remolacha forrajera), arroz, sorgo y mijo, trigo, cebada, avena, centeno, girasol, tabaco, patatas o verduras (por ejemplo, tomates, crucíferas). Los principios activos según la invención son igualmente adecuados para el tratamiento de semilla de plantas frutales y verduras como ya se ha mencionado anteriormente. El tratamiento de semilla de maíz, soja, algodón, trigo y canola o colza es particularmente importante.

Como ya se ha mencionado anteriormente, es también particularmente importante el tratamiento de una semilla transgénica con un principio activo según la invención. Esta toma la forma de semilla de plantas que, por norma, comprenden al menos un gen heterólogo que dirige la expresión de un polipéptido con propiedades insecticidas particulares. En este contexto, los genes heterólogos en una semilla transgénica pueden derivar de microorganismos tales como *Bacillus*, *Rhizobium*, *Pseudomonas*, *Serratia*, *Trichoderma*, *Clavibacter*, *Glomus* o *Gliocladium*. La presente invención es particularmente adecuada para el tratamiento de una semilla transgénica que comprende al menos un gen heterólogo procedente de *Bacillus* sp. y cuyo producto génico muestra actividad contra barrenador del maíz europeo y/o gusano de la raíz del maíz. Se prefiere particularmente un gen heterólogo derivado de *Bacillus thuringiensis*.

En el contexto de la presente invención, se aplica el principio activo según la invención solo o en una formulación adecuada sobre la semilla. Preferiblemente, se trata la semilla en un estado en el que sea suficientemente estable para evitar daños durante el tratamiento. En general, la semilla puede tratarse en cualquier punto temporal entre la cosecha y la siembra. La semilla utilizada habitualmente se ha separado de la planta y liberado de mazorcas, cáscaras, tallos, cubiertas, pelos o pulpa frutal.

Cuando se trata la semilla, generalmente debe tenerse cuidado de que la cantidad de principio activo según la

invención aplicado a la semilla y/o la cantidad de aditivos adicionales se elijan de tal modo que la germinación de la semilla no se afecte adversamente, o que la planta resultante no se dañe. Esto debe tenerse en cuenta en particular en el caso de principios activos que pueden tener efectos fitotóxicos a ciertas cantidades de aplicación. Como ya se ha mencionado anteriormente, es posible tratar todas las plantas y sus partes según la invención. En una forma de realización preferida, se tratan especies de plantas y variedades de plantas silvestres o aquellas obtenidas mediante procedimientos de cultivo biológico convencional, tales como cruzamiento o fusión de protoplastos, y partes de los mismos. En una realización preferida adicional, se tratan plantas transgénicas y variedades de planta obtenidas mediante procedimientos de ingeniería genética, siempre que sea apropiado en combinación con procedimientos convencionales (organismos modificados genéticamente), y partes de las mismas. Los términos "partes", "partes de plantas" y "partes de planta" se han explicado anteriormente.

De forma particularmente preferible, se tratan según la invención plantas de variedades de plantas que están en cada caso comercialmente disponibles o en uso. Como significado de variedades de planta, deben entenderse plantas que tienen propiedades novedosas ("rasgos") que se han obtenido mediante cultivo convencional, mediante mutagénesis o mediante técnicas de ADN recombinante. Éstas pueden ser variedades, biotipos o genotipos.

Dependiendo de la especie de planta o variedad de planta, su hábitat y condiciones de crecimiento (suelos, clima, periodo vegetativo, alimentación), el tratamiento según la invención puede dar como resultado también efectos superaditivos ("sinérgicos"). Así, por ejemplo, son posibles cantidades de aplicación reducidas y/o una ampliación del espectro de actividad y/o un aumento de la actividad de los principios activos y composiciones que pueden utilizarse según la invención, mejor crecimiento de plantas, tolerancia elevada frente a altas o bajas temperaturas, tolerancia elevada frente a la sequía o frente al contenido de sales del agua o el suelo, rendimiento de floración elevado, recolección facilitada, maduración acelerada, mayores rendimientos de recolección, mayor calidad y/o mayor valor nutritivo de los productos recolectados, mejor estabilidad de almacenamiento y/o procesabilidad de los productos recolectados, que superan los efectos que realmente se esperaban. Las plantas o variedades de planta transgénicas (obtenidas mediante ingeniería genética) que se tratan preferiblemente según la invención incluyen todas las plantas que, gracias a una modificación por ingeniería genética, han recibido material genético que confería rasgos particularmente ventajosos, útiles para estas plantas. Son ejemplos de dichos rasgos mejor crecimiento de planta, tolerancia elevada frente a temperaturas altas o bajas, tolerancia aumentada frente a la sequía o frente al contenido de sales de agua o suelo, rendimiento de floración elevado, recolección facilitada, maduración acelerada, mayores rendimientos de recolección, mayor calidad y/o mayor valor nutritivo de los productos recolectados, mejor estabilidad de almacenamiento y/o procesabilidad de los productos recolectados. Son ejemplos adicionales y particularmente destacados de dichos rasgos una mejor defensa de las plantas frente a plagas animales y microbianas, tales como frente a insectos, ácaros, hongos fitopatógenos, bacterias y/o virus, y también una tolerancia elevada de las plantas frente a ciertos principios activos herbicidas. Son ejemplos de plantas transgénicas que pueden mencionarse las plantas de cultivo importantes, tales como cereales (trigo, arroz), maíz, soja, patatas, remolacha azucarera, tomates, guisantes y otras variedades de verduras, algodón, tabaco, colza y también las plantas frutales (con los frutos manzanas, peras, frutos cítricos y uvas), destacando particularmente maíz, soja, patatas, algodón, tabaco y colza. Los rasgos que se destacan son en particular la defensa elevada de las plantas frente a insectos, arácnidos, nematodos y babosas gracias a toxinas formadas en las plantas, particularmente aquellas formadas en las plantas mediante el material genético de *Bacillus thuringiensis* (por ejemplo, mediante los genes CryIA(a), CryIA(b), CryIA(c), CryIIA, CryIIIA, CryIIIB2, Cry9c Cry2Ab, Cry3Bb y CryIF, y también combinaciones de los mismos) (citadas en el presente documento como "plantas Bt"). Los rasgos que se destacan particularmente también son la defensa elevada de las plantas frente a hongos, bacterias y virus mediante resistencia sistémica adquirida (SAR), sistemina, fitoalexinas, desencadenantes y genes de resistencia y las correspondientes proteínas y toxinas expresadas. Adicionalmente, los rasgos que se destacan particularmente son la tolerancia elevada de las plantas frente a ciertos principios activos herbicidas, por ejemplo, imidazolinonas, sulfonilureas, glifosato o fosfinotricina (por ejemplo, el gen "PAT"). Los genes que confieren los rasgos deseados en cuestión pueden estar también presentes en combinación entre sí en las plantas transgénicas. Son ejemplos de "plantas Bt" que pueden mencionarse variedades de maíz, variedades de algodón, variedades de soja y variedades de patata, que se comercializan con las denominaciones comerciales YIELD GARD® (por ejemplo, maíz, algodón, soja), KnockOut® (por ejemplo, maíz), StarLink® (por ejemplo, maíz), Bollgard® (algodón), Nucotn® (algodón) y NewLeaf® (patata). Son ejemplos de plantas tolerantes a herbicidas que pueden mencionarse variedades de maíz, variedades de algodón y variedades de soja que se comercializan con las denominaciones comerciales Roundup Ready® (tolerancia frente a glifosato, por ejemplo, maíz, algodón, soja), Liberty Link® (tolerancia frente a fosfinotricina, por ejemplo, colza), IMI® (tolerancia frente a imidazolinonas) y STS® (tolerancia frente a sulfonilureas, por ejemplo, maíz). Las plantas resistentes a herbicidas (plantas cultivadas convencionalmente para tolerancia a herbicida) que pueden mencionarse incluyen las variedades comercializadas con la denominación Clearfield® (por ejemplo, maíz). Por supuesto, estas indicaciones se aplican también a las variedades de planta que tienen estos rasgos genéticos o que han de desarrollar todavía los rasgos genéticos, desarrollándose y/o comercializándose dichas variedades de planta en el futuro. Las plantas enumeradas pueden tratarse según la invención de forma particularmente ventajosa con los principios activos de fórmula general I según la invención. Los intervalos preferidos expuestos anteriormente para los principios activos se aplican también al tratamiento de estas plantas. Se destaca particularmente el tratamiento de plantas con los principios activos mencionados específicamente en el presente texto.

Los principios activos según la invención no solo actúan contra plagas de plantas, higiene y productos almacenados, sino también en el sector de medicina veterinaria contra parásitos animales (ecto- y endoparásitos) tales como garrapatas duras, garrapatas blandas, ácaros de la sarna, ácaros chupadores, moscas (picadoras y chupadoras), larvas de moscas parásitas, piojos, malófagos de piel, malófagos de pluma y pulgas. Estos parásitos incluyen:

- 5 Del orden de los *Anoplurida*, por ejemplo, *Haematopinus* spp., *Linognathus* spp., *Pediculus* spp., *Phthirus* spp., *Solenopotes* spp.
Del orden de los *Mallophagida* y los subórdenes *Amblycerina* y *Ischnocerina*, por ejemplo, *Trimenopon* spp., *Menopon* spp., *Trinoton* spp., *Bovicola* spp., *Werneckiella* spp., *Lepikentron* spp., *Damalina* spp., *Trichodectes* spp., *Felicola* spp.
- 10 Del orden de los *Diptera* y los subórdenes *Nematocerina* y *Brachycerina*, por ejemplo, *Aedes* spp., *Anopheles* spp., *Culex* spp., *Simulium* spp., *Eusimulium* spp., *Phlebotomus* spp., *Lutzomyia* spp., *Culicoides* spp., *Chrysops* spp., *Hybomitra* spp., *Atylotus* spp., *Tabanus* spp., *Haematopota* spp., *Philipomyia* spp., *Braula* spp., *Musca* spp., *Hydrotaea* spp., *Stomoxys* spp., *Haematobia* spp., *Morellia* spp., *Fannia* spp., *Glossina* spp., *Calliphora* spp., *Lucilia* spp., *Chrysomyia* spp., *Wohlfahrtia* spp., *Sarcophaga* spp., *Oestrus* spp., *Hypoderma* spp., *Gasterophilus* spp., *Hippobosca* spp., *Lipoptena* spp., *Melophagus* spp.
- 15 Del orden de los *Siphonapterida*, por ejemplo, *Pulex* spp., *Ctenocephalides* spp., *Xenopsylla* spp., *Ceratophyllus* spp. Del orden de los *Heteropterida*, por ejemplo, *Cimex* spp., *Triatoma* spp., *Rhodnius* spp., *Panstrongylus* spp. Del orden de los *Blattarida*, por ejemplo, *Blatta orientalis*, *Periplaneta americana*, *Blattella germanica*, *Supella* spp. De la subclase de los *Acarí* (*Acarina*) y los subórdenes *Metastigmata* y *Mesostigmata*, por ejemplo, *Argas* spp., *Ornithodoros* spp., *Otobius* spp., *Ixodes* spp., *Amblyomma* spp., *Boophilus* spp., *Dermacentor* spp., *Haemophysalis* spp., *Hyalomma* spp., *Rhipicephalus* spp., *Dermanyssus* spp., *Railletia* spp., *Pneumonyssus* spp., *Sternostoma* spp., *Varroa* spp.
- 20 Del orden de los *Actiniedida* (*Prostigmata*) y *Acaridida* (*Astigmata*), por ejemplo, *Acarapis* spp., *Cheyletiella* spp., *Ornithocheyletia* spp., *Myobia* spp., *Psorergates* spp., *Demodex* spp., *Trombicula* spp., *Listrophorus* spp., *Acarus* spp., *Tyrophagus* spp., *Caloglyphus* spp., *Hypodectes* spp., *Pterolichus* spp., *Psoroptes* spp., *Chorioptes* spp., *Otodectes* spp., *Sarcoptes* spp., *Notoedres* spp., *Knemidocoptes* spp., *Cytodites* spp., *Laminosioptes* spp.
- 25

Los principios activos de fórmula (I) según la invención son también adecuados para controlar artrópodos que infestan animales productivos agrícolas tales como, por ejemplo, vacas, ovejas, cabras, caballos, cerdos, asnos, camellos, búfalos, conejos, gallinas, pavos, patos, gansos y abejas, otras mascotas tales como, por ejemplo, perros, gatos, aves domésticas y peces de acuario, y los denominados animales de ensayo tales como, por ejemplo, hámsteres, conejillos de indias, ratas y ratones. Mediante el control de estos artrópodos, deben reducirse los fallos de productividad y reducciones de productividad (de carne, leche, lana, pieles, huevos, miel, etc.), de modo que mediante el uso de los principios activos según la invención es posible una cría de animales más económica y sencilla.

- 35 Los principios activos según la invención se utilizan en el sector veterinario y en la cría de animales de manera conocida mediante administración enteral en forma de, por ejemplo, comprimidos, cápsulas, pociones, brebajes, gránulos, pastas, bolos, procedimientos de alimentación por sonda y supositorios, mediante administración parenteral como, por ejemplo, mediante inyección (intramuscular, subcutánea, intravenosa, intraperitoneal y similares), implantes, mediante administración nasal, mediante uso dérmico en forma, por ejemplo, de inmersión o baño, pulverización, vertido dorsal y en la cruz, lavado y empolvado, y también con ayuda de artículos moldeados que contienen el principio activo tales como collares, marcas en la oreja, marcas en el rabo, brazaletes, ronzales, dispositivos de marcaje, y similares.
- 40

Cuando se utiliza para ganado, aves, mascotas y similares, los principios activos de fórmula (I) pueden utilizarse como formulaciones (por ejemplo, polvos, emulsiones, agentes fluidos) que comprenden los principios activos en una cantidad de 1 a 80% en peso, directamente o después de dilución de 100 a 10.000 veces, o pueden utilizarse como baño químico.

- 45

Además, se ha encontrado que los principios activos según la invención muestran también una fuerte acción insecticida frente a insectos que destruyen materiales industriales. Los siguientes insectos pueden mencionarse como ejemplos preferidos - pero sin limitación alguna:

- 50 Escarabajos tales como *Hylotrupes bajulus*, *Chlorophorus pilosis*, *Anobium punctatum*, *Xestobium rufovillosum*, *Ptilinus pecticornis*, *Dendrobium pertinex*, *Ernobius mollis*, *Priobium carpini*, *Lyctus brunneus*, *Lyctus africanus*, *Lyctus planicollis*, *Lyctus linearis*, *Lyctus pubescens*, *Trogosyllum aequale*, *Minthes rugicollis*, especies de *Xyleborus*, especies de *Tryptodendron*, *Apate monachus*, *Bostrychus capucinus*, *Heterobostrychus brunneus*, especies de *Sinoxylon*, *Dinoderus minutus*. Himenópteros tales como *Sirex juvencus*, *Urocera gigas*, *Urocera gigas taignus*, *Urocera augur*;
- 55 Termitas tales como *Kaloterms flavicollis*, *Cryptoterms brevis*, *Heteroterms indicola*, *Reticuliterms flavipes*, *Reticuliterms santonensis*, *Reticuliterms lucifugus*, *Mastoterms darwiniensis*, *Zootermopsis nevadensis*, *Coptoterms formosanus*.
Lepismas tales como *Lepisma saccharina*.

- 60 Como significado de materiales industriales, deben entenderse en el presente contexto, materiales no vivos tales

como, preferiblemente, plásticos, adhesivos, colas, papeles y cartones, cuero, madera y productos del procesamiento de la madera y composiciones de recubrimiento. Las composiciones preparadas para uso pueden comprender, siempre que sea apropiado, insecticidas adicionales y, siempre que sea apropiado, uno o más fungicidas.

- 5 Con respecto a los aditivos adicionales posibles, puede hacerse referencia a los insecticidas y fungicidas anteriormente mencionados. Igualmente, los principios activos según la invención pueden emplearse para proteger frente a la incrustación a objetos que entran en contacto con agua salada o agua salobre, tales como cascos de barcos, cedazos, redes, construcciones, muelles e instalaciones de señalización. Además, los principios activos según la invención, solos o en combinaciones con otros principios activos, pueden emplearse como agentes antiincrustación.

10 Los principios activos son adecuados también para controlar plagas animales en la protección doméstica, de higiene y de productos almacenados, particularmente frente a insectos, arácnidos y ácaros que se encuentran en espacios cerrados tales como, por ejemplo, viviendas, fábricas, oficinas, cubículos de vehículos, y similares. Pueden emplearse para controlar estas plagas solos o en combinación con otros principios activos y coadyuvantes en productos insecticidas domésticos. Son activos frente a especies sensibles y resistentes, y frente a todos los estados de desarrollo. Estas plagas incluyen: Del orden de los *Scorpionidea*, por ejemplo, *Buthus occitanus*.

