

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 561 981**

51 Int. Cl.:

C07D 413/12 (2006.01)

C07D 413/14 (2006.01)

A01N 43/76 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **15.04.2009** **E 09733754 (7)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **25.11.2015** **EP 2274305**

54 Título: **Derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonil]-oxazol, derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfanil]-oxazol y derivados quirales de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfinil]-oxazol, procedimientos para su preparación así como su uso como herbicidas y reguladores del crecimiento de plantas**

30 Prioridad:

22.04.2008 EP 08007742

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

01.03.2016

73 Titular/es:

**BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH
(100.0%)**

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

72 Inventor/es:

**KEHNE, HEINZ;
DIETRICH, HANSJÖRG;
FEUCHT, DIETER;
SCHMUTZLER, DIRK;
HAEUSER-HAHN, ISOLDE;
PAULITZ, CHRISTIAN;
DITTGEN, JAN;
MARTELLETTI, ARIANNA y
ROSINGER, CHRISTOPHER HUGH**

74 Agente/Representante:

CARPINTERO LÓPEZ, Mario

Observaciones :

Véase nota informativa (Remarks) en el folleto original publicado por la Oficina Europea de Patentes

ES 2 561 981 T3

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

DESCRIPCIÓN

Derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonil]-oxazol, derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfanil]-oxazol y derivados quirales de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfinil]-oxazol, procedimientos para su preparación así como su uso como herbicidas y reguladores del crecimiento de plantas

5 La presente invención se refiere a derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonil]-oxazol, derivados quirales de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfinil]-oxazol y derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfanil]-oxazol así como a procedimientos para su preparación. Otro objeto de la presente invención es su uso como herbicida, en particular como herbicida para la lucha selectiva contra plantas perjudiciales en cultivos de plantas útiles y como regulador del crecimiento de plantas sólo o en combinación con sustancias protectoras y/o en mezcla con otros herbicidas.

10 Por distintos documentos se conoce ya que determinados derivados de oxazol tienen propiedades herbicidas o pesticidas.

Así se describen en el documento WO 2004/013112 A derivados de oxazol de acción herbicida que tienen en la posición 2 del anillo de oxazol un grupo tioéter que comprende a su vez una unidad de fluoroalqueno.

15 El documento US 4.022.607 describe derivados de 2-(alquilsulfonil)-oxazol, su preparación así como su uso como herbicida.

El documento DE 10 254 876 A describe 2-(fluoroalqueniltio)-oxazoles y su uso como herbicidas.

El documento EP 0 435 794 A describe 1-heterociclisulfonil-2-fenil-2-propenos y su uso como herbicidas.

Las propiedades pesticidas de derivados de 2-trifluorobutenotiooxazol se describen por ejemplo en los documentos WO 2001/066529 A, WO 99/52874 A y WO 95/24403 A.

20 En el documento DE 23 59 922 A se describen sulfuros de 1-alquil-5-nitro-imidazolil-2-alquil-heteroarilo, en los que el heteroarilo es un oxazol sustituido.

Además se describen también derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonilo] y de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonilo], que tienen propiedades herbicidas. Así se describen en los documentos WO 2007/071900 A, WO 02/62770 A y WO 2006/123088 A algunos derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonilo] y de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonilo], que llevan un grupo (1H-pirazol-4-ilmetilo) sustituido adecuado como sustituyente en el grupo 2-sulfonilo o 2-sulfonilo. Un procedimiento para su preparación se describe igualmente en los documentos mencionados anteriormente.

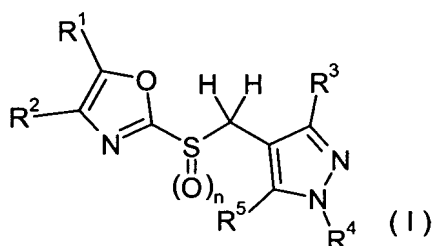
Además se describen también derivados sustituidos con 2-(arilmetil-sulfonilo), que tienen propiedades herbicidas. Así en los documentos JP 2003/096059, WO 2001/112613 A y US 3.960.542 se describen algunos derivados de 2-(arilmetil-sulfonilo), que llevan un grupo fenilmetilo sustituido adecuado como sustituyente en el grupo 2-sulfonilo. Un procedimiento para su preparación se describe igualmente en los documentos mencionados anteriormente.

Los principios activos conocidos ya a partir de los documentos anteriormente mencionados presentan sin embargo inconvenientes en su uso, ya sea (a) que éstos no tienen o sin embargo tienen una acción herbicida sólo insuficiente contra plantas perjudiciales, (b) un espectro demasiado bajo de plantas perjudiciales que puede combatirse con un principio activo o (c) una selectividad demasiado baja en cultivos de plantas útiles.

35 Por tanto se desea facilitar principios activos químicos alternativos que puedan usarse eventualmente con ventajas como herbicidas o reguladores del crecimiento de plantas.

De acuerdo con la invención se encontraron ahora derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfonil]-oxazol, derivados quirales de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfinil]-oxazol y derivados de 2-[(1H-pirazol-4-ilmetil)-sulfanil]-oxazol, que presentan ventajas en comparación con los compuestos descritos previamente.

40 Son objeto de la presente invención compuestos de acuerdo con la invención de fórmula general (I) y sus sales agroquímicamente compatibles



en la que los restos y los índices presentan el siguiente significado:

- n es igual a 0, 1 o 2;
- los sustituyentes R¹ y R² se seleccionan, en cada caso independientemente entre sí, del grupo que está constituido por
 - hidrógeno, halógeno, nitro, ciano, formilo, C(O)OH, hidroxilo, amino,
 - alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-carbonilo, alquil(C₁-C₆)-carbonil-alquilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₆)-carboniloxilo,
 - alcoxilo (C₁-C₆), alcoxi(C₁-C₆)-carbonilo, alcoxi(C₁-C₆)-carbonil-alquilo (C₁-C₆), alcoxi(C₁-C₆)-alquilo (C₁-C₆),
 - alcoxi(C₁-C₆)-alcoxilo (C₁-C₆), alcoxi(C₁-C₆)-carbonil-alcoxilo (C₁-C₆),
 - alqueno (C₂-C₆), alquénil(C₂-C₆)-oxilo, alquínil (C₂-C₆), alquínil(C₂-C₆)-oxilo,
 - alquil(C₁-C₆)-tio, alquil(C₁-C₆)-sulfinilo, alquil(C₁-C₆)-sulfonilo, alquil(C₁-C₆)-sulfoniloxilo, alquil(C₁-C₆)-sulfonil-alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-sulfinil-alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-tio-alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-tio-alcoxilo (C₁-C₆),
 - mono-(alquil(C₁-C₆))-amino, di-(alquil(C₁-C₆))-amino, N-(alcanoil(C₁-C₆))-amino, aminocarbonil-alquilo (C₁-C₆), mono-(alquil(C₁-C₆))-aminocarbonilo, di-(alquil(C₁-C₆))-aminocarbonilo, mono-(alquil(C₁-C₆))-aminosulfonilo, di-(alquil(C₁-C₆))-aminosulfonilo,
 - cicloalquilo (C₃-C₈), cicloalcoxilo (C₃-C₈), cicloalquil(C₃-C₈)-alquilo (C₁-C₆), cicloalquil(C₃-C₈)-alcoxilo (C₁-C₆), cicloalquil(C₃-C₈)-carbonilo, cicloalcoxi(C₃-C₈)-carbonilo,
 - cicloalqueno (C₃-C₈), cicloalquénil(C₃-C₈)-oxilo, cicloalquil(C₃-C₈)-tio, cicloalquil(C₃-C₈)-sulfinilo, cicloalquil(C₃-C₈)-sulfonilo, cicloalquil(C₃-C₈)-sulfoniloxilo,
 - ciano-alcoxilo (C₁-C₆), ciano-alquilo (C₁-C₆),
 - -CONH-SO₂-alquilo (C₁-C₆), -NHCHO, -NHCO-alquilo (C₁-C₆), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₆), -NHCONH-alquilo (C₁-C₆), -NHSO₂-alquilo (C₁-C₆), -OCONH-alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-aminosulfonil-alquilo (C₁-C₂), di-alquil(C₁-C₆)-aminosulfonil-alquilo (C₁-C₂),
 - -C(O)NHR⁹, -C(O)NR⁹R¹⁰,
 - en el que R⁹ y R¹⁰ son independientemente entre sí hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆) o
 - en el que R⁹ y R¹⁰ juntos forman un grupo alquileo (C₁-C₆) que puede contener un átomo de oxígeno o átomo de azufre o uno o dos grupos amino o alquil(C₁-C₆)-amino,

en los que los restos R¹ y R² mencionados anteriormente pueden estar monosustituídos o polisustituídos e independientemente entre sí con restos que se seleccionan del grupo que está constituido por halógeno y alquilo (C₁-C₆);

R³ se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, halógeno, hidroxilo, ciano, nitro, amino, alquilo (C₁-C₄), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₄), alcoxilo (C₁-C₄), alcoxi(C₁-C₄)-alquilo (C₁-C₂), cicloalcoxilo (C₃-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₄)-tio, alquil(C₁-C₄)-tio-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-sulfinil-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonil-alquilo (C₁-C₂), di-alquil(C₁-C₄)-amino, alqueno (C₂-C₄), alquénil (C₂-C₄), alquénil(C₃-C₄)-oxilo, alquínil(C₃-C₄)-oxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alcoxilo (C₁-C₂), hidroxil-alquilo (C₁-C₂), hidroxil-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alquilo (C₁-C₂), fenilo, fenil-alquilo (C₁-C₂), fenil-alcoxilo (C₁-C₂), fenoxilo, alquil(C₁-C₄)-carboniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), alcoxi(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂) y 3-oxetaniloxilo, -C(O)NR⁹R¹⁰, en el que R⁹ y R¹⁰ se seleccionan, independientemente entre sí, del grupo que está constituido por hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), o en el que R⁹ y R¹⁰ juntos forman un grupo alquileo (C₁-C₆) que puede contener un átomo de oxígeno o átomo de azufre o uno o dos grupos amino o alquil(C₁-C₆)-amino,

R⁴ se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, alquilo (C₁-C₄), haloalquilo (C₁-C₄), fenilo, fenil-alquilo (C₁-C₂), cicloalquilo (C₃-C₆); cicloalquil(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₂), estando sustituido el resto cicloalquilo eventualmente con alquilo (C₁-C₄); alqueno (C₂-C₄), alquénil (C₂-C₄), alcoxi(C₁-C₄)-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-tio-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfinil-alquilo (C₁-C₂), ciano-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfonil-alquilo (C₁-C₂), alcoxi(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂), mono-alquil(C₁-C₄)-aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂), di-alquil(C₁-C₄)-aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂), hidroxil-alquilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), alcoxi(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfinilo; fenilsulfonilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; alquil(C₁-C₄)-carbonilo; fenilcarbonilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; y alcoxi(C₁-C₄)-carbonilo,

R⁵ se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, halógeno, hidroxilo, ciano, nitro, amino, alquilo (C₁-C₄), haloalquilo (C₁-C₄), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₄), alcoxi(C₁-C₄)-alcoxilo (C₁-C₄), alcoxi(C₁-C₄)-alquilo (C₁-C₂), cicloalcoxilo (C₃-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₄)-tio, alquil(C₁-C₄)-tio-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-sulfinil-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonil-alquilo (C₁-C₂), di-alquil(C₁-C₄)-amino, alqueno (C₂-C₄), haloalqueno (C₂-C₄), ciano-alquilo (C₁-C₄), alquénil (C₂-C₄), alquénil(C₃-C₄)-oxilo, alquínil(C₃-C₄)-oxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alcoxilo (C₁-C₂), hidroxil-alquilo (C₁-C₂), hidroxil-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alquilo (C₁-C₂); fenilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; fenil-alquilo (C₁-C₂), que está sustituido

eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; fenil-alcoxilo (C₁-C₂); fenoxilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; alquil(C₁-C₄)-carboniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), alcoxi(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂) y 3-oxetaniloxilo, -C(O)NR⁹R¹⁰, en el que R⁹ y R¹⁰ se seleccionan, independientemente entre sí, del grupo que está constituido por hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), o en el que R⁹ y R¹⁰ juntos forman un grupo alquileo (C₁-C₆) que puede contener un átomo de oxígeno o átomo de azufre o uno o dos grupos amino o alquil(C₁-C₆)-amino

y/o los restos R⁴ y R⁵ adyacentes uno con respecto a otro pueden estar enlazados entre sí de manera cíclica y/o forman un grupo alquileo (C₁-C₆), que pueden contener uno o varios átomos de oxígeno y/o azufre, pudiendo estar monosustituido o polisustituido el grupo alquileo (C₁-C₆) con halógeno y pudiendo ser iguales o distintos los respectivos sustituyentes de halógeno.

En el caso de que los restos, en particular restos que comprenden un grupo arilo, un grupo cicloalquilo, un grupo alquilo, un grupo alquileo, un grupo alquinilo y un grupo cicloalquileo, comprendan uno o varios sustituyentes, tales como por ejemplo cicloalquilo o arilo, entonces se seleccionan los sustituyentes preferentemente del grupo que está constituido por alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), nitro, ciano, cicloalquilo (C₁-C₃), haloalcoxilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-tio, alquil(C₁-C₆)-carbonilo, alcoxi(C₁-C₆)-carbonilo o halógeno, pudiendo estar los restos mencionados eventualmente enlazados entre sí de manera cíclica, con la condición de que se encuentren en posición orto.

En una primera forma de realización de la presente invención están comprendidos compuestos de fórmula general (I) en los que

R¹ preferentemente

se selecciona del grupo que está constituido por H, halógeno, nitro, ciano, carboxilo, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), cicloalcoxilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-carbonilo, alcoxi(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalcoxi(C₃-C₆)-carbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, alquil(C₁-C₄)-tio, cicloalquil(C₃-C₆)-tio, alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfoniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfoniloxilo, alquileo (C₂-C₃), alquinilo (C₂-C₃), alquileo(C₂-C₃)-oxilo, alquinil(C₂-C₃)-oxilo, -NHCO-alquilo (C₁-C₃), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₃), -NHCONH-alquilo (C₁-C₃), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₃), -OCONH-alquilo (C₁-C₃), -CONHR⁹, -CONR⁹R¹⁰, en el que R⁹ y R¹⁰ son independientemente entre sí hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), en los que el resto R¹ mencionado anteriormente puede estar monosustituido o polisustituido e independientemente entre sí con restos que se seleccionan del grupo que está constituido por halógeno y alquilo (C₁-C₆);

R¹ de manera especialmente preferente

se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, I, Me, Et, NO₂, CHF₂ y CF₃; y

R¹ de manera muy especialmente preferente

se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, I y Me.

En una segunda forma de realización de la presente invención están comprendidos compuestos de fórmula general (I), en los que

R² preferentemente

se selecciona del grupo que está constituido por H, halógeno, nitro, ciano, carboxilo, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), cicloalcoxilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-carbonilo, alcoxi(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalcoxi(C₃-C₆)-carbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, alquil(C₁-C₄)-tio, cicloalquil(C₃-C₆)-tio, alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfoniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfoniloxilo, alquileo (C₂-C₃), alquinilo (C₂-C₃), alquileo(C₂-C₃)-oxilo, alquinil(C₂-C₃)-oxilo, -NHCO-alquilo (C₁-C₃), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₃), -NHCONH-alquilo (C₁-C₃), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₃), -OCONH-alquilo (C₁-C₃), -CONHR⁹, -CONR⁹R¹⁰, en el que R⁹ y R¹⁰

5		son independientemente entre sí hidrógeno, alquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), en los que el resto R ² mencionado anteriormente puede estar monosustituido o polisustituido e independientemente entre sí con restos que se seleccionan del grupo que está constituido por halógeno y alquilo (C ₁ -C ₆);
	R ² de manera especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, I, Me, Et, NO ₂ , CHF ₂ y CF ₃ ; y
	R ² de manera muy especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl y Br.
10	Una tercera forma de realización de la presente invención comprende compuestos de fórmula general (I), en los que	
	R ³ preferentemente	se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, halógeno, hidroxilo, ciano, nitro, amino, alquilo (C ₁ -C ₄), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₄), alcoxilo (C ₁ -C ₄), alcoxi(C ₁ -C ₄)-alquilo (C ₁ -C ₂), cicloalcoxilo (C ₃ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₄), alquil(C ₁ -C ₄)-tio, alquil(C ₁ -C ₄)-tio-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-sulfinilo, alquil(C ₁ -C ₄)-sulfinil-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-sulfonilo, alquil(C ₁ -C ₄)-sulfonil-alquilo (C ₁ -C ₂), di-alquil(C ₁ -C ₄)-amino, alquenilo (C ₂ -C ₄), alquinilo (C ₂ -C ₄), alquenil(C ₃ -C ₄)-oxilo, alquinil(C ₃ -C ₄)-oxilo, cicloalquil(C ₃ -C ₆)-alcoxilo (C ₁ -C ₂), hidroxil-alquilo (C ₁ -C ₂), hidroxil-alcoxilo (C ₁ -C ₂), ciano-alcoxilo (C ₁ -C ₂), ciano-alquilo (C ₁ -C ₂); fenilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; fenil-alquilo (C ₁ -C ₂), que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; fenil-alcoxilo (C ₁ -C ₂), que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; alquil(C ₁ -C ₄)-carboniloxilo, cicloalquil(C ₃ -C ₆)-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-carbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), alcoxi(C ₁ -C ₄)-carbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), aminocarbonil-alquilo (C ₁ -C ₂) y 3-oxetaniloxilo, -C(O)NR ⁹ R ¹⁰ , en el que R ⁹ y R ¹⁰ se seleccionan, independientemente entre sí, del grupo que está constituido por hidrógeno, alquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), o en el que R ⁹ y R ¹⁰ juntos forman un grupo alquilenilo (C ₁ -C ₆) que puede contener un átomo de oxígeno o átomo de azufre o uno o dos grupos amino o alquil(C ₁ -C ₆)-amino; y
40	R ³ de manera especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, I, CN, Me, Et, Pr, iPr, tBu, CHF ₂ , CF ₃ , OMe, OEt, OCHF ₂ y OCH ₂ CF ₃ ; y
	R ³ de manera muy especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por F, Cl, Br, CHF ₂ , CF ₃ , OCHF ₂ , OCF ₃ , OCH ₂ CF ₃ , Me, OMe, Pr, iPr y Et.
	Una cuarta forma de realización de la presente invención comprende compuestos de fórmula general (I), en los que	
45	R ⁴ preferentemente	se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno; alquilo (C ₁ -C ₄); haloalquilo (C ₁ -C ₄); fenilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; fenil-alquilo (C ₁ -C ₂), que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; cicloalquilo (C ₃ -C ₆); cicloalquil(C ₃ -C ₆)-alquilo (C ₁ -C ₂), estando sustituido el resto cicloalquilo eventualmente con alquilo (C ₁ -C ₄); alquenilo (C ₂ -C ₄), alquinilo (C ₂ -C ₄), alcoxi(C ₁ -C ₄)-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-tio-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-sulfinil-alquilo (C ₁ -C ₂), ciano-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-sulfonil-alquilo (C ₁ -C ₂), alcoxi(C ₁ -C ₄)-carbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), aminocarbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), mono-alquil(C ₁ -C ₄)-aminocarbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), di-

5		alquil(C ₁ -C ₄)-aminocarbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), hidroxialquilo (C ₁ -C ₄), alquil(C ₁ -C ₄)-carbonil-alquilo (C ₁ -C ₄), alcoxi(C ₁ -C ₄)-carbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-sulfonilo; fenilsulfonilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; alquil(C ₁ -C ₄)-carbonilo; fenilcarbonilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; y alcoxi(C ₁ -C ₄)-carbonilo;
10		
	R ⁴ de manera especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por H, Me, Et, Pr, cPr, iPr, Bu, iBu, sBu, tBu, cPen, cHex, CHF ₂ , CH ₂ CF ₃ , Ph, Ph(4-Cl), CH ₂ cPr, CH ₂ cPr(2-Me), CHMecPr, CH ₂ cBu, CH ₂ cPen, CH ₂ cHex, CH ₂ Ph, CH ₂ CH=CH ₂ , CH ₂ C≡CH, CHMeC=CH, CH ₂ C≡CMe, CH ₂ OMe, CH ₂ OEt, CH ₂ CH ₂ OH, CH ₂ CH ₂ OMe, CH ₂ CH ₂ OEt, CH ₂ CH ₂ C(O)Me, CH ₂ SMe, CH ₂ SO ₂ Me, CH ₂ CN, CH ₂ C(O)OMe, CH ₂ C(O)OEt, CH ₂ C(O)NH ₂ , CH ₂ C(O)NMe ₂ , CH ₂ C(O)Me, SO ₂ Me, SO ₂ Ph, C(O)Me, C(O)Ph y C(O)OMe; y
15		
20	R ⁴ de manera muy especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por Me, Et y CHF ₂ .
	Una quinta forma de realización de la presente invención comprende compuestos de fórmula general (I), en los que	
	R ⁵ preferentemente	se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, halógeno, hidroxilo, ciano, nitro, amino, alquilo (C ₁ -C ₄), haloalquilo (C ₁ -C ₄), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₄), alcoxi(C ₁ -C ₄)-alcoxilo (C ₁ -C ₄), alcoxi(C ₁ -C ₄)-alquilo (C ₁ -C ₂), cicloalcoxilo (C ₃ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₄), alquil(C ₁ -C ₄)-tio, alquil(C ₁ -C ₄)-tio-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -4)-sulfinilo, alquil(C ₁ -C ₄)-sulfinil-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-sulfonilo, alquil(C ₁ -C ₄)-sulfonil-alquilo (C ₁ -C ₂), di-alquil(C ₁ -C ₄)-amino, alquenilo (C ₂ -C ₄), haloalquenilo (C ₂ -C ₄), ciano-alquilo (C ₁ -C ₄), alquinilo (C ₂ -C ₄), alquenil(C ₃ -C ₄)-oxilo, alquinil(C ₃ -C ₄)-oxilo, cicloalquil(C ₃ -C ₆)-alcoxilo (C ₁ -C ₂), hidroxialquilo (C ₁ -C ₂), hidroxialcoxilo (C ₁ -C ₂), ciano-alcoxilo (C ₁ -C ₂), ciano-alquilo (C ₁ -C ₂); fenilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; fenil-alquilo (C ₁ -C ₂), que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; fenil-alcoxilo (C ₁ -C ₂); fenoxilo, que está sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, nitro, ciano, alquilo (C ₁ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), alcoxilo (C ₁ -C ₆), haloalcoxilo (C ₁ -C ₆) o alquil(C ₁ -C ₆)-tio; alquil(C ₁ -C ₄)-carboniloxilo, cicloalquil(C ₃ -C ₆)-alquilo (C ₁ -C ₂), alquil(C ₁ -C ₄)-carbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), alcoxi(C ₁ -C ₄)-carbonil-alquilo (C ₁ -C ₂), aminocarbonil-alquilo (C ₁ -C ₂) y 3-oxetaniloxilo, - C(O)NR ⁹ R ¹⁰ , en el que R ⁹ y R ¹⁰ se seleccionan, independientemente entre sí, del grupo que está constituido por hidrógeno, alquilo (C ₁ -C ₆), cicloalquilo (C ₃ -C ₆), haloalquilo (C ₁ -C ₆), o en el que R ⁹ y R ¹⁰ juntos forman un grupo alquilenilo (C ₁ -C ₆) que puede contener un átomo de oxígeno o átomo de azufre o uno o dos grupos amino o alquil(C ₁ -C ₆)-amino; y
25		
30		
35		
40		
45		
50		
	R ⁵ de manera especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, I, CN, Me, Et, CHF ₂ , CF ₃ , OCHF ₂ , OCH ₂ CF ₃ , OMe, OEt, OPr, OiPr, OtBu, SO ₂ Me, SO ₂ iPr, 3-oxetaniloxilo, OPh, OCH ₂ CH=CH ₂ , OCH ₂ C≡CH, OCH ₂ CHF ₂ , SEt, OCH ₂ CH ₂ OCH ₃ , SMe, OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F, OCH(CH ₂ F) ₂ , OCH ₂ CF=CH ₂ , OCH(CH ₃)CF ₃ , OCH ₂ CN, OCH(CH ₃)CH ₂ F, OCH ₂ CF ₂ CHF ₂ y OCH(CH ₃) ₂ ; y
55		
	R ⁵ de manera muy especialmente preferente	se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, CHF ₂ , CF ₃ , OCHF ₂ y OCH ₂ CF ₃ .
60		

En el contexto de la presente invención es posible combinar entre sí de manera discrecional los significados individuales preferentes, especialmente preferentes y muy especialmente preferentes de los sustituyentes R^1 a R^5 tal como se define en las cinco formas de realización mencionadas anteriormente. Es decir que los compuestos de fórmula general (I) están comprendidos por la presente invención, en los que por ejemplo el sustituyente R^3 presenta un significado preferente y los sustituyentes R^1 , R^2 , R^4 y R^5 presentan el significado general o sin embargo el sustituyente R^4 presenta un significado preferente, el sustituyente R^5 presenta un significado especialmente preferente y los sustituyentes R^1 a R^3 presentan un significado muy especial.