15 Del orden de los *Acarina*, por ejemplo, *Argas persicus*, *Argas reflexus*, *Bryobia ssp.*, *Dermanyssus gallinae*, *Glyciphagus domesticus*, *Ornithodoros moubat*, *Rhipicephalus sanguineus*, *Trombicula alfreddugesi*, *Neutrombicula autumnalis*, *Dermatophagoides pteronissimus*, *Dermatophagoides forinae*. Del orden de los *Araneae*, por ejemplo, *Aviculariidae*, *Araneidae*.

20 Del orden de los *Opiliones*, por ejemplo, *Pseudoscorpiones chelifer*, *Pseudoscorpiones cheiridium*, *Opiliones phalangium*. Del orden de los *Isopoda*, por ejemplo, *Oniscus asellus*, *Porcellio scaber*.

Del orden de los *Diplopoda*, por ejemplo, *Blaniulus guttulatus*, *Polydesmus spp.*

25 Del orden de los *Chilopoda*, por ejemplo, *Geophilus spp.* Del orden de los *Zygentoma*, por ejemplo, *Ctenolepisma spp.*, *Lepisma saccharina*, *Lepismodes inquilinus*.

Del orden de los *Blattaria*, por ejemplo, *Blatta orientalis*, *Blattella germanica*, *Blattella asahinai*, *Leucophaea maderae*, *Panchlora spp.*, *Parcoblatta spp.*, *Periplaneta australasiae*, *Periplaneta americana*, *Periplaneta brunnea*, *Periplaneta fuliginosa*, *Supella longipalpa*.

Del orden de los *Saltatoria*, por ejemplo, *Acheta domesticus*.

30 Del orden de los *Dermaptera*, por ejemplo, *Forficula auricularia*.

Del orden de los *Isoptera*, por ejemplo, *Kaloterms spp.*, *Reticuliterms spp.*

Del orden de los *Psocoptera*, por ejemplo, *Lepinatus spp.*, *Liposcelis spp.*

35 Del orden de los *Coleoptera*, por ejemplo, *Anthrenus spp.*, *Attagenus spp.*, *Dermestes spp.*, *Latheticus oryzae*, *Necrobia spp.*, *Ptinus spp.*, *Rhizopertha dominica*, *Sitophilus granarius*, *Sitophilus oryzae*, *Sitophilus zeamais*, *Stegobium paniceum*. Del orden de los *Diptera*, por ejemplo, *Aedes aegypti*, *Aedes albopictus*, *Aedes taeniorhynchus*, *Anopheles spp.*, *Calliphora erythrocephala*, *Chrysosoma pluvialis*, *Culex quinquefasciatus*, *Culex pipiens*, *Culex tarsalis*, *Drosophila spp.*, *Fannia canicularis*, *Musca domestica*, *Phlebotomus spp.*, *Sarcophaga carnaria*, *Simulium spp.*, *Stomoxys calcitrans*, *Tipula paludosa*. Del orden de los *Lepidoptera*, por ejemplo, *Achroia grisella*, *Galleria mellonella*, *Plodia interpunctella*, *Tinea cloacella*, *Tinea pellionella*, *Tineola bisselliella*.

40 Del orden de los *Siphonaptera*, por ejemplo, *Ctenocephalides canis*, *Ctenocephalides felis*, *Pulex irritans*, *Tunga penetrans*, *Xenopsylla cheopis*.

Del orden de los *Hymenoptera*, por ejemplo, *Camponotus herculeanus*, *Lasius fuliginosus*, *Lasius niger*, *Lasius umbratus*, *Monomorium pharaonis*, *Paravespula spp.*, *Tetramorium caespitum*.

45 Del orden de los *Anoplura*, por ejemplo, *Pediculus humanus capitis*, *Pediculus humanus corporis*, *Pemphigus spp.*, *Phylloera vastatrix*, *Phthirus pubis*.

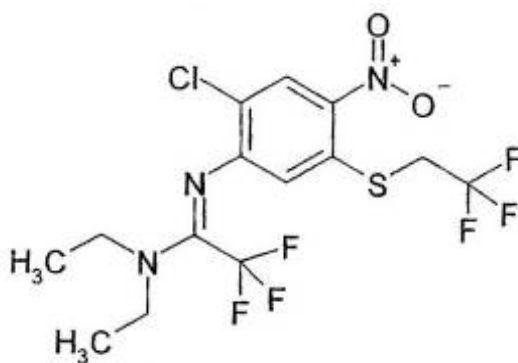
Del orden de los *Heteroptera*, por ejemplo, *Cimex hemipterus*, *Cimex lectularius*, *Rhodinus prolixus*, *Triatoma infestans*.

50 En el campo de los insecticidas domésticos, los principios activos según la invención se utilizan solos o en combinación con otros principios activos adecuados tales como ésteres de ácido fosfórico, carbamatos, piretroides, neonicotinoides, reguladores del crecimiento o principios activos de otras clases de insecticidas conocidas. Los principios activos según la invención se utilizan en aerosoles, pulverizadores sin presión, por ejemplo, pulverizadores de bombeo y atomización, sistemas de nebulizadores automáticos, nebulizadores, espumas, geles, productos de

vaporización con placas vaporizadoras de celulosa o poliméricas, vaporizadores de líquido, vaporizadores de gel y membrana, vaporizadores accionados por propulsores, sistemas de vaporización sin energía o pasivos, papeles antipollas, saquitos antipollas y geles antipollas, en forma de gránulos o polvos, en cebos dispersados o trampas con cebo.

- 5 A continuación, se ilustrará adicionalmente la presente invención específicamente mediante ejemplos, pero la presente invención no debería limitarse a solo estos ejemplos.

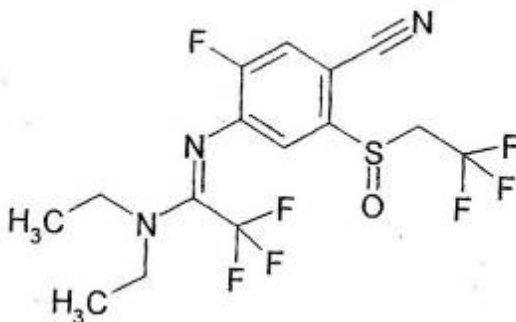
Ejemplo de síntesis 1 (síntesis de sustancia final)



Síntesis de *N'*-[2-cloro-4-nitro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil]-*N,N*-dietil-2,2,2-trifluoroetanimidamida

- 10 Se añadieron 0,4 g (3,4 mmol) de 2,2,2-trifluoroetanotiol y 0,5 g (3,6 mmol) de carbonato de potasio a una disolución de 0,8 g (2,2 mmol) de *N'*-(2,5-dicloro-4-nitrofenil)-*N,N*-dietil-2,2,2-trifluoroetanimidamida en 50 ml de DMF, y se agitó a temperatura ambiente durante 15 horas. Se vertió la disolución de reacción en agua con hielo, se extrajo con acetato de etilo y se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 0,85 g del compuesto diana en forma de un aceite amarillo
- 15 pálido (rendimiento: 87%, n_D^{20} 1,5473).

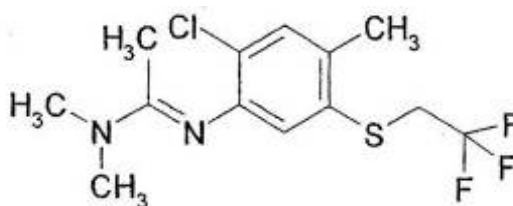
Ejemplo de síntesis 2 (síntesis de sustancia final)



Síntesis de *N'*-[4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)sulfinil]fenil]-*N,N*-dietil-2,2,2-trifluoroetanimidamida

- 20 Se añadieron 0,3 g (pureza 70%, 1,2 mmol) de ácido *m*-cloroperbenzoico a una disolución de 0,4 g (1,0 mmol) de *N'*-[4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil]-*N,N*-dietil-2,2,2-trifluoroetanimidamida en 50 ml de diclorometano con enfriamiento con hielo, la temperatura volvió a temperatura ambiente sin ningún otro tratamiento y se agitó durante 10 horas. Después de terminada la reacción, se lavó la disolución de reacción dos veces con disolución acuosa saturada de hidrogenocarbonato de sodio y se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 0,3 g del
- 25 compuesto diana en forma de un cristal blanco (rendimiento: 72%, p.f.: 103 a 105 °C).

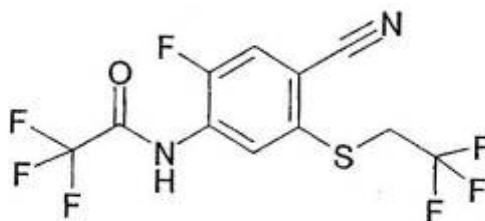
Ejemplo de síntesis 3 (síntesis de sustancia final)



Síntesis de *N*-{2-cloro-4-metil-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-*N,N*-dimetiletanimidamida

Se agitó a 100 °C durante 3 horas una disolución mixta de 0,58 g (2,2 mmol) de 2-cloro-4-metil-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]anilina, 0,4 g (4,5 mmol) de *N,N*-dimetilacetamida y 1 ml (11 mmol) de oxocloruro de fósforo. Se enfrió la disolución de reacción, después, se vertió en agua con hielo y se alcalinizó con una disolución acuosa de NaOH, después, se extrajo con acetato de etilo. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 0,18 g del compuesto diana en forma de cristal blanco (rendimiento: 24%, p.f. 66 a 71 °C).

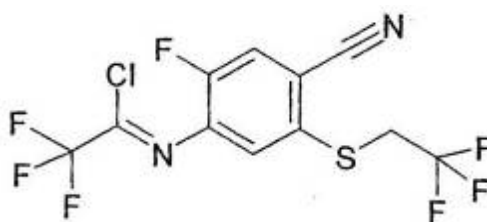
Ejemplo de síntesis 4-1 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de *N*-{4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-2,2,2-trifluoroacetamida

Se añadieron gota a gota 2,0 g (19,8 mmol) de trietilamina y una disolución de 4,0 g (19,0 mmol) de anhídrido trifluoroacético en 20 ml de diclorometano a una disolución de 4,0 g (16,0 mmol) de 4-amino-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benzonitrilo en 50 ml de diclorometano con enfriamiento con hielo, la temperatura volvió a temperatura ambiente sin ningún otro tratamiento y se agitó durante 1 hora. Después de terminada la reacción, se lavó la disolución de reacción con disolución salina saturada y se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 4,0 g del compuesto diana en forma de un aceite amarillo pálido (rendimiento: 78%).

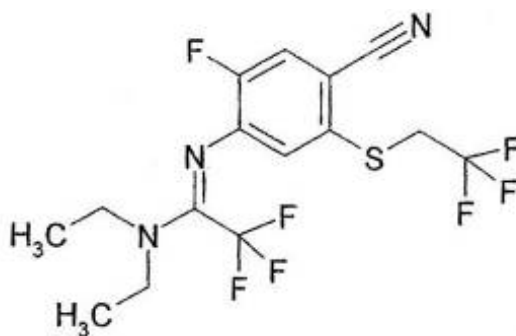
Ejemplo de síntesis 4-2 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de cloruro de *N*-{4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-2,2,2-trifluoroetanimidilo

Se añadieron gota a gota 12,0 g (45,8 mmol) de trifetilfosfina y 8,0 g (52,0 mmol) de tetracloruro de carbono a una disolución de 11,5 g (33,2 mmol) de *N*-{4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-2,2,2-trifluoroacetamida obtenida anteriormente en 100 ml de diclorometano aproximadamente a 30 °C, después, se calentó la mezcla a reflujo durante 5 horas. Después de terminada la reacción, se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 10,2 g del compuesto diana en forma de un aceite amarillo pálido (rendimiento: 84%).

Ejemplo de síntesis 4-3 (síntesis de sustancia final)

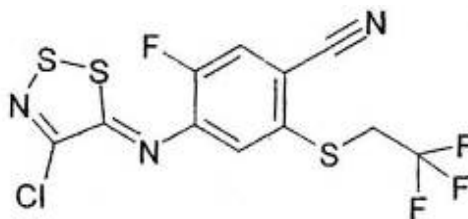


Síntesis de *N*-{4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-*N,N*-dietil-2,2,2-trifluoroetanimidamida

5

Se añadieron una disolución de 0,2 g (0,5 mmol) de cloruro de *N*-{4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-2,2,2-trifluoroetanimidilo obtenido anteriormente en 10 ml de acetonitrilo a una disolución de 0,2 g (2,7 mmol) de dietilamina en 30 ml de acetonitrilo, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 1 hora. Después de terminada la reacción, se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 0,15 g del compuesto diana en forma de un aceite incoloro (rendimiento: 68%, n_D^{20} 1,5187).

Ejemplo de síntesis 5-1 (síntesis de material en bruto)



10

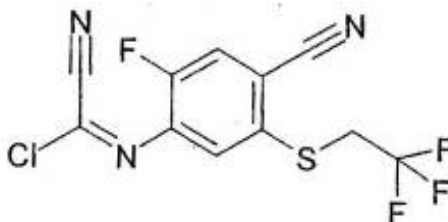
Síntesis de 4-[(4-cloro-5*H*-1,2,3-ditiazol-5-iliden)amino]-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benzonitrilo

15

Se añadieron 3,0 g (14,4 mmol) de cloruro de 4,5-dicloro-1,2,3-ditiazol-1-ilo a una disolución de 3,2 g (12,8 mmol) de 4-amino-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benzonitrilo en 50 ml de diclorometano, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 2 horas. Después, se añadió gota a gota a temperatura ambiente una disolución de 2,2 g (27,8 mmol) de piridina en 20 ml de diclorometano, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 1 hora sin ninguna otra operación. Después de terminada la reacción, se lavó la disolución de reacción con disolución salina saturada, se separó el disolvente mediante destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 4,1 g del compuesto diana en forma de un cristal amarillo (rendimiento: 83%).

20

Ejemplo de síntesis 5-2 (síntesis de material en bruto)

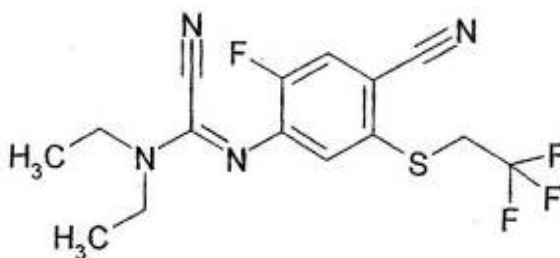


Síntesis de 1-[(cloro(ciano)metilen)amino]-4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benceno

25

Se calentaron a 200 °C 3 g de 4-[(4-cloro-5*H*-1,2,3-ditiazol-5-iliden)-amino]-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benzonitrilo obtenido anteriormente con agitación durante 5 minutos. Después de enfriar, se disolvió la sustancia de reacción en diclorometano y se eliminaron las sustancias insolubles mediante filtración. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 1,8 g del compuesto diana en forma de un cristal blanco (rendimiento: 72%).

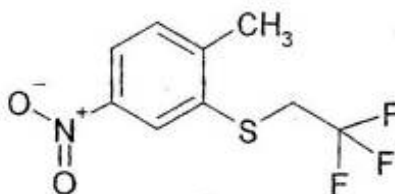
Ejemplo de síntesis 5-3 (síntesis de sustancia final)



Síntesis de 1-ciano-4-[(ciano(dietilamino)metilen)amino]-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benceno

Se añadió gota a gota una disolución de 0,3 g (0,9 mmol) de 1-[[cloro(ciano)metilen]amino]-4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benceno en 10 ml de acetonitrilo a una disolución de 0,2 g (2,7 mmol) de dietilamina en 30 ml de acetonitrilo, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 1 hora. Después de terminada la reacción, se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 0,2 g del compuesto diana en forma de un aceite incoloro (rendimiento: 60%, n_D^{20} 1,5538).

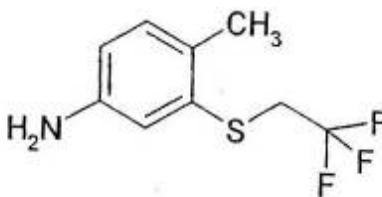
Ejemplo de síntesis 6-1 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 1-metil-4-nitro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benceno

Se agitó a 50 °C durante 1 hora una disolución de 1,1 g (7,1 mmol) de 2-fluoro-1-metil-4-nitrobenceno, 1,0 g (8,6 mmol) de 2,2,2-trifluoroetanotiol y 1,19 g (8,6 mmol) de carbonato de potasio en DMF. Se vertió la disolución de reacción en agua y se extrajo con acetato de etilo. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 0,49 g del compuesto diana en forma de un cristal blanco (rendimiento: 27%).