En el contexto de la presente invención están comprendidos por el compuesto de fórmula general (I) también compuestos que están cuaternizados en un átomo de nitrógeno mediante a) protonación, b) alquilación u c) oxidación. Los compuestos de fórmula general (I) pueden formar sales eventualmente mediante adición de un ácido adecuado inorgánico u orgánico, tal como por ejemplo HCl, HBr, H_2SO_4 o HNO_3 , sin embargo también ácido oxálico o ácidos sulfónicos en un grupo básico, tal como por ejemplo amino o alquilamino. Los sustituyentes adecuados que se encuentran en forma desprotonada, tal como por ejemplo ácidos sulfónicos o ácidos carboxílicos, pueden formar sales internas con grupos protonables por su parte, tales como grupos amino. Pueden formarse sales igualmente debido a que con sustituyentes adecuados, tales como por ejemplo ácidos sulfónicos o ácidos carboxílicos, se sustituye el hidrógeno por un catión adecuado en el sector agroquímico. Estas sales son por ejemplo sales metálicas, en particular sales de metal alcalino o sales de metal alcalinotérreo, en particular sales de sodio y de potasio, o también sales de amonio, sales con aminas orgánicas o sales de amonio cuaternario con cationes de fórmula $[NRR'R'']^+$, en la que R a R'' representan respectivamente de manera independiente un resto orgánico, en particular alquilo, arilo, arilalquilo o alquilarilo.

En la fórmula general (I) y todas las demás fórmulas en la presente invención, los restos alquilo, alcoxilo, haloalquilo, haloalcoxilo, alquilamino, alquiltio, haloalquiltio, alquilsulfínico, alquilsulfónico, haloalquilsulfínico y haloalquilsulfónico, así como los correspondientes restos insaturados y/o sustituidos pueden ser de cadena lineal o pueden estar ramificados respectivamente en la cadena principal de carbono. Si no se indica de manera especial, se prefieren en caso de estos restos las cadenas principales de carbono pequeñas, por ejemplo con 1 a 6 átomos de C, en particular de 1 a 4 átomos de C, o en caso de grupos insaturados con 2 a 6 átomos de C, en particular de 2 a 4 átomos de C. Los restos alquilo, también en los significados compuestos tal como alcoxilo, haloalquilo etc., significan por ejemplo metilo, etilo, n- o i-propilo, n-, i-, t- o 2-butilo, pentilos, hexilos, tales como n-hexilo, i-hexilo y 1,3-dimetilbutilo, heptilos, tales como n-heptilo, 1-metilhexilo y 1,4-dimetilpentilo; los restos alqueno y alquino tienen el significado de los posibles restos insaturados que corresponden a los restos alquilo; estando contenido al menos un doble enlace o triple enlace, preferentemente un doble enlace o triple enlace. Alqueno significa por ejemplo vinilo, alilo; 1-metilprop-2-en-1-ilo, 2-metilprop-2-en-1-ilo, but-2-en-1-ilo, but-3-en-1-ilo, 1-metil-but-3-en-1-ilo y 1-metil-but-2-en-1-ilo; alquino significa por ejemplo etinilo, propargilo, but-2-in-1-ilo, but-3-in-1-ilo y 1-metil-but-3-in-1-ilo.

Halógeno significa flúor, cloro, bromo o yodo; haloalquilo, haloalqueno y haloalquino significan alquilo, alqueno o alquino sustituido parcial o completamente con halógeno, preferentemente con flúor, cloro o bromo, en particular con flúor y/o cloro, por ejemplo monohaloalquilo (= monohalogenoalquilo), perhaloalquilo, CF_3 , CHF_2 , CF_3CF_2 , CH_2FCHCl , CCl_3 , $CHCl_2$, CH_2CH_2Cl ; haloalcoxilo es por ejemplo OCF_3 , $OCHF_2$, OCH_2F , CF_3CF_2O , OCH_2CF_3 y OCH_2CH_2Cl ; lo correspondiente se aplica para haloalqueno y otros restos sustituidos con halógeno.

Arilo eventualmente sustituido es preferentemente fenilo, que está no sustituido o monosustituido o polisustituido, preferentemente hasta trisustituido con restos iguales o distintos seleccionados del grupo que está constituido por halógeno, alquilo (C_1-C_4), alcoxilo (C_1-C_4), haloalquilo (C_1-C_4), haloalcoxilo (C_1-C_4), cicloalquilo (C_3-C_6), alquil(C_1-C_6)-tio, ciano y nitró, por ejemplo o-tolilo, m-tolilo y p-tolilo, dimetilfenilos, 2-clorofenilo, 3-clorofenilo y 4-clorofenilo, 2-trifluorometilo, 3-trifluorometilo y 4-trifluorometilo y 2-triclorometilfenilo, 3-triclorometilfenilo y 4-triclorometilfenilo, 2,4-diclorofenilo, 3,5-diclorofenilo, 2,5-diclorofenilo y 2,3-diclorofenilo, o-metoxifenilo, m-metoxifenilo y p-metoxifenilo.

Con la definición "está sustituido con uno o varios restos" quiere decirse, cuando no se defina de otra manera, uno o varios restos iguales o distintos.

Los sustituyentes mencionados a modo de ejemplo ("primer nivel de sustituyentes"), siempre que éstos contengan proporciones que contienen hidrocarburo, pueden estar sustituidos allí eventualmente de manera adicional ("segundo nivel de sustituyentes"), por ejemplo con uno de los sustituyentes, tal como se ha definido para el primer nivel de sustituyentes. Son posibles otros planos de sustituyentes correspondientes. Preferentemente se comprenden por el término "resto sustituido" sólo uno o dos planos de sustituyentes.

En los restos con átomos de C se prefieren aquellos con 1 a 6 átomos de C, preferentemente de 1 a 4 átomos de C, en particular 1 o 2 átomos de C. Se prefieren por regla general sustituyentes del grupo halógeno, por ejemplo flúor y cloro, alquilo (C_1-C_4), preferentemente metilo o etilo, haloalquilo (C_1-C_4), preferentemente trifluorometilo, alcoxilo (C_1-C_4), preferentemente metoxilo o etoxilo, haloalcoxilo (C_1-C_4), nitró y ciano.

Son también objeto de la invención todos los estereoisómeros, que están comprendidos por la fórmula (I), y sus mezclas. Tales compuestos de fórmula (I) contienen uno o varios átomos de C asimétricos (= átomos de C sustituidos de manera asimétrica), o/y átomos de azufre asimétricos en forma de sulfóxidos ($n = 1$), que pueden existir en dos formas enantioméricas, o también dobles enlaces que no están indicados aparte en las fórmulas

generales (I). Los estereoisómeros posibles definidos mediante su forma espacial específica, tales como enantiómeros, diastereómeros, isómeros Z y E están todos comprendidos por la fórmula (I) y pueden obtenerse según procedimientos habituales a partir de mezclas de los estereoisómeros o pueden prepararse también mediante reacciones estereoselectivas en combinación con el uso de sustancias de partida estereoquímicamente puras.

- 5 Las definiciones de restos mencionadas anteriormente o mencionadas en intervalos preferentes se aplican tanto para los productos finales de fórmula (I) como de manera correspondiente para los productos de partida y productos intermedios necesarios respectivamente para la preparación. Estas definiciones de restos pueden combinarse de manera discrecional entre sí, como también entre los intervalos preferentes indicados.

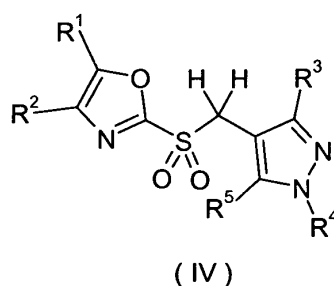
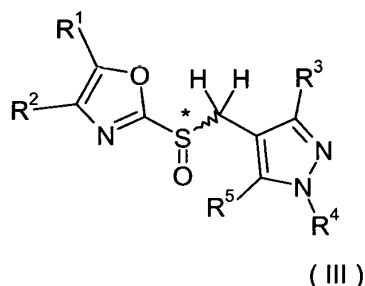
- 10 Las posibilidades de combinación de los distintos sustituyentes de fórmula general (I) han de entenderse de modo que puedan tenerse en cuenta los principios generales de la estructura de compuestos químicos, es decir la fórmula (I) no comprende compuestos de los que el experto sepa que son químicamente imposibles.

Son también objeto de la presente invención procedimientos para la preparación de los compuestos de fórmula general (I) y/o sus sales.

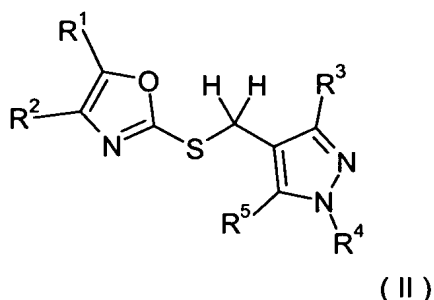
- 15 Los compuestos de fórmula (I) de acuerdo con la invención pueden prepararse como alternativa mediante distintos procedimientos.

En los siguientes procedimientos se usan parcialmente disolventes. En este contexto designan "disolventes inertes" respectivamente disolventes que sean inertes en las respectivas condiciones de reacción, sin embargo no deben ser inertes en condiciones de reacción discrecionales.

- 20 a.) Para la preparación de sulfóxidos ópticamente activos de fórmula (III) ($n = 1$) o sulfonas de fórmula (IV) ($n = 2$), en la que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I),



se oxida por ejemplo un tioéter de fórmula general (II),



- 25 en la que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I), con un equivalente de un agente oxidante para dar los sulfóxidos ópticamente activos (III) ($n = 1$) o con dos equivalentes de un agente oxidante para dar las sulfonas (IV) ($n = 2$). Pueden obtenerse las sulfonas de fórmula general (IV) también a partir de los sulfóxidos ópticamente activos de fórmula general (III), oxidándose los sulfóxidos de fórmula general (III) con un equivalente de un agente oxidante

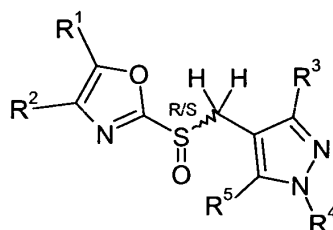
para dar las sulfonas de fórmula general (IV).

Los agentes oxidantes que pueden usarse para esta reacción, no están sujetos a determinaciones especiales y pueden usarse generalmente como agentes oxidantes que pueden oxidar correspondientes compuestos de azufre en compuestos de sulfóxido o compuestos de sulfona.

Como agentes oxidantes para la preparación de los sulfóxidos ópticamente activos ($n = 1$) son adecuados peróxidos inorgánicos tales como por ejemplo peróxido de hidrógeno, metaperyodato de sodio, opcionalmente en presencia de un catalizador, tal como por ejemplo cloruro de rutenio(III), peróxidos orgánicos, tales como por ejemplo hidroperóxido de terc-butilo o perácidos orgánicos, tales como ácido peracético o preferentemente ácido 3-cloroperbenzoico. La reacción puede realizarse en hidrocarburos halogenados, por ejemplo diclorometano, 1,2-dicloroetano, un alcohol, tal como por ejemplo metanol, o en dimetilformamida, acetonitrilo, agua o ácido acético o en una mezcla de los disolventes mencionados anteriormente. La reacción se realiza en un intervalo de temperatura entre -80°C y 120°C , preferentemente entre -20°C y 50°C . Tales procedimientos se conocen en la bibliografía y se describen por ejemplo en J. Org. Chem., 58 (1993) 2791, J. Org. Chem., 68 (2003) 3849 y J. Heterocyclic Chem., 15 (1978) 1361.

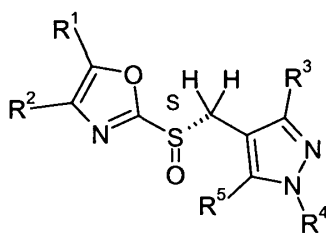
Como agentes oxidantes para la preparación de las sulfonas ($n = 2$) son adecuados por ejemplo peróxido de hidrógeno, peróxidos orgánicos, tales como por ejemplo hidroperóxido de terc-butilo o perácidos orgánicos, tales como ácido peracético o preferentemente ácido 3-cloroperbenzoico.

La síntesis enantioselectiva de sulfóxidos quirales de fórmula (III) en forma ópticamente enriquecida o pura puede realizarse, partiendo de tiocompuestos de fórmula (II), según procedimientos, tal como se describen por ejemplo en Chem. Rev., 103 (2003) 3651-3705, o la bibliografía allí citada y Adv. Synth. Catal., 347 (2005) 19-31, o la bibliografía allí citada. La configuración absoluta del producto depende en el caso individual de la estructura del catalizador ópticamente activo.

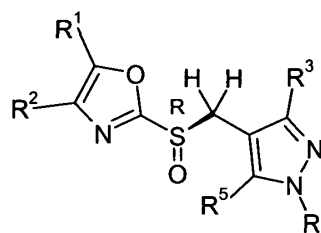


(III)

Los compuestos de fórmula general (III) están constituidos por una mezcla de los respectivos enantiómeros quirales (III-S) y (III-R) en la función sulfóxido



(III-S)



(III-R)

en los que los restos R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen el significado indicado anteriormente de acuerdo con la fórmula (I). Para la preparación de enantiómeros de fórmula general (III) se tienen en cuenta además de las síntesis enantioselectivas también procedimientos habituales de separación de racematos (véanse manuales de estereoquímica).

Las mezclas racémicas, por ejemplo de sulfóxidos ópticamente activos de fórmula general (III), pueden separarse según procedimientos conocidos. Los procedimientos de separación de racematos de este tipo se han descrito en manuales de estereoquímica, por ejemplo en "Basic Organic Stereochemistry" (Eds.: Eliel, Ernest L.; Wilen, Samuel H.; Doyle, Michael P.; 2001; John Wiley & Sons) y "Stereochemistry of Organic Compounds" (Eds.: Eliel, Ernest L.; Wilen, Samuel H.; Mander, Lewis N.; 1994; John Wiley & Sons). Según esto se tienen en cuenta por ejemplo formación de productos de adición con un reactivo auxiliar ópticamente activo, la separación de los productos de adición diastereómeros en los correspondientes diastereómeros, por ejemplo mediante cristalización, procedimientos de cromatografía, sobre todo cromatografía en columna y cromatografía de líquidos de alta resolución, destilación, eventualmente a presión reducida, extracción y otros procedimientos y una siguiente disociación posterior de los diastereómeros en los enantiómeros. Para las cantidades preparativas o en escala industrial se tienen en cuenta procedimientos tales como la cristalización de sales diastereoméricas que pueden obtenerse a partir de los compuestos (III) con ácidos ópticamente activos y eventualmente, en caso de grupos ácidos existentes, con bases ópticamente activas.

Para la separación de racematos mediante cristalización de sales diastereoméricas se tienen en consideración

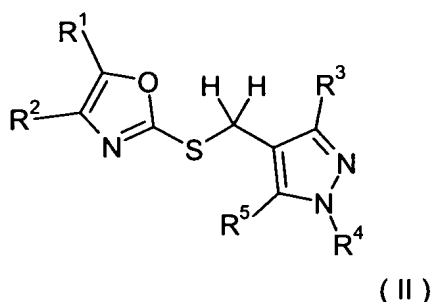
como ácido ópticamente activo por ejemplo ácido alcanforsulfónico, ácido alcanfórico, ácido bromoalcanforsulfónico, ácido quínico, ácido tartárico, ácido dibenzoiltartárico y otros ácidos análogos; como bases ópticamente activas se tienen en cuenta por ejemplo quinina, cinconina, quinidina, brucina, 1-feniletilamina y otras bases análogas.

Las cristalizaciones se realizan entonces en la mayoría de los casos en disolventes acuosos u orgánicos acuosos, precipitándose en primer lugar el diastereómero con la solubilidad más baja eventualmente tras la inoculación. Un enantiómero del compuesto de fórmula (III) se libera después de la sal precipitada o el otro enantiómero del cristalizado mediante acidificación o con base.

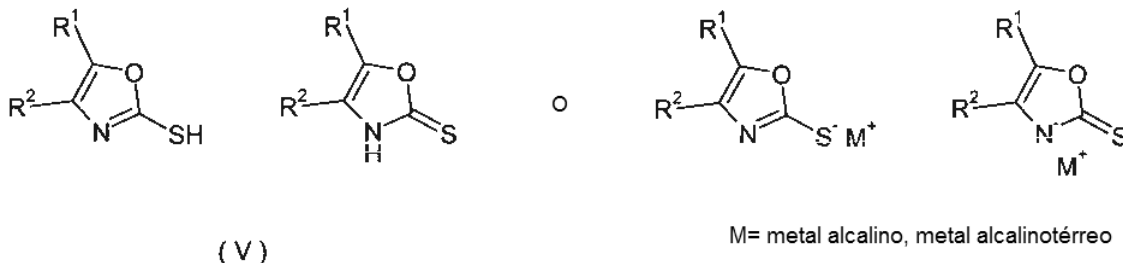
Además pueden separarse racematos mediante cromatografía con fases estacionarias quirales. Las separaciones de enantiómeros de este tipo pueden realizarse desde mg hasta en el intervalo de 100 kg con instalaciones de HPLC preparativa en funcionamiento puntual o continuo.

La preparación de los tioéteres de fórmula general (II), que sirven como producto de partida para la preparación de los sulfóxidos de fórmula general (III) o de las sulfonas de fórmula general (IV), se describe a continuación en los procedimientos b.), c.), d.), e.), f.), g.) y h.).

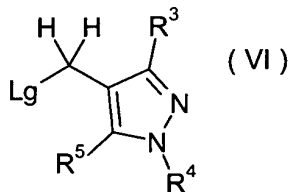
b.) Para la preparación de un tioéter de fórmula general (II),



en la que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I), se hace reaccionar por ejemplo 2-mercaptooxazol o una oxazol-2(3H)-tione o una sal del mismo, preferentemente una sal de metal alcalino o metal alcalinotérreo de fórmula general (V),



en la que R^1 , R^2 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I), con un derivado de (1H-pirazol-4-ilmetilo) de fórmula general (VI)



en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I) y Lg significa un grupo saliente, en presencia de una base adecuada de metal alcalino o metal alcalinotérreo, por ejemplo carbonato de potasio o hidruro de sodio, o de una base orgánica tal como por ejemplo 1,8-diazabicyclo(5.4.0)undec-7-eno (DBU), en un disolvente adecuado, por ejemplo dimetilformamida, tetrahydrofurano, etanol, o preferentemente acetonitrilo, en un intervalo de temperatura entre 0 °C y 100 °C, y eventualmente bajo una atmósfera de gas inerte, por ejemplo nitrógeno. Reacciones análogas para la reacción de 2-mercaptooxazoles u oxazol-2(3H)-tiones o sus sales se han descrito en la bibliografía, por ejemplo en los documentos DE 26 25 229 A, WO 99/52874 A, WO 01/66529 A, WO 95/24403 A, Bradsher, C. K.; Jones, W. J. Jr; J. Org. Chem. 32, 2079 (1967).

En lugar de los compuestos de mercapto mencionados o de las sales de los mismos pueden usarse también agentes formadores de mercaptano, tales como por ejemplo sales de isotiuronio.

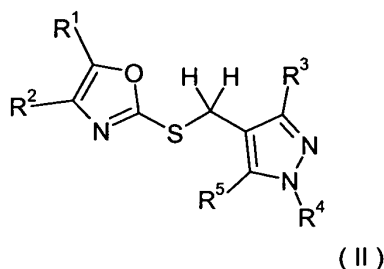
Como grupos salientes Lg se prefieren cloro, bromo, yodo o grupos sulfonato, tales como metanosulfonato,

trifluorometanosulfonato, etanosulfonato, becenosulfonato o toluenosulfonato.

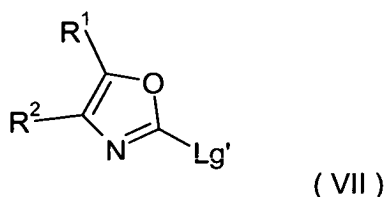
Los derivados de 2-mercaptooxazol usados en el procedimiento b.) u oxazol-2(3H)-tionas o correspondientes sales de los derivados de 2-mercaptooxazol o oxazol-2(3H)-tionas de fórmula general (V) los conoce el experto y pueden obtenerse parcialmente de manera comercial o pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto, por ejemplo tal como se describe en a) Science of Synthesis, Houben-Weyl (Methods of Molecular Transformations), Category 2, volumen 11, Ed. E. Schaumann; b) Houben-Weyl (Methoden der organische Chemie), volumen E8a, Hetarene III-Teil 1, Ed. E. Schaumann; c) Can. J. Chem., vol. 50, 3082-3083 (1972); d) documento WO 2003/006442 A.

Los derivados de (1H-pirazol-4-il-metilo) usados en el procedimiento b.) de fórmula general (VI) los conoce el experto o pueden obtenerse comercialmente o pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto (véase por ejemplo: a) Communications de la Faculte des Sciences de l'Universite d'Ankara, serie B: Chemistry and Chemical Engineering (1996), 41(1-2), 87-94; b) documento WO 2004/013106 A; c) documento WO 2006/024820 A).

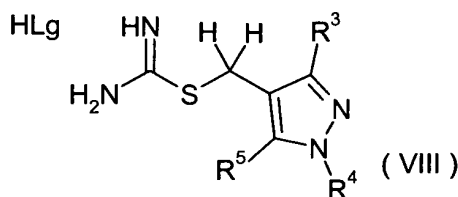
c.) Como alternativa puede realizarse la preparación de un tioéter de fórmula general (II),



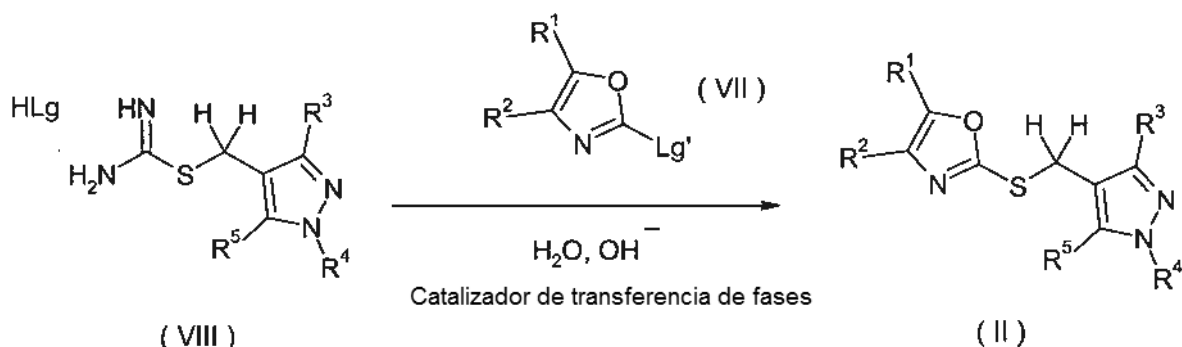
en la que R¹, R², R³, R⁴, R⁵ tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I), mediante la reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (VII),



en la que R¹, R² tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I) y Lg' significa un grupo saliente, pudiendo actuar como grupos salientes entre otros flúor, cloro, bromo, yodo, grupos sulfuros, sulfóxidos o sulfonato, con una sal de [(1H-pirazol-4-il-metil)]-imidotiocarbamato de fórmula general (VIII)



en la que R³, R⁴, R⁵ tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I), Lg significa un grupo saliente, en un procedimiento de un solo recipiente en presencia de una base acuosa de metal alcalino o alcalinotérreo. Generalmente se representa la reacción mediante el siguiente esquema de fórmula:



Los derivados de oxazol usados en el procedimiento c.) de fórmula general (VII) los conoce el experto o pueden obtenerse comercialmente o pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto (por ejemplo tal como se describe en Science of Synthesis, Houben-Weyl (Methods of Molecular Transformations), Category 2,

El uso de sales de imidotiocarbamato (sales de isotiuronio) en el sentido de una reacción de un solo recipiente para la saponificación de la sal de imidotiocarbamato (sal de isotiuronio) y la reacción del mercaptano producido de manera intermedia en una reacción de intercambio se describe en otro esquema de reacción se describen por ejemplo en los documentos DE 39 42 946, WO 2006/024820 A y WO 2006/037945 A y usando catálisis de transferencia de fases se describe en los documentos WO 2007/003294 A y WO 2007/003295 A.