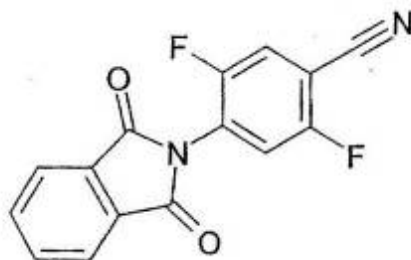
Ejemplo de síntesis 6-2 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 4-metil-3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]anilina

Se enfrió a 0 °C una disolución de 1,0 g (4 mmol) de 1-metil-4-nitro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benceno obtenido anteriormente y 1,9 g (8 mmol) de cloruro de níquel en metanol, y se añadieron en porciones 0,6 g (16 mmol) de borohidruro de sodio. Se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 1 hora. Se separó el disolvente por destilación y se añadió ácido clorhídrico 2 N al residuo. Después, se añadió amoníaco acuoso al 28% y se extrajo con acetato de etilo. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se lavó el residuo con hexano, obteniéndose 0,4 g (rendimiento: 45%) de un cristal.

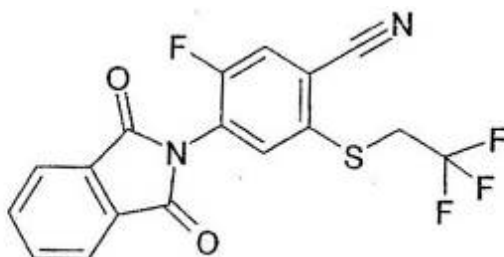
Ejemplo de síntesis 7-1 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 4-(1,3-dioxo-1,3-dihidro-2H-isoindol-2-il)-3,5-difluorobenzonitrilo

5 Se añadieron 20,0 g (108 mmol) de ftalimida de potasio a una disolución de 16,0 g (101,6 mmol) de 2,4,5-trifluorobenzonitrilo en 100 ml de DMF, y se calentó la mezcla a 100 °C con agitación durante 5 horas. Después de enfriar, se vertió la disolución de reacción en agua con hielo y se extrajo con un disolvente mezcla de acetato de etilo-THF, y se separó el disolvente por destilación a presión reducida. Se lavó el cristal restante con una pequeña cantidad de acetato de etilo, obteniéndose 24,7 g del compuesto diana en forma de un cristal blanco (rendimiento: 85%).

Ejemplo de síntesis 7-2 (síntesis de material en bruto)

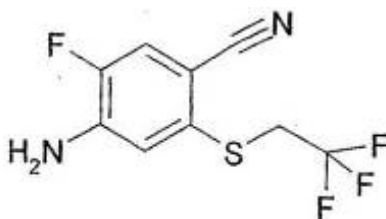


10

Síntesis de 4-(1,3-dioxo-1,3-dihidro-2H-isoindol-2-il)-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benzonitrilo

15 Se añadieron 5,0 g (36,2 mmol) de carbonato de potasio a una disolución de 8,5 g (29,9 mmol) de 4-(1,3-dioxo-1,3-dihidro-2H-isoindol-2-il)-2,5-difluorobenzonitrilo obtenido anteriormente en 100 ml de DMF y se añadió gota a gota una disolución de 3,5 g (30,1 mmol) de 2,2,2-trifluoroetanotiol en 100 ml de DMF con enfriamiento con hielo durante 1 hora. La temperatura volvió a temperatura ambiente y se agitó la mezcla durante 1 hora, después se vertió la disolución de reacción en agua con hielo y se extrajo con acetato de etilo. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, proporcionando un residuo que se utilizó en la reacción posterior sin purificación, obteniéndose 11,0 g (rendimiento: 97%) del compuesto diana en forma de una suspensión marrón.

Ejemplo de síntesis 7-3 (síntesis de material en bruto)

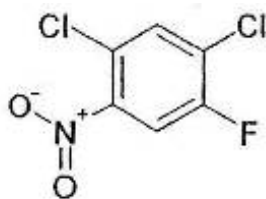


20

Síntesis de 4-amino-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benzonitrilo

25 Se añadieron 7,0 g (139,8 mmol) de hidrato de hidrazina a una disolución de 40,0 g (105,2 mmol) de 4-(1,3-dioxo-1,3-dihidro-2H-isoindol-2-il)-5-fluoro-2-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]benzonitrilo obtenido anteriormente en 150 ml de etanol, y se calentó la mezcla a reflujo durante 5 horas, después, la temperatura volvió a temperatura ambiente y se filtraron los materiales insolubles. Se separó el disolvente por destilación, se disolvió el residuo en acetato de etilo y se lavó con una disolución de hidróxido de sodio 1 N. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida y se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 10,0 g (rendimiento: 38%) del compuesto diana en forma de un cristal blanco.

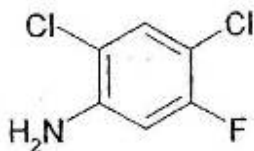
Ejemplo de síntesis 8-1 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 1,5-dicloro-2-fluoro-4-nitrobenzono

5 Se agitaron 5,0 g (30 mmol) de 2,4-dicloro-1-fluorobenceno en 40 ml de ácido sulfúrico concentrado con enfriamiento con hielo, y se añadieron 3,1 g (30 mmol) de nitrato de potasio a esta disolución agitada. La temperatura volvió a temperatura ambiente y se agitó la mezcla durante 12 horas, después, se vertió en agua con hielo y se extrajo con acetato de etilo. Se lavó la fase orgánica con agua y disolución salina saturada, después se secó sobre sulfato de sodio y se separó el disolvente por destilación a presión reducida, obteniéndose 6,2 g (rendimiento: 97%) del compuesto diana.

Ejemplo de síntesis 8-2 (síntesis de material en bruto)



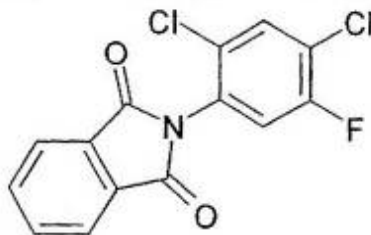
10

Síntesis de 2,4-dicloro-5-fluoroanilina

15 Se añadieron gradualmente 5,1 g (135 mmol) de borohidruro de sodio a una disolución de 10,7 g (45 mmol) de cloruro de níquel hexahidratado en 500 ml de metanol con enfriamiento con hielo. La temperatura volvió a temperatura ambiente y se agitó la mezcla durante 1 hora, después se añadieron 19,0 g (90 mmol) de 1,5-dicloro-2-fluoro-4-nitrobenzono obtenido anteriormente y se enfrió con hielo. Se añadieron gradualmente a esto 12,0 g (317 mmol) de borohidruro de sodio. Se agitó la mezcla durante 1 hora, después, se separó el disolvente por destilación a presión reducida. Se añadieron al residuo 150 ml de una disolución acuosa de ácido clorhídrico 1 N, 150 ml de amoníaco acuoso y 200 ml de acetato de etilo en este orden, y se agitó la mezcla. Se filtraron los materiales insolubles a través de Celite y se lavó una fase orgánica con disolución salina saturada, se secó sobre sulfato de sodio y se separó por destilación a presión reducida. Se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 14,8 g (rendimiento: 91%) del compuesto diana.

20

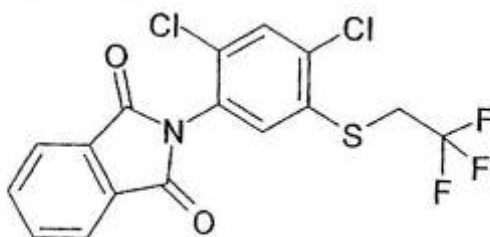
Ejemplo de síntesis 8-3 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 2-(2,4-dicloro-5-fluorofenil)-1H-isoindol-1,3(2H)-diona

25 Se calentó a reflujo durante 4 horas una mezcla de 3,0 g (16,7 mmol) de 2,4-dicloro-5-fluoroanilina y 2,5 g (16,7 mmol) de anhídrido ftálico en 40 ml de ácido acético. Se enfrió la mezcla a temperatura ambiente, después se separó el disolvente por destilación a presión reducida. Se lavó el residuo resultante con hexano y se filtró, obteniéndose 3,5 g (rendimiento: 68%) del compuesto diana.

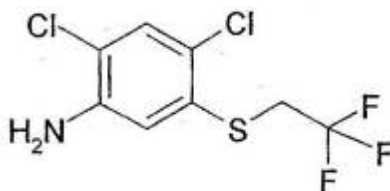
Ejemplo de síntesis 8-4 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 2-{2,4-dicloro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-1H-isoindol-1,3(2H)-diona

5 Se añadió 1,0 g (8,6 mmol) de 2,2,2-trifluoroetanotiol a una disolución de 2,6 g (8,6 mmol) de 2-{2,4-dicloro-5-fluorofenil}-1H-isoindol-1,3(2H)-diona obtenida anteriormente y 1,79 g (12,9 mmol) de carbonato de potasio en 20 ml de DMF con enfriamiento con hielo en atmósfera de argón, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 12 horas. Se diluyó la disolución con acetato de etilo, después, se lavó con agua y disolución salina saturada, después, se secó sobre sulfato de sodio. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, obteniéndose 2,8 g (rendimiento: 80%) del compuesto diana.

Ejemplo de síntesis 8-5 (síntesis de material en bruto)

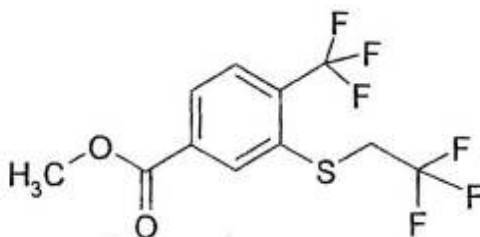


10

Síntesis de 2,4-dicloro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]anilina

15 Se añadieron 0,38 g (7,6 mmol) de hidrazina monohidratada a una disolución de 2,8 g (6,9 mmol) de 2-{2,4-dicloro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil}-1H-isoindol-1,3(2H)-diona obtenida anteriormente en 30 ml de etanol, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 12 horas. Se filtró el precipitado, se separó el disolvente por destilación a presión reducida y se purificó el residuo mediante cromatografía en gel de sílice, obteniéndose 1,4 g (rendimiento: 73%) del compuesto diana.

Ejemplo de síntesis 9-1 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]-4-(trifluorometil)benzoato de metilo

20 Se añadieron 10,0 g (86,1 mmol) de 2,2,2-trifluoroetanotiol y 12,0 g (86,8 mmol) de carbonato de potasio a una disolución de 14,0 g (63,0 mmol) de 3-fluoro-4-(trifluorometil)benzoato de metilo en 200 ml de acetonitrilo, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 15 horas. Se filtró la disolución de reacción para eliminar los materiales insolubles, después, se destiló el filtrado a presión reducida y se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 10,9 g (rendimiento: 54%) del compuesto diana en forma de un aceite marrón pálido.

25

Ejemplo de síntesis 9-2 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de ácido 3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]-4-(trifluorometil)benzoico

Se añadieron 100 ml de agua que contenía 2,0 g (50,0 mmol) de hidróxido de sodio disueltos en ella a una disolución de 7,2 g (22,6 mmol) de 3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]-4-(trifluorometil)benzoato de metilo obtenido anteriormente en 10 ml de dioxano, y se agitó la mezcla a temperatura ambiente durante 15 horas. Se lavó la disolución de reacción con tolueno, después, se añadió ácido clorhídrico concentrado a una fase acuosa hasta alcanzar pH 1, y se filtró el cristal depositado. Se secó el cristal filtrado, obteniéndose 5,2 g (rendimiento: 75%) del compuesto diana en forma de un cristal blanco.

Ejemplo de síntesis 9-3 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de cloruro 3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]-4-(trifluorometil)benzoico

Se añadieron 3 gotas de DMF y 4,0 g (33,6 mmol) de cloruro de tionilo a una disolución de 7,1 g (23,3 mmol) de ácido 3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]-4-(trifluorometil)benzoico obtenida anteriormente en 50 ml de 1,2-dicloroetano, y se calentó la mezcla a reflujo durante 5 horas. Después de terminada la reacción, se separó el disolvente por destilación a presión reducida, obteniéndose 7,4 g (rendimiento: 98%) de un compuesto diana amarillo pálido.

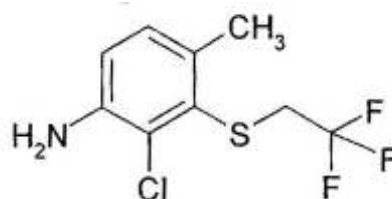
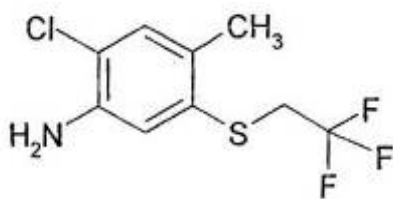
Ejemplo de síntesis 9-4 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]-4-(trifluorometil)anilina

Se añadieron 30 ml de tolueno y 200 mg de cloruro de trietilbencilamonio a una disolución acuosa de 50 ml de 1,4 g (21,5 mmol) de azida de sodio, y se añadió gota a gota lentamente una disolución de 6,0 g (18,6 mmol) de cloruro 3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]-4-(trifluorometil)benzoico obtenido anteriormente en 30 ml de tolueno con agitación vigorosa con enfriamiento con hielo. Después de terminado el goteo, la temperatura volvió a temperatura ambiente y se agitó vigorosamente la mezcla durante 1 hora a la misma temperatura, y se separó una fase orgánica y se secó sobre sulfato de magnesio. Se eliminó el sulfato de magnesio mediante filtración, después, se calentó a reflujo la disolución de filtrado de tolueno durante 5 horas sin ninguna otra operación, y la temperatura volvió a temperatura ambiente, después, se añadió gota a gota lentamente una disolución mixta de 20 ml de ácido acético y 20 ml de agua. Después de terminado el goteo, se calentó a reflujo la mezcla de nuevo durante 1 hora sin ninguna otra operación, y la temperatura de la disolución de reacción volvió a temperatura ambiente, después, se lavó la disolución de reacción con disolución salina saturada, después, con disolución saturada de hidrogenocarbonato de sodio. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en gel de sílice, obteniéndose 2,0 g (rendimiento: 39%) del compuesto diana en forma de un cristal blanco.

Ejemplo de síntesis 10 (síntesis de material en bruto)



Síntesis de 2-cloro-4-metil-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]anilina y 2-cloro-4-metil-3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]anilina

- 5 Se agitó a 70 °C durante 2 horas una disolución de 0,56 g (2,5 mmol) de 4-metil-3-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]anilina y 0,41 g (3 mmol) de *N*-clorosuccinimida en ácido acético. Se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se separó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose cada vez 0,07 g (rendimiento: 11%) de dos clases de isómeros del compuesto diana.

Ejemplo de síntesis 11 (síntesis de sustancia final)



Síntesis de *N*-[4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil]-*N*-[(etilamino)-carbonil]-2,2,2-trifluoroetanimidamida

- 10 Se añadieron 0,05 g (0,7 mmol) de etilisocianato a una disolución de 0,2 g (0,6 mmol) de *N*'-[4-ciano-2-fluoro-5-[(2,2,2-trifluoroetil)tio]fenil]-2,2,2-trifluoroetanimidamida en 50 ml de DMF, y se añadieron en porciones a temperatura ambiente 0,05 g (1,3 mmol) de hidruro de sodio (pureza: 60%). Se agitó la mezcla durante 15 horas a temperatura ambiente sin ninguna otra operación, después, se vertió la disolución de reacción en agua con hielo, se extrajo con acetato de etilo y se separó el disolvente por destilación a presión reducida, después, se purificó el residuo mediante cromatografía en columna de gel de sílice, obteniéndose 0,15 g (rendimiento: 62%, n_D^{20} 1,5215) del compuesto diana en forma de un aceite incoloro.

Los compuestos de fórmula (I), que pueden obtenerse de la misma manera que en los ejemplos de síntesis ejemplificados anteriormente de material en bruto y sustancia final, se muestran en la Tabla 1 y Tabla 2, y los compuestos de fórmula (IV-A) se muestran en la Tabla 3.

- 20 En los ejemplos de síntesis anteriormente mencionados, se muestran también en la Tabla 1 los compuestos diana correlacionados con la síntesis de sustancia final.