Los compuestos de fórmula general (VIII) pueden obtenerse mediante reacción de un agente de alquilación de fórmula general (VI), en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I) y Lg es un grupo saliente, con tiourea.

La preparación de las sales de imidotiocarbamato (VIII) mediante reacción de un agente de (1H-pirazol-4-il)metilación de fórmula general (VI) con tiourea se realiza según procedimientos conocidos (tales como por ejemplo el procedimiento descrito en el documento DD 152557), ventajosamente mediante reacción con una cantidad equimolar de tiourea y opcionalmente en presencia de yoduro alcalino, por ejemplo yoduro de sodio o yoduro de potasio, en un disolvente inerte, tales como alcoholes de bajo peso molecular, tales como por ejemplo metanol, etanol o isopropanol; hidrocarburos, tales como por ejemplo benceno o tolueno; hidrocarburos halogenados, tales como por ejemplo diclorometano o cloroformo; o derivados de éter, tales como por ejemplo metil-terc-butiléter, tetrahydrofurano o dioxano e temperaturas entre 0 °C a 150 °C, preferentemente entre 20 °C y 100 °C.

Los compuestos de las sales de imidotiocarbamato de fórmula general (VIII) obtenidos en muchos casos mediante cristalización se hacen reaccionar en el procedimiento de acuerdo con la invención en general sin otras etapas de purificación con agitación fuerte con cantidades equimolares de los derivados de oxazol de fórmula general (VII) en condiciones de transferencia de fases.

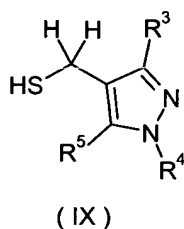
Ventajosamente se trabaja en este caso en un sistema de dos fases, siendo la fase orgánica además de una disolución acuosa fuertemente básica de hidróxido de metal alcalino o metal alcalinotérreo, preferentemente hidróxido de sodio o de potasio, con al menos dos equivalentes de la base, un disolvente inerte tal como tetrahydrofurano, dietiléter, acetonitrilo, pentano, hexano, benceno, tolueno, xileno, clorobenceno, diclorometano, cloroformo, tetracloruro de carbono, nitrobenzono o mezclas de estos disolventes.

Es posible también usar el producto de partida respectivamente de más valor de fórmula (VIII) o de fórmula (VII) por ejemplo en cantidad deficiente.

Como catalizadores de transferencia de fases son adecuados sales de amonio o de fosfonio cuaternario así como éteres corona, criptandos o polietilenglicoles. Ejemplos de tales catalizadores se encuentran por ejemplo en W. P. Weber, G. W. Gokel; Phase Transfer Catalysis in Organic Synthesis, Springer-Verlag, Berlin 1977 o E. V. Dehmlow, S. S. Dehmlow, Phase Transfer Catalysis, segunda edición Verlag Chemie, Weinheim 1983.

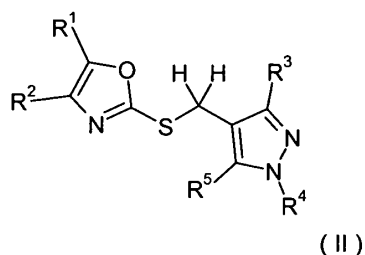
Preferentemente se agitan fuertemente los componentes de reacción y el catalizador a temperaturas de 20 °C a 100 °C en atmósfera de gas protector.

El mercaptano de fórmula general (IX) producido de manera intermedia en las condiciones de reacción, en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I),

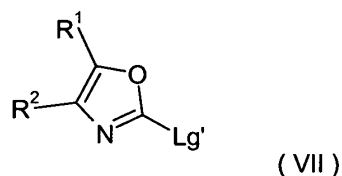


se capta *in situ* inmediatamente por el derivado de oxazol de fórmula general (VII).

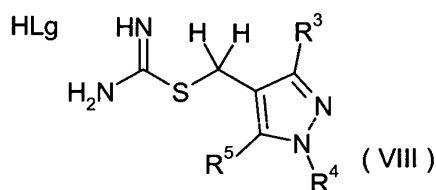
d.) Como alternativa puede realizarse la preparación de tioéteres de fórmula (II), en la que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I),



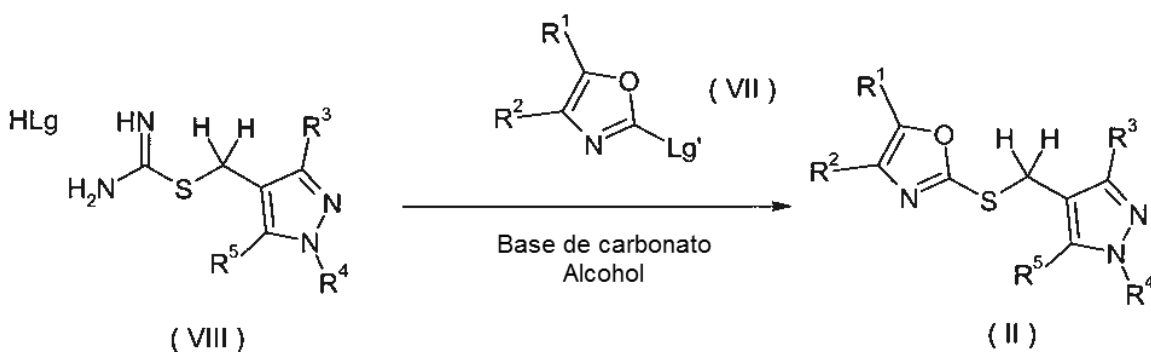
mediante la reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (VII)



en la que R^1 , R^2 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I) y Lg' significa un grupo saliente, pudiendo actuar como grupos salientes entre otros cloro, bromo o grupos metilsulfonilo, con una sal de (1H-pirazol-4-ilmetil)-imidotiocarbamato (sal de isotiuronio) de fórmula general (VIII)



en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I), Lg significa un grupo saliente, en un procedimiento de un solo recipiente en presencia de una base de carbonato de metal alcalino o metal alcalinotérreo y de un disolvente, tal como un alcohol. Generalmente se representa la reacción mediante el siguiente esquema de fórmula:



Los compuestos de fórmula general (VIII) pueden obtenerse mediante reacción de un agente de alquilación de fórmula general (VI), en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I), y Lg es un grupo saliente, con tiourea, tal como se describe de acuerdo con el procedimiento c.) mencionado anteriormente.

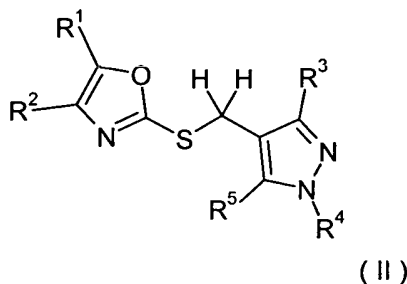
Las sales de imidotiocarbamato (sales de isotiuronio) de fórmula general (VIII) se hacen reaccionar en el procedimiento de acuerdo con la invención en general sin otras etapas de purificación con fuerte agitación con ligero exceso de los derivados de oxazol de fórmula general (VII) y con ligero exceso de una base de carbonato, por ejemplo carbonato de potasio, carbonato de sodio o bicarbonato de potasio, o de un hidróxido, por ejemplo hidróxido de potasio, o un alcóxido, por ejemplo alcóxido de sodio, en alcohol, por ejemplo etanol, éter, por ejemplo 1,4-dioxano, tetrahidrofurano, un disolvente polar tal como por ejemplo agua, dimetilformamida o una mezcla de estos disolventes en un intervalo de temperatura entre 20 °C y 200 °C, preferentemente entre 50 °C y 150 °C, opcionalmente bajo una atmósfera de gas inerte, por ejemplo nitrógeno, o en un aparato de microondas. Las sales de imidotiocarbamato (sales de isotiuronio) de fórmula general (VIII) pueden hacerse reaccionar posteriormente también *in situ*, sin aislamiento.

Ventajosamente se trabaja en este caso en un alcohol, preferentemente etanol, con al menos 1,1 equivalentes de la base, preferentemente carbonato de potasio (K_2CO_3).

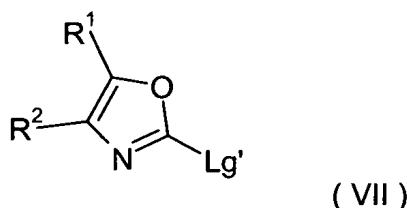
Tales procedimientos se conocen en la bibliografía y se describen por ejemplo en los documentos WO 2006/024820 A, WO 2001/012613 A y WO 2006/123088 A.

5 Los derivados de oxazol usados en el procedimiento d.) de fórmula general (VII) los conoce el experto o pueden obtenerse comercialmente o pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto [véase por ejemplo Science of Synthesis, Houben-Weyl (Methods of Molecular Transformations), Category 2, volumen 11, Ed. E. Schaumann].

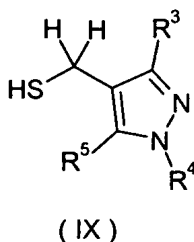
e.) Como alternativa puede realizarse la preparación de un tioéter de fórmula general (II),



10 en la que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I), mediante la reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (VII),



15 en la que R^1 , R^2 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I) y Lg' significa un grupo saliente, pudiendo actuar como grupos salientes LG' entre otros flúor, cloro, bromo o grupos sulfonato, con un (1H-pirazol-4-ilmetil)-mercaptano de fórmula general (IX),



20 en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I), en presencia de una base de metal alcalino o metal alcalinotérreo, por ejemplo carbonato de potasio o hidruro de sodio, o base orgánica, por ejemplo preferentemente 1,8-diazabicyclo(5.4.0)undec-7-eno (DBU), opcionalmente en un disolvente, por ejemplo dimetilformamida, tetrahidrofurano, etanol, o preferentemente acetonitrilo, en un intervalo de temperatura entre 0 °C y 100 °C, y opcionalmente bajo una atmósfera de gas inerte, por ejemplo nitrógeno.

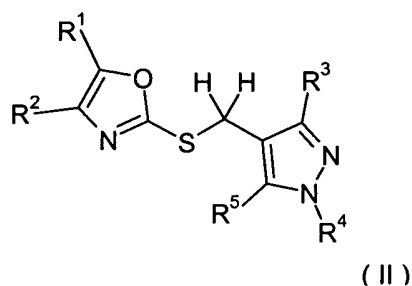
25 Algunos de los procedimientos se conocen en la bibliografía y se describen por ejemplo en los documentos WO 2006/024820 A, WO 2001/012613 A y WO 2006/123088 A.

Las sustituciones nucleófilas de derivados de oxazol se han descrito en la bibliografía, por ejemplo en Yamanaka, H.; Ohba, S.; Sakamoto, T.; Heterocycles (1990), 31(6), 1115-27.

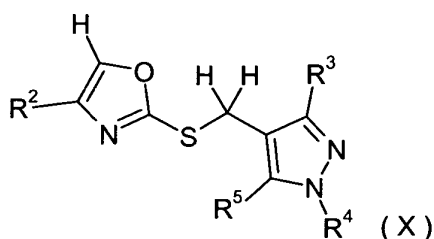
30 Los derivados de oxazol de fórmula general (VII) usados en el procedimiento e.) los conoce el experto o pueden obtenerse comercialmente o pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto [véase por ejemplo Science of Synthesis, Houben-Weyl (Methods of Molecular Transformations), Category 2, volumen 11, Ed. E. Schaumann].

Los mercaptanos de fórmula general (IX) usados en el procedimiento e.) los conoce el experto (véase por ejemplo el documento WO 2004/013106 A) o pueden prepararse en analogía a procedimientos conocidos por el experto para la preparación de mercaptano.

35 f.) La preparación de tioéteres de fórmula (II), en la que R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I), y R^1 significa halógeno o nitro



puede realizarse por ejemplo mediante la reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (X),



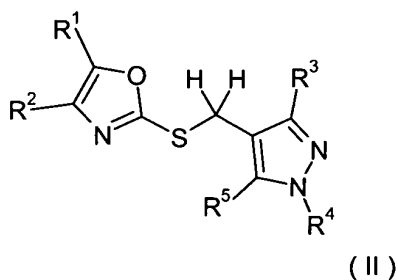
en la que R², R³, R⁴, R⁵ tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I). En general se representa la reacción mediante el siguiente esquema de fórmula:



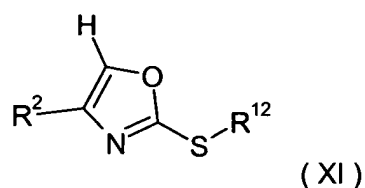
Los compuestos de fórmula general (X) se tratan con un agente de halogenación, tal como por ejemplo halógeno, tal como cloro, bromo, yodo o halo-succinimida, tal como N-clorosuccinimida (NCS), N-bromosuccinimida (NBS), N-yodosuccinimida (NIS) o para nitro con un agente de nitración, tal como por ejemplo ácido nitrante preparado a partir de ácido sulfúrico y ácido nítrico, y se hacen reaccionar en disolventes adecuados, tales como hidrocarburos clorados, por ejemplo tetraclorometano, diclorometano, 1,2-dicloroetano, o dimetilformamida para dar compuestos de fórmula (II).

Los derivados de tioéter análogos de fórmula general (X) usados en el procedimiento f.) pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto (véase por ejemplo: los documentos DE 26 25 229 A, WO 99/52874 A, WO 01/66529 A, WO 95/24403 A; o según los procedimientos mencionados anteriormente en b.), c.), d.), e.).

g.) La preparación de tioéteres de fórmula (II), en la que R¹, R², R³, R⁴, R⁵ tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I),



puede desarrollarse por ejemplo mediante la reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (XI),

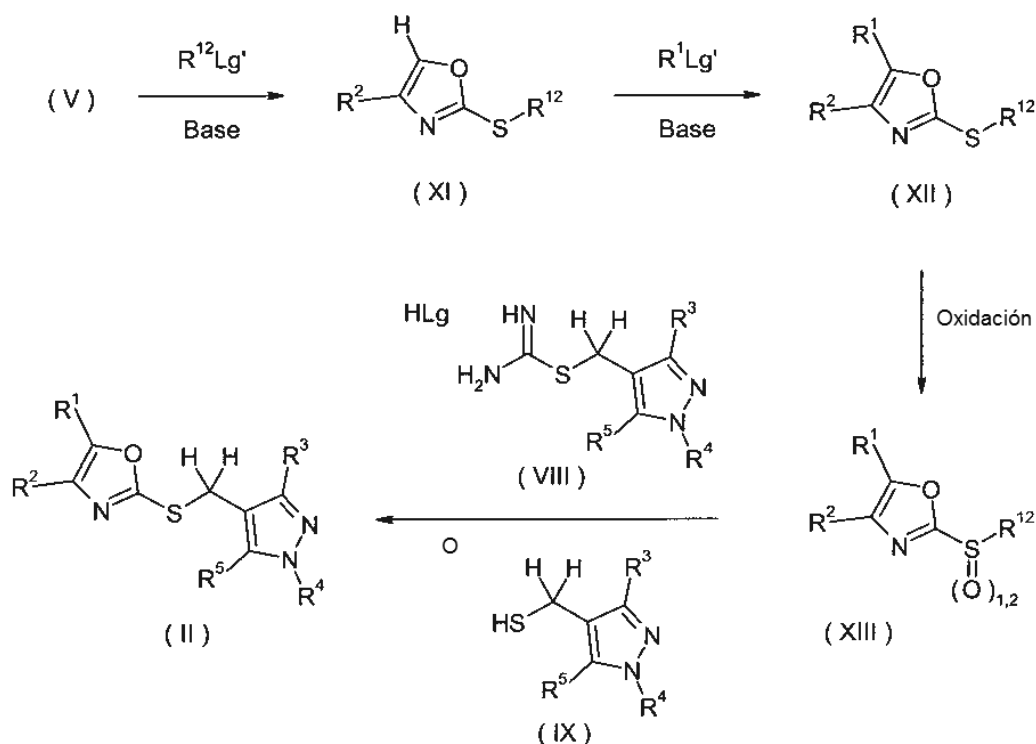


preparado a partir de un derivado de oxazol de fórmula general (V), mediante reacción con un agente de alquilación $R^{12}Lg'$,

en el que R^2 tiene el significado indicado anteriormente de acuerdo con la fórmula (I); R^{12} es preferentemente alquilo (C_1-C_6) que está no sustituido o sustituido con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, y es de manera especialmente preferente metilo o etilo, y Lg' significa un grupo saliente, pudiendo actuar como grupos salientes entre otros cloro, bromo o grupos metilsulfonylo,

en presencia de una base fuerte y un agente de alquilación R^1Lg' ,

en el que R^1 tiene el significado indicado anteriormente de acuerdo con la fórmula (I), según el esquema



en el que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I) y Lg o Lg' significa un grupo saliente, pudiendo actuar como grupos salientes entre otros flúor, cloro, bromo, yodo o grupos sulfonato tales como metanosulfonato, trifluorometanosulfonato, etanosulfonato, fenilsulfonato o toluenosulfonato, y R^{12} tiene preferentemente el significado indicado anteriormente.

Como base fuerte puede usarse diisopropilamida de litio (LDA), tetrametilpiperidina de litio (LTMP), hexametildisilazano de litio (LHMDS), preferentemente LDA, que pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto. Puede usarse hexametilfosforamida (HMPT) por ejemplo como co-disolvente.

Como disolventes sirven disolventes inertes tales como hidrocarburos, tales como por ejemplo hexano, heptano, ciclohexano, hidrocarburos aromáticos tales como por ejemplo benceno, éteres, tales como por ejemplo dietiléter, metil-terc-butiléter (MTBE), tetrahydrofurano, y dioxano, preferentemente tetrahydrofurano. Los disolventes mencionados anteriormente pueden usarse también como mezclas.

En esta reacción se usan los compuestos de fórmula (XI) y la base o el agente de alquilación R^1Lg' preferentemente en de 0,9 a 1,5 mol de los últimos por mol de los primeros. La reacción se realiza preferentemente en un intervalo de temperatura entre $-90^\circ C$ y el punto de ebullición del disolvente. El tiempo de reacción no está sujeto a ninguna limitación, las reacciones están concluidas generalmente tras de 1 a 24 h.

Para la preparación de las sulfonas y sulfóxidos de los compuestos de fórmula general (II), en la que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula general (I), puede usarse el procedimiento indicado en a).

Especialmente para el caso en el que R^1 sea flúor, se usan preferentemente reactivos para la fluoración electrófila, tal como por ejemplo bis-tetrafluoroborato de 1-clorometil-4-fluoro-1,4-diazabicyclo[2,2,2]octano (F-TEDA-BF₄, SelectFluor™), imida de ácido N-fluorobenzenosulfónico (NFBS o NFSi), N-fluoro-o-

bencenodisulfonimida (NFOBS), bis(tetrafluoroborato) de 1-fluoro-4-hidroxi-1,4-diazoniabicyclo[2.2.2]octano (NFTh, AccuFluor™) y otros tal como se describen en "Modern Fluoroorganic Chemistry", 2004, Wiley-VCH Verlag, Ed. P. Kirsch.

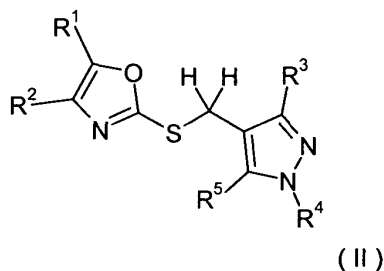
Los derivados de 2-mercaptooxazol u oxazol-2(3H)-tiones o correspondientes sales de los derivados de 2-mercaptooxazol o derivados de oxazol-2(3H)-tione de fórmula general (V) usados en el procedimiento g.) los conoce el experto o pueden obtenerse comercialmente o pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto, por ejemplo tal como se describen en Science of Synthesis, Houben-Weyl (Methods of Molecular Transformations), Category 2, volumen 11, Ed. E. Schaumann.

Los derivados de oxazol (XI) pueden desprotonarse en analogía a los procedimientos conocidos por el experto, de manera regioselectiva en la posición 5. Reacciones análogas usando una base de alquilo tal como butil-litio se describen en la bibliografía, por ejemplo en Boger, D. L. *et al.*; J. Med. Chem. (2007) 50 (33), 1058-1068 y Molinski, T. F. *et al.* J. Org. Chem. (1998) 63, 551-555, y con terc-butil-litio y una sal de cobre en Marino, J. P.; Nguyen, N. Tet. Lett. (2003) 44, 7395-7398 y la bibliografía allí citada.

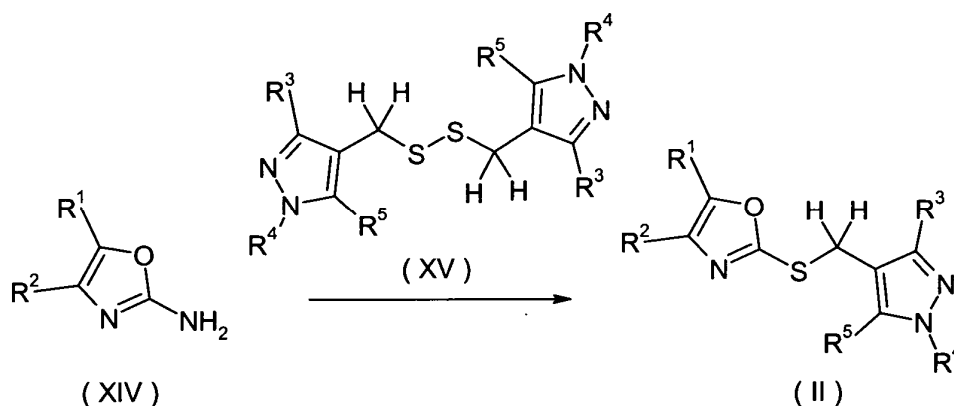
Los derivados de oxazol de fórmula general (XI) usados en el procedimiento g.) pueden prepararse por ejemplo de manera correspondiente al procedimiento b.) mediante reacción de un derivado de 2-mercaptooxazol o derivado de oxazol-2(3H)-tione de fórmula general (V) con un agente de alquilación $R^{12}Lg'$ o según procedimientos conocidos por el experto [véase por ejemplo Science of Synthesis, Houben-Weyl (Methods of Molecular Transformations), Category 2, volumen 11, Ed. E. Schaumann], o pueden obtenerse comercialmente.

Los compuestos de fórmula (XIII) mencionados en el procedimiento g.) pueden prepararse a partir de los compuestos de fórmula (XII) mediante oxidación según el procedimiento a) mencionado anteriormente o según procedimientos conocidos por el experto. Los compuestos de fórmula general (XIII) pueden hacerse reaccionar a su vez según el procedimiento c.) o d.) mencionado anteriormente con sales de (1H-pirazol-4-ilmetil)-imidotiocarbamato (VIII) o con (1H-pirazol-4-ilmetil)-mercaptanos de fórmula (IX) según el procedimiento e.) mencionado anteriormente para dar compuestos del tipo (II).

h.) La preparación de tioéteres de fórmula (II), en la que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I),



puede realizarse por ejemplo también mediante la reacción de un derivado de disulfuro de (1H-pirazol-4-ilmetil) de fórmula general (XV) con 2-amino-oxazoles de fórmula (XIV) y un agente de diazotización tal como se representa en el siguiente esquema,



y en el que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados indicados anteriormente de acuerdo con la fórmula (I).

Los disulfuros de (1H-pirazol-4-ilmetil) de fórmula general (XV) se llevan a reacción con un agente de diazotización y un derivado de 2-amino-oxazol de fórmula general (XIV) en un disolvente adecuado para dar compuestos de fórmula (II).

Los disolventes adecuados son disolventes inertes con respecto a la reacción, tal como por ejemplo hidrocarburos, así como hexano, heptano, ciclohexano, hidrocarburos aromáticos, tales como benceno, clorobenceno, tolueno, xileno, hidrocarburos halogenados tales como por ejemplo diclorometano, dicloroetano, cloroformo y tetracloruro de carbono, ésteres tales como por ejemplo acetato de etilo y acetato de metilo, éteres tales como por ejemplo dietiléter, terc-butiléter, dioxano, nitrilos así como acetonitrilo, alcoholes tales como por

ejemplo metanol, etanol, alcohol isopropílico, amidas tales como por ejemplo N,N-dimetilformamida y sulfóxidos tales como por ejemplo dimetilsulfóxido.

El reactivo de diazotización puede ser por ejemplo un éster de nitrito, tal como nitrito de isoamilo o una sal de nitrito, tal como por ejemplo nitrito de sodio.

Las proporciones molares pueden seleccionarse libremente, se prefieren cantidades equimolares de los disulfuros de heteroarilalquilo y de los agentes de diazotización. Preferentemente se realiza la reacción a una temperatura entre -20 °C y el punto de ebullición del disolvente seleccionado y se concluye tras un tiempo de 0,1 a 40 horas completamente. La diazotización de un derivado de 2-amino-oxazol de fórmula general (XIV) se ha descrito por ejemplo en Hodgetts, K. J.; Kershaw, M. T. *Org. Lett.* (2002), 4(17), 2905-2907.

Los derivados de oxazol de fórmula general (XIV) usados en el procedimiento h.) los conoce el experto o pueden obtenerse comercialmente, o pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto (véase *Science of Synthesis*, Houben-Weyl (Methods of Molecular Transformations), Category 2, volumen 11, Ed. E. Schaumann).

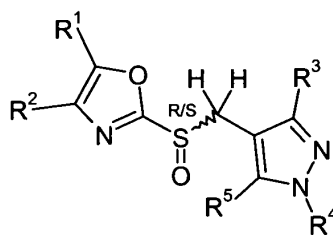
Los disulfuros de (1H-pirazol-4-ilmetilo) de fórmula general (XV) pueden prepararse según procedimientos conocidos por el experto, tal como por ejemplo en Gladysz, J. A., Wong, V. K., Jick, B. S.; *Tetrahedron* (1979) 35, 2329.

Como grupos salientes Lg se prefieren halógenos, por ejemplo cloro, bromo, yodo, o grupos alquilsulfonilo o aril-sulfonilo, tales como grupo metilo, etilo, fenilo o toilsulfonilo, o un grupo haloalquilsulfonilo, tal como trifluorometilsulfonilo, o nitro, prefiriéndose especialmente sin embargo cloro y metilsulfonilo.

Como grupos salientes Lg' se prefieren halógenos, por ejemplo cloro, bromo, yodo, o grupos alquilsulfonilo o aril-sulfonilo, tales como grupo metilo, etilo, fenilo o toilsulfonilo, o un grupo haloalquilsulfonilo, tal como trifluorometilsulfonilo, o nitro, prefiriéndose especialmente sin embargo cloro y metilsulfonilo.

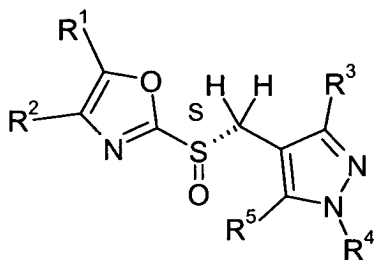
Como grupo R¹² se prefiere alquilo (C₁-C₆), que está no sustituido o sustituido eventualmente con uno o varios restos iguales o distintos del grupo halógeno, de manera especialmente preferente metilo o etilo.

Los presentes compuestos de fórmula general (III)

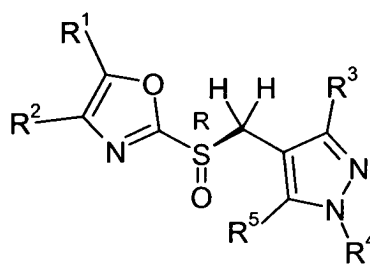


(III)

están compuestos de una mezcla de los respectivos enantiómeros (III-S) y (III-R) quirales en la función sulfóxido:



(III-S)



(III-R)

Éstos presentan por consiguiente un átomo de azufre quiral que está ilustrado en la estructura representada anteriormente mediante la designación (R/S). De acuerdo con las reglas según Cahn, Ingold y Prelog (reglas CIP) puede presentar este átomo de azufre tanto una configuración (R) como una configuración (S).

Por la presente invención se engloban compuestos de fórmula general (III) tanto con configuración (S) como con configuración (R), es decir que la presente invención engloba los compuestos de fórmula general (III) en los que el respectivo átomo de azufre presenta

- (1) una configuración (R); o
- (2) una configuración (S).

Además se engloban en el contexto de la presente invención también

- (3) mezclas discrecionales de compuestos de fórmula general (III), que presentan una configuración (R)

(compuestos de fórmula general (III-(R)), con compuestos de fórmula general (III), que presentan una configuración (S) (compuestos de fórmula general (III-S)).

La presente invención comprende compuestos de fórmula general (III) que son racémicos, es decir en los que los compuestos de fórmula general (III) se encuentran con configuración (S) (compuestos de fórmula general (III-S)) en comparación con la configuración (R) (compuestos de fórmula general (III-R)) como mezcla 1:1 (50 % de pureza estereoquímica).

Sin embargo se prefieren en el contexto de la presente invención también compuestos de fórmula general (III) con configuración (S) (compuestos de fórmula general (III-S)) en comparación con la configuración (R) (compuestos de fórmula general (III-R)) con una pureza estereoquímica de en general por encima del 50 % al 100 %, preferentemente del 60 % al 100 %, en particular del 80 % al 100 %, muy especialmente del 90 % al 100 %, especialmente del 95 % al 100 %, encontrándose preferentemente el respectivo compuesto (S) con una enantioselectividad de respectivamente más del 50 % de ee, preferentemente del 60 % al 100 % de ee, en particular del 80 % al 100 % de ee, muy especialmente del 90 % al 100 % de ee, encontrándose en la mayoría de los casos preferentemente del 95 % al 100 % de ee, con respecto al contenido total del respectivo compuesto (S).

Además se prefieren en el contexto de la presente invención también compuestos de fórmula general (III) con configuración (R) (compuestos de fórmula general (III-R)) en comparación con la configuración (S) (compuestos de fórmula general (III-R)) con una pureza estereoquímica de en general por encima del 50 % al 100 %, preferentemente del 60 % al 100 %, en particular del 80 % al 100 %, muy especialmente del 90 % al 100 %, especialmente del 95 % al 100 %, encontrándose preferentemente el respectivo compuesto (R) con una enantioselectividad de respectivamente más del 50 % de ee, preferentemente del 60 % al 100 % de ee, en particular del 80 % al 100 % de ee, muy especialmente del 90 % al 100 % de ee, encontrándose en la mayoría de los casos preferentemente del 95 % al 100 % de ee, con respecto al contenido total del respectivo compuesto (S).

Por tanto, la presente invención se refiere también a compuestos de fórmula general (III), en los que la configuración estereoquímica en el átomo de azufre (S) caracterizado con (*) se encuentra con una pureza estereoquímica del 60 % al 100 % de (S), preferentemente del 80 % al 100 % de (S), en particular del 90 % al 100 % de (S), muy especialmente del 95 % al 100 % de (S).

Los compuestos de fórmula general (III) pueden contener dependiendo del tipo y del enlace de los sustituyentes otros centros de quiralidad distintos del átomo de S marcado con una estrella (*) en la fórmula (III) y pueden encontrarse correspondientemente como estereoisómeros. Los posibles estereoisómeros definidos mediante su forma espacial específica, tales como enantiómeros, diastereómeros, isómeros Z y E están comprendidos todos por la fórmula (III). Si están presentes por ejemplo uno o varios grupos alquénico, entonces se producen diastereómeros (isómeros Z y E). Si están presentes por ejemplo uno o varios átomos de carbono asimétricos, entonces pueden producirse enantiómeros y diastereómeros. Los estereoisómeros pueden obtenerse a partir de las mezclas que de producen en la preparación según procedimientos de separación habituales, por ejemplo mediante procedimientos de separación cromatográficos. Igualmente pueden prepararse de manera selectiva estereoisómeros mediante uso de reacciones estereoselectivas usando sustancias de partida y/o coadyuvantes ópticamente activos. La invención se refiere por consiguiente también a todos los estereoisómeros que están comprendidos por la fórmula general (III), sin embargo no están indicados con su estereoforma específica y sus mezclas.

Si están presentes por ejemplo uno o varios grupos alquénico, entonces pueden producirse diastereómeros (isómeros Z y E).

Si están presentes por ejemplo uno o varios átomos de carbono asimétricos, entonces pueden producirse enantiómeros y diastereómeros.

Los correspondientes estereoisómeros pueden obtenerse a partir de las mezclas que se producen en la preparación según procedimientos de separación habituales, por ejemplo mediante procedimientos de separación cromatográficos. Igualmente pueden prepararse de manera selectiva estereoisómeros mediante uso de reacciones estereoselectivas usando sustancias de partida y/o coadyuvantes ópticamente activos. La invención se refiere por consiguiente también a todos los estereoisómeros que están comprendidos por la fórmula general (I), sin embargo no están indicados con su estereoforma específica y sus mezclas.

En el contexto de la presente invención pueden usarse sales de adición de ácido de los compuestos de fórmula general (I). Para la preparación de las sales de adición de ácido de los compuestos de fórmula (I) se tienen en cuenta los siguientes ácidos: ácidos hidrácidos tales como ácido clorhídrico o ácido bromhídrico, además ácido fosfórico, ácido nítrico, ácido sulfúrico, ácidos carboxílicos monofuncionales o bifuncionales y ácidos hidroxicarboxílicos tales como ácido acético, ácido maleico, ácido succínico, ácido fumárico, ácido tartárico, ácido cítrico, ácido salicílico, ácido sórbico o ácido láctico, así como ácidos sulfónicos tales como ácido p-toluenosulfónico o ácido 1,5-naftalenodisulfónico. Los compuestos de adición de ácido de fórmula (I) pueden obtenerse de manera sencilla según los procedimientos de formación de sales habituales, por ejemplo mediante disolución de un compuesto de fórmula (I) en un disolvente orgánico adecuado tal como por ejemplo metanol, acetona, cloruro de metileno o bencina y adición del ácido a temperaturas de 0 °C a 100 °C y pueden aislarse de manera conocida, por ejemplo mediante separación por filtración, y eventualmente pueden purificarse mediante lavado con un disolvente

orgánico inerte.

Las sales de adición de base de los compuestos de fórmula (I) se preparan preferentemente en disolventes polares inertes tales como por ejemplo agua, metanol o acetona a temperaturas de 0 °C a 100 °C. Las bases adecuadas para la preparación de las sales de acuerdo con la invención son por ejemplo carbonatos alcalinos, tales como carbonato de potasio, hidróxidos alcalinos y alcalinotérreos, tales como por ejemplo NaOH o KOH, hidruros alcalinos y alcalinotérreos, tales como por ejemplo NaH, alcoholatos alcalinos y alcalinotérreos, tales como por ejemplo metanolato de sodio o terc-butilato de potasio, amoníaco, etanolamina o hidróxido de amonio cuaternario de fórmula $[\text{NRR}'\text{R}''\text{R}''']^+ \text{OH}^-$.

Las colecciones de compuestos de fórmula (I) y/o sus sales que pueden sintetizarse según las reacciones mencionadas anteriormente, pueden prepararse también de manera paralelizada, pudiéndose realizarse esto de manera manual, de manera parcialmente automatizada o de manera completamente automatizada. A este respecto es posible por ejemplo automatizar la realización de la reacción, el procesamiento o la purificación de los productos o etapas intermedias. En total se entiende por esto un modo de proceder, tal como se describe por ejemplo por D. Tiebes en *Combinatorial Chemistry - Synthesis, Analysis, Screening* (editor Günther Jung), Verlag Wiley 1999, en las páginas 1 a 34.

Para la realización de la reacción y el procesamiento paralelizados pueden usarse una serie de aparatos que pueden obtenerse en el comercio, por ejemplo bloques de reacción Calpyso (*Calpyso reaction blocks*) de la empresa Barnstead International, Dubuque, Iowa 52004-0797, EE.UU. o estaciones de reacción (*reaction stations*) de la empresa Radleys, Shirehill, Saffron Walden, Essex, CB 11 3AZ, Inglaterra o MultiPROBE Automated Workstations de la empresa Perkin Elmer, Waltham, Massachusetts 02451, EE.UU. Para la purificación paralelizada de compuestos de fórmula general (I) y sus sales o de productos intermedios que se producen en la preparación se encuentran a disposición entre otros aparatos de cromatografía, por ejemplo de la empresa ISCO, Inc., 4700 Superior Street, Lincoln, NE 68504, EE.UU.

Los aparatos mencionados conducen a un modo de procedimiento modular, en el que están automatizadas las etapas de trabajo individuales, debiéndose realizar entre las etapas de trabajo sin embargo operaciones manuales. Esto puede evitarse mediante el uso de sistemas de automatización parcial o completamente integrados, en los que los módulos de automatización respectivos por ejemplo se manejan mediante robot. Los sistemas de automatización de este tipo pueden adquirirse por ejemplo por la empresa Caliper, Hopkinton, MA 01748, EE.UU.

La realización de etapas de síntesis individuales o diversas puede fomentarse mediante el uso de reactivos soportados en polímero/resinas de intercambio. En la bibliografía técnica se han descrito una serie de protocolos de ensayos, por ejemplo en *ChemFiles*, vol. 4, n.º 1, *Polymer-Supported Scavengers and Reagents for Solution-Phase Synthesis* (Sigma-Aldrich).

Además de los procedimientos descritos en el presente documento puede realizarse la preparación de compuestos de fórmula general (I) y sus sales completa o parcialmente mediante procedimientos soportados en fase sólida. Para este fin se unieron a una resina de síntesis las etapas intermedias individuales o todas las etapas intermedias de la síntesis o de una síntesis adaptada para el modo de procedimiento correspondiente. Los procedimientos de síntesis soportados en fase sólida se han descrito de manera suficiente en la bibliografía técnica, por ejemplo Barry A. Bunin en "The Combinatorial Index", Verlag Academic Press, 1998 y *Combinatorial Chemistry - Synthesis, Analysis, Screening* (editor Günther Jung), Verlag Wiley, 1999. El uso de procedimientos de síntesis soportados en fase sólida permite una serie de protocolos conocidos en la bibliografía, que a su vez pueden realizarse de manera manual o automatizada. Las reacciones pueden realizarse por ejemplo por medio de tecnología IRORI en microrreactores (*microreactors*) de la empresa Nexus Biosystems, 12140 Community Road, Poway, CA92064, EE.UU.

Tanto en fase sólida como en fase líquida puede soportarse la realización de etapas de síntesis individuales o diversas mediante el uso de la tecnología de microondas. En la bibliografía técnica se ha descrito una serie de protocolos de ensayo, por ejemplo en *Microwaves in Organic and Medicinal Chemistry* (editor C. O. Kappe y a. Stadler), Verlag Wiley, 2005.

La preparación de acuerdo con los procedimientos descritos en el presente documento proporciona compuestos de fórmula (I) y sus sales en forma de colecciones de sustancia, que se denominan bibliotecas. Son también objeto de la presente invención bibliotecas que contienen al menos dos compuestos de fórmula (I) y sus sales.

Debido a sus propiedades herbicidas y reguladoras del crecimiento de las plantas, los principios activos también pueden usarse para combatir plantas perjudiciales en cultivos de plantas conocidas o modificadas genéticamente aún en desarrollo. En general, las plantas transgénicas se distinguen por propiedades especialmente ventajosas, por ejemplo, por resistencias a ciertos pesticidas, principalmente ciertos herbicidas, resistencias a enfermedades de plantas u organismos causantes de enfermedades de plantas, tales como ciertos insectos, o microorganismos tales como hongos, bacterias o virus. Otras propiedades especiales se refieren, por ejemplo, al material recolectado con respecto a la cantidad, calidad, capacidad de almacenamiento, composición y constituyentes especiales. De esta manera, se conocen plantas transgénicas cuyo contenido de almidón está aumentado, o cuya calidad de almidón se ha alterado, o plantas en las que el material recolectado tiene una composición diferente de ácidos grasos. Otras

propiedades especiales pueden encontrarse en una tolerancia o resistencia contra estresores abióticos por ejemplo calor, frío, sequedad, salinidad y radicación ultravioleta.

Se prefiere el uso de los compuestos de fórmula (I) de acuerdo con la invención o sus sales en cultivos transgénicos económicamente importantes de plantas útiles y ornamentales, por ejemplo, de cereales tales como trigo, cebada, centeno, avena, mijo, arroz, mandioca y maíz o también cultivos de remolacha azucarera, algodón, soja, colza, patata, tomate, guisantes y otras hortalizas.

Preferentemente pueden usarse los compuestos de fórmula (I) como herbicidas en cultivos de plantas útiles que son resistentes, o que se han hecho resistentes mediante ingeniería genética, a los efectos fitotóxicos de los herbicidas.

Los procedimientos convencionales para generar nuevas plantas que tienen propiedades modificadas en comparación con las plantas producidas hasta la fecha consisten, por ejemplo, en procedimientos de reproducción tradicionales y la generación de mutantes. Como alternativa, pueden generarse nuevas plantas con propiedades alteradas con la ayuda de procedimientos recombinantes (véanse, por ejemplo, los documentos EP 0221044, EP 0131624). Por ejemplo, se han descrito en varios casos

- modificaciones mediante ingeniería genética de plantas de cultivo con la intención de modificar el almidón sintetizado en las plantas (por ejemplo, documentos WO 92/011376 A, WO 92/014827 A, WO 91/019806 A),
- plantas de cultivo transgénicas que son resistentes a ciertos herbicidas del tipo de glufosinato (véanse, por ejemplo, los documentos EP 0 242 236 A, EP 0 242 246 A) del tipo de glifosato (documento WO 92/000377 A) o de las sulfonilureas (documentos EP 0 257 993 A, US 5.013.659) o a combinaciones o mezclas de estos herbicidas mediante "apilamiento de genes" (*gene stacking*), tales como plantas de cultivo transgénicas por ejemplo maíz o soja con el nombre comercial o la denominación Optimum™ GAT™ (Glyphosate ALS Tolerant).
- plantas de cultivo transgénicas, por ejemplo, algodón, con la capacidad de producir toxinas de *Bacillus thuringiensis* (toxinas Bt), que hacen que las plantas sean resistentes a ciertas plagas (documentos EP 0 142 924 A, EP 0 193 259 A)
- plantas de cultivo transgénicas con una composición de ácidos grasos modificada (documento WO 91/013972 A).
- plantas de cultivo modificadas mediante ingeniería genética con nuevos constituyentes o metabolitos secundarios, por ejemplo, nuevas fitoalexinas, que producen una mayor resistencia a enfermedades (documentos EP 0 309 862 A, EP 0 464 461 A)
- plantas modificadas mediante ingeniería genética con una fotorrespiración reducida, que presentan mayores rendimientos y mayor tolerancia a estrés (EP 0 305 398 A)
- plantas de cultivo transgénicas que producen proteínas importantes desde el punto de vista farmacéutico o de diagnóstico ("agricultura molecular"),
- plantas de cultivo transgénicas que se caracterizan por mayores rendimientos o mejor calidad
- plantas de cultivo transgénicas que se caracterizan por una combinación, por ejemplo, de las nuevas propiedades mencionadas anteriormente ("apilamiento de genes")

En principio, se conoce un gran número de técnicas de biología molecular por medio de las cuales pueden generarse nuevas plantas transgénicas con propiedades modificadas; véase, por ejemplo, I. Potrykus y G. Spangenberg (eds.) *Gene Transfer to Plants*, Springer Lab Manual (1995), Springer Verlag Berlin, Heidelberg. o Christou, "Trends in Plant Science" 1 (1996) 423-431.

Para realizar dichas manipulaciones recombinantes, pueden introducirse en plásmidos moléculas de ácido nucleico que permitan la mutagénesis o cambios de secuencia por recombinación de secuencias de ADN. Por ejemplo, pueden realizarse sustituciones de bases, pueden retirarse secuencias parciales o pueden añadirse secuencias naturales o sintéticas con la ayuda de procedimientos convencionales. Para la unión de los fragmentos de ADN entre sí pueden añadirse adaptadores o ligadores a los fragmentos, véase, por ejemplo, Sambrook y *et al.*, 1989, *Molecular Cloning, A Laboratory Manual*, 2ª ed., Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, NY; o Winnacker "Gene und Klon", VCH Weinheim 2ª ed., 1996.

Por ejemplo, la generación de células vegetales con una actividad reducida de un producto génico puede conseguirse mediante la expresión de al menos un ARN antisentido correspondiente, un ARN sentido para conseguir un efecto de cosupresión o mediante la expresión de al menos una ribozima construida de forma adecuada que escinda específicamente transcritos del producto génico mencionado anteriormente.

Para este fin pueden usarse por un lado moléculas de ADN que incluyen la secuencia codificante entera de un producto génico incluyendo secuencias flanqueantes que puedan estar presentes eventualmente, y también moléculas de ADN que sólo incluyen partes de la secuencia codificante, siendo necesario que estas partes sean suficientemente largas para tener un efecto antisentido en las células. También es posible el uso de secuencias de ADN que tengan un alto grado de homología con las secuencias codificantes de un producto génico, pero no sean completamente idénticas a las mismas.

Cuando se expresan moléculas de ácido nucleico en plantas, la proteína sintetizada puede localizarse en cualquier compartimento discrecional de la célula vegetal. Sin embargo, para conseguir la localización en un compartimento

particular, puede unirse por ejemplo la región codificante con secuencias de ADN que aseguran la localización en un compartimento particular. Dichas secuencias se conocen por el experto (véase, por ejemplo, Braun y *et al.*, EMBO J. 11 (1992), 3219-3227; Wolter y *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 85 (1988), 846-850; Sonnewald y *et al.*, Plant J. 1 (1991), 95-106). Las moléculas de ácido nucleico también pueden expresarse en los orgánulos de las células vegetales.

Las células de plantas transgénicas pueden regenerarse por técnicas conocidas para producir plantas enteras. En principio, en el caso de las plantas transgénicas puede tratarse de plantas de cualquier especie vegetal discrecional, es decir plantas tanto monocotiledóneas como dicotiledóneas.

Así pueden obtenerse plantas transgénicas cuyas propiedades estén alteradas por sobreexpresión, supresión o inhibición de secuencias génicas o genes homólogos (= naturales) o la expresión de secuencias génicas o genes heterólogos (= extraños).

Preferentemente pueden usarse los compuestos (I) de acuerdo con la invención en cultivos transgénicos que sean resistentes a reguladores del crecimiento tales como, por ejemplo, 2,4 D, dicamba, o a herbicidas que inhiben enzimas esenciales de las plantas, por ejemplo acetolactato sintasas (ALS), EPSP sintasas, glutamina sintasas (GS) o hidroxifenilpiruvato dioxigenasas (HPPD), o respectivamente a herbicidas del grupo de las sulfonilureas, los glifosatos, glufosinatos o benzoilisoxazoles y principios activos análogos, o a cualquier combinación de estos principios activos.

De manera especialmente preferente pueden usarse los compuestos de acuerdo con la invención en plantas de cultivo transgénicas que son resistentes a una combinación de glifosatos y glufosinatos, glifosatos y sulfonilureas o imidazolinonas. De manera muy especialmente preferente pueden usarse los compuestos de acuerdo con la invención en plantas de cultivo transgénicas tales como por ejemplo maíz o soja con el nombre comercial o la denominación Optimum™ GAT™ (Glyphosate ALS Tolerant).

Cuando los principios activos de acuerdo con la invención se usan en cultivos transgénicos, con frecuencia se observan efectos, además de los efectos sobre plantas perjudiciales que pueden observarse en otros cultivos, que son específicos para la aplicación en el cultivo transgénico en cuestión, por ejemplo, un espectro ampliado especialmente o modificado de malas hierbas que pueden controlarse, cantidades de aplicación modificadas que pueden usarse para la aplicación, preferentemente una buena capacidad de combinación con los herbicidas a los que es resistente el cultivo transgénico, y un efecto sobre el crecimiento y la producción de las plantas de cultivo transgénicas.

Por tanto es objeto de la invención también el uso de los compuestos de fórmula (I) de acuerdo con la invención como herbicidas para combatir plantas perjudiciales en plantas de cultivos transgénicas.

Los compuestos de acuerdo con la invención pueden usarse en forma de polvos humectables, concentrados emulsionables, soluciones pulverizables, productos de espolvoreo o productos granulados en las preparaciones habituales. Por tanto son objeto de la invención también agentes herbicidas y reguladores del crecimiento de las plantas que contienen los compuestos de acuerdo con la invención. Los compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención pueden formularse de diversas formas de acuerdo con los parámetros biológicos y/o fisicoquímicos que se requieren. Las formulaciones posibles incluyen, por ejemplo: polvos humectables (WP), polvos solubles en agua (SP), concentrados solubles en agua, concentrados emulsionables (EC), emulsiones (EW) tales como emulsiones de aceite en agua y de agua en aceite, disoluciones pulverizables, concentrados en suspensión (SC), dispersiones basadas en aceite o en agua, disoluciones miscibles con aceite, suspensiones de cápsulas (CS), productos de espolvoreo (DP), productos desinfectantes, productos granulados para dispersión y aplicación en el sustrato, productos granulados (GR) en forma de microgranulados, granulados de pulverización, granulados revestidos y granulados de adsorción, granulados dispersables en agua (WG), granulados solubles en agua (SG), formulaciones ULV, microcápsulas y ceras.