[TABLA 1]

Tabla 1

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n_D^{20} o p.f.
I-1	H	H	CF3	H	H	H	CN	0	
I-2	H	H	CF3	H	H	H	CN	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-3	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	0	1,5312
I-4	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	1	143-145
I-5	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	0	
I-6	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	1	
I-7	CH2CF3	H	CF3	H	H	H	CN	0	1,4942
I-8	CH2CF3	H	CF3	H	H	H	CN	1	
I-9	i-Pr	H	CF3	H	H	H	CN	0	51-53
I-10	i-Pr	H	CF3	H	H	H	CN	1	96-98
I-11	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	H	H	CN	0	1,5465
I-12	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	H	H	CN	1	
I-13	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	H	H	CN	0	
I-14	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	H	H	CN	1	
I-15	-CH2C≡CH	H	CF3	H	H	H	CN	0	85-86
I-16	-CH2C≡CH	H	CF3	H	H	H	CN	1	147-149
I-17	CH3	CH3	CN	H	H	H	CN	0	
I-18	CH3	CH3	CN	H	H	H	CN	1	
I-19	CH3	CH3	H	H	H	H	CN	0	
I-20	CH3	CH3	H	H	H	H	CN	1	
I-21	CH3	CH3	CH3	H	H	H	CN	0	
I-22	CH3	CH3	CH3	H	H	H	CN	1	
I-23	CH3	CH3	Ph	H	H	H	CN	0	
I-24	CH3	CH3	Ph	H	H	H	CN	1	
I-25	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	H	H	CN	0	
I-26	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	H	H	CN	1	
I-27	-CO-	CH3	-C2H4-	H	H	H	CN	0	
I-28	-CO-	CH3	-C2H4-	H	H	H	CN	1	
I-29	H	H	CF3	H	F	H	CN	0	145-146
I-30	H	H	CF3	H	F	H	CN	1	190-192
I-31	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	0	1,5217
I-32	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	1	109-112
I-33	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	0	1,53
I-34	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	1	158-159
I-35	C2H5	H	CF3	H	F	H	CN	0	
I-36	C2H5	H	CF3	H	F	H	CN	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-37	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,4853
I-38	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	120-124
I-39	n-Pr	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	87-89
I-40	n-Pr	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	87-90
I-41	i-Pr	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,5109
I-42	i-Pr	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	146-148
I-43	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,5187
I-44	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	F	H	CN	1	103-105
I-45	-CH ₂ CH ₂ -	-CH ₂ CH ₂ -	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,5433
I-46	-CH ₂ CH ₂ -	-CH ₂ CH ₂ -	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-47	-CH ₂ CH ₂ O-	-CH ₂ CH ₂ -	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,533
I-48	-CH ₂ CH ₂ O-	-CH ₂ CH ₂ -	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-49	cyc-Pr	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	77-78
I-50	cyc-Pr	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	129-131
I-51	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	79-88
I-52	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	50-54
I-53	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	77-78
I-54	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	1,5103
I-55	C ₂ H ₅	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CN	0	79-88
I-56	C ₂ H ₅	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-57	cyc-C ₆ H ₁₁	C ₂ H ₅	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,5305
I-58	cyc-C ₆ H ₁₁	C ₂ H ₅	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-59	Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	
I-60	Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-61	4-CF ₃ -Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	141-144
I-62	4-CF ₃ -Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	197-200
I-63	-CH ₂ Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	
I-64	-CH ₂ Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-65	-CH ₂ -4-CF ₃ -Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	99-103
I-66	-CH ₂ -4-CF ₃ -Ph	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-67	-OCH ₃	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	86-90
I-68	-OCH ₃	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	112-119
I-69	-OCH ₃	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,5123
I-70	-OCH ₃	CH ₃	CF ₃	H	F	H	CN	1	144-145
I-71	-CH ₂ CH ₂ OCH ₃	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	76-78

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-72	-CH ₂ CH ₂ OCH ₃	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	62-63
I-73	-CH ₂ CH ₂ N(CH ₃) ₂	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	73-76
I-74	-CH ₂ CH ₂ N(CH ₃) ₂	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-75	-CONHC ₂ H ₅	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	1,5215
I-76	-CONHC ₂ H ₅	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-77	-CONHPh	H	CF ₃	H	F	H	CN	0	
I-78	-CONHPh	H	CF ₃	H	F	H	CN	1	
I-79	H	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-80	H	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-81	CH ₃	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	1,5
I-82	CH ₃	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	135-137
I-83	CH ₃	CH ₃	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-84	CH ₃	CH ₃	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-85	C ₂ H ₅	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-86	C ₂ H ₅	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-87	CH ₂ CF ₃	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-88	CH ₂ CF ₃	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-89	n-Pr	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-90	n-Pr	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-91	i-Pr	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	1,4922
I-92	i-Pr	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	122-124
I-93	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	1,4998
I-94	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	97-100
I-95	-CH ₂ CH ₂ -	-CH ₂ CH ₂ -	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-96	-CH ₂ CH ₂ -	-CH ₂ CH ₂ -	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-97	cyc-Pr	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-98	cyc-Pr	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-99	-CH ₂ CH=CH ₂	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	
I-100	-CH ₂ CH=CH ₂	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	
I-101	-CH ₂ C≡CH	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	0	1,5505
I-102	-CH ₂ C≡CH	H	C ₂ F ₅	H	F	H	CN	1	127-129
I-103	H	H	C ₃ F ₇	H	F	H	CN	0	
I-104	H	H	C ₃ F ₇	H	F	H	CN	1	
I-105	CH ₃	H	C ₃ F ₇	H	F	H	CN	0	83-84
I-106	CH ₃	H	C ₃ F ₇	H	F	H	CN	1	122-125