En principio, estos tipos individuales de formulación se conocen y se describen, por ejemplo, en: Winnacker-Küchler, "Chemische Technologie", volumen 7, C. Hanser Verlag Munich, 4ª Ed. 1986, Wade van Valkenburg, "Pesticide Formulations", Marcel Dekker, N. Y., 1973; K. Martens, "Spray Drying" Handbook, 3ª Ed. 1979, G. Goodwin Ltd. London.

Igualmente se conocen los coadyuvantes de formulación necesarios, tales como materiales inertes, tensioactivos, disolventes y aditivos adicionales y se describen, por ejemplo, en: Watkins, "Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers", 2ª Ed., Darland Books, Caldwell N. J., H.v. Olphen, "Introduction to Clay Colloid Chemistry", 2ª Ed., J. Wiley & Sons, N. Y.; C. Marsden, "Solvents Guide", 2ª Ed., Interscience, N. Y. 1963; McCutcheon's "Detergents and Emulsifiers Annual", MC Publ. Corp., Ridgewood N. J.; Sisley y Wood, "Encyclopedia of Surface Active Agents", Chem. Publ. Co. Inc., N. Y. 1964; Schönfeldt, "Grenzflächenaktive Äthylenoxidaddukte", Wiss. Verlagsgesell., Stuttgart 1976; Winnacker-Küchler, "Chemische Technologie", volumen 7, C. Hanser Verlag Munich, 4ª Ed. 1986.

Basándose en estas formulaciones, también es posible producir combinaciones con otras sustancias de acción pesticida tales como, por ejemplo, insecticidas, acaricidas, herbicidas, fungicidas y también con sustancias protectoras, fertilizantes y/o reguladores del crecimiento, por ejemplo en forma de una formulación acabada o como

- una mezcla en tanque. Los polvos humectables son preparaciones que pueden dispersarse uniformemente en agua que, además del compuesto activo, aparte de un diluyente o sustancia inerte también comprenden tensioactivos de tipo iónico y/o no iónico (agentes humectantes, dispersantes), por ejemplo alquifenoles polioxietilados, alcoholes grasos polioxietilados, aminas grasas polioxietiladas, sulfatos de poliglicol éter de alcohol graso, alcanosulfonatos, alquilbencenosulfonatos, lignosulfonato sódico, 2,2'-dinaftilmetano-6,6'-disulfonato sódico, dibutilnaftalenosulfonato sódico o también oleilmetiltaurida sódica. Para preparar los polvos humectables, los principios activos herbicidas se trituran en partículas finas, por ejemplo en aparatos habituales tales como molinos de martillo, molinos mezcladores y molinos de chorro de aire y simultánea o posteriormente se mezclan con los coadyuvantes de formulación.
- Los concentrados emulsionables se preparan disolviendo el principio activo en un disolvente orgánico, por ejemplo butanol, ciclohexanona, dimetilformamida, xileno o también compuestos aromáticos con punto de ebullición más alto o hidrocarburos o mezclas de los disolventes orgánicos con adición de uno o más tensioactivos de tipo iónico y/o no iónico (emulsionantes). Como emulsionantes pueden usarse por ejemplo: sales de calcio del ácido alquilarilsulfónico tales como dodecilbencenosulfonato de calcio, o emulsionantes no iónicos tales como ésteres de poliglicol de ácidos grasos, alquilarilpoliglicoléteres, éteres de poliglicol de alcohol graso, productos de condensación de óxido de propileno-óxido de etileno, alquiliéteres, ésteres de sorbitano, tales como por ejemplo ésteres de ácidos grasos de sorbitano, o ésteres de polioxietileno-sorbitano, como por ejemplo ésteres de ácidos grasos de polioxietileno-sorbitano.
- Los productos en polvo se obtienen triturando el principio activo con sustancias sólidas distribuidas finamente, por ejemplo talco, arcillas naturales tales como caolín, bentonita y pirofilita, o tierra de diatomeas.
- Los concentrados de suspensión pueden estar basados en agua o en aceite. Pueden prepararse, por ejemplo, por trituración en húmedo por medio de molinos de perlas comerciales y eventualmente la adición de tensioactivos, tal como ya se ha indicado, por ejemplo, anteriormente para los otros tipos de formulación.
- Pueden prepararse emulsiones, por ejemplo emulsiones de aceite en agua (EW), por ejemplo, por medio de agitadores, molinos coloidales y/o mezcladoras estáticas usando disolventes orgánicos acuosos y eventualmente tensioactivos como los que, por ejemplo, ya se han indicado anteriormente para los otros tipos de formulación.
- Pueden prepararse productos granulados por pulverización del principio activo en un material inerte granulado con capacidad de adsorción o mediante aplicación de concentrados del principio activo en la superficie de sustancias de soporte, tales como arena, caolinitas o material inerte granulado, por medio de adhesivos, por ejemplo poli(alcohol vinílico), poliacrilato sódico o también aceites minerales. Los principios activos adecuados también pueden granularse de la manera habitual para la preparación de granulados de fertilizantes (si se desea como una mezcla con fertilizantes).
- Los productos granulados dispersables en agua se preparan por regla general según los procedimientos habituales tales como secado por pulverización, granulación en lecho fluidizado, granulación en cazuela, mezclado con mezcladoras de alta velocidad y extrusión sin material inerte sólido.
- Para la preparación de productos granulados en cazuela, lecho fluidizado, prensa extrusora y pulverización véanse, por ejemplo, los procedimientos de "Spray-Drying Handbook" 3ª ed. 1979, G. Goodwin Ltd., London; J. E. Browning, "Agglomeration", Chemical and Engineering 1967, páginas 147 y siguientes; "Perry's Chemical Engineer's Handbook", 5ª Ed., McGraw-Hill, Nueva York 1973, pág. 8-57.
- Para otros detalles con respecto a la formulación de agentes fitosanitarios véase, por ejemplo, G. C. Klingman, "Weed Control as a Science", John Wiley and Sons, Inc., Nueva York, 1961, páginas 81-96 y J. D. Freyer, S. A. Evans, "Weed Control Handbook", 5ª Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1968, páginas 101-103.
- Las preparaciones agroquímicas contienen por regla general del 0,1 % al 99 % en peso, en particular del 0,1 % al 95 % en peso de principio activo de fórmula (I).
- En los polvos humectables, la concentración de principio activo asciende, por ejemplo, a de aproximadamente el 10 % al 90 % en peso, estando constituido el resto hasta el 100 % en peso por componentes de formulación habituales. En el caso de concentrados emulsionables, la concentración de principio activo puede ascender a de aproximadamente el 1 % al 90 %, preferentemente del 5 % al 80 % en peso. Las formulaciones en forma de polvo contienen del 1 % al 30 % en peso de principio activo, preferentemente en la mayoría de los casos del 5 % al 20 % en peso de principio activo, las disoluciones pulverizables contienen de aproximadamente el 0,05 % al 80 % en peso, preferentemente del 2 % al 50 % en peso de principio activo. En el caso de productos granulados dispersables en agua, el contenido en principio activo depende parcialmente de si el compuesto activo está presente en forma líquida o sólida o de los auxiliares de granulación, cargas, etc. que se usen. En los productos granulados dispersables en agua, el contenido en principio activo se encuentra, por ejemplo, entre el 1 % y el 95 % en peso, preferentemente entre el 10 % y el 80 % en peso.
- Además, las formulaciones de principios activos mencionadas contienen eventualmente los adhesivos, agentes humectantes, dispersantes, emulsionantes, agentes de penetración, conservantes, disolventes y agentes anticongelantes, cargas, vehículos y colorantes, antiespumantes, inhibidores de la evaporación y agentes que

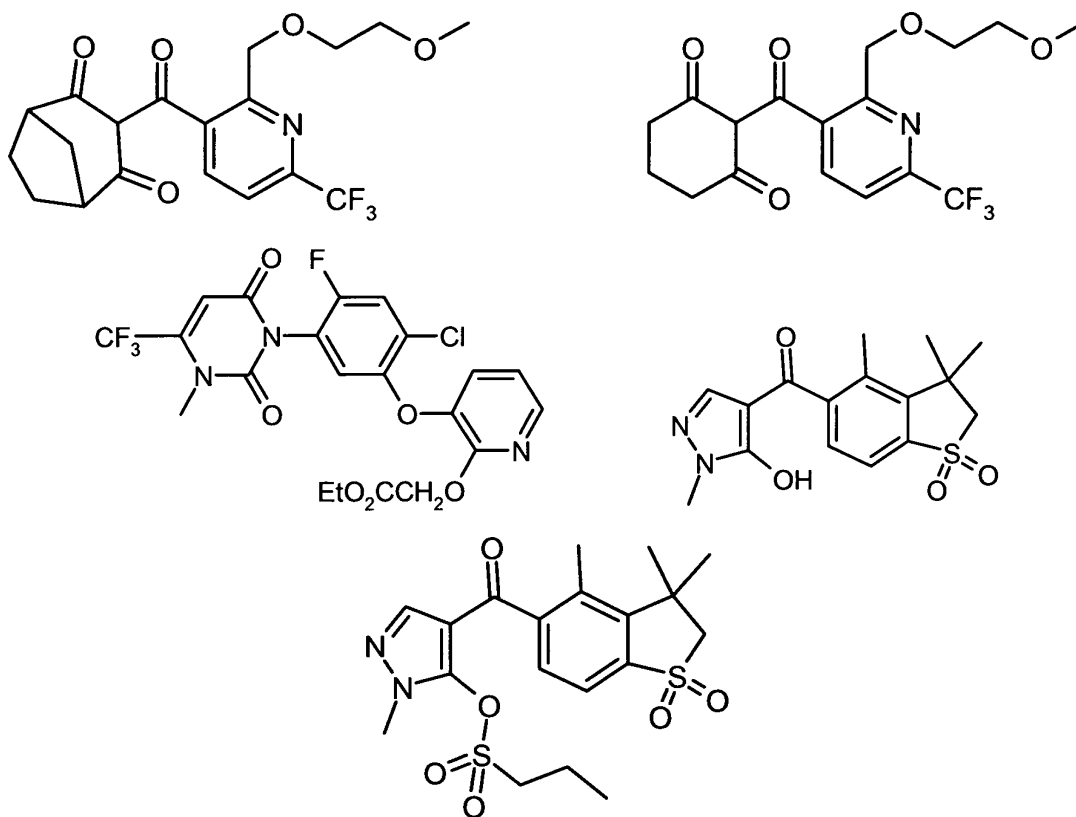
influyen en el pH y la viscosidad respectivamente habituales.

Los compuestos de fórmula general (I) o sus sales pueden usarse como tales o en forma de sus preparaciones (formulaciones) con otras sustancias de acción pesticida, tales como por ejemplo insecticidas, acaricidas, nematocidas, herbicidas, fungicidas, sustancias protectoras, fertilizantes y/o reguladores del crecimiento, por ejemplo como formulación acabada o como mezclas en tanque.

Como componentes de combinación para los compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención en formulaciones de mezcla o en la mezcla en tanque pueden usarse por ejemplo principios activos conocidos que se basan en la inhibición de por ejemplo acetolactato-sintasa, acetil-CoA-carboxilasa, celulosa-sintasa, enolpiruvilsiquimato-3-fosfato-sintasa, glutamina-sintetasa, p-hidroxifenilpiruvato-dioxigenasa, fitoendesaturasa, fotosistema I, fotosistema II, protoporfirinógeno oxidasa, como se describe, por ejemplo, en Weed Research 26 (1986) 441 445 o "The Pesticide Manual", 14ª edición, The British Crop Protection Council and the Royal Soc. of Chemistry, 2003 y la bibliografía allí citada. Como herbicidas o reguladores del crecimiento de plantas conocidos que pueden combinarse con los compuestos de acuerdo con la invención, pueden mencionarse por ejemplo los siguientes principios activos (los compuestos se designan o bien con el "nombre común" según la Organización Internacional para la Estandarización, *International Organization for Standardization*, (ISO) o con el nombre químico o con el número de código) y comprenden siempre todas las formas de aplicación tales como ácidos, sales, ésteres e isómeros tales como estereoisómeros e isómeros ópticos. A este respecto se mencionan a modo de ejemplo una y en parte también varias formas de aplicación:

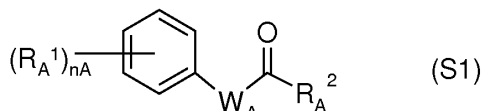
acetoclor, acibenzolar, acibenzolar-S-metilo, acifluorfen, acifluorfen-sódico, aclonifén, alaclor, allidoclor, alloxidim, alloxidim-sódico, ametrín, amicarbazona, amidoclor, amidosulfurón, aminociclopiraclor, aminopirialid, amitrol, sulfamato amónico, ancimídol, anilofos, asulam, atrazina, azafenidín, azimsulfurón, aziprotrín, BAH-043, BAS-140H, BAS-693H, BAS-714H, BAS-762H, BAS-776H, BAS-800H, beflubutamid, benazolin, benazolin-etilo, bencarbazona, benfluralín, benfuresato, bensulida, bensulfurón-metilo, bentazona, benzfendizona, benzobiciclón, benzofenap, benzoilfúor, benzoilprop, bifenox, bilanafos, bilanafos-sódico, bispiribac, bispiribac-sódico, bromacil, bromobutida, bromofenoxim, bromoxinil, bromurón, buminafos, busoxinona, butaclor, butafenacil, butamifos, butenaclo, butralin, butroxidim, butilato, cafenstrol, carbetamida, carfentrazona, carfentrazona-etilo, clometoxifén, clorambén, clorazifop, clorazifop-butilo, clorbromurón, clorbufam, clorfenac, clorfenac-sódico, clorfenprop, clorflurenol, clorflurenol-metilo, cloridazón, clorimurón, clorimurón-etilo, cloruro de cloromequat, clomitrofén, clorotalim, clortal-dimetilo, clorotolurón, clorsulfurón, cinidón, cinidón-etilo, cinmetilín, cinosulfurón, cletodim, clodinafop, clodinafop-propargilo, clofencet, clomazona, clomeprop, cloprop, clopiralid, cloransulam, cloransulam-metilo, cumilurón, cianamida, cianazina, ciclanilida, cicloato, ciclosulfamurón, cicloxidim, ciclurón, cihalofop, cihalofop-butilo, ciperquat, ciprozina, ciprozol, 2,4-D, 2,4-DB, daimurón/dimron, dalapon, daminozida, dazomet, n-decanol, desmedifam, desmetrín, detosil pirazolato (DTP), diallato, dicamba, diclobenil, diclorprop, diclorprop-P, diclofop, diclofop-metilo, diclofop-P-metilo, diclosulam, dietatil, dietatil-etilo, difenoxurón, difenzoquat, diflufenicán, diflufenzopir, diflufenzopir-sódico, dimefurón, dikegulac-sódico, dimefurón, dimepiperato, dimetaclo, dimetametetrín, dimetenamid, dimetenamid-P, dimetipín, dimetrasulfurón, dinitramina, dinoseb, dinoterb, difenamid, dipropetrín, diquat, dibromuro de diquat, ditiopir, diurón, DNOC, eglinafina-etilo, endotal, EPTC, esprocarb, etalfuralín, etametsulfurón-metilo, etefón, etidimurón, etiozín, etofumesato, etoxifén, etoxifén-etilo, etoxisulfurón, etobenzanid, F-5331, es decir N-[2-cloro-4-fluoro-5-[4-(3-fluoropropil)-4,5-dihidro-5-oxo-1H-tetrazol-1-il]fenil]-etanosulfonamida, fenoprop, fenoxaprop, fenoxaprop-P, fenoxaprop-etilo, fenoxaprop-P-etilo, fentrazamida, fenurón, flamprop, flamprop-M-isopropilo, flamprop-M-metilo, flazasulfurón, florasulam, fluaizifop, fluaizifop-P, fluaizifop-butilo, fluaizifop-P-butilo, fluaizolato, flucarbazona, flucarbazona-sódica, flucetosulfurón, flucloalín, flufenacet (tiafluamida), flufenpir, flufenpir-etilo, flumetralín, flumetsulam, flumiclorac, flumiclorac-pentilo, flumioxazín, flumipropín, flumeturón, fluorodifén, fluoroglicofén, fluoroglicofén-etilo, flupoxam, fluproacil, flupropanato, flupirsulfurón, flupirsulfurón-metil-sódico, flurenol, flurenol-butilo, fluridona, flurocloridona, fluroxipir, fluroxipir-metilo, flurprimidol, flurtamona, flutiacet, flutiacet-metilo, flutiamida, fomesafén, foramsulfurón, forclorfenurón, fosamina, furiloxifén, ácido giberélico, glufosinato, L-glufosinato, L-glufosinato-amónico, glufosinato-amónico, glifosato, glifosato-isopropilamónico, H-9201, halosafén, halosulfurón, halosulfurón-metilo, haloxifop, haloxifop-P, haloxifop-etoxietilo, haloxifop-P-etoxietilo, haloxifop-metilo, haloxifop-P-metilo, hexazinona, HNPC-9908, HOK-201, HW-02, imazametabenz, imazametabenz-metilo, imazamox, imazapic, imazapir, imazaquin, imazetapir, imazosulfurón, inabenzida, indanofán, ácido indolacético (IAA), ácido 4-indol-3-ilbutírico (IBA), iodosulfurón, iodosulfurón-metil-sodio, ioxinil, isocarbamid, isopropalín, isoproturón, isourón, isoxaben, isoxaclortol, isoxaflutol, isoxapirifop, KUH-043, KUH-071, karbutilato, ketospiradox, lactofén, lenacil, linurón, hidrazida maleica, MCPA, MCPB, MCPB-metilo, -etilo y -sodio, mecoprop, mecoprop-sódico, mecoprop-butitol, mecoprop-P-butitol, mecoprop-P-dimetilamonio, mecoprop-P-2-etilhexil, mecoprop-P-potasio, mefenacet, mefluidida, cloruro de mepiquat, mesosulfurón, mesosulfurón-metilo, mesotriona, metabenztiaturón, metam, metamifop, metamitrón, metazaclor, metazol, metoxifenona, metildimurón, 1-metilciclopropeno, metilisotiocianato, metobenzurón, metobromurón, metolaclo, S-metolaclo, metosulam, metoxurón, metribuzín, metsulfurón, metsulfurón-metilo, molinato, monalida, monocarbamida, monocarbamida dihidrogensulfato, monolinurón, monosulfurón, monurón, MT 128, MT-5950, es decir, N-[3-cloro-4-(1-metiletil)fenil]-2-metilpentanamida, NGGC-011, naproanilida, napropamida, naptalam, NC-310, es decir 4-(2,4-diclorobenzoil)-1-metil-5-benciloxipirazol, neburón, nicosulfurón, nipiraclorfen, nitalín, nitrofen, nitrofenolato sódico (mezcla de isómero), nitrofluorfen, ácido nonanoico, norflurazón, orbencarb, ortosulfamurón, orizalín, oxadiargil, oxadiazón, oxasulfurón, oxaziclomefona,

oxifluorfén, paclobutrazol, paraquat, dicloruro de paraquat, ácido pelargónico (ácido nonanoico), pendimetalín, pendralín, penoxsulam, pentanoclor, pentoxazona, perfluidona, petoxamid, fenisofam, fenmedifam, fenmedifam-etilo, picloram, picolinafén, pinoxadén, piperofos, pirifenop, pirifenop-butilo, pretilaclor, primisulfurón, primisulfurón-metilo, probenazol, profluazol, prociazina, prodiamina, prifluralina, profoxidim, prohexadiona, prohexadiona-cálcica, prohidrojasmona, prometón, prometrín, propaclor, propanil, propaquizafop, propazina, profam, propisoclor, propoxicarbazona, propoxicarbazona-sódica, propizamida, prosulfalín, prosulfocarb, prosulfurón, prinaclor, piraclonil, piraflufén, piraflufén-etilo, pirasulfotol, pirazolinato (pirazolato), pirazosulfurón-etilo, pirazoxifén, piribambenz, piribambenz-isopropilo, piribenzoxim, piributicarb, piridafol, piridato, piriftalid, piriminobac, piriminobac-metilo, pirimisulfán, piritiobac, piritiobac-sódico, piroxasulfona, piroxsulam, quinclorac, quinmerac, quinoclamina, quizalofop, quizalofop-etilo, quizalofop-P, quizalofop-P-etilo, quizalofop-P-tefurilo, rimsulfurón, saflufenacil, secbumetón, setoxidim, sidurón, simazina, simetrín, SN-106279, sulcotriona, sulfallato (CDEC), sulfentrazona, sulfometurón, sulfometurón-metilo, sulfosato (glifosato-trimesium), sulfosulfurón, SYN-523, SYP-249, SYP-298, SIP-300, tebutam, tebutiurón, tecnaceno, tefuriltriona, tembotriona, tepraloxidim, terbacil, terbucarb, terbucior, terbumetón, terbutilazina, terbutrín, TH-547, tenilclor, tiafluamida, tiazaflurón, tiazopir, tidiazimín, tidiazurón, tiencarbazona, tiencarbazona-metilo, tifensulfurón, tifensulfurón-metilo, tiobencarb, tiocarbazil, topramezona, tralkoxidim, triallato, triasulfurón, triaziflam, triazofenamida, tribenurón, tribenurón-metilo, ácido tricloroacético (TCA), triclopir, tridifano, trietacina, trifloxisulfurón, trifloxisulfurón-sódico, trifluralín, triflusulfurón, triflusulfurón-metilo, trimeturón, trinaxapac, trinaxapac-etilo, tritosulfurón, tsitodef, uniconazol, uniconazol-P, vernolato, ZJ-0166, ZJ-0270, ZJ-0543 o ZJ-0862 así como los siguientes compuestos



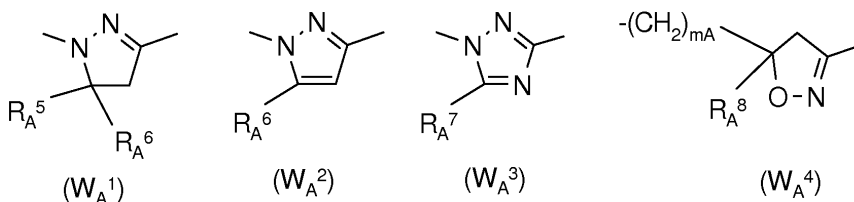
Es especialmente interesante la lucha selectiva contra plantas perjudiciales en cultivos de plantas útiles y ornamentales. Aunque los compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención presentan ya en muchos cultivos una selectividad de muy buena a suficiente, en principio en algunos cultivos y sobre todo también en el caso de mezclas con otros herbicidas que son menos selectivos pueden producirse fitotoxicidades en las plantas de cultivo. Con respecto a esto son especialmente interesantes las combinaciones de compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención, que contienen los compuestos de fórmula general (I) o sus combinaciones con otros herbicidas o pesticidas y sustancias protectoras. Las sustancias protectoras que se usan en un contenido con acción de antídoto reducen los efectos secundarios fitotóxicos de los herbicidas/pesticidas usados, por ejemplo en cultivos económicamente importantes tales como cereales (trigo, cebada, centeno, maíz, arroz, mijo), remolacha azucarera, caña de azúcar, colza, algodón y soja, preferentemente cereales. Los siguientes grupos de compuestos se tienen en cuenta por ejemplo como sustancias protectoras para los compuestos (I) solos o sin embargo en sus combinaciones con otros pesticidas:

S1) Compuestos de fórmula (S1),



en la que los símbolos e índices tienen los siguientes significados:

- 5 n_A es un número natural de 0 a 5, preferentemente de 0 a 3;
 R_A^1 es halógeno, alquilo (C_1-C_4), alcoxilo (C_1-C_4), nitro o haloalquilo (C_1-C_4);
 W_A es un resto heterocíclico divalente no sustituido o sustituido del grupo de los heterociclos de cinco anillos parcialmente insaturados o aromáticos con 1 a 3 heteroátomos de anillo del grupo N y O, estando contenido al menos un átomo de N y como máximo un átomo de O en el anillo, preferentemente un resto del grupo (W_A^1) a (W_A^4),