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-107	CH3	CH3	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-108	CH3	CH3	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-109	C2H5	H	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-110	C2H5	H	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-111	CH2CF3	H	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-112	CH2CF3	H	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-113	n-Pr	H	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-114	n-Pr	H	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-115	i-Pr	H	C3F7	H	F	H	CN	0	1,479
I-116	i-Pr	H	C3F7	H	F	H	CN	1	95-98
I-117	CH2CH3	CH2CH3	C3F7	H	F	H	CN	0	1,487
I-118	CH2CH3	CH2CH3	C3F7	H	F	H	CN	1	99-101
I-119	-CH2CH2-	-CH2CH2-	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-120	-CH2CH2-	-CH2CH2-	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-121	cyc-Pr	H	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-122	cyc-Pr	H	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-123	-CH2CH=CH2	H	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-124	-CH2CH=CH2	H	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-125	-CH2C≡CH	H	C3F7	H	F	H	CN	0	
I-126	-CH2C≡CH	H	C3F7	H	F	H	CN	1	
I-127	H	H	CN	H	F	H	CN	0	107-111
I-128	H	H	CN	H	F	H	CN	1	
I-129	CH3	H	CN	H	F	H	CN	0	1,5505
I-130	CH3	H	CN	H	F	H	CN	1	182-185
I-131	i-Pr	H	CN	H	F	H	CN	0	1,5415
I-132	i-Pr	H	CN	H	F	H	CN	1	167-168
I-133	C2H5	C2H5	CN	H	F	H	CN	0	1,5538
I-134	C2H5	C2H5	CN	H	F	H	CN	1	157-159
I-135	CH3	CH3	H	H	F	H	CN	0	86-91
I-136	CH3	CH3	H	H	F	H	CN	1	
I-137	C2H5	C2H5	H	H	F	H	CN	0	1,5782
I-138	C2H5	C2H5	H	H	F	H	CN	1	
I-139	-C2H2-O-	-C2H4-	H	H	F	H	CN	0	
I-140	-C2H2-O-	-C2H4-	H	H	F	H	CN	1	
I-141	-C2H4-	-C2H4-	H	H	F	H	CN	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-142	-C2H4-	-C2H4-	H	H	F	H	CN	1	
I-143	-C2H4-	-C2H4-	H	H	F	H	CN	0	
I-144	-C2H4-	-C2H4-	H	H	F	H	CN	1	
I-145	CH3	CH3	CH3	H	F	H	CN	0	109-111
I-146	CH3	CH3	CH3	H	F	H	CN	1	131 -133
I-147	C2H5	C2H5	CH3	H	F	H	CN	0	1,559
I-148	C2H5	C2H5	CH3	H	F	H	CN	1	101-102
I-149	-C2H4-O-	-C2H4-	CH3	H	F	H	CN	0	102-103
I-150	-C2H4-O-	-C2H4-	CH3	H	F	H	CN	1	137-145
I-151	-C2H4-	-C2H4-	CH3	H	F	H	CN	0	1,5865
I-152	-C2H4-	-C2H4-	CH3	H	F	H	CN	1	94-96
I-153	-C2H4-	-C2H4-	CH3	H	F	H	CN	0	1,5792
I-154	-C2H4-	-C2H4-	CH3	H	F	H	CN	1	132-134
I-155	CH3	CH3	Ph	H	F	H	CN	0	1,5798
I-156	CH3	CH3	Ph	H	F	H	CN	1	
I-157	C2H5	C2H5	Ph	H	F	H	CN	0	
I-158	C2H5	C2H5	Ph	H	F	H	CN	1	
I-159	-C2H4-O-	-C2H4-	Ph	H	F	H	CN	0	
I-160	-C2H4-O-	-C2H4-	Ph	H	F	H	CN	1	
I-161	-C2H4-	-C2H4-	Ph	H	F	H	CN	0	
I-162	-C2H4-	-C2H4-	Ph	H	F	H	CN	1	
I-163	-C2H4-	-C2H4-	Ph	H	F	H	CN	0	
I-164	-C2H4-	-C2H4-	Ph	H	F	H	CN	1	
I-165	-C2H4-	CH3	-CH2-	H	F	H	CN	0	94-100
I-166	-C2H4-	CH3	-CH2-	H	F	H	CN	1	131-133
I-167	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	F	H	CN	0	93-98
I-168	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	F	H	CN	1	145-147
I-169	-CO-	CH3	-C2H4-	H	F	H	CN	0	124-127
I-170	-CO-	CH3	-C2H4-	H	F	H	CN	1	
I-171	H	H	CF3	H	Cl	H	CN	0	
I-172	H	H	CF3	H	Cl	H	CN	1	
I-173	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	0	
I-174	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	1	
I-175	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	0	
I-176	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-177	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	0	
I-178	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	1	
I-179	i-Pr	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	0	
I-180	i-Pr	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	1	
I-181	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	Cl	H	CN	0	
I-182	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	Cl	H	CN	1	
I-183	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	0	
I-184	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	1	
I-185	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	0	
I-186	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	Cl	H	CN	1	
I-187	CH ₃	CH ₃	CN	H	Cl	H	CN	0	
I-188	CH ₃	CH ₃	CN	H	Cl	H	CN	1	
I-189	CH ₃	CH ₃	H	H	Cl	H	CN	0	
I-190	CH ₃	CH ₃	H	H	Cl	H	CN	1	
I-191	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	Cl	H	CN	0	
I-192	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	Cl	H	CN	1	
I-193	CH ₃	CH ₃	Ph	H	Cl	H	CN	0	
I-194	CH ₃	CH ₃	Ph	H	Cl	H	CN	1	
I-195	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Cl	H	CN	0	
I-196	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Cl	H	CN	1	
I-197	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Cl	H	CN	0	
I-198	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Cl	H	CN	1	
I-199	H	H	CF ₃	H	Br	H	CN	0	
I-200	H	H	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-201	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	H	CN	0	
I-202	CH ₃	H	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-203	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	Br	H	CN	0	
I-204	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-205	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	Br	H	CN	0	
I-206	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-207	i-Pr	H	CF ₃	H	Br	H	CN	0	
I-208	i-Pr	H	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-209	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	Br	H	CN	0	
I-210	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-211	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	Br	H	CN	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-212	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-213	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	Br	H	CN	0	
I-214	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	Br	H	CN	1	
I-215	CH ₃	CH ₃	CN	H	Br	H	CN	0	
I-216	CH ₃	CH ₃	CN	H	Br	H	CN	1	
I-217	CH ₃	CH ₃	H	H	Br	H	CN	0	
I-218	CH ₃	CH ₃	H	H	Br	H	CN	1	
I-219	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	Br	H	CN	0	
I-220	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	Br	H	CN	1	
I-221	CH ₃	CH ₃	Ph	H	Br	H	CN	0	
I-222	CH ₃	CH ₃	Ph	H	Br	H	CN	1	
I-223	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Br	H	CN	0	
I-224	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Br	H	CN	1	
I-225	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Br	H	CN	0	
I-226	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	Br	H	CN	1	
I-227	H	H	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-228	H	H	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-229	CH ₃	H	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-230	CH ₃	H	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-231	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-232	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-233	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-234	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-235	i-Pr	H	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-236	i-Pr	H	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-237	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-238	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-239	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-240	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-241	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	I	H	CN	0	
I-242	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	I	H	CN	1	
I-243	CH ₃	CH ₃	CN	H	I	H	CN	0	
I-244	CH ₃	CH ₃	CN	H	I	H	CN	1	
I-245	CH ₃	CH ₃	H	H	I	H	CN	0	
I-246	CH ₃	CH ₃	H	H	I	H	CN	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-247	CH3	CH3	CH3	H	I	H	CN	0	
I-248	CH3	CH3	CH3	H	I	H	CN	1	
I-249	CH3	CH3	Ph	H	I	H	CN	0	
I-250	CH3	CH3	Ph	H	I	H	CN	1	
I-251	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	I	H	CN	0	
I-252	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	I	H	CN	1	
I-253	-CO-	CH3	-C2H4-	H	I	H	CN	0	
I-254	-CO-	CH3	-C2H4-	H	I	H	CN	1	
I-255	H	H	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-256	H	H	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-257	CH3	H	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-258	CH3	H	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-259	CH3	CH3	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-260	CH3	CH3	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-261	CH2CF3	H	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-262	CH2CF3	H	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-263	i-Pr	H	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-264	i-Pr	H	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-265	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-266	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-267	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-268	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-269	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	H	H	CN	0	
I-270	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	H	H	CN	1	
I-271	CH3	CH3	CN	Cl	H	H	CN	0	
I-272	CH3	CH3	CN	Cl	H	H	CN	1	
I-273	CH3	CH3	H	Cl	H	H	CN	0	
I-274	CH3	CH3	H	Cl	H	H	CN	1	
I-275	CH3	CH3	CH3	Cl	H	H	CN	0	
I-276	CH3	CH3	CH3	Cl	H	H	CN	1	
I-277	CH3	CH3	Ph	Cl	H	H	CN	0	
I-278	CH3	CH3	Ph	Cl	H	H	CN	1	
I-279	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	H	H	CN	0	
I-280	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	H	H	CN	1	
I-281	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	H	H	CN	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-282	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	H	H	CN	1	
I-283	H	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-284	H	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-285	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-286	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-287	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	0	
I-288	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	1	
I-289	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-290	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-291	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	H	0	73-76
I-292	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-293	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	H	0	
I-294	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	H	1	
I-295	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-296	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-297	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-298	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-299	CH3	CH3	CN	H	CN	H	H	0	
I-300	CH3	CH3	CN	H	CN	H	H	1	
I-301	CH3	CH3	H	H	CN	H	H	0	
I-302	CH3	CH3	H	H	CN	H	H	1	
I-303	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	H	0	
I-304	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	H	1	
I-305	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	H	0	
I-306	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	H	1	
I-307	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	0	
I-308	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	1	
I-309	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	0	
I-310	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	1	
I-311	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-312	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-313	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-314	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-315	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-316	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-317	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-318	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-319	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-320	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-321	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-322	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-323	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-324	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-325	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-326	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-327	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Cl	0	
I-328	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Cl	1	
I-329	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	0	
I-330	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	1	
I-331	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-332	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-333	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Cl	0	
I-334	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Cl	1	
I-335	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	0	
I-336	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	1	
I-337	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	0	
I-338	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	1	
I-339	H	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-340	H	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-341	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-342	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-343	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-344	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-345	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-346	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-347	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-348	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-349	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-350	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-351	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-352	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-353	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-354	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-355	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Br	0	
I-356	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Br	1	
I-357	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Br	0	
I-358	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Br	1	
I-359	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Br	0	
I-360	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Br	1	
I-361	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Br	0	
I-362	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Br	1	
I-363	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	0	
I-364	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	1	
I-365	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	0	
I-366	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	1	
I-367	H	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-368	H	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-369	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-370	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-371	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-372	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-373	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-374	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-375	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-376	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-377	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-378	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-379	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-380	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-381	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-382	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-383	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	I	0	
I-384	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	I	1	
I-385	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	0	
I-386	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-387	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	I	0	
I-388	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	I	1	
I-389	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	I	0	
I-390	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	I	1	
I-391	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	0	
I-392	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	1	
I-393	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	0	
I-394	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	1	
I-395	H	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-396	H	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-397	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-398	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-399	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-400	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-401	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-402	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-403	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-404	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-405	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-406	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-407	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-408	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-409	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-410	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-411	CH3	CH3	CN	Cl	CN	H	H	0	
I-412	CH3	CH3	CN	Cl	CN	H	H	1	
I-413	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	H	0	
I-414	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	H	1	
I-415	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	H	0	
I-416	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	H	1	
I-417	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	H	0	
I-418	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	H	1	
I-419	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	0	
I-420	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	1	
I-421	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-422	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	1	
I-423	H	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	1,4625
I-424	H	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	193-195
I-425	CH3	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	1,4713
I-426	CH3	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	81-82
I-427	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-428	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-429	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-430	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-431	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-432	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-433	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-434	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-435	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-436	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-437	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-438	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-439	CH3	CH3	CN	H	CN	H	CF3	0	
I-440	CH3	CH3	CN	H	CN	H	CF3	1	
I-441	CH3	CH3	H	H	CN	H	CF3	0	
I-442	CH3	CH3	H	H	CN	H	CF3	1	
I-443	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CF3	0	
I-444	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CF3	1	
I-445	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CF3	0	
I-446	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CF3	1	
I-447	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	0	
I-448	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	1	
I-449	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	0	
I-450	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	1	
I-451	H	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-452	H	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-453	CH3	H	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-454	CH3	H	CF3	H	CN	H	CF3	1	
I-455	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CF3	0	
I-456	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CF3	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-457	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-458	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-459	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-460	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-461	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-462	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-463	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-464	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-465	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-466	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-467	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	0	
I-468	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	1	
I-469	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CF ₃	0	
I-470	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CF ₃	1	
I-471	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-472	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-473	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CF ₃	0	
I-474	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CF ₃	1	
I-475	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	0	
I-476	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	1	
I-477	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	0	
I-478	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	1	
I-479	H	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-480	H	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-481	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-482	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-483	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-484	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-485	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-486	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-487	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-488	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-489	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-490	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-491	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-492	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-493	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-494	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-495	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	0	
I-496	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	1	
I-497	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CF ₃	0	
I-498	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CF ₃	1	
I-499	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-500	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-501	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CF ₃	0	
I-502	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CF ₃	1	
I-503	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	0	
I-504	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	1	
I-505	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	0	
I-506	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CF ₃	1	
I-507	H	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-508	H	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-509	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-510	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-511	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-512	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-513	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-514	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-515	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-516	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-517	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-518	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-519	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-520	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-521	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-522	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-523	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	0	
I-524	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	1	
I-525	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CF ₃	0	
I-526	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CF ₃	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-527	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CF3	0	
I-528	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CF3	1	
I-529	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CF3	0	
I-530	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CF3	1	
I-531	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	0	
I-532	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	1	
I-533	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	0	
I-534	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	1	
I-535	H	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-536	H	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-537	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-538	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-539	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-540	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-541	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-542	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-543	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-544	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-545	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-546	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-547	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-548	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-549	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-550	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-551	CH3	CH3	CN	Cl	CN	H	CF3	0	
I-552	CH3	CH3	CN	Cl	CN	H	CF3	1	
I-553	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	CF3	0	
I-554	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	CF3	1	
I-555	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	CF3	0	
I-556	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	CF3	1	
I-557	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	CF3	0	
I-558	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	CF3	1	
I-559	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CF3	0	
I-560	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CF3	1	
I-561	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CF3	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-562	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CF3	1	
I-563	H	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-564	H	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-565	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-566	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-567	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	0	
I-568	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	1	
I-569	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-570	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-571	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-572	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-573	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	H	0	
I-574	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	H	1	
I-575	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-576	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-577	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-578	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-579	CH3	CH3	CN	H	CN	H	H	0	
I-580	CH3	CH3	CN	H	CN	H	H	1	
I-581	CH3	CH3	H	H	CN	H	H	0	
I-582	CH3	CH3	H	H	CN	H	H	1	
I-583	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	H	0	
I-584	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	H	1	
I-585	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	H	0	
I-586	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	H	1	
I-587	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	0	
I-588	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	1	
I-589	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	0	
I-590	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	1	
I-591	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-592	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-593	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-594	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-595	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-596	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-597	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-598	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-599	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-600	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-601	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-602	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-603	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-604	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-605	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-606	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-607	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Cl	0	
I-608	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Cl	1	
I-609	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	0	
I-610	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	1	
I-611	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-612	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-613	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Cl	0	
I-614	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Cl	1	
I-615	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	0	
I-616	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	1	
I-617	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	0	
I-618	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	1	
I-619	H	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-620	H	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-621	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-622	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-623	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-624	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-625	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-626	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-627	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-628	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-29	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-630	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-631	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-632	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-633	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-634	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-635	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Br	0	
I-636	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	Br	1	
I-637	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Br	0	
I-638	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Br	1	
I-639	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Br	0	
I-640	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Br	1	
I-641	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Br	0	
I-642	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Br	1	
I-643	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	0	
I-644	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	1	
I-645	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	0	
I-646	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	1	
I-647	H	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-648	H	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-649	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-650	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-651	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-652	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-653	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-654	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-655	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-656	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-657	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-658	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-659	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-660	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-661	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-662	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-663	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	I	0	
I-664	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	I	1	
I-665	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	0	
I-666	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-667	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	I	0	
I-668	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	I	1	
I-669	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	I	0	
I-670	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	I	1	
I-671	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	0	
I-672	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	1	
I-673	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	0	
I-674	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	1	
I-675	H	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-676	H	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-677	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-678	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-679	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-680	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-681	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-682	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-683	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-684	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-685	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-686	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-687	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-688	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-689	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-690	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-691	CH3	CH3	CN	Cl	CN	H	H	0	
I-692	CH3	CH3	CN	Cl	CN	H	H	1	
I-693	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	H	0	
I-694	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	H	1	
I-695	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	H	0	
I-696	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	H	1	
I-697	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	H	0	
I-698	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	H	1	
I-699	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	0	
I-700	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	1	
I-701	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-702	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	1	
I-703	H	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-704	H	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-705	CH3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-706	CH3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-707	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-708	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-709	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-710	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-711	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-712	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-713	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-714	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-715	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-716	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-717	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-718	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-719	CH3	CH3	H	H	CN	H	CHF2	0	
I-720	CH3	CH3	H	H	CN	H	CHF2	1	
I-721	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CHF2	0	
I-722	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CHF2	1	
I-723	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CHF2	0	
I-724	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CHF2	1	
I-725	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	0	
I-726	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	1	
I-727	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	0	
I-728	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	1	
I-729	H	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-730	H	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-731	CH3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-732	CH3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-733	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-734	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-735	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-736	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-737	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-738	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-739	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-740	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-741	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-742	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-743	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-744	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-745	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-746	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-747	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-748	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-749	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-750	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-751	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-752	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-753	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-754	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-755	H	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-756	H	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-757	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-758	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-759	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-760	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-761	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-762	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-763	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-764	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-765	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-766	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-767	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-768	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-769	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	0	
I-770	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CHF ₂	1	
I-771	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CHF ₂	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-772	CH3	CH3	H	H	CN	H	CHF2	1	
I-773	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CHF2	0	
I-774	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CHF2	1	
I-775	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CHF2	0	
I-776	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CHF2	1	
I-777	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	0	
I-778	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	1	
I-779	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	0	
I-780	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	1	
I-781	H	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-782	H	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-783	CH3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-784	CH3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-785	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-786	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-787	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-788	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-789	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-790	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-791	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-792	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-793	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-794	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-795	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CHF2	0	
I-796	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CHF2	1	
I-797	CH3	CH3	H	H	CN	H	CHF2	0	
I-798	CH3	CH3	H	H	CN	H	CHF2	1	
I-799	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CHF2	0	
I-800	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CHF2	1	
I-801	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CHF2	0	
I-802	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CHF2	1	
I-803	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	0	
I-804	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	1	
I-805	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	0	
I-806	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CHF2	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-807	H	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-808	H	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-809	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-810	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-811	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-812	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-813	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-814	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-815	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-816	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-817	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-818	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-819	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-820	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-821	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-822	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-823	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-824	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-825	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-826	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-827	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-828	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-829	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-830	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-831	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CHF2	0	
I-832	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CHF2	1	
I-833	H	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-834	H	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-835	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-836	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-837	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	0	
I-838	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	1	
I-839	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-840	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-841	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	H	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-842	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	H	1	
I-843	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	H	0	
I-844	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	H	1	
I-845	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	H	0	
I-846	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	H	1	
I-847	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	H	0	
I-848	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	H	1	
I-849	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	H	0	
I-850	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	H	1	
I-851	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	H	0	
I-852	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	H	1	
I-853	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	H	0	
I-854	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	H	1	
I-855	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	H	0	
I-856	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	H	1	
I-857	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	H	0	
I-858	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	H	1	
I-859	H	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-860	H	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-861	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-862	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-863	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-864	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-865	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-866	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-867	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-868	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-869	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-870	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-871	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-872	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-873	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-874	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-875	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	0	
I-876	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-877	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	0	
I-878	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	1	
I-879	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	0	
I-880	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	1	
I-881	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	
I-882	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-883	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	
I-884	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-885	H	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-886	H	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-887	CH3	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-888	CH3	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-889	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-890	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-891	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-892	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-893	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-894	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-895	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-896	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-897	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-898	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-899	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-900	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-901	CH3	CH3	H	H	CN	H	Br	0	
I-902	CH3	CH3	H	H	CN	H	Br	1	
I-903	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Br	0	
I-904	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Br	1	
I-905	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Br	0	
I-906	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Br	1	
I-907	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	0	
I-908	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	1	
I-909	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	0	
I-910	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	1	
I-911	H	H	CF3	H	CN	H	I	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-912	H	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-913	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-914	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-915	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-916	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-917	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-918	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-919	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-920	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-921	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-922	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-923	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-924	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-925	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-926	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-927	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	0	
I-928	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	1	
I-929	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	I	0	
I-930	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	I	1	
I-931	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	I	0	
I-932	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	I	1	
I-933	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	I	0	
I-934	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	I	1	
I-935	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	I	0	
I-936	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	I	1	
I-937	H	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-938	H	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-939	CH ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-940	CH ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-941	CH ₃	CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-942	CH ₃	CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-943	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-944	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-945	i-Pr	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-946	i-Pr	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-947	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-948	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-949	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-950	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-951	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-952	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-953	CH ₃	CH ₃	H	Cl	CN	H	H	0	
I-954	CH ₃	CH ₃	H	Cl	CN	H	H	1	
I-955	CH ₃	CH ₃	CH ₃	Cl	CN	H	H	0	
I-956	CH ₃	CH ₃	CH ₃	Cl	CN	H	H	1	
I-957	CH ₃	CH ₃	Ph	Cl	CN	H	H	0	
I-958	CH ₃	CH ₃	Ph	Cl	CN	H	H	1	
I-959	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	Cl	CN	H	H	0	
I-960	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	Cl	CN	H	H	1	
I-961	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	Cl	CN	H	H	0	
I-962	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	Cl	CN	H	H	1	
I-963	H	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-964	H	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-965	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-966	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-967	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-968	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-969	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-970	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-971	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-972	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-973	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-974	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-975	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-976	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-977	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-978	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-979	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CH ₃	0	
I-980	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CH ₃	1	
I-981	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CH ₃	0	1,5463

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-982	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CH3	1	1,5472
I-983	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CH3	0	
I-984	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CH3	1	
I-985	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	0	
I-986	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	1	
I-987	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	0	
I-988	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	1	
I-989	H	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-990	H	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-991	CH3	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	1,517
I-992	CH3	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-993	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-994	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-995	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-996	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-997	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-998	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-999	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1000	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1001	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1002	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1003	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1004	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1005	CH3	CH3	H	H	CN	H	CH3	0	
I-1006	CH3	CH3	H	H	CN	H	CH3	1	
I-1007	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CH3	0	
I-1008	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CH3	1	
I-1009	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CH3	0	
I-1010	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CH3	1	
I-1011	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	0	
I-1012	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	1	
I-1013	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	0	
I-1014	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	1	
I-1015	H	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1016	H	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1017	CH3	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1018	CH3	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1019	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1020	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1021	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1022	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1023	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1024	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1025	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1026	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1027	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1028	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1029	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1030	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1031	CH3	CH3	H	H	CN	H	CH3	0	
I-1032	CH3	CH3	H	H	CN	H	CH3	1	
I-1033	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CH3	0	
I-1034	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CH3	1	
I-1035	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CH3	0	
I-1036	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CH3	1	
I-1037	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	0	
I-1038	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	1	
I-1039	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	0	
I-1040	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CH3	1	
I-1041	H	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1042	H	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1043	CH3	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1044	CH3	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1045	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1046	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1047	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1048	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1049	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CH3	0	
I-1050	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	CH3	1	
I-1051	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	CH3	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1052	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1053	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-1054	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1055	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-1056	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1057	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CH ₃	0	
I-1058	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1059	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CH ₃	0	
I-1060	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1061	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CH ₃	0	
I-1062	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1063	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CH ₃	0	
I-1064	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1065	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CH ₃	0	
I-1066	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	CH ₃	1	
I-1067	H	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1068	H	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1069	CH ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1070	CH ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1071	CH ₃	CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1072	CH ₃	CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1073	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1074	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1075	i-Pr	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1076	i-Pr	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1077	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1078	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1079	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1080	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1081	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1082	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1083	CH ₃	CH ₃	H	Cl	CN	H	CH ₃	0	
I-1084	CH ₃	CH ₃	H	Cl	CN	H	CH ₃	1	
I-1085	CH ₃	CH ₃	CH ₃	Cl	CN	H	CH ₃	0	1,5516
I-1086	CH ₃	CH ₃	CH ₃	Cl	CN	H	CH ₃	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1087	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	CH3	0	
I-1088	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	CH3	1	
I-1089	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CH3	0	
I-1090	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CH3	1	
I-1091	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CH3	0	
I-1092	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	CH3	1	
I-1093	H	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1094	H	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1095	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1096	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1097	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1098	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1099	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1100	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1101	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1102	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1103	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1104	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1105	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1106	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1107	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	H	0	
I-1108	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	H	1	
I-1109	CH3	CH3	H	H	CN	H	H	0	
I-1110	CH3	CH3	H	H	CN	H	H	1	
I-1111	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	H	0	
I-1112	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	H	1	
I-1113	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	H	0	
I-1114	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	H	1	
I-1115	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	0	
I-1116	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	1	
I-1117	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	0	
I-1118	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	H	1	
I-1119	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1120	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1121	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1122	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1123	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1124	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1125	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1126	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1127	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1128	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1129	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1130	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1131	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1132	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1133	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1134	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1135	CH3	CH3	H	H	CN	H	Cl	0	
I-1136	CH3	CH3	H	H	CN	H	Cl	1	
I-1137	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	0	
I-1138	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	1	
I-1139	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	0	
I-1140	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	1	
I-1141	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	
I-1142	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-1143	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	
I-1144	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-1145	H	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-1146	H	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-1147	CH3	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-1148	CH3	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-1149	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-1150	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-1151	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-1152	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-1153	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-1154	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Br	1	
I-1155	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Br	0	
I-1156	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Br	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1157	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1158	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1159	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1160	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1161	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Br	0	
I-1162	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Br	1	
I-1163	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1164	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1165	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Br	0	
I-1166	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Br	1	
I-1167	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	0	
I-1168	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	1	
I-1169	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	0	
I-1170	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Br	1	
I-1171	H	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1172	H	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1173	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1174	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1175	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1176	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1177	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1178	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1179	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1180	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1181	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1182	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1183	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1184	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1185	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	0	
I-1186	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	I	1	
I-1187	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	0	
I-1188	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	I	1	
I-1189	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	I	0	
I-1190	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	I	1	
I-1191	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	I	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1192	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	I	1	
I-1193	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	0	
I-1194	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	1	
I-1195	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	0	
I-1196	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	I	1	
I-1197	H	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1198	H	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1199	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1200	CH3	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1201	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1202	CH3	CH3	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1203	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1204	CH2CF3	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1205	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1206	i-Pr	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1207	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1208	CH2CH3	CH2CH3	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1209	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1210	-CH2CH=CH2	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1211	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	H	0	
I-1212	-CH2C≡CH	H	CF3	Cl	CN	H	H	1	
I-1213	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	H	0	
I-1214	CH3	CH3	H	Cl	CN	H	H	1	
I-1215	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	H	0	
I-1216	CH3	CH3	CH3	Cl	CN	H	H	1	
I-1217	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	H	0	
I-1218	CH3	CH3	Ph	Cl	CN	H	H	1	
I-1219	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	0	
I-1220	-C2H4-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	1	
I-1221	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	0	
I-1222	-CO-	CH3	-C2H4-	Cl	CN	H	H	1	
I-1223	H	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1224	H	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1225	CH3	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1226	CH3	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1227	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1228	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1229	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1230	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1231	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1232	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1233	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	NO2	0	1,5743
I-1234	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	NO2	1	112-114
I-1235	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1236	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1237	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1238	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1239	CH3	CH3	CN	H	CN	H	NO2	0	
I-1240	CH3	CH3	CN	H	CN	H	NO2	1	
I-1241	CH3	CH3	H	H	CN	H	NO2	0	
I-1242	CH3	CH3	H	H	CN	H	NO2	1	
I-1243	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	NO2	0	
I-1244	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	NO2	1	
I-1245	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	NO2	0	
I-1246	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	NO2	1	
I-1247	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	NO2	0	
I-1248	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	NO2	1	
I-1249	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	NO2	0	
I-1250	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	NO2	1	
I-1251	H	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1252	H	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1253	CH3	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1254	CH3	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1255	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1256	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1257	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1258	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1259	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	NO2	0	
I-1260	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	NO2	1	
I-1261	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	NO2	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1262	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1263	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1264	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1265	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1266	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1267	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1268	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1269	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1270	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1271	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1272	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1273	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1274	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1275	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1276	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1277	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	NO ₂	0	
I-1278	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	NO ₂	1	
I-1279	H	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1280	H	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1281	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1282	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1283	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1284	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1285	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1286	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1287	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1288	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1289	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1290	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1291	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1292	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1293	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1294	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	CF ₃	1	
I-1295	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	0	
I-1296	CH ₃	CH ₃	CN	H	CN	H	CF ₃	1	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1297	CH3	CH3	H	H	CN	H	CF3	0	
I-1298	CH3	CH3	H	H	CN	H	CF3	1	
I-1299	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CF3	0	
I-1300	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	CF3	1	
I-1301	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CF3	0	
I-1302	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	CF3	1	
I-1303	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	0	
I-1304	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	1	
I-1305	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	0	
I-1306	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	CF3	1	
I-1307	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	93-100
I-1308	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1309	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	1,5282
I-1310	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1311	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1312	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1313	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1314	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1315	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1316	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1317	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1318	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1319	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1320	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1321	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1322	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1323	CH3	CH3	H	H	CN	H	Cl	0	
I-1324	CH3	CH3	H	H	CN	H	Cl	1	
I-1325	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	0	
I-1326	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	1	
I-1327	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	0	
I-1328	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	1	
I-1329	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	
I-1330	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-1331	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1332	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-1333	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1334	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1335	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1336	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1337	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1338	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1339	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1340	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1341	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1342	i-Pr	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1343	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1344	CH2CH3	CH2CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1345	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1346	-CH2CH=CH2	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1347	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1348	-CH2C≡CH	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1349	CH3	CH3	H	H	CN	H	Cl	0	
I-1350	CH3	CH3	H	H	CN	H	Cl	1	
I-1351	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	0	
I-1352	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Cl	1	
I-1353	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	0	
I-1354	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Cl	1	
I-1355	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	
I-1356	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-1357	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	0	
I-1358	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Cl	1	
I-1359	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1360	H	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1361	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1362	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1363	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1364	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	1	
I-1365	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	0	
I-1366	CH2CF3	H	CF3	H	CN	H	Cl	1	

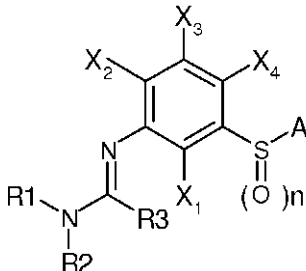
(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1367	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-1368	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-1369	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-1370	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-1371	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-1372	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-1373	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-1374	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-1375	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	0	
I-1376	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Cl	1	
I-1377	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Cl	0	
I-1378	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	CN	H	Cl	1	
I-1379	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Cl	0	
I-1380	CH ₃	CH ₃	Ph	H	CN	H	Cl	1	
I-1381	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	0	
I-1382	-C ₂ H ₄ -	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	1	
I-1383	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	0	
I-1384	-CO-	CH ₃	-C ₂ H ₄ -	H	CN	H	Cl	1	
I-1385	H	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1386	H	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1387	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1388	CH ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1389	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1390	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1391	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1392	CH ₂ CF ₃	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1393	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1394	i-Pr	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1395	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1396	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₃	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1397	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1398	-CH ₂ CH=CH ₂	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1399	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	0	
I-1400	-CH ₂ C≡CH	H	CF ₃	H	CN	H	Br	1	
I-1401	CH ₃	CH ₃	H	H	CN	H	Br	0	

(continuación)

N.º de comp.	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	n	n _D ²⁰ o p.f.
I-1402	CH3	CH3	H	H	CN	H	Br	1	
I-1403	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Br	0	
I-1404	CH3	CH3	CH3	H	CN	H	Br	1	
I-1405	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Br	0	
I-1406	CH3	CH3	Ph	H	CN	H	Br	1	
I-1407	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	0	
I-1408	-C2H4-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	1	
I-1409	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	0	
I-1410	-CO-	CH3	-C2H4-	H	CN	H	Br	1	

[TABLA 2] (No es según la invención)

Table 2										
N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-1	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	CH3	0	
II-2	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	CH3	1	
II-3	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	CH3	0	1,597
II-4	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	CH3	1	
II-5	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	CH3	0	
II-6	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	CH3	1	
II-7	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	CH3	0	
II-8	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	CH3	1	
II-9	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	CH3	0	
II-10	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	CH3	1	
II-11	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	CH3	0	
II-12	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	CH3	1	
II-13	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	CH3	0	
II-14	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	CH3	1	
II-15	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	CH3	0	
II-16	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	CH3	1	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-17	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	CH3	0	
II-18	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	CH3	1	
II-19	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	CH3	0	
II-20	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	CH3	1	
II-21	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	CH3	0	
II-22	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	CH3	1	
II-23	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	CH3	0	
II-24	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	CH3	1	
II-25	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	CH3	0	
II-26	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	CH3	1	
II-27	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	CH3	0	
II-28	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	CH3	1	
II-29	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	CH3	0	
II-30	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	CH3	1	
II-31	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	CH3	0	
II-32	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	CH3	1	
II-33	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	CH3	0	
II-34	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	CH3	1	
II-35	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	CH3	0	
II-36	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	CH3	1	
II-37	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	CH3	0	
II-38	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	CH3	1	
II-39	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	CH3	0	
II-40	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	CH3	1	
II-41	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH3	0	
II-42	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH3	1	
II-43	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH3	0	
II-44	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH3	1	
II-45	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	CH3	0	
II-46	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	CH3	1	
II-47	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	CH3	0	
II-48	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	CH3	1	
II-49	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-50	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH3	1	
II-51	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH3	0	
II-52	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH3	1	
II-53	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	CH3	0	
II-54	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	CH3	1	
II-55	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	CH3	0	
II-56	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	CH3	1	
II-57	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	CH3	0	
II-58	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	CH3	1	
II-59	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	CH3	0	
II-60	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	CH3	1	
II-61	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	CH3	0	
II-62	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	CH3	1	
II-63	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	CH3	0	
II-64	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	CH3	1	
II-65	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	CH3	0	
II-66	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	CH3	1	
II-67	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	CH3	0	
II-68	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	CH3	1	
II-69	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	CH3	0	
II-70	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	CH3	1	
II-71	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	CH3	0	
II-72	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	CH3	1	
II-73	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	CH3	0	
II-74	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	CH3	1	
II-75	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	CH3	0	
II-76	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	CH3	1	
II-77	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	CH3	0	
II-78	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	CH3	1	
II-79	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	CH3	0	
II-80	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	CH3	1	
II-81	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	CH3	0	
II-82	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	CH3	1	
II-83	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-84	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	CH3	1	
II-85	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	CH3	0	
II-86	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	CH3	1	
II-87	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	CH3	0	
II-88	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	CH3	1	
II-89	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	CH3	0	
II-90	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	CH3	1	
II-91	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	CH3	0	
II-92	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	CH3	1	
II-93	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	CH3	0	
II-94	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	CH3	1	
II-95	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	CH3	0	
II-96	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	CH3	1	
II-97	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	CH2CH3	0	
II-98	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	CH2CH3	1	
II-99	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	CH2CH3	0	
II-100	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	CH2CH3	1	
II-101	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	CH2CH3	0	
II-102	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	CH2CH3	1	
II-103	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	CH2CH3	0	
II-104	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	CH2CH3	1	
II-105	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH3	0	
II-106	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH3	1	
II-107	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH3	0	
II-108	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH3	1	
II-109	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	CH2CH3	0	
II-110	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	CH2CH3	1	
II-111	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	CH2CH3	0	
II-112	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	CH2CH3	1	
II-113	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH3	0	
II-114	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH3	1	
II-115	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH3	0	
II-116	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH3	1	
II-117	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-118	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH3	1	
II-119	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH3	0	
II-120	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH3	1	
II-121	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH3	0	
II-122	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH3	1	
II-123	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH3	0	
II-124	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH3	1	
II-125	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH3	0	
II-126	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH3	1	
II-127	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH3	0	
II-128	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH3	1	
II-129	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH3	0	
II-130	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH3	1	
II-131	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH3	0	
II-132	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH3	1	
II-133	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH3	0	
II-134	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH3	1	
II-135	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH3	0	
II-136	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH3	1	
II-137	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH3	0	
II-138	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH3	1	
II-139	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH3	0	
II-140	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH3	1	
II-141	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH3	0	
II-142	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH3	1	
II-143	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH3	0	
II-144	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH3	1	
II-145	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH3	0	
II-146	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH3	1	
II-147	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH3	0	
II-148	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH3	1	
II-149	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH3	0	
II-150	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH3	1	
II-151	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-152	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH3	1	
II-153	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH3	0	
II-154	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH3	1	
II-155	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH3	0	
II-156	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH3	1	
II-157	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH3	0	
II-158	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH3	1	
II-159	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH3	0	
II-160	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH3	1	
II-161	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH3	0	
II-162	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH3	1	
II-163	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH3	0	
II-164	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH3	1	
II-165	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH3	0	
II-166	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH3	1	
II-167	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH3	0	
II-168	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH3	1	
II-169	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH3	0	
II-170	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH3	1	
II-171	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH3	0	
II-172	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH3	1	
II-173	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH3	0	
II-174	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH3	1	
II-175	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH3	0	
II-176	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH3	1	
II-177	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH3	0	
II-178	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH3	1	
II-179	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH3	0	
II-180	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH3	1	
II-181	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH3	0	
II-182	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH3	1	
II-183	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH3	0	
II-184	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH3	1	
II-185	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-186	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH3	1	
II-187	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH3	0	
II-188	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH3	1	
II-189	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH3	0	
II-190	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH3	1	
II-191	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH3	0	
II-192	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH3	1	
II-193	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	CH2CH2CH3	0	
II-194	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	CH2CH2CH3	1	
II-195	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	CH2CH2CH3	0	
II-196	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	CH2CH2CH3	1	
II-197	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	0	
II-198	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	1	
II-199	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	0	94-90
II-200	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	1	
II-201	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH2CH3	0	
II-202	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH2CH3	1	
II-203	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH2CH3	0	
II-204	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	CH2CH2CH3	1	
II-205	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	CH2CH2CH3	0	
II-206	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-207	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	CH2CH2CH3	0	
II-208	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-209	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-210	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-211	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-212	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-213	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH2CH3	0	
II-214	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH2CH3	1	
II-215	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH2CH3	0	
II-216	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	CH2CH2CH3	1	
II-217	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH2CH3	0	
II-218	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH2CH3	1	
II-219	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-220	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	CH2CH2CH3	1	
II-221	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH2CH3	0	
II-222	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-223	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH2CH3	0	
II-224	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-225	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-226	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-227	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-228	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-229	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH2CH3	0	
II-230	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH2CH3	1	
II-231	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH2CH3	0	
II-232	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	CH2CH2CH3	1	
II-233	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH2CH3	0	
II-234	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH2CH3	1	
II-235	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH2CH3	0	
II-236	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	CH2CH2CH3	1	
II-237	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH2CH3	0	
II-238	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-239	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH2CH3	0	
II-240	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-241	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-242	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-243	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-244	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-245	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH2CH3	0	
II-246	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH2CH3	1	
II-247	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH2CH3	0	
II-248	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	CH2CH2CH3	1	
II-249	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH2CH3	0	
II-250	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH2CH3	1	
II-251	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH2CH3	0	
II-252	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	CH2CH2CH3	1	
II-253	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-254	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-255	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH2CH3	0	
II-256	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	CH2CH2CH3	1	
II-257	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-258	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-259	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-260	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-261	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH2CH3	0	
II-262	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH2CH3	1	
II-263	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH2CH3	0	
II-264	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	CH2CH2CH3	1	
II-265	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH2CH3	0	
II-266	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH2CH3	1	
II-267	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH2CH3	0	
II-268	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	CH2CH2CH3	1	
II-269	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH2CH3	0	
II-270	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH2CH3	1	
II-271	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH2CH3	0	
II-272	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	CH2CH2CH3	1	
II-273	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-274	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-275	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-276	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-277	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-278	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-279	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-280	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-281	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-282	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-283	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH2CH3	0	
II-284	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	CH2CH2CH3	1	
II-285	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH2CH3	0	
II-286	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH2CH3	1	
II-287	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-288	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	CH2CH2CH3	1	
II-289	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH(CH3)2	0	
II-290	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH(CH3)2	1	
II-291	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH(CH3)2	0	
II-292	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH(CH3)2	1	
II-293	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH(CH3)2	0	
II-294	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH(CH3)2	1	
II-295	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH(CH3)2	0	
II-296	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH(CH3)2	1	
II-297	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH(CH3)2	0	
II-298	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH(CH3)2	1	
II-299	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH(CH3)2	0	
II-300	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH(CH3)2	1	
II-301	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-302	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-303	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-304	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-305	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-306	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-307	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-308	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-309	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH(CH3)2	0	
II-310	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH(CH3)2	1	
II-311	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH(CH3)2	0	
II-312	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH(CH3)2	1	
II-313	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH(CH3)2	0	
II-314	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH(CH3)2	1	
II-315	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH(CH3)2	0	
II-316	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH(CH3)2	1	
II-317	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-318	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-319	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-320	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-321	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH(CH3)2	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-322	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-323	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-324	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-325	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH(CH3)2	0	
II-326	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH(CH3)2	1	
II-327	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH(CH3)2	0	
II-328	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH(CH3)2	1	
II-329	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH(CH3)2	0	
II-330	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH(CH3)2	1	
II-331	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH(CH3)2	0	
II-332	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH(CH3)2	1	
II-333	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-334	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-335	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-336	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-337	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-338	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-339	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-340	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-341	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH(CH3)2	0	
II-342	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH(CH3)2	1	
II-343	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH(CH3)2	0	
II-344	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH(CH3)2	1	
II-345	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH(CH3)2	0	
II-346	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH(CH3)2	1	
II-347	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH(CH3)2	0	
II-348	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH(CH3)2	1	
II-349	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-350	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-351	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH(CH3)2	0	
II-352	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH(CH3)2	1	
II-353	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-354	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-355	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH(CH3)2	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-356	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-357	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH(CH3)2	0	
II-358	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH(CH3)2	1	
II-359	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH(CH3)2	0	
II-360	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH(CH3)2	1	
II-361	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH(CH3)2	0	
II-362	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH(CH3)2	1	
II-363	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH(CH3)2	0	
II-364	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH(CH3)2	1	
II-365	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH(CH3)2	0	
II-366	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH(CH3)2	1	
II-367	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH(CH3)2	0	
II-368	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH(CH3)2	1	
II-369	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-370	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-371	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-372	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-373	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-374	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-375	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-376	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-377	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-378	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-379	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH(CH3)2	0	
II-380	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH(CH3)2	1	
II-381	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH(CH3)2	0	
II-382	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH(CH3)2	1	
II-383	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH(CH3)2	0	
II-384	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH(CH3)2	1	
II-385	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-386	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-387	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-388	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-389	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-390	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-391	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-392	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-393	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-394	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-395	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-396	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-397	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-398	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-399	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-400	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-401	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-402	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-403	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-404	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-405	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-406	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-407	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-408	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-409	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-410	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-411	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-412	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-413	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-414	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-415	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-416	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-417	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-418	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-419	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-420	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-421	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-422	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-423	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-424	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-425	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-426	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-427	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-428	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-429	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-430	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-431	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-432	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-433	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-434	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-435	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-436	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-437	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-438	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-439	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-440	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-441	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-442	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-443	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-444	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-445	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-446	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-447	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-448	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-449	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-450	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-451	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-452	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-453	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-454	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-455	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-456	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-457	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-458	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-459	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-460	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-461	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-462	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-463	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-464	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-465	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-466	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-467	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-468	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-469	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-470	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-471	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-472	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-473	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-474	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-475	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-476	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-477	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-478	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-479	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH2CH2CH3	0	
II-480	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH2CH2CH3	1	
II-481	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH(CH3)2	0	
II-482	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH(CH3)2	1	
II-483	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH(CH3)2	0	
II-484	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2CH(CH3)2	1	
II-485	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH(CH3)2	0	
II-486	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH(CH3)2	1	
II-487	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH(CH3)2	0	
II-488	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2CH(CH3)2	1	
II-489	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH(CH3)2	0	
II-490	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH(CH3)2	1	
II-491	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH(CH3)2	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-492	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2CH(CH3)2	1	
II-493	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	
II-494	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-495	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	
II-496	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-497	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-498	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-499	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-500	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-501	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-502	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-503	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-504	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-505	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-506	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-507	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-508	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-509	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	
II-510	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-511	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	
II-512	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-513	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-514	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-515	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-516	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-517	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-518	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-519	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-520	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-521	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-522	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-523	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-524	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-525	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-526	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-527	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	
II-528	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-529	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-530	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-531	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-532	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-533	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-534	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-535	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-536	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-537	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-538	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-539	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-540	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-541	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	
II-542	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-543	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH(CH3)2	0	
II-544	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2CH(CH3)2	1	
II-545	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-546	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-547	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-548	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-549	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-550	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-551	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-552	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-553	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-554	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-555	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	0	
II-556	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2CH(CH3)2	1	
II-557	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	0	
II-558	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-559	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-560	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2CH(CH3)2	1	
II-561	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-562	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-563	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-564	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-565	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-566	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-567	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-568	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-569	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-570	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-571	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	0	
II-572	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2CH(CH3)2	1	
II-573	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH(CH3)2	0	
II-574	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH(CH3)2	1	
II-575	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH(CH3)2	0	
II-576	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2CH(CH3)2	1	
II-577	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-578	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-579	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-580	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-581	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-582	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-583	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-584	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-585	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-586	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-587	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-588	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-589	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-590	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-591	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-592	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-593	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-594	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-595	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-596	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-597	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-598	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-599	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-600	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-601	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-602	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-603	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-604	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-605	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-606	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-607	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-608	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-609	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-610	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-611	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-612	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-613	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-614	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-615	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-616	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-617	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-618	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-619	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-620	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-621	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-622	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-623	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-624	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-625	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-626	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-627	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-628	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-629	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-630	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-631	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-632	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-633	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-634	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-635	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-636	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-637	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-638	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-639	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-640	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-641	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-642	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-643	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-644	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-645	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-646	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-647	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-648	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-649	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-650	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-651	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-652	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-653	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-654	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-655	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-656	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-657	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-658	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-659	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-660	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-661	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-662	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-663	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-664	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-665	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-666	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-667	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-668	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-669	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-670	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-671	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2-cyc-C3H5	0	
II-672	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2-cyc-C3H5	1	
II-673	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2COOCH3	0	
II-674	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2COOCH3	1	
II-675	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2COOCH3	0	
II-676	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2COOCH3	1	
II-677	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2COOCH3	0	
II-678	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2COOCH3	1	
II-679	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2COOCH3	0	
II-680	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2COOCH3	1	1,5824
II-681	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2COOCH3	0	
II-682	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2COOCH3	1	
II-683	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2COOCH3	0	
II-684	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2COOCH3	1	
II-685	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-686	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-687	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-688	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-689	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-690	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-691	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-692	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-693	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2COOCH3	0	
II-694	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2COOCH3	1	
II-695	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2COOCH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-696	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2COOCH3	1	
II-697	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2COOCH3	0	
II-698	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2COOCH3	1	
II-699	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2COOCH3	0	
II-700	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2COOCH3	1	
II-701	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-702	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-703	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-704	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-705	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-706	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-707	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-708	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-709	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2COOCH3	0	
II-710	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2COOCH3	1	
II-711	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2COOCH3	0	
II-712	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2COOCH3	1	
II-713	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2COOCH3	0	
II-714	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2COOCH3	1	
II-715	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2COOCH3	0	
II-716	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2COOCH3	1	
II-717	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-718	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-719	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-720	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-721	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-722	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-723	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-724	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-725	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2COOCH3	0	
II-726	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2COOCH3	1	
II-727	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2COOCH3	0	
II-728	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2COOCH3	1	
II-729	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2COOCH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-730	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2COOCH3	1	
II-731	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2COOCH3	0	
II-732	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2COOCH3	1	
II-733	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-734	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-735	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2COOCH3	0	
II-736	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2COOCH3	1	
II-737	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-738	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-739	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-740	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-741	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2COOCH3	0	
II-742	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2COOCH3	1	
II-743	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2COOCH3	0	
II-744	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2COOCH3	1	
II-745	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2COOCH3	0	
II-746	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2COOCH3	1	
II-747	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2COOCH3	0	
II-748	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2COOCH3	1	
II-749	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2COOCH3	0	
II-750	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2COOCH3	1	
II-751	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2COOCH3	0	
II-752	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2COOCH3	1	
II-753	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-754	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-755	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-756	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-757	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-758	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-759	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-760	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-761	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2COOCH3	0	
II-762	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-763	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2COOCH3	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-764	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2COOCH3	1	
II-765	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2COOCH3	0	
II-766	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2COOCH3	1	
II-767	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2COOCH3	0	
II-768	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2COOCH3	1	
II-769	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2Ph	0	
II-770	CH3	H	CF3	H	H	H	CN	-CH2Ph	1	
II-771	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2Ph	0	
II-772	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CN	-CH2Ph	1	
II-773	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2Ph	0	
II-774	CH3	H	CF3	H	F	H	CN	-CH2Ph	1	
II-775	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2Ph	0	
II-776	CH3	CH3	CF3	H	F	H	CN	-CH2Ph	1	
II-777	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2Ph	0	
II-778	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2Ph	1	
II-779	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2Ph	0	
II-780	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CN	-CH2Ph	1	
II-781	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2Ph	0	
II-782	CH3	H	CF3	H	CN	H	H	-CH2Ph	1	
II-783	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2Ph	0	
II-784	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	H	-CH2Ph	1	
II-785	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-786	CH3	H	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-787	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-788	CH3	CH3	CF3	H	CN	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-789	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2Ph	0	
II-790	CH3	H	CF3	H	H	H	CF3	-CH2Ph	1	
II-791	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2Ph	0	
II-792	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CF3	-CH2Ph	1	
II-793	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2Ph	0	
II-794	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2Ph	1	
II-795	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2Ph	0	
II-796	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CF3	-CH2Ph	1	
II-797	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2Ph	0	