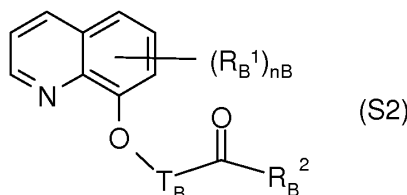


- 10 m_A es 0 o 1;
 R_A^2 es OR_A^3 , SR_A^3 o $NR_A^3R_A^4$ o un heterociclo de 3 a 7 miembros saturado o insaturado con al menos un átomo de N y hasta 3 heteroátomos, preferentemente del grupo O y S, que está unido a través del átomo de N con el grupo carbonilo en (S1) y no está sustituido o está sustituido con restos del grupo alquilo (C_1-C_4), alcoxilo (C_1-C_4) o fenilo eventualmente sustituido, preferentemente un resto de fórmula OR_A^3 , NHR_A^4 o $N(CH_3)_2$, en particular de fórmula OR_A^3 ;
 R_A^3 es hidrógeno o un resto de hidrocarburo alifático no sustituido o sustituido, preferentemente con en total 1 a 18 átomos de C;
 R_A^4 es hidrógeno, alquilo (C_1-C_6), alcoxilo (C_1-C_6) o fenilo sustituido o no sustituido;
 R_A^5 es H, alquilo (C_1-C_8), haloalquilo (C_1-C_8), alcoxi(C_1-C_4)alquilo (C_1-C_8), ciano o $COOR_A^9$, en el que R_A^9 es hidrógeno, alquilo (C_1-C_8), haloalquilo (C_1-C_8), alcoxi(C_1-C_4)-alquilo (C_1-C_4), hidroxialquilo (C_1-C_6), cicloalquilo (C_3-C_{12}) o trialquil(C_1-C_4)-sililo;
 R_A^6, R_A^7, R_A^8 son de manera igual o distinta hidrógeno, alquilo (C_1-C_8), haloalquilo (C_1-C_8), cicloalquilo (C_3-C_{12}) o fenilo sustituido o no sustituido;

preferentemente:

- a) compuestos del tipo del ácido diclorofenilpirazolin-3-carboxílico (S1^a), preferentemente compuestos tales como ácido 1-(2,4-diclorofenil)-5-(etoxicarbonil)-5-metil-2-pirazolin-3-carboxílico, éster etílico del ácido 1-(2,4-diclorofenil)-5-(etoxicarbonil)-5-metil-2-pirazolin-3-carboxílico (S1-1) ("mefenpir-dietilo"), y compuestos relacionados, tal como se describen en el documento WO-A-91/07874;
b) derivados del ácido diclorofenilpirazolcarboxílico (S1^b), preferentemente compuestos tales como éster etílico del ácido 1-(2,4-diclorofenil)-5-metil-pirazol-3-carboxílico (S1-2), éster etílico del ácido 1-(2,4-diclorofenil)-5-isopropil-pirazol-3-carboxílico (S1-3), éster etílico del ácido 1-(2,4-diclorofenil)-5-(1,1-dimetil-etil)pirazol-3-carboxílico (S1-4) y compuestos relacionados, tal como se describen en los documentos EP-A-333 131 y EP-A-269 806;
c) derivados del ácido 1,5-difenilpirazol-3-carboxílico (S1^c), preferentemente compuestos tales como éster etílico del ácido 1-(2,4-diclorofenil)-5-fenilpirazol-3-carboxílico (S1-5), éster metílico del ácido 1-(2-clorofenil)-5-fenilpirazol-3-carboxílico (S1-6) y compuestos relacionados tal como se describen por ejemplo en el documento EP-A-268554;
d) compuestos del tipo de los ácidos triazolcarboxílicos (S1^d), preferentemente compuestos tales como éster etílico de fenclorazol, es decir éster etílico del ácido 1-(2,4-diclorofenil)-5-triclorometil-(1H)-1,2,4-triazol-3-carboxílico (S1-7), y compuestos relacionados tal como se describen en los documentos EP-A-174 562 y EP-A-346 620;
e) compuestos del tipo del ácido 5-bencil- o 5-fenil-2-isoxazolin-3-carboxílico o del ácido 5,5-difenil-2-isoxazolin-3-carboxílico (S1^e), preferentemente compuestos tales como éster etílico del ácido 5-(2,4-diclorobencil)-2-isoxazolin-3-carboxílico (S1-8) o éster etílico del ácido 5-fenil-2-isoxazolin-3-carboxílico (S1-9) y compuestos relacionados tal como se describen en el documento WO-A-91/08202 o ácido 5,5-difenil-2-isoxazolin-carboxílico (S1-10) o éster etílico del ácido 5,5-difenil-2-isoxazolin-carboxílico (S1-11) ("isoxadifeno-etilo") o éster n-propílico del ácido 5,5-difenil-2-isoxazolin-carboxílico (S1-12) o el éster etílico del ácido 5-(4-fluorofenil)-5-fenil-2-isoxazolin-3-carboxílico (S1-13), tal como se describen en la solicitud de patente WO-A-95/07897.

S2) Derivados de quinolina de fórmula (S2),



en la que los símbolos e índices tienen los siguientes significados:

- R_B^1 es halógeno, alquilo (C_1 - C_4), alcoxilo (C_1 - C_4), nitro o haloalquilo (C_1 - C_4);
 n_B es un número natural de 0 a 5, preferentemente de 0 a 3;
 R_B^2 es OR_B^3 , SR_B^3 o $NR_B^3R_B^4$ o un heterociclo de 3 a 7 miembros saturado o insaturado con al menos un átomo de N y hasta 3 heteroátomos, preferentemente del grupo O y S, que está unido a través del átomo de N con el grupo carbonilo en (S2) y está no sustituido o está sustituido con restos del grupo alquilo (C_1 - C_4), alcoxilo (C_1 - C_4) o fenilo eventualmente sustituido, preferentemente un resto de fórmula OR_B^3 , NHR_B^4 o $N(CH_3)_2$, en particular de fórmula OR_B^3 ;
 R_B^3 es hidrógeno o un resto de hidrocarburo alifático no sustituido o sustituido, preferentemente con en total de 1 a 18 átomos de C;
 R_B^4 es hidrógeno, alquilo (C_1 - C_6), alcoxilo (C_1 - C_6) o fenilo sustituido o no sustituido;
 T_B es una cadena de alcanodilo (C_1 o C_2), que está no sustituida o sustituida con uno o dos restos alquilo (C_1 - C_4) o con [alcoxi(C_1 - C_3)]-carbonilo;

preferentemente:

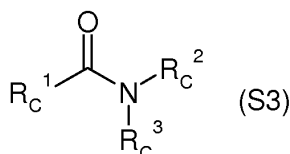
a) compuestos del tipo del ácido 8-quinolinoxiacético (S2^a), preferentemente

- éster 1-metilhexílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético ("cloquintocet-mexilo") (S2-1),
 éster (1,3-dimetil-but-1-ílico) del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-2),
 éster 4-aliloxi-butílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-3),
 éster 1-aliloxi-prop-2-ílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-4),
 éster etílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-5),
 éster metílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-6),
 éster alílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-7),
 éster 2-(2-propiliden-iminoxi)-1-etílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-8),
 éster 2-oxo-prop-1-ílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-9) y

compuestos relacionados tal como se describen en los documentos EP-A-86 750, EP-A-94 349 y EP-A-191 736 o EP-A-0 492 366, así como ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)acético (S2-10), sus hidratos y sales, por ejemplo sus sales de litio, de sodio, de potasio, de calcio, de magnesio, de aluminio, de hierro, de amonio, de amonio cuaternario, de sulfonio o de fosfonio tal como se describen en los documentos WO-A-2002/34048;

b) compuestos del tipo del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)malónico (S2^b), preferentemente compuestos tales como éster dietílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)malónico, éster dialílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)malónico, éster metil-etílico del ácido (5-cloro-8-quinolinoxi)malónico y compuestos relacionados, tal como se describen en el documento EP-A-0 582 198.

S3) Compuestos de fórmula (S3)



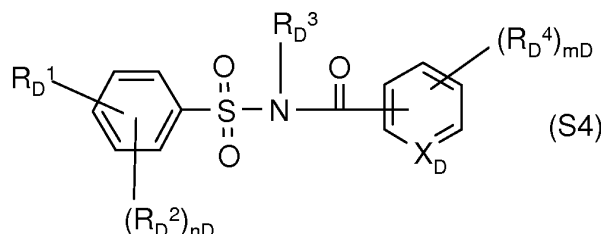
en la que los símbolos e índices tienen los siguientes significados:

- R_C^1 es alquilo (C_1 - C_4), haloalquilo (C_1 - C_4), alqueno (C_2 - C_4), haloalqueno (C_2 - C_4), cicloalquilo (C_3 - C_7), preferentemente diclorometilo;
 R_C^2 , R_C^3 son de manera igual o distinta hidrógeno, alquilo (C_1 - C_4), alqueno (C_2 - C_4), alquino (C_2 - C_4), haloalquilo (C_1 - C_4), haloalqueno (C_2 - C_4), alquil(C_1 - C_4)-carbamoil-alquilo (C_1 - C_4), alquenoil(C_2 - C_4)-carbamoil-alquilo (C_1 - C_4), alcoxil(C_1 - C_4)-alquilo (C_1 - C_4), dioxolanil-alquilo (C_1 - C_4), tiazolilo, furilo, furilalquilo, tienilo, piperidilo, fenilo sustituido o no sustituido, o R_C^2 y R_C^3 forman juntos un anillo heterocíclico sustituido o no sustituido, preferentemente un anillo de oxazolidina, de tiazolidina, de piperidina, de morfolina, de hexahidropirimidina o de benzoxazina;

preferentemente:

principios activos del tipo de las dicloroacetamidas, que con frecuencia se usan como sustancias protectoras de pre-emergencia (sustancias protectoras eficaces en suelo), tales como por ejemplo
 "dicloromida" (N,N-dialil-2,2-dicloroacetamida) (S3-1),
 "R-29148" (3-dicloroacetil-2,2,5-trimetil-1,3-oxazolidina) de la empresa Stauffer (S3-2),
 "R-28725" (3-dicloroacetil-2,2,-dimetil-1,3-oxazolidina) de la empresa Stauffer (S3-3),
 "benoxacor" (4-dicloroacetil-3,4-dihidro-3-metil-2H-1,4-benzoxazina) (S3-4),
 "PPG-1292" (N-alil-N-[(1,3-dioxolan-2-il)-metil]-dicloroacetamida) de la empresa PPG Industries (S3-5),
 "DKA-24" (N-alil-N-[(alilaminocarbonil)metil]-dicloroacetamida) de la empresa Sagro-Chem (S3-6),
 "AD-67" o "MON 4660" (3-dicloroacetil-1-oxa-3-aza-espiro[4,5]decano) de la empresa Nitrokemia o Monsanto (S3-7),
 "TI-35" (1-dicloroacetil-azepan) de la empresa TRI-Chemical RT (S3-8),
 "diclonona" (diclonona) o "BAS145138" o "LAB145138" (S3-9), (3-dicloroacetil-2,5,5-trimetil-1,3-diazabicyclo[4.3.0]nonano) de la empresa BASF,
 "furlazol" o "MON13900" ((RS)-3-dicloroacetil-5-(2-furil)-2,2-dimetil-oxazolidina) (S3-10); así como su isómero (R) (S3-11).

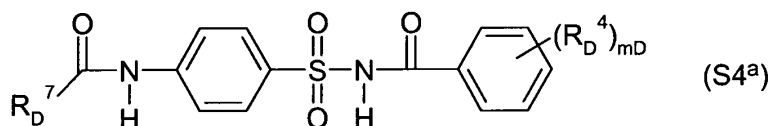
S4) N-acilsulfonamidas de fórmula (S4) y sus sales,



en la que los símbolos e índices tienen los siguientes significados:

- X_D es CH o N;
 R_D^1 es $CO-NR_D^5R_D^6$ o $NHCO-R_D^7$;
 R_D^2 es halógeno, haloalquilo (C_1-C_4), haloalcoxilo (C_1-C_4), nitro, alquilo (C_1-C_4), alcoxilo (C_1-C_4), alquil(C_1-C_4)-sulfonilo, alcoxi(C_1-C_4)-carbonilo o alquil(C_1-C_4)-carbonilo;
 R_D^3 es hidrógeno, alquilo (C_1-C_4), alquenilo (C_2-C_4) o alquinilo (C_2-C_4);
 R_D^4 es halógeno, nitro, alquilo (C_1-C_4), haloalquilo (C_1-C_4), haloalcoxilo (C_1-C_4), cicloalquilo (C_3-C_6), fenilo, alcoxilo (C_1-C_4), ciano, alquil(C_1-C_4)tio, alquil(C_1-C_4)sulfonilo, alquil(C_1-C_4)-sulfonilo, alcoxi(C_1-C_4)-carbonilo o alquil(C_1-C_4)-carbonilo;
 R_D^5 es hidrógeno, alquilo (C_1-C_6), cicloalquilo (C_3-C_6), alquenilo (C_2-C_6), alquinilo (C_2-C_6), cicloalquenilo (C_5-C_6), fenilo o heterocíclico de 3 a 6 miembros que contiene v_D heteroátomos del grupo nitrógeno, oxígeno y azufre, estando sustituidos los siete últimos restos mencionados con v_D sustituyentes del grupo halógeno, alcoxilo (C_1-C_6), haloalcoxilo (C_1-C_6), alquilsulfonilo (C_1-C_2), alquilsulfonilo (C_1-C_2), cicloalquilo (C_3-C_6), alcoxi(C_1-C_4)-carbonilo, alquil(C_1-C_4)-carbonilo y fenilo y en el caso de restos cíclicos también alquilo (C_1-C_4) y haloalquilo (C_1-C_4);
 R_D^6 es hidrógeno, alquilo (C_1-C_6), alquenilo (C_2-C_6) o alquinilo (C_2-C_6), estando sustituidos los tres últimos restos mencionados con v_D restos del grupo halógeno, hidroxilo, alquilo (C_1-C_4), alcoxilo (C_1-C_4) y alquil(C_1-C_4)tio, o
 R_D^5 y R_D^6 junto con el átomo de nitrógeno al que llevan forman un resto pirrolidinilo o piperidinilo;
 R_D^7 es hidrógeno, alquil(C_1-C_4)amino, di-alquil(C_1-C_4)amino, alquilo (C_1-C_6), cicloalquilo (C_3-C_6), estando sustituidos los 2 últimos restos mencionados con v_D sustituyentes del grupo halógeno, alcoxilo (C_1-C_4), haloalcoxilo (C_1-C_6) y alquil(C_1-C_4)tio y en el caso de restos cíclicos también alquilo (C_1-C_4) y haloalquilo (C_1-C_4);
 n_D es 0, 1 o 2;
 m_D es 1 o 2;
 v_D es 0, 1, 2 o 3;

de las que se prefieren compuestos del tipo de las N-acilsulfonamidas, por ejemplo de la siguiente fórmula (S4^a), que se conocen por ejemplo por el documento WO-A-97/45016



en la que

R_D^7 significa alquilo (C_1-C_6), cicloalquilo (C_3-C_6), estando sustituidos los 2 últimos restos mencionados con v_D sustituyentes del grupo halógeno, alcoxilo (C_1-C_4), haloalcoxilo (C_1-C_6) y alquil(C_1-C_4)tio y en el caso de restos cíclicos también alquilo (C_1-C_4) y haloalquilo (C_1-C_4);

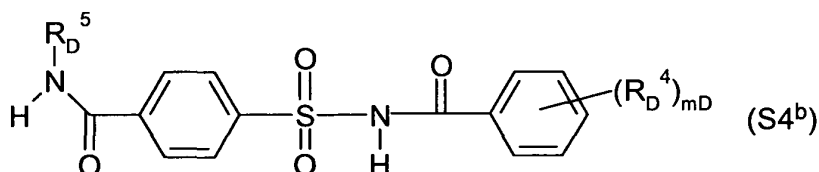
R_D^4 significa halógeno, alquilo (C_1-C_4), alcoxilo (C_1-C_4), CF_3 ;

m_D significa 1 o 2;

v_D es 0, 1, 2 o 3;

así como

amidas del ácido acilsulfamoilbenzoico, por ejemplo de la siguiente fórmula ($S4^b$), que se conocen por ejemplo por el documento WO-A-99/16744,



por ejemplo aquéllas en las que

es R_D^5 = ciclopropilo y (R_D^4) = 2-OMe ("ciprosulfamidas", $S4-1$),

es R_D^5 = ciclopropilo y (R_D^4) = 5-Cl-2-OMe ($S4-2$),

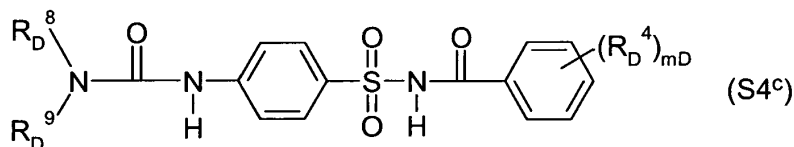
es R_D^5 = etilo y (R_D^4) = 2-OMe ($S4-3$),

es R_D^5 = isopropilo y (R_D^4) = 5-Cl-2-OMe ($S4-4$) y

es R_D^5 = isopropilo y (R_D^4) = 2-OMe ($S4-5$)

así como

compuestos del tipo de las N-acilsulfamoilfenilureas de fórmula ($S4^c$), que se conocen por ejemplo por el documento EP-A-365484,



en la que

R_D^8 y R_D^9 independientemente entre sí significan hidrógeno, alquilo (C_1-C_8), cicloalquilo (C_3-C_8), alquenilo (C_3-C_6), alquinilo (C_3-C_6),

R_D^4 significa halógeno, alquilo (C_1-C_4), alcoxilo (C_1-C_4), CF_3

m_D significa 1 o 2;

por ejemplo

1-[4-(N-2-metoxibenzoilsulfamoil)fenil]-3-metilurea,

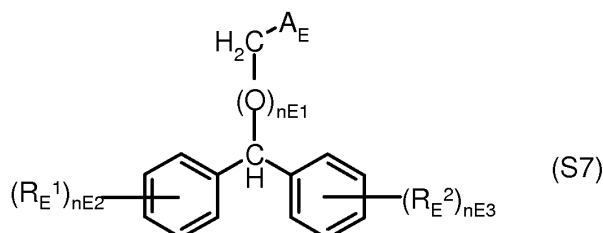
1-[4-(N-2-metoxibenzoilsulfamoil)fenil]-3,3-dimetilurea,

1-[4-(N-4,5-dimetilbenzoilsulfamoil)fenil]-3-metilurea.

S5) Principios activos de la clase de los compuestos de hidroxilo aromáticos y de los derivados de ácido carboxílico aromático-alifáticos (S5), por ejemplo 3,4,5-triacetoxibenzoato de etilo, ácido 3,5-dimetoxi-4-hidroxibenzoico, ácido 3,5-dihidroxibenzoico, ácido 4-hidroxisalicílico, ácido 4-fluorosalicílico, ácido 2-hidroxicinámico, ácido 2,4-diclorocinámico, tal como se describen en los documentos WO-A-2004/084631, WO-A-2005/015994, WO-A-2005/016001.

S6) Principios activos de la clase de las 1,2-dihidroquinoxalin-2-onas (S6), por ejemplo 1-metil-3-(2-tienil)-1,2-dihidroquinoxalin-2-ona, 1-metil-3-(2-tienil)-1,2-dihidroquinoxalin-2-tiona, clorhidrato de 1-(2-aminoetil)-3-(2-tienil)-1,2-dihidro-quinoxalin-2-ona, 1-(2-metilsulfonilaminoetil)-3-(2-tienil)-1,2-dihidro-quinoxalin-2-ona, tal como se describen en el documento WO-A-2005/112630.

S7) Compuestos de fórmula (S7), tal como se describen en el documento WO-A-1998/38856



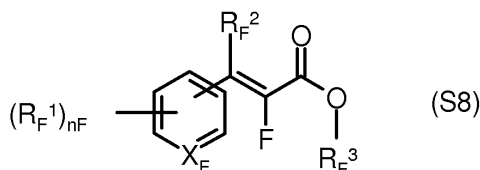
en la que los símbolos e índices tienen los siguientes significados:

- 5 R_E^1, R_E^2 son independientemente entre sí halógeno, alquilo (C₁-C₄), alcoxilo (C₁-C₄), haloalquilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₄)amino, di-alquil(C₁-C₄)amino, nitro;
 A_E es COOR_E³ o COSR_E⁴
 R_E^3, R_E^4 son independientemente entre sí hidrógeno, alquilo (C₁-C₄), alquenilo (C₂-C₆), alquinilo (C₂-C₄), cianoalquilo, haloalquilo (C₁-C₄), fenilo, nitrofenilo, bencilo, halobencilo, piridinilalquilo y alquilamonio,
 10 n_E^1 es 0 o 1
 n_E^2, n_E^3 son independientemente entre sí 0, 1 o 2,

preferentemente:

- 15 ácido difenilmetoxiacético,
 éster etílico del ácido difenilmetoxiacético,
 éster metílico del ácido difenilmetoxiacético (n.º de registro CAS 41858-19-9) (S7-1).

S8) Compuestos de fórmula (S8), tal como se describen en el documento WO-A-98/27049



en la que significan

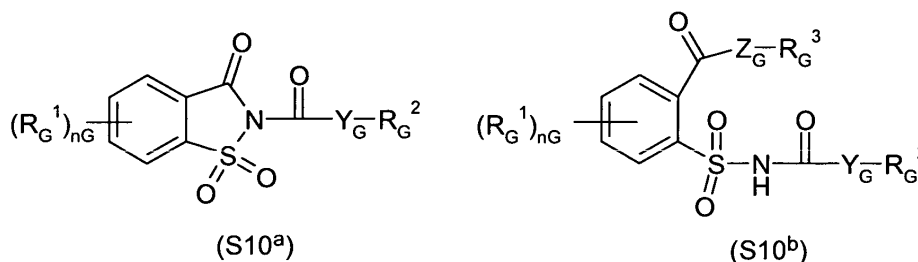
- 20 X_F CH o N,
 n_F para el caso de que sea $X_F=N$, un número entero de 0 a 4 y para el caso de que sea $X_F=CH$, un número entero de 0 a 5,
 R_F^1 halógeno, alquilo (C₁-C₄), haloalquilo (C₁-C₄), alcoxilo (C₁-C₄), haloalcoxilo (C₁-C₄), nitro, alquil(C₁-C₄)tio, alquil(C₁-C₄)sulfonilo, alcoxi(C₁-C₄)-carbonilo, fenilo eventualmente sustituido, fenoxilo eventualmente sustituido,
 25 R_F^2 hidrógeno o alquilo (C₁-C₄)
 R_F^3 hidrógeno, alquilo (C₁-C₈), alquenilo (C₂-C₄), alquinilo (C₂-C₄), o arilo, estando no sustituido cada uno de los restos que contienen C mencionados anteriormente o estando sustituido con uno o varios, preferentemente hasta tres restos iguales o distintos del grupo que está constituido por halógeno y alcoxilo; o sus sales,

preferentemente compuestos en los que significan

- 30 X_F CH,
 n_F un número entero de 0 a 2,
 R_F^1 halógeno, alquilo (C₁-C₄), haloalquilo (C₁-C₄), alcoxilo (C₁-C₄), haloalcoxilo (C₁-C₄),
 R_F^2 hidrógeno o alquilo (C₁-C₄),
 35 R_F^3 hidrógeno, alquilo (C₁-C₈), alquenilo (C₂-C₄), alquinilo (C₂-C₄), o arilo, estando no sustituido cada uno de los restos que contienen C mencionados anteriormente o estando sustituidos con uno o varios, preferentemente hasta tres restos iguales o distintos del grupo que está constituido por halógeno y alcoxilo, o sus sales.

- 40 S9) Principios activos de la clase de las 3-(5-tetrazolilcarbonil)-2-quinolonas (S9), por ejemplo 1,2-dihidro-4-hidroxi-1-etil-3-(5-tetrazolilcarbonil)-2-quinolona (n.º de registro CAS 219479-18-2), 1,2-dihidro-4-hidroxi-1-metil-3-(5-tetrazolil-carbonil)-2-quinolona (n.º de registro CAS 95855-00-8), tal como se describen en el documento WO-A-1999/000020.