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-798	CH3	H	CF3	H	CF3	H	H	-CH2Ph	1	
II-799	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2Ph	0	
II-800	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	H	-CH2Ph	1	
II-801	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-802	CH3	H	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-803	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-804	CH3	CH3	CF3	H	CF3	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-805	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2Ph	0	
II-806	CH3	H	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2Ph	1	
II-807	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2Ph	0	
II-808	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CHF2	-CH2Ph	1	
II-809	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2Ph	0	
II-810	CH3	H	CF3	H	C	H	CHF2	-CH2Ph	1	
II-811	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2Ph	0	
II-812	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CHF2	-CH2Ph	1	
II-813	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2Ph	0	
II-814	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2Ph	1	
II-815	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2Ph	0	
II-816	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	H	-CH2Ph	1	
II-817	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-818	CH3	H	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-819	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-820	CH3	CH3	CF3	H	CHF2	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-821	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2Ph	0	
II-822	CH3	H	CF3	H	H	H	CH3	-CH2Ph	1	
II-823	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2Ph	0	
II-824	CH3	CH3	CF3	H	H	H	CH3	-CH2Ph	1	
II-825	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2Ph	0	
II-826	CH3	H	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2Ph	1	
II-827	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2Ph	0	
II-828	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	CH3	-CH2Ph	1	
II-829	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2Ph	0	
II-830	CH3	H	CF3	H	CH3	H	H	-CH2Ph	1	
II-831	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2Ph	0	

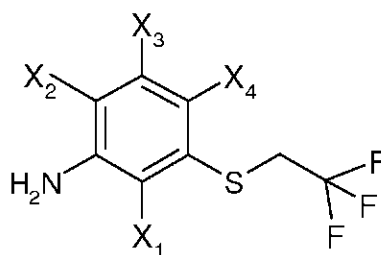
(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-832	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	H	-CH2Ph	1	
II-833	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-834	CH3	H	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-835	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-836	CH3	CH3	CF3	H	CH3	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-837	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2Ph	0	
II-838	CH3	H	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2Ph	1	
II-839	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2Ph	0	
II-840	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	NO2	-CH2Ph	1	
II-841	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2Ph	0	
II-842	CH3	H	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2Ph	1	
II-843	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2Ph	0	
II-844	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	NO2	-CH2Ph	1	
II-845	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2Ph	0	
II-846	CH3	H	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2Ph	1	
II-847	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2Ph	0	
II-848	CH3	CH3	CF3	H	NO2	H	CF3	-CH2Ph	1	
II-849	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-850	CH3	H	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-851	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-852	CH3	CH3	CF3	H	Cl	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-853	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-854	CH3	H	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-855	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-856	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-857	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-858	CH3	H	CF3	H	I	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-859	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2Ph	0	
II-860	CH3	CH3	CF3	H	I	H	Cl	-CH2Ph	1	
II-861	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2Ph	0	
II-862	CH3	H	CF3	H	Br	H	Br	-CH2Ph	1	
II-863	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2Ph	0	
II-864	CH3	CH3	CF3	H	Br	H	Br	-CH2Ph	1	
II-865	CH3	H	CH3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	0	73-76

(continuación)

N.º de Comp	R1	R2	R3	X1	X2	X3	X4	A	n	n _D ²⁰ o p.f.
II-866	CH3	H	CH3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	1	105-112
II-867	CH3	CH3	CH3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	0	1,6053
II-868	CH3	CH3	CH3	H	F	H	CN	CH2CH2CH3	1	1,5943

Tabla 3



N.º de Comp.	X1	X2	X3	X4	p.f., RMN
III-1	H	H	H	CN	
III-2	H	F	H	CN	105-109
III-3	H	Cl	H	CN	
III-4	H	Br	H	CN	
III-5	H	I	H	CN	
III-6	Cl	H	H	CN	
III-7	H	CN	H	H	
III-8	H	CN	H	Cl	
III-9	H	CN	H	Br	
III-10	H	CN	H	I	
III-11	Cl	CN	H	H	
III-12	H	H	H	CF3	
III-13	H	Cl	H	CF3	
III-14	H	Br	H	CF3	
III-15	H	I	H	CF3	
III-16	Cl	H	H	CF3	
III-17	H	CF3	H	H	
III-18	H	CF3	H	Cl	
III-19	H	CF3	H	Br	
III-20	H	CF3	H	I	
III-21	Cl	CF3	H	H	
III-22	H	H	H	CHF2	

(continuación)

N.º de Comp.	X1	X2	X3	X4	p.f., RMN
III-23	H	Cl	H	CHF2	
III-24	H	Br	H	CHF2	
III-25	H	I	H	CHF2	
III-26	Cl	H	H	CHF2	
III-27	H	CHF2	H	H	
III-28	H	CHF2	H	Cl	
III-29	H	CHF2	H	Br	
III-30	H	CHF2	H	I	
III-31	Cl	CHF2	H	H	
III-32	H	H	H	CH3	
III-33	H	Cl	H	CH3	
III-34	H	Br	H	CH3	
III-35	H	I	H	CH3	
III-36	Cl	H	H	CH3	
III-37	H	CH3	H	H	
III-38	H	CH3	H	Cl	
III-39	H	CH3	H	Br	
III-40	H	CH3	H	I	
III-41	Cl	CH3	H	H	
III-42	H	Cl	H	Cl	※
III-43	H	Br	H	Cl	
III-44	H	I	H	Cl	
III-45	H	Br	H	Br	
III-46	H	Cl	H	NO2	
III-47	H	NO2	H	NO2	
III-48	H	CF3	H	NO2	
※ = RMN-1H (CDCl3, δ) 3,43(2H, ddd, J= 9,6 Hz) 4,2 (2H, m) 6,98 (1 H, s) 7,32 (1 H, s).					

Ejemplo 1 de ensayo biológico: ensayo con larvas de *Spodoptera litura* Preparación de la disolución química de muestra

- 5 Disolvente: dimetilformamida 3 partes en peso
Emulsionante: polioxietilenoalquilfeniléter 1 parte en peso

Para preparar una mezcla adecuada de principios activos, se mezcló 1 parte en peso de principios activos con un disolvente en la cantidad mencionada anteriormente que contenía un emulsionante en la cantidad mencionada anteriormente, y se diluyó la mezcla a la concentración dada con agua.

Procedimiento de ensayo

- 5 Se sumergieron hojas de batata en una disolución química de muestra diluida a una concentración dada, se secó al aire la disolución química, después, se dispuso en una placa Petri con un diámetro de 9 cm, se liberaron diez larvas de *Spodoptera litura* de 3 días de edad, se dispuso la placa Petri en una sala a temperatura constante de 25 °C y se añadieron hojas de batata 2 y 4 días después, se comprobó el número de insectos muertos 7 días después y se calculó la relación insecticida.

En este ensayo, se promediaron los resultados de dos placas Petri en una zona.

Resultado de ensayo

- 10 En el ejemplo de ensayo biológico 1 mencionado anteriormente, típicamente el compuesto nº I-62 anteriormente mencionado manifestaba un efecto controlador de una relación insecticida del 100% a una concentración de ingrediente activo de 500 ppm.

Ejemplo de ensayo biológico 2: ensayo con araña roja (*Tetranychus urticae*) (ensayo de pulverizador)

Procedimiento de ensayo

- 15 Se liberaron 50 a 100 insectos arañas rojas adultas (*Tetranychus urticae*) sobre hojas de judía blanca en el periodo de desarrollo de dos hojas verdaderas cultivada en una maceta con un diámetro de 6 cm, se pulverizó un día después una disolución diluida con agua de los principios activos preparados anteriormente de una concentración dada en cantidad suficiente utilizando una pistola pulverizadora. Después de pulverizar, se dispusieron las hojas en un invernadero y, 7 días después, se calculó la relación acaricida.

Resultados de ensayo

- 20 Los compuestos nº I-3, I-4, I-7, I-9, I-10, I-15, I-16, I-29, I-30, I-31, I-32, I-33, I-34, I-37, I-38, I-39, I-40, I-41, I-42, I-43, I-44, I-49, I-50, I-51, I-52, I-53, I-54, I-55, I-65, I-68, I-69, I-70, I-71, I-75, I-81, I-82, I-91, I-92, I-93, I-94, I-101, I-102, I-105, I-115, I-116, I-117, I-118, I-147, I-148, I-155, I-156, I-157, II-229, II-230 anteriormente mencionados manifestaron un efecto controlador de una relación acaricida de 98% o más a una concentración de ingrediente activo de 100 ppm, como ejemplos típicos.

- 25 Ejemplo de ensayo biológico 3: ensayo con escarabajo de hoja de cucurbitácea (*Aulacophora femoralis*) (ensayo de pulverización)

Procedimiento de ensayo

- 30 Se sumergieron hojas de calabacín en una disolución diluida con agua de principios activos preparados anteriormente a una concentración dada y se secó al aire la disolución química, después, se dispusieron en una copa de plástico llena de tierra negra desinfectada estéril y se liberaron cinco escarabajos de hoja de cucurbitácea de 2 días (*Aulacophora femoralis*). 7 días después, se comprobó el número de insectos muertos y se calculó la relación insecticida.

Resultado del ensayo

- 35 Los compuestos nº I-16, I-29, I-30, I-31, I-32, I-33, I-34, I-37, I-38, I-40, I-41, I-42, I-51, I-52, I-53, I-55, I-62, I-65, I-75 anteriormente mencionados manifestaron un efecto controlador de una relación insecticida del 100% a una concentración de ingrediente activo de 500 ppm, como ejemplos típicos.

Ejemplo de ensayo biológico 4: ensayo con araña roja (ensayo de irrigación).

Procedimiento de ensayo

- 40 Se liberaron 50 a 100 insectos arañas rojas adultas (*Tetranychus urticae*) sobre hojas de judía blanca en el periodo de desarrollo de dos hojas verdaderas cultivada en una maceta con un diámetro de 6 cm, se irrigó un día después una disolución diluida con agua de los principios activos preparados anteriormente de una concentración dada en una cierta cantidad en la maceta utilizando una pipeta. Después del tratamiento, se dispusieron las hojas en un invernadero y, 7 días después, se calculó la relación acaricida.

Resultados del ensayo

- 45 Los compuestos nº I-4, I-165 y I-166 anteriormente mencionados manifestaron un efecto controlador de una relación insecticida de 98% o más a una concentración de ingrediente activo de 1,5 mg/maceta, como ejemplos típicos.

Ejemplo de preparación 1 (gránulo)

Se añadieron 25 partes de agua a una mezcla de 10 partes de compuestos de la presente invención (nº I-16), 30 partes de bentonita (montmorillonita), 58 partes de talco y 2 partes de un sulfonato de lignina, se amasó bien la

mezcla, se configuró en partículas de malla 10 a 40 mediante un granulador de tipo extrusión, y se secó a 40 a 50 °C, proporcionando gránulos.

Ejemplo de preparación 2 (gránulo)

- 5 Se dispusieron 95 partes de partículas de mineral de arcilla con una distribución de tamaño de partícula de 0,2 a 2 mm en un mezclador giratorio, y se pulverizaron 5 partes de compuestos de la presente invención (n.º I-19) junto con un agente diluyente líquido con rotación causando una humectación uniforme, después, se secó a 40 a 50 °C proporcionando gránulos.

Ejemplo de preparación 3 (emulsión)

- 10 Se mezclaron 30 partes de compuestos de la presente invención (n.º I-30), 55 partes de xileno, 8 partes de polioxietilentalquilfeniléter y 7 partes de alquilbencenosulfonato de calcio y se agitaron, proporcionando una emulsión.

Ejemplo de preparación 4 (hidrato)

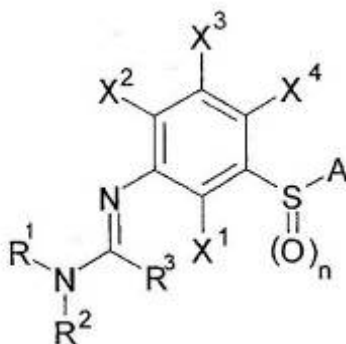
- 15 Se molieron 15 partes de compuestos de la presente invención (n.º I-31), 80 partes de una mezcla (1:5) de carbón blanco (polvo fino de óxido de silicio amorfo que contiene agua) y arcilla en polvo, 2 partes de alquilbencenosulfonato de sodio y 3 partes de condensado de alquilnaftalenosulfonato de sodio-formalina y se mezclaron, proporcionando un hidrato.

Ejemplo de preparación 5 (gránulo hidratado)

Se mezclaron suficientemente 20 partes de compuestos de la presente invención (n.º I-32), 30 partes de lignosulfonato de sodio y 15 partes de bentonita y 35 partes de tierra de diatomeas calcinada en polvo, se añadió agua a esto, se extruyó la mezcla mediante un tamiz de 0,3 mm y se secó, proporcionando gránulos hidratados.

20 Resumen de la invención

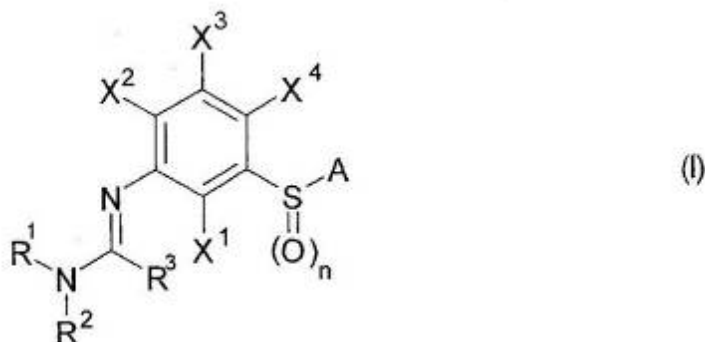
Nuevas benzamidinas de fórmula (I)



y su uso como insecticidas.

REIVINDICACIONES

1. Nuevas benzamidas de fórmula (I)



5 en la que R¹ representa hidrógeno, alquilo C₁₋₁₂ lineal o ramificado, alqueno C₂₋₅, alquino C₂₋₃, alcoxi, cicloalquilo C₃₋₈, haloalquilo, alcoxialquilo, fenilo, α- o β-naftilo, aralquilo, alquilaminocarbonilo, arilaminocarbonilo o dialquilaminoalquilo,

R² representa hidrógeno o alquilo C₁₋₁₂ lineal o ramificado,

10 R¹ y R² pueden formar, junto con un átomo de N al que están unidos, pirrolidina, piperidina o morfolina,

R³ representa hidrógeno, alquilo C₁₋₁₂ lineal o ramificado, haloalquilo, ciano o fenilo, α- o β-naftilo,

R¹ y R³ pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina o piperidina opcionalmente sustituidas con oxo,

15 X¹, X², X³ y X⁴ pueden ser iguales o diferentes y representan hidrógeno, halógeno, alquilo C₁₋₁₂ lineal o ramificado, haloalquilo, haloalcoxi, alcoxicarbonilo, nitro o ciano,

A representa trifluoroetilo, y

n representa 0 o 1.

2. Los compuestos según la reivindicación 1, en los que

R¹ representa hidrógeno, alquilo C₁₋₆, alqueno C₂₋₄, alquino C₂₋₃,

20 alcoxi C₁₋₄, cicloalquilo C₃₋₆, haloalquilo C₁₋₄, alcoxialquilo C₂₋₄ (número total de carbonos), fenilo, α- y β-naftilo, aralquilo C₇₋₈, alquil C₁₋₂-aminocarbonilo, aril C₆₋₁₀-aminocarbonilo o dialquilamino(alquilo C₁₋₂) C₂₋₄ (número total de átomos de carbono),

R² representa hidrógeno o alquilo C₁₋₄,

25 R¹ y R² pueden formar, junto con un átomo de N al que están unidos, pirrolidina, piperidina o morfolina,

R³ representa hidrógeno, alquilo C₁₋₆, haloalquilo C₁₋₄, ciano o fenilo,

R¹ y R³ pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina o piperidina opcionalmente sustituidas con oxo,

30 X¹, X², X³ y X⁴ pueden ser iguales o diferentes y representan hidrógeno, halógeno, alquilo C₁₋₂, haloalquilo C₁₋₂, haloalcoxi C₁₋₂, alcoxi C₁₋₂-carbonilo, nitro o ciano.

A representa trifluoroetilo y

n representa 0 o 1.

3. Los compuestos según la reivindicación 1 o 2, en los que

R¹ representa hidrógeno, alquilo C₁₋₃, alilo, propargilo, alcoxi C₁₋₂, ciclopropilo, ciclohexilo, trifluoroetilo, metoxietilo, trifluorometilfenilo, fenilo, bencilo, etilaminocarbonilo, fenilaminocarbonilo o dimetilaminoetilo,

35 R² representa hidrógeno o alquilo C₁₋₂,

R¹ y R² pueden formar, junto con un átomo de N al que están unidos, piperidina o morfolina,

R³ representa hidrógeno, alquilo C₁, alquilo C₁₋₃ sustituido con flúor, ciano o fenilo,

R¹ y R³ pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina o piperidina opcionalmente sustituidas con oxo,

40 X¹ representa hidrógeno o cloro,

X² representa hidrógeno, flúor, cloro, bromo, yodo, metilo, difluorometilo, trifluorometilo, nitro o ciano,

X³ representa hidrógeno,

X⁴ representa hidrógeno, cloro, bromo, yodo, metilo, difluorometilo, trifluorometilo, nitro o ciano,

A representa trifluoroetilo, y

45 n representa 0 o 1.

4. Los compuestos según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, en los que

R^1 representa hidrógeno, alquilo C_{1-3} , alilo, propargilo, metoxi, ciclopropilo, trifluoroetilo, trifluorometilfenilo, bencilo o etilaminocarbonilo,

R^2 representa hidrógeno o alquilo C_{1-2} ,

R^3 representa alquilo C_1 , alquileo C_1 , alquilo C_{1-3} sustituido con flúor, ciano o fenilo,

R^1 y R^3 pueden formar, junto con un átomo de N y un átomo de C a los que están unidos, pirrolidina,

X^1 representa hidrógeno,

X^2 representa hidrógeno o flúor,

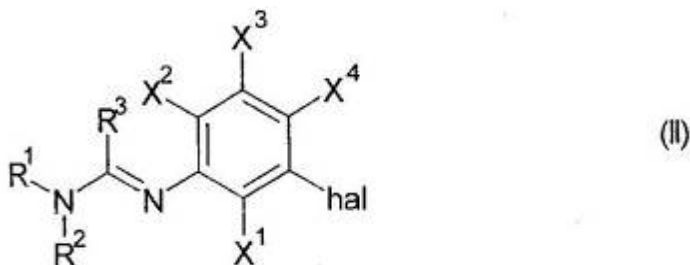
X^3 representa hidrógeno,

X^4 representa difluorometilo o ciano,

A representa alquilo C_3 o trifluoroetilo, y

n representa 0 o 1.

5. Procedimiento de preparación de los compuestos de fórmula (I) según la reivindicación 1, **caracterizado porque** en el procedimiento de producción (a): {en la fórmula (I), al menos uno de X^2 y X^4 representa un grupo atractor de electrones, y n representa 0} los compuestos de fórmula (II)



en la que R^1 , R^2 , R^3 , X^1 , X^2 , X^3 y X^4 son como se definen en la reivindicación 1 y al menos uno de X^2 y X^4 representa un grupo atractor de electrones, y hal representa un halógeno,

se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (III)

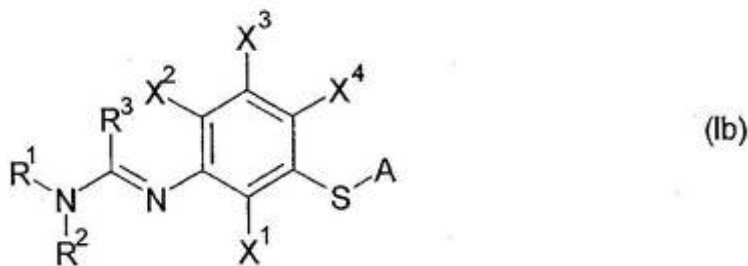


en la que A es como se define anteriormente,

en presencia de disolvente inerte y, siempre que sea apropiado, en presencia de una base,

en el procedimiento de producción (b): {en la fórmula (I), n representa 1}

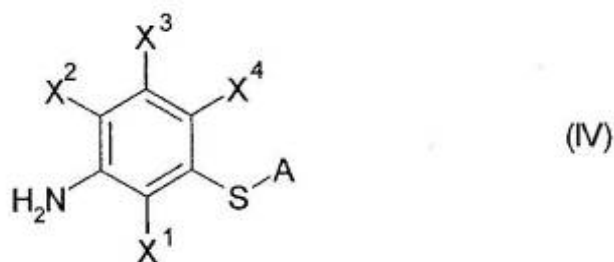
los compuestos de fórmula (Ib)



en la que R^1 , R^2 , R^3 , X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como en la reivindicación 1, se oxidan en presencia de disolventes inertes;

en el procedimiento de producción (c): {en la fórmula (I), R^3 representa hidrógeno, alquilo o arilo}

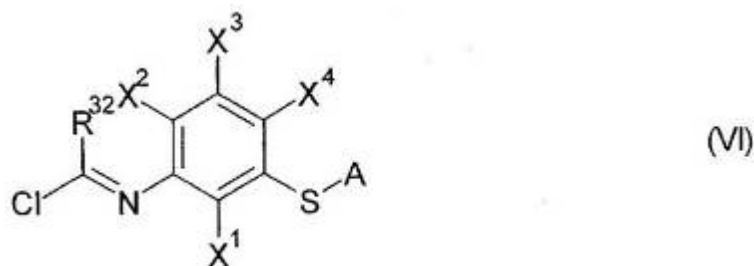
los compuestos de fórmula (IV)



en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen en la reivindicación 1, se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (V)



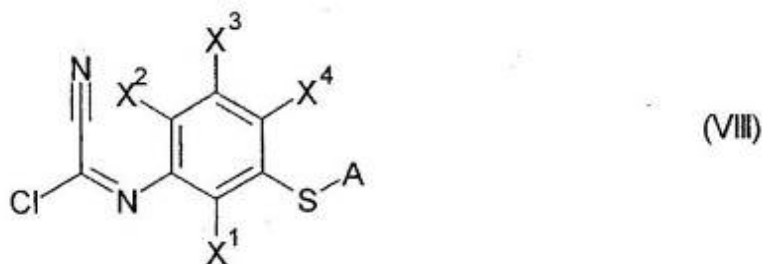
- 5 en la que R^1 y R^2 son como se definen en la reivindicación 1, R^{31} representa hidrógeno, alquilo o arilo, en presencia de disolventes inertes, en el procedimiento de producción (d): {en la fórmula (I), R^3 representa perfluoroalquilo} los compuestos de fórmula (VI)



- 10 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen en la reivindicación 1, y R^{32} representa perfluoroalquilo, se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (VII)

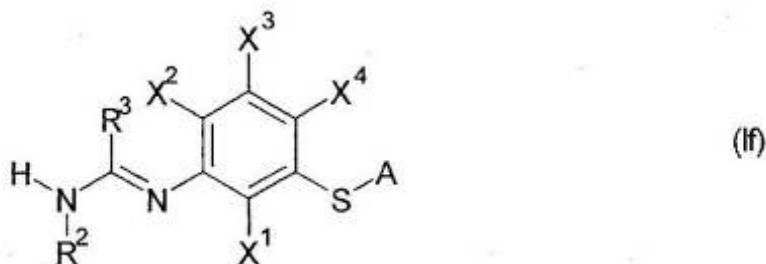


- 15 en la que R^1 y R^2 son como se definen en la reivindicación 1, en presencia de disolventes inertes y, siempre que sea apropiado, en presencia de una base, en el procedimiento de producción (e): {en la fórmula (I), R^3 representa ciano} los compuestos de fórmula (VIII)



- 20 en la que X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen en la reivindicación 1, se hacen reaccionar con compuestos de los compuestos de fórmula (VII) anteriormente mencionados en presencia de disolventes inertes;

en el procedimiento de producción (f): {en la fórmula (I), R^1 representa alquilaminocarbonilo}
los compuestos de fórmula (If)



- 5 en la que R^2 , R^3 , X^1 , X^2 , X^3 , X^4 y A son como se definen en la reivindicación 1, se hacen reaccionar con compuestos de fórmula (X)



en la que R^{11} representa alquilaminocarbonilo,
en presencia de disolventes inertes y, siempre que sea apropiado, en presencia de una base.

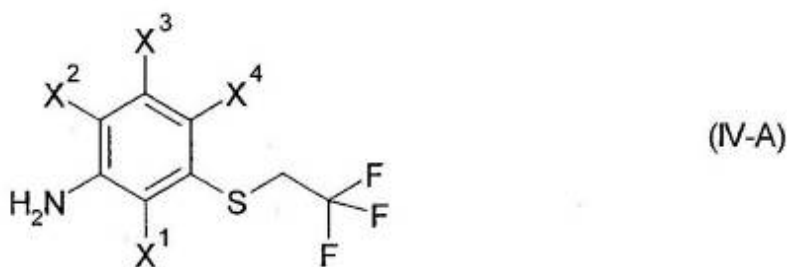
- 10 6. Composiciones insecticidas **caracterizadas porque** contienen al menos un compuesto de fórmula (I) como se define en la reivindicación 1 o en la reivindicación 2 o en la reivindicación 3 o en la reivindicación 4.

7. Procedimiento para combatir insectos dañinos, **caracterizado porque** los compuestos de fórmula (I) como se definen en la reivindicación 1 o en la reivindicación 2 o en la reivindicación 3 o en la reivindicación 4 se dejan actuar sobre insectos dañinos y/o su hábitat.

- 15 8. Uso de compuestos de fórmula (I) como se define en la reivindicación 1 o en la reivindicación 2 o en la reivindicación 3 o en la reivindicación 4 para combatir insectos dañinos.

9. Procedimiento de preparación de una composición insecticida, **caracterizado porque** los compuestos de fórmula (I) como se definen en la reivindicación 1 o en la reivindicación 2 o en la reivindicación 3 o en la reivindicación 4 se mezclan con extensores y/o agentes tensioactivos.

- 20 10. Nuevos derivados de anilina de fórmula (IV-A)



en la que X^1 , X^2 y X^3 son como se definen en la reivindicación 1 y X^4 representa hidrógeno, halógeno, haloalquilo, haloalcoxi, alcóxicarbonilo, nitro o ciano.