S10) Compuestos de fórmulas (S10^a) o (S10^b), tal como se describen en los documentos WO-A-2007/023719 y WO-A-2007/023764



en la que significan

R_G^1 halógeno, alquilo (C_1-C_4), metoxilo, nitro, ciano, CF_3 , OCF_3
 Y_G, Z_G independientemente entre sí O o S,
 n_G un número entero de 0 a 4,
 R_G^2 alquilo (C_1-C_{16}), alqueno (C_2-C_6), cicloalquilo (C_3-C_6), arilo; bencilo, halobencilo,
 R_G^3 hidrógeno o alquilo (C_1-C_6).

S11) Principios activos del tipo de los compuestos de oximino (S11), que se conocen como desinfectantes para semillas, tales como por ejemplo

“oxabetrinilo” ((Z)-1,3-dioxolan-2-ilmetoxiimino(fenil)acetonitrilo) (S11-1), que se conoce como sustancia protectora desinfectante para semillas para mijo contra daños por metolaclor,
 “fluxofenim” (1-(4-clorofenil)-2,2,2-trifluoro-1-etanona-O-(1,3-dioxolan-2-ilmetil)-oxima) (S11-2), que se conoce como sustancia protectora desinfectante para semillas para mijo contra daños por metolaclor, y
 “ciometrinilo” o “CGA-43089” ((Z)-cianometoxiimino(fenil)acetonitrilo) (S11-3), que se conoce como sustancia protectora desinfectante para semillas para mijo contra daños por metolaclor.

S12) Principios activos de la clase de las isotiocromanonas (S12), tales como por ejemplo [(3-oxo-1H-2-benzotiopiran-4(3H)-iliden)metoxi]acetato de metilo (n.º de registro CAS 205121-04-6) (S12-1) y compuestos relacionados del documento WO-A-1998/13361.

S13) uno o varios compuestos del grupo (S13):

“anhídrido naftálico” (anhídrido de ácido 1,8-naftalindicarboxílico) (S13-1), que se conoce como sustancia protectora desinfectante para semillas para maíz contra daños por herbicidas de tiocarbamato,
 “fenclorim” (4,6-dicloro-2-fenilpirimidina) (S13-2), que se conoce como sustancia protectora para pretilaclor en arroz sembrado,
 “flurazol” (2-cloro-4-trifluorometil-1,3-tiazol-5-carboxilato de bencilo) (S13-3), que se conoce como sustancia protectora desinfectante para semillas para mijo contra daños por alaclor y metolaclor,
 “CL 304415” (n.º de registro CAS 31541-57-8) (ácido 4-carboxi-3,4-dihidro-2H-1-benzopiran-4-acético) (S13-4) de la empresa American Cyanamid, que se conoce como sustancia protectora para maíz contra daños por imidazolinonas,
 “MG 191” (n.º de registro CAS 96420-72-3) (2-diclorometil-2-metil-1,3-dioxolano) (S13-5) de la empresa Nitrokemia, que se conoce como sustancia protectora para maíz,
 “MG-838” (n.º de registro CAS 133993-74-5) (1-oxa-4-azaspiro[4.5]decano-4-carboditioato de 2-propenilo) (S13-6) de la empresa Nitrokemia,
 “disulfoton” (O,O-dietil S-2-etiltioetil fosforoditioato) (S13-7),
 “dietolato” (O,O-dietil-O-fenilfosforotioato) (S13-8),
 “mefenato” (metilcarbamato de 4-clorofenilo) (S13-9).

S14) Principios activos que además de una acción herbicida contra plantas perjudiciales presentan también acción de sustancia protectora en plantas de cultivo tales como arroz, tales como por ejemplo

“dimepiperato” o “MY-93” (S-1-metil-1-feniletil-piperidin-1-carbotioato), que se conoce como sustancia protectora para arroz contra daños del herbicida molinato,
 “daimuron” o “SK 23” (1-(1-metil-1-feniletil)-3-p-tolil-urea), que se conoce como sustancia protectora para arroz contra daños del herbicida imazosulfurona,
 “cumiluron” = “JC-940” (3-(2-clorofenilmetil)-1-(1-metil-1-fenil-etil)urea, véase el documento JP-A-60087254), que se conoce como sustancia protectora para arroz contra daños de algunos herbicidas,
 “metoxifenona” o “NK 049” (3,3'-dimetil-4-metoxi-benzofenona), que se conoce como sustancia protectora para arroz contra daños de algunos herbicidas,
 “CSB” (1-bromo-4-(clorometilsulfonil)benceno) de Kumiai, (n.º de registro CAS 54091-06-4), que se conoce como sustancia protectora contra daños de algunos herbicidas en arroz.

S15) Principios activos, que se usan preferentemente como herbicidas, sin embargo presentan también acción de sustancia protectora sobre plantas de cultivo, por ejemplo

ácido (2,4-diclorofenoxi)acético (2,4-D),
 ácido (4-clorofenoxi)acético,
 ácido (R,S)-2-(4-cloro-o-toliloxi)propiónico (mecoprop),
 ácido 4-(2,4-diclorofenoxi)butírico (2,4-DB),
 ácido (4-cloro-o-toliloxi)acético (MCPA),
 ácido 4-(4-cloro-o-toliloxi)butírico,
 ácido 4-(4-clorofenoxi)butírico,
 ácido 3,6-dicloro-2-metoxibenzoico (dicamba),
 3,6-dicloro-2-metoxibenzoato de 1-(etoxicarbonil)etilo (lactidicloro-etilo)

- 10 Algunas de las sustancias protectoras se conocen ya como herbicidas y por consiguiente desarrollan además de la acción herbicida en plantas perjudiciales al mismo también acción protectora en las plantas de cultivo.

Las proporciones en peso de (mezcla) herbicida con respecto a sustancia protectora depende en general de la cantidad de aplicación de herbicida y de la actividad de la respectiva sustancia protectora y puede variar dentro de límites amplios, por ejemplo en el intervalo de 200:1 a 1:200, preferentemente de 100:1 a 1:100, en particular de 20:1 a 1:20. Las sustancias protectoras pueden formularse de manera análoga a los compuestos de fórmula (I) o sus mezclas con otros herbicidas/pesticidas y pueden proporcionarse y aplicarse como formulación acabada o mezcla en tanque con los herbicidas.

Para la aplicación se diluyen las formulaciones existentes en forma habitual en el comercio eventualmente de manera habitual, por ejemplo en polvos humectables, concentrados emulsionables, dispersiones y productos granulados dispersables en agua por medio de agua. Las preparaciones en forma de polvo, los productos granulados para dispersión o aplicación en el sustrato así como las disoluciones pulverizables habitualmente ya no se diluyen antes de la aplicación con otras sustancias inertes.

Con las condiciones externas como la temperatura, humedad, el tipo de herbicida usado, entre otras varía la cantidad de aplicación necesaria de los compuestos de fórmula general (I). Ésta puede oscilar dentro de límites amplios, por ejemplo entre 0,001 y 10,0 kg/ha o más de sustancia activa, preferentemente se encuentra sin embargo entre 0,005 y 5 kg/ha.

La presente invención se explica en más detalle por medio de los siguientes ejemplos que sin embargo en ningún caso limitan la invención.

Ejemplos de síntesis

- 30 A continuación se describen a modo de ejemplo algunos ejemplos de síntesis de compuestos de fórmula general (I) o sus sales.

2-({[5-(Difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-1,3-oxazol (ejemplo 49)

Se dispone 1,3-oxazol-2(3H)-tione (2,960 g, 29 mmol; preparada tal como se describe en el documento WO 2003/006442 A) en 50 ml de acetonitrilo. Con enfriamiento con baño de hielo se añade gota a gota 1,8-diazabicyclo(5.4.0)undec-7-eno (DBU, 4,81 ml, 32 mmol). Se agita posteriormente durante 30 minutos a 25 °C. Se añade gota a gota una disolución de 4-(bromometil)-5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol (9,045 g, 29 mmol) disuelto en acetonitrilo. Se agita durante otras 4 horas a 25 °C y se deja en reposo durante la noche. Para el procesamiento se añade la mezcla de reacción a agua y se extrae dos veces con diclorometano, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. El producto bruto se purifica mediante cromatografía (heptano : acetato de etilo, gradiente de 10:0 a 7:3). Se obtienen 7,6 g de producto (74,9 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.82 (s, 3H, CH₃); 4.32 (s, 2H, SCH₂); 6.75 (t, 1 H, OCHF₂); 7.11 (s a, 1H); 7.68 (s a, 1H).

2-({[5-(Difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol (ejemplo 50)

Se dispone 2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-1,3-oxazol (2,00 g, 6 mmol) en 333 ml de diclorometano bajo una atmósfera de argón. Entonces se añade en porciones con agitación y enfriamiento con hielo ácido 3-cloro-perbenzoico (1,362 g, 6 mmol, al 77 %) y se agita durante otras 6 horas a 0 °C. Para el procesamiento se lava la mezcla de reacción dos veces con disolución de hidróxido de sodio 2 molar, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. El producto bruto se purifica mediante cromatografía (heptano : acetato de etilo, gradiente de 10:0 a 6:4). Se obtienen 1,98 g de producto (89,7 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.86 (s, 3H, CH₃); 4.36 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.49 (d, 1 H, S(O)CH₂); 6.97 (dd, 1H, OCHF₂); 7.39 (s a, 1 H); 7.93 (s a, 1 H).

2-[(S)-{[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil]-1,3-oxazol (ejemplo 2285) y 2-[(R)-{[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil]-1,3-oxazol (ejemplo 3041)

El 2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfinil]-1,3-oxazol racémico obtenido (0,5 g, al 99 %) se separa mediante HPLC quiral preparativa (columna: Chiralpak® IC; eluyente: n-heptano/2-propanol 80:20; flujo: 90 ml/min; temperatura de columna: 25 °C) en los enantiómeros. Se obtienen así 0,2 g (40 % d. t.) de 2-[(S)-{[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil]-1,3-oxazol ($R_t = 8,129$ min, $[\alpha]_D^{25} = -126,1^\circ$) y 0,2 g (40 % d. t.) de 2-[(R)-{[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil]-1,3-oxazol ($R_t = 10,286$ min, $[\alpha]_D^{25} = +123,3^\circ$).

La configuración absoluta de 2-[(S)-{[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil]-1,3-oxazol se confirmó por medio de análisis de estructura por rayos X.

Los tiempos de retención (R_t , en minutos) y las proporciones de enantiómeros (ee) de compuestos quirales se determinaron por medio de HPLC quiral analítica [columna Chiralpak® IC (250 x 4,6 mm, tamaño de grano 10 µm), temperatura 25 °C, flujo 1 ml/min, n-heptano / 2-propanol 80:20 v/v].

Los racematos o las mezclas enantioméricas se separaron por medio de HPLC quiral preparativa en los respectivos enantiómeros [columna Chiralpak® IC (250 x 50 mm, tamaño de grano 20 µm), temperatura 25 °C, flujo 90 ml/min, n-heptano / 2-propanol 80:20 v/v]

2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfonyl]-1,3-oxazol (ejemplo 51)

Se dispone 2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfonyl]-1,3-oxazol (0,30 g, 1 mmol) en 50 ml de diclorometano bajo una atmósfera de argón. Entonces se añade en porciones con agitación y enfriamiento con hielo ácido 3-cloro-perbenzoico (0,449 g, 2 mmol, al 77 %) y se agita durante otras 3 horas a 25 °C y se deja en reposo durante la noche. Se añaden otros 100 mg de ácido 3-cloro-perbenzoico y se agitan durante otras 4 horas a 25 °C. Para el procesamiento se lava la mezcla de reacción dos veces con disolución de hidróxido de sodio 2 molar, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. El producto bruto se purifica por medio de HPLC preparativa (fase inversa). Se obtienen 0,097 g de producto (28 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.87 (s, 3H, CH₃); 4.59 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 6.84 (t, 1 H, OCHF₂); 7.4 (s a, 1 H); 7.89(s a, 1 H).

5-Bromo-2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfonyl]-1,3-oxazol (ejemplo 787)

a) Preparación de 2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfonyl]-1,3-oxazol [según Can. J. Chem., vol. 50, 3082-3083 (1972)]

Se añade ácido dihidroxifumárico (5,00 g, 34 mmol) en porciones bajo una atmósfera de argón a agua calentada hasta 60 °C (20 ml) (desarrollo de gases). Se agita a 60 °C tanto hasta que ya no tiene lugar ningún desarrollo de gases (aproximadamente 1 h; disolución 1). Se dispone rodanuro de potasio (3,282 g, 34 mmol) en etanol (25 ml). A 0 °C se añade gota a gota ácido clorhídrico concentrado (4 ml, 4,76 g, 48 mmol) y se agita durante una hora a 25 °C. El cloruro de potasio precipitado producido se separa por filtración con succión y el filtrado se añade gota a gota a temperatura ambiente lentamente a la disolución 1 y a continuación se agita posteriormente durante 12 horas a reflujo. La disolución de reacción se concentra y el residuo acuoso se mezcla con acetonitrilo (50 ml). Se añade en primer lugar carbonato de potasio (7,00 g, 51 mmol) y entonces 4-(bromometil)-5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol (5,218 g, 17 mmol) y se agita durante otras 7 horas a 60 °C. Para el procesamiento se añade la mezcla de reacción a agua y se extrae dos veces con acetato de etilo, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. El producto bruto se purifica mediante cromatografía (heptano : acetato de etilo, gradiente de 10:0 a 7:3). Se obtienen 3,09 g de producto (26,4 % d. t.).

b) Preparación de 5-bromo-2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfonyl]-1,3-oxazol

Se dispone 2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfonyl]-1,3-oxazol (1,24 g, 4 mol) en 20 ml de dimetilformamida. Entonces se añade con agitación N-bromosuccinimida (0,892 g, 5 mmol) en porciones. Se agita durante otras 6 horas a 40 °C. Para el procesamiento se añade la mezcla de reacción a agua, se extrae dos veces con diclorometano, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. El producto bruto se purifica mediante cromatografía (heptano : acetato de etilo, gradiente de 10:0 a 7:3). Se obtienen 0,70 g de producto (43,2 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.81 (s, 3H, CH₃); 4.28 (s, 2H, SCH₂); 6.71 (t, 1H, OCHF₂); 6.98 (s, 1 H).

5-Cloro-2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfanil]-1,3-oxazol (ejemplo 541)

Se dispone 2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfanil]-1,3-oxazol (1,02 g, 3 mmol) en 15 ml de dimetilformamida. Entonces se añade con agitación N-clorosuccinimida (0,550 g, 4 mmol) en porciones. Se agita durante otras 4 horas a 40 °C. Para el procesamiento se añade la mezcla de reacción a agua, se extrae dos veces con diclorometano, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. El producto bruto se purifica mediante cromatografía (heptano : acetato de etilo, gradiente de 10:0 a 7:3). Se obtienen 0,45 g de producto (35,9 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.80 (s, 3H, CH₃); 4.28 (s, 2H, SCH₂); 6.69 (t, 1 H, OCHF₂); 6.88 (s, 1 H).

10 5-Yodo-2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfanil]-1,3-oxazol (ejemplo 1033)

Se dispone 2-([5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfanil]-1,3-oxazol (0,700 g, 2 mmol) en 10 ml de dimetilformamida. Entonces se añade con agitación N-yodosuccinimida (0,750 g, 3,3 mmol) en porciones. Se agita durante otras 16 horas a 40 °C. Para el procesamiento se añade la mezcla de reacción a agua, y se extrae dos veces con diclorometano, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. El producto bruto se purifica mediante cromatografía (heptano : acetato de etilo, gradiente de 10:0 a 8:2). Se obtienen 0,25 g de producto (24,5 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.80 (s, 3H, CH₃); 4.29 (s, 2H, SCH₂); 6.70 (t, 1 H, OCHF₂); 7.11 (s, 1 H).

20 2-([5-(Cloro)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfanil]-1,3-oxazol (ejemplo 34)**a) Preparación de 2-(metilsulfonil)-1,3-oxazol**

Se dispone 1,3-oxazol-2(3H)-tionea (1,00 g, 10 mmol; preparada tal como se describe en el documento WO 2003/006442 A) bajo atmósfera de gas protector en 20 ml de acetonitrilo. Se añade gota a gota yodometano (1,544 g, 0,677 ml, 11 mmol), entonces se añade carbonato de potasio (1,503 ml, 11 mmol). Se agita posteriormente 6 horas a 25 °C. Para el procesamiento se añade la mezcla de reacción a agua y se extrae dos veces con diclorometano (100 ml), entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se hacen reaccionar posteriormente de manera directa. A esta disolución en diclorometano se añade entonces con agitación y enfriamiento con hielo ácido 3-cloro-perbenzoico (5,100 g, 23 mmol, al 77 %) en porciones, se agita posteriormente durante otras 6 horas a 25 °C y se deja en reposo durante la noche. Para el procesamiento se lava la mezcla de reacción dos veces con disolución de hidróxido de sodio 2 molar, entonces se lava con agua y finalmente con disolución saturada de NaCl. Las fases orgánicas combinadas se secan sobre sulfato de magnesio, se separan por filtración y se concentran. Se obtienen 0,820 g de producto (50,7 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.35 (s, 3H, CH₃); 7.38 (s a, 1 H); 7.88 (s a, 1 H).

35 b) Preparación de 2-([5-(cloro)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil)sulfanil]-1,3-oxazol

A una mezcla intensamente agitada compuesta de 50 ml de tolueno y disolución acuosa al 50 % de hidróxido de sodio (21 g) se añade bromhidrato de imidotiocarbamato de [5-cloro-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metilo (1,934 g, 5 mmol) y se agita intensamente durante otras 1,5 horas. Entonces se añaden bromuro de tetra-n-butilamonio (0,494 g, 2 mmol) y 2-(metilsulfonil)-1,3-oxazol (0,805 g, 5 mmol) y se agita fuertemente durante otras 6 horas a 25 °C. Para el procesamiento se añade la disolución de reacción a agua y se extrae con tolueno. Las fases orgánicas combinadas se secan y se concentra. Se obtienen 1,290 g de producto (75,2 % d. t.).

RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.89 (s, 3H, CH₃); 4.33 (s, 2H, SCH₂); 7.12 (s a, 1 H); 7.68 (s a, 1 H).

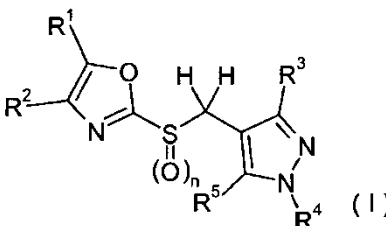
Los compuestos descritos en las siguientes tablas 1 - 3 se obtienen de acuerdo con o de manera análoga a los ejemplos de síntesis descritos anteriormente.

45 En las tablas significan:

Me = metilo
Et = etilo
Ph = fenilo
Pr = n-propilo
cPr = ciclopropilo
iPr = isopropilo
tBu = terc-butilo
cPen = ciclopentilo

50

Tabla 1: compuestos de fórmula (I)

 (I)						
N.º de ejemplo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	n
1.	H	H	CF ₃	Ph	Cl	0
2.	H	H	CF ₃	Ph	Cl	1
3.	H	H	CF ₃	Ph	Cl	2
4.	H	H	CF ₃	tBu	Cl	0
5.	H	H	CF ₃	tBu	Cl	1
6.	H	H	CF ₃	tBu	Cl	2
7.	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
8.	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
9.	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
10.	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
11.	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
12.	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
13.	H	H	CF ₃	Me	OMe	0
14.	H	H	CF ₃	Me	OMe	1
15.	H	H	CF ₃	Me	OMe	2
16.	H	H	CF ₃	Me	CN	0
17.	H	H	CF ₃	Me	CN	1
18.	H	H	CF ₃	Me	CN	2
19.	H	H	Cl	Et	Cl	0
20.	H	H	Cl	Et	Cl	1
21.	H	H	Cl	Et	Cl	2
22.	H	H	CHF ₂	Me	Cl	0
23.	H	H	CHF ₂	Me	Cl	1
24.	H	H	CHF ₂	Me	Cl	2
25.	H	H	Me	Me	Me	0
26.	H	H	Me	Me	Me	1
27.	H	H	Me	Me	Me	2
28.	H	H	Me	Me	Cl	0
29.	H	H	Me	Me	Cl	1
30.	H	H	Me	Me	Cl	2
31.	H	H	Cl	Me	Cl	0
32.	H	H	Cl	Me	Cl	1

ES 2 561 981 T3

33.	H	H	Cl	Me	Cl	2
34.	H	H	CF ₃	Me	Cl	0
35.	H	H	CF ₃	Me	Cl	1
36.	H	H	CF ₃	Me	Cl	2
37.	H	H	Cl	Me	CF ₃	0
38.	H	H	Cl	Me	CF ₃	1
39.	H	H	Cl	Me	CF ₃	2
40.	H	H	CF ₃	Me	F	0
41.	H	H	CF ₃	Me	F	1
42.	H	H	CF ₃	Me	F	2
43.	H	H	OMe	Me	CF ₃	0
44.	H	H	OMe	Me	CF ₃	1
45.	H	H	OMe	Me	CF ₃	2
46.	H	H	CF ₃	Me	OEt	0
47.	H	H	CF ₃	Me	OEt	1
48.	H	H	CF ₃	Me	OEt	2
49.	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
50.	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
51.	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
52.	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
53.	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
54.	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
55.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
56.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
57.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
58.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
59.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
60.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
61.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	0
62.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	1
63.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	2
64.	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
65.	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
66.	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
67.	H	H	CF ₃	Me	SEt	0
68.	H	H	CF ₃	Me	SEt	1
69.	H	H	CF ₃	Me	SEt	2
70.	H	H	CF ₃	Me	Me	0
71.	H	H	CF ₃	Me	Me	1
72.	H	H	CF ₃	Me	Me	2

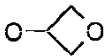
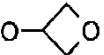
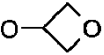
ES 2 561 981 T3

73.	H	H	CF ₃	Me	Et	0
74.	H	H	CF ₃	Me	Et	1
75.	H	H	CF ₃	Me	Et	2
76.	H	H	CF ₃	Et	Cl	0
77.	H	H	CF ₃	Et	Cl	1
78.	H	H	CF ₃	Et	Cl	2
79.	H	H	Cl	Et	CF ₃	0
80.	H	H	Cl	Et	CF ₃	1
81.	H	H	Cl	Et	CF ₃	2
82.	H	H	CF ₃	iPr	Cl	0
83.	H	H	CF ₃	iPr	Cl	1
84.	H	H	CF ₃	iPr	Cl	2
85.	H	H	Cl	iPr	CF ₃	0
86.	H	H	Cl	iPr	CF ₃	1
87.	H	H	Cl	iPr	CF ₃	2
88.	H	H	CF ₃	tBu	Cl	0
89.	H	H	CF ₃	tBu	Cl	1
90.	H	H	CF ₃	tBu	Cl	2
91.	H	H	Cl	tBu	CF ₃	0
92.	H	H	Cl	tBu	CF ₃	1
93.	H	H	Cl	tBu	CF ₃	2
94.	H	H	CF ₃	cPen	Cl	0
95.	H	H	CF ₃	cPen	Cl	1
96.	H	H	CF ₃	cPen	Cl	2
97.	H	H	Cl	cPen	CF ₃	0
98.	H	H	Cl	cPen	CF ₃	1
99.	H	H	Cl	cPen	CF ₃	2
100.	H	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	0
101.	H	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	1
102.	H	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	2
103.	H	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	0
104.	H	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	1
105.	H	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	2
106.	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	0
107.	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	1
108.	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	2
109.	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	0
110.	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	1
111.	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	2
112.	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	0

ES 2 561 981 T3

113.	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
114.	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
115.	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	0
116.	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	1
117.	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	2
118.	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
119.	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
120.	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
121.	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	0
122.	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	1
123.	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	2
124.	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	0
125.	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	1
126.	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	2
127.	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	0
128.	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	1
129.	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	2
130.	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	0
131.	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	1
132.	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	2
133.	H	H	Me	Ph	Me	0
134.	H	H	Me	Ph	Me	1
135.	H	H	Me	Ph	Me	2
136.	H	H	Me	Ph	Cl	0
137.	H	H	Me	Ph	Cl	1
138.	H	H	Me	Ph	Cl	2
139.	H	H	Et	Ph	Cl	0
140.	H	H	Et	Ph	Cl	1
141.	H	H	Et	Ph	Cl	2
142.	H	H	Pr	Ph	Cl	0
143.	H	H	Pr	Ph	Cl	1
144.	H	H	Pr	Ph	Cl	2
145.	H	H	iPr	Ph	Cl	0
146.	H	H	iPr	Ph	Cl	1
147.	H	H	iPr	Ph	Cl	2
148.	H	H	CF ₃	Ph	Cl	0
149.	H	H	CF ₃	Ph	Cl	1
150.	H	H	CF ₃	Ph	Cl	2
151.	H	H	CF ₃	Ph	Me	0
152.	H	H	CF ₃	Ph	Me	1

ES 2 561 981 T3

153.	H	H	CF ₃	Ph	Me	2
154.	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃	0
155.	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃	1
156.	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃	2
157.	H	H	CF ₃	Ph	F	0
158.	H	H	CF ₃	Ph	F	1
159.	H	H	CF ₃	Ph	F	2
160.	H	H	CF ₃	Ph	OMe	0
161.	H	H	CF ₃	Ph	OMe	1
162.	H	H	CF ₃	Ph	OMe	2
163.	H	H	CF ₃	Ph	OEt	0
164.	H	H	CF ₃	Ph	OEt	1
165.	H	H	CF ₃	Ph	OEt	2
166.	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
167.	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
168.	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
169.	H	H	CF ₃	Ph	CN	0
170.	H	H	CF ₃	Ph	CN	1
171.	H	H	CF ₃	Ph	CN	2
172.	H	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	0
173.	H	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	1
174.	H	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	2
175.	H	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
176.	H	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
177.	H	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
178.	H	H	CF ₃	Me		0
179.	H	H	CF ₃	Me		1
180.	H	H	CF ₃	Me		2
181.	H	H	CF ₃	Me	H	0
182.	H	H	CF ₃	Me	H	1
183.	H	H	CF ₃	Me	H	2
184.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
185.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
186.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2

ES 2 561 981 T3

187.	H	H	CF ₃	Me	SMe	0
188.	H	H	CF ₃	Me	SMe	1
189.	H	H	CF ₃	Me	SMe	2
190.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
191.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
192.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
193.	H	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
194.	H	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
195.	H	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
196.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
197.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
198.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
199.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
200.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
201.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
202.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
203.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
204.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
205.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
206.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
207.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
208.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
209.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
210.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
211.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
212.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
213.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
214.	H	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
215.	H	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
216.	H	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
217.	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂	0
218.	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂	1
219.	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂	2
220.	H	H	Cl	Me	OCHF ₂	0
221.	H	H	Cl	Me	OCHF ₂	1
222.	H	H	Cl	Me	OCHF ₂	2
223.	H	H	Br	Me	OCHF ₂	0
224.	H	H	Br	Me	OCHF ₂	1
225.	H	H	Br	Me	OCHF ₂	2
226.	H	H	Br	Me	CF ₃	0

ES 2 561 981 T3

227.	H	H	Br	Me	CF ₃	1
228.	H	H	Br	Me	CF ₃	2
229.	H	H	CF ₃	Me	CF ₃	0
230.	H	H	CF ₃	Me	CF ₃	1
231.	H	H	CF ₃	Me	CF ₃	2
232.	H	H	CHF ₂	Me	CF ₃	0
233.	H	H	CHF ₂	Me	CF ₃	1
234.	H	H	CHF ₂	Me	CF ₃	2
235.	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
236.	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
237.	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
238.	H	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	0
239.	H	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	1
240.	H	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	2
241.	H	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	0
242.	H	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	1
243.	H	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	2
244.	H	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	0
245.	H	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	1
246.	H	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	2
247.	F	H	CF ₃	Ph	Cl	0
248.	F	H	CF ₃	Ph	Cl	1
249.	F	H	CF ₃	Ph	Cl	2
250.	F	H	CF ₃	tBu	Cl	0
251.	F	H	CF ₃	tBu	Cl	1
252.	F	H	CF ₃	tBu	Cl	2
253.	F	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
254.	F	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
255.	F	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
256.	F	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
257.	F	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
258.	F	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
259.	F	H	CF ₃	Me	OMe	0
260.	F	H	CF ₃	Me	OMe	1
261.	F	H	CF ₃	Me	OMe	2
262.	F	H	CF ₃	Me	CN	0
263.	F	H	CF ₃	Me	CN	1
264.	F	H	CF ₃	Me	CN	2
265.	F	H	Cl	Et	Cl	0
266.	F	H	Cl	Et	Cl	1

ES 2 561 981 T3

267.	F	H	Cl	Et	Cl	2
268.	F	H	CHF ₂	Me	Cl	0
269.	F	H	CHF ₂	Me	Cl	1
270.	F	H	CHF ₂	Me	Cl	2
271.	F	H	Me	Me	Me	0
272.	F	H	Me	Me	Me	1
273.	F	H	Me	Me	Me	2
274.	F	H	Me	Me	Cl	0
275.	F	H	Me	Me	Cl	1
276.	F	H	Me	Me	Cl	2
277.	F	H	Cl	Me	Cl	0
278.	F	H	Cl	Me	Cl	1
279.	F	H	Cl	Me	Cl	2
280.	F	H	CF ₃	Me	Cl	0
281.	F	H	CF ₃	Me	Cl	1
282.	F	H	CF ₃	Me	Cl	2
283.	F	H	Cl	Me	CF ₃	0
284.	F	H	Cl	Me	CF ₃	1
285.	F	H	Cl	Me	CF ₃	2
286.	F	H	CF ₃	Me	F	0
287.	F	H	CF ₃	Me	F	1
288.	F	H	CF ₃	Me	F	2
289.	F	H	OMe	Me	CF ₃	0
290.	F	H	OMe	Me	CF ₃	1
291.	F	H	OMe	Me	CF ₃	2
292.	F	H	CF ₃	Me	OEt	0
293.	F	H	CF ₃	Me	OEt	1
294.	F	H	CF ₃	Me	OEt	2
295.	F	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
296.	F	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
297.	F	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
298.	F	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
299.	F	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
300.	F	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
301.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
302.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
303.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
304.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
305.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
306.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2

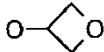
ES 2 561 981 T3

307.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	0
308.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	1
309.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	2
310.	F	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
311.	F	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
312.	F	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
313.	F	H	CF ₃	Me	SEt	0
314.	F	H	CF ₃	Me	SEt	1
315.	F	H	CF ₃	Me	SEt	2
316.	F	H	CF ₃	Me	Me	0
317.	F	H	CF ₃	Me	Me	1
318.	F	H	CF ₃	Me	Me	2
319.	F	H	CF ₃	Me	Et	0
320.	F	H	CF ₃	Me	Et	1
321.	F	H	CF ₃	Me	Et	2
322.	F	H	CF ₃	Et	Cl	0
323.	F	H	CF ₃	Et	Cl	1
324.	F	H	CF ₃	Et	Cl	2
325.	F	H	Cl	Et	CF ₃	0
326.	F	H	Cl	Et	CF ₃	1
327.	F	H	Cl	Et	CF ₃	2
328.	F	H	CF ₃	iPr	Cl	0
329.	F	H	CF ₃	iPr	Cl	1
330.	F	H	CF ₃	iPr	Cl	2
331.	F	H	Cl	iPr	CF ₃	0
332.	F	H	Cl	iPr	CF ₃	1
333.	F	H	Cl	iPr	CF ₃	2
334.	F	H	CF ₃	tBu	Cl	0
335.	F	H	CF ₃	tBu	Cl	1
336.	F	H	CF ₃	tBu	Cl	2
337.	F	H	Cl	tBu	CF ₃	0
338.	F	H	Cl	tBu	CF ₃	1
339.	F	H	Cl	tBu	CF ₃	2
340.	F	H	CF ₃	cPen	Cl	0
341.	F	H	CF ₃	cPen	Cl	1
342.	F	H	CF ₃	cPen	Cl	2
343.	F	H	Cl	cPen	CF ₃	0
344.	F	H	Cl	cPen	CF ₃	1
345.	F	H	Cl	cPen	CF ₃	2
346.	F	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	0

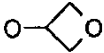
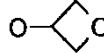
ES 2 561 981 T3

347.	F	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	1
348.	F	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	2
349.	F	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	0
350.	F	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	1
351.	F	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	2
352.	F	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	0
353.	F	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	1
354.	F	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	2
355.	F	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	0
356.	F	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	1
357.	F	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	2
358.	F	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
359.	F	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
360.	F	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
361.	F	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	0
362.	F	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	1
363.	F	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	2
364.	F	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
365.	F	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
366.	F	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
367.	F	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	0
368.	F	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	1
369.	F	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	2
370.	F	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	0
371.	F	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	1
372.	F	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	2
373.	F	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	0
374.	F	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	1
375.	F	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	2
376.	F	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	0
377.	F	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	1
378.	F	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	2
379.	F	H	Me	Ph	Me	0
380.	F	H	Me	Ph	Me	1
381.	F	H	Me	Ph	Me	2
382.	F	H	Me	Ph	Cl	0
383.	F	H	Me	Ph	Cl	1
384.	F	H	Me	Ph	Cl	2
385.	F	H	Et	Ph	Cl	0
386.	F	H	Et	Ph	Cl	1

ES 2 561 981 T3

387.	F	H	Et	Ph	Cl	2
388.	F	H	Pr	Ph	Cl	0
389.	F	H	Pr	Ph	Cl	1
390.	F	H	Pr	Ph	Cl	2
391.	F	H	iPr	Ph	Cl	0
392.	F	H	iPr	Ph	Cl	1
393.	F	H	iPr	Ph	Cl	2
394.	F	H	CF ₃	Ph	Cl	0
395.	F	H	CF ₃	Ph	Cl	1
396.	F	H	CF ₃	Ph	Cl	2
397.	F	H	CF ₃	Ph	Me	0
398.	F	H	CF ₃	Ph	Me	1
399.	F	H	CF ₃	Ph	Me	2
400.	F	H	CF ₃	Ph	CF ₃	0
401.	F	H	CF ₃	Ph	CF ₃	1
402.	F	H	CF ₃	Ph	CF ₃	2
403.	F	H	CF ₃	Ph	F	0
404.	F	H	CF ₃	Ph	F	1
405.	F	H	CF ₃	Ph	F	2
406.	F	H	CF ₃	Ph	OMe	0
407.	F	H	CF ₃	Ph	OMe	1
408.	F	H	CF ₃	Ph	OMe	2
409.	F	H	CF ₃	Ph	OEt	0
410.	F	H	CF ₃	Ph	OEt	1
411.	F	H	CF ₃	Ph	OEt	2
412.	F	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
413.	F	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
414.	F	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
415.	F	H	CF ₃	Ph	CN	0
416.	F	H	CF ₃	Ph	CN	1
417.	F	H	CF ₃	Ph	CN	2
418.	F	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	0
419.	F	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	1
420.	F	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	2
421.	F	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
422.	F	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
423.	F	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
424.	F	H	CF ₃	Me		0

ES 2 561 981 T3

425.	F	H	CF ₃	Me		1
426.	F	H	CF ₃	Me		2
427.	F	H	CF ₃	Me	H	0
428.	F	H	CF ₃	Me	H	1
429.	F	H	CF ₃	Me	H	2
430.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
431.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
432.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
433.	F	H	CF ₃	Me	SMe	0
434.	F	H	CF ₃	Me	SMe	1
435.	F	H	CF ₃	Me	SMe	2
436.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
437.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
438.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
439.	F	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
440.	F	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
441.	F	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
442.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
443.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
444.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
445.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
446.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
447.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
448.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
449.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
450.	F	H	CH ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
451.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
452.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
453.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
454.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
455.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
456.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
457.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
458.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
459.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
460.	F	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	0

ES 2 561 981 T3

461.	F	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
462.	F	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
463.	F	H	CF ₃	Me	CHF ₂	0
464.	F	H	CF ₃	Me	CHF ₂	1
465.	F	H	CF ₃	Me	CHF ₂	2
466.	F	H	Cl	Me	OCHF ₂	0
467.	F	H	Cl	Me	OCHF ₂	1
468.	F	H	Cl	Me	OCHF ₂	2
469.	F	H	Br	Me	OCHF ₂	0
470.	F	H	Br	Me	OCHF ₂	1
471.	F	H	Br	Me	OCHF ₂	2
472.	F	H	Br	Me	CF ₃	0
473.	F	H	Br	Me	CF ₃	1
474.	F	H	Br	Me	CF ₃	2
475.	F	H	CF ₃	Me	CF ₃	0
476.	F	H	CF ₃	Me	CF ₃	1
477.	F	H	CF ₃	Me	CF ₃	2
478.	F	H	CHF ₂	Me	CF ₃	0
479.	F	H	CH ₂	Me	CF ₃	1
480.	F	H	CHF ₂	Me	CF ₃	2
481.	F	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
482.	F	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
483.	F	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
484.	F	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	0
485.	F	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	1
486.	F	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	2
487.	F	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	0
488.	F	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	1
489.	F	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	2
490.	F	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	0
491.	F	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	1
492.	F	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	2
493.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl	0
494.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl	1
495.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl	2
496.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl	0
497.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl	1
498.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl	2
499.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
500.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	1

ES 2 561 981 T3

501.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
502.	Cl	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
503.	Cl	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
504.	Cl	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
505.	Cl	H	CF ₃	Me	OMe	0
506.	Cl	H	CF ₃	Me	OMe	1
507.	Cl	H	CF ₃	Me	OMe	2
508.	Cl	H	CF ₃	Me	CN	0
509.	Cl	H	CF ₃	Me	CN	1
510.	Cl	H	CF ₃	Me	CN	2
511.	Cl	H	Cl	Et	Cl	0
512.	Cl	H	Cl	Et	Cl	1
513.	Cl	H	Cl	Et	Cl	2
514.	Cl	H	CHF ₂	Me	Cl	0
515.	Cl	H	CHF ₂	Me	Cl	1
516.	Cl	H	CHF ₂	Me	Cl	2
517.	Cl	H	Me	Me	Me	0
518.	Cl	H	Me	Me	Me	1
519.	Cl	H	Me	Me	Me	2
520.	Cl	H	Me	Me	Cl	0
521.	Cl	H	Me	Me	Cl	1
522.	Cl	H	Me	Me	Cl	2
523.	Cl	H	Cl	Me	Cl	0
524.	Cl	H	Cl	Me	Cl	1
525.	Cl	H	Cl	Me	Cl	2
526.	Cl	H	CF ₃	Me	Cl	0
527.	Cl	H	CF ₃	Me	Cl	1
528.	Cl	H	CF ₃	Me	Cl	2
529.	Cl	H	Cl	Me	CF ₃	0
530.	Cl	H	Cl	Me	CF ₃	1
531.	Cl	H	Cl	Me	CF ₃	2
532.	Cl	H	CF ₃	Me	F	0
533.	Cl	H	CF ₃	Me	F	1
534.	Cl	H	CF ₃	Me	F	2
535.	Cl	H	OMe	Me	CF ₃	0
536.	Cl	H	OMe	Me	CF ₃	1
537.	Cl	H	OMe	Me	CF ₃	2
538.	Cl	H	CF ₃	Me	OE _t	0
539.	Cl	H	CF ₃	Me	OE _t	1
540.	Cl	H	CF ₃	Me	OE _t	2

ES 2 561 981 T3

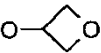
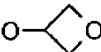
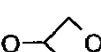
541.	Cl	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
542.	Cl	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
543.	Cl	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
544.	Cl	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
545.	Cl	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
546.	Cl	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
547.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
548.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
549.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
550.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
551.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
552.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
553.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	0
554.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	1
555.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	2
556.	Cl	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
557.	Cl	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
558.	Cl	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
559.	Cl	H	CF ₃	Me	SEt	0
560.	Cl	H	CF ₃	Me	SEt	1
561.	Cl	H	CF ₃	Me	SEt	2
562.	Cl	H	CF ₃	Me	Me	0
563.	Cl	H	CF ₃	Me	Me	1
564.	Cl	H	CF ₃	Me	Me	2
565.	Cl	H	CF ₃	Me	Et	0
566.	Cl	H	CF ₃	Me	Et	1
567.	Cl	H	CF ₃	Me	Et	2
568.	Cl	H	CF ₃	Et	Cl	0
569.	Cl	H	CF ₃	Et	Cl	1
570.	Cl	H	CF ₃	Et	Cl	2
571.	Cl	H	Cl	Et	CF ₃	0
572.	Cl	H	Cl	Et	CF ₃	1
573.	Cl	H	Cl	Et	CF ₃	2
574.	Cl	H	CF ₃	iPr	Cl	0
575.	Cl	H	CF ₃	iPr	Cl	1
576.	Cl	H	CF ₃	iPr	Cl	2
577.	Cl	H	Cl	iPr	CF ₃	0
578.	Cl	H	Cl	iPr	CF ₃	1
579.	Cl	H	Cl	iPr	CF ₃	2
580.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl	0

ES 2 561 981 T3

581.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl	1
582.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl	2
583.	Cl	H	Cl	tBu	CF ₃	0
584.	Cl	H	Cl	tBu	CF ₃	1
585.	Cl	H	Cl	tBu	CF ₃	2
586.	Cl	H	CF ₃	cPen	Cl	0
587.	Cl	H	CF ₃	cPen	Cl	1
588.	Cl	H	CF ₃	cPen	Cl	2
589.	Cl	H	Cl	cPen	CF ₃	0
590.	Cl	H	Cl	cPen	CF ₃	1
591.	Cl	H	Cl	cPen	CF ₃	2
592.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	0
593.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	1
594.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	2
595.	Cl	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	0
596.	Cl	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	1
597.	Cl	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	2
598.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	0
599.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	1
600.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	2
601.	Cl	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	0
602.	Cl	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	1
603.	Cl	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	2
604.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
605.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
606.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
607.	Cl	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	0
608.	Cl	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	1
609.	Cl	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	2
610.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
611.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
612.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
613.	Cl	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	0
614.	Cl	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	1
615.	Cl	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	2
616.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	0
617.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	1
618.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	2
619.	Cl	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	0
620.	Cl	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	1

ES 2 561 981 T3

621.	Cl	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	2
622.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	0
623.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	1
624.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	2
625.	Cl	H	Me	Ph	Me	0
626.	Cl	H	Me	Ph	Me	1
627.	Cl	H	Me	Ph	Me	2
628.	Cl	H	Me	Ph	Cl	0
629.	Cl	H	Me	Ph	Cl	1
630.	Cl	H	Me	Ph	Cl	2
631.	Cl	H	Et	Ph	Cl	0
632.	Cl	H	Et	Ph	Cl	1
633.	Cl	H	Et	Ph	Cl	2
634.	Cl	H	Pr	Ph	Cl	0
635.	Cl	H	Pr	Ph	Cl	1
636.	Cl	H	Pr	Ph	Cl	2
637.	Cl	H	iPr	Ph	Cl	0
638.	Cl	H	iPr	Ph	Cl	1
639.	Cl	H	iPr	Ph	Cl	2
640.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl	0
641.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl	1
642.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl	2
643.	Cl	H	CF ₃	Ph	Me	0
644.	Cl	H	CF ₃	Ph	Me	1
645.	Cl	H	CF ₃	Ph	Me	2
646.	Cl	H	CF ₃	Ph	CF ₃	0
647.	Cl	H	CF ₃	Ph	CF ₃	1
648.	Cl	H	CF ₃	Ph	CF ₃	2
649.	Cl	H	CF ₃	Ph	F	0
650.	Cl	H	CF ₃	Ph	F	1
651.	Cl	H	CF ₃	Ph	F	2
652.	Cl	H	CF ₃	Ph	OMe	0
653.	Cl	H	CF ₃	Ph	OMe	1
654.	Cl	H	CF ₃	Ph	OMe	2
655.	Cl	H	CF ₃	Ph	OEt	0
656.	Cl	H	CF ₃	Ph	OEt	1
657.	Cl	H	CF ₃	Ph	OEt	2
658.	Cl	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
659.	Cl	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
660.	Cl	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2

661.	Cl	H	CF ₃	Ph	CN	0
662.	Cl	H	CF ₃	Ph	CN	1
663.	Cl	H	CF ₃	Ph	CN	2
664.	Cl	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	0
665.	Cl	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	1
666.	Cl	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	2
667.	Cl	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
668.	Cl	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
669.	Cl	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
670.	Cl	H	CF ₃	Me		0
671.	Cl	H	CF ₃	Me		1
672.	Cl	H	CF ₃	Me		2
673.	Cl	H	CF ₃	Me	H	0
674.	Cl	H	CF ₃	Me	H	1
675.	Cl	H	CF ₃	Me	H	2
676.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
677.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
678.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
679.	Cl	H	CF ₃	Me	SMe	0
680.	Cl	H	CF ₃	Me	SMe	1
681.	Cl	H	CF ₃	Me	SMe	2
682.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
683.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
684.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
685.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
686.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
687.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
688.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
689.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
690.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
691.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
692.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
693.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
694.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0

ES 2 561 981 T3

695.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
696.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
697.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
698.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
699.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
700.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
701.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
702.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
703.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
704.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
705.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
706.	Cl	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
707.	Cl	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
708.	Cl	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
709.	Cl	H	CF ₃	Me	CHF ₂	0
710.	Cl	H	CF ₃	Me	CHF ₂	1
711.	Cl	H	CF ₃	Me	CHF ₂	2
712.	Cl	H	Cl	Me	OCHF ₂	0
713.	Cl	H	Cl	Me	OCHF ₂	1
714.	Cl	H	Cl	Me	OCHF ₂	2
715.	Cl	H	Br	Me	OCHF ₂	0
716.	Cl	H	Br	Me	OCHF ₂	1
717.	Cl	H	Br	Me	OCHF ₂	2
718.	Cl	H	Br	Me	CF ₃	0
719.	Cl	H	Br	Me	CF ₃	1
720.	Cl	H	Br	Me	CF ₃	2
721.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₃	0
722.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₃	1
723.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₃	2
724.	Cl	H	CHF ₂	Me	CF ₃	0
725.	Cl	H	CHF ₂	Me	CF ₃	1
726.	Cl	H	CHF ₂	Me	CF ₃	2
727.	Cl	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
728.	Cl	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
729.	Cl	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
730.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	0
731.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	1
732.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	2
733.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	0
734.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	1

ES 2 561 981 T3

735.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	2
736.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	0
737.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	1
738.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	2
739.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl	0
740.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl	1
741.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl	2
742.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl	0
743.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl	1
744.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl	2
745.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
746.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
747.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
748.	Br	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
749.	Br	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
750.	Br	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
751.	Br	H	CF ₃	Me	OMe	0
752.	Br	H	CF ₃	Me	OMe	1
753.	Br	H	CF ₃	Me	OMe	2
754.	Br	H	CF ₃	Me	CN	0
755.	Br	H	CF ₃	Me	CN	1
756.	Br	H	CF ₃	Me	CN	2
757.	Br	H	Cl	Et	Cl	0
758.	Br	H	Cl	Et	Cl	1
759.	Br	H	Cl	Et	Cl	2
760.	Br	H	CHF ₂	Me	Cl	0
761.	Br	H	CHF ₂	Me	Cl	1
762.	Br	H	CHF ₂	Me	Cl	2
763.	Br	H	Me	Me	Me	0
764.	Br	H	Me	Me	Me	1
765.	Br	H	Me	Me	Me	2
766.	Br	H	Me	Me	Cl	0
767.	Br	H	Me	Me	Cl	1
768.	Br	H	Me	Me	Cl	2
769.	Br	H	Cl	Me	Cl	0
770.	Br	H	Cl	Me	Cl	1
771.	Br	H	Cl	Me	Cl	2
772.	Br	H	CF ₃	Me	Cl	0
773.	Br	H	CF ₃	Me	Cl	1
774.	Br	H	CF ₃	Me	Cl	2

ES 2 561 981 T3

775.	Br	H	Cl	Me	CF ₃	0
776.	Br	H	Cl	Me	CF ₃	1
777.	Br	H	Cl	Me	CF ₃	2
778.	Br	H	CF ₃	Me	F	0
779.	Br	H	CF ₃	Me	F	1
780.	Br	H	CF ₃	Me	F	2
781.	Br	H	OMe	Me	CF ₃	0
782.	Br	H	OMe	Me	CF ₃	1
783.	Br	H	OMe	Me	CF ₃	2
784.	Br	H	CF ₃	Me	OEt	0
785.	Br	H	CF ₃	Me	OEt	1
786.	Br	H	CF ₃	Me	OEt	2
787.	Br	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
788.	Br	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
789.	Br	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
790.	Br	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
791.	Br	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
792.	Br	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
793.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
794.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
795.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
796.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
797.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
798.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
799.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	0
800.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	1
801.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	2
802.	Br	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
803.	Br	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
804.	Br	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
805.	Br	H	CF ₃	Me	SEt	0
806.	Br	H	CF ₃	Me	SEt	1
807.	Br	H	CF ₃	Me	SEt	2
808.	Br	H	CF ₃	Me	Me	0
809.	Br	H	CF ₃	Me	Me	1
810.	Br	H	CF ₃	Me	Me	2
811.	Br	H	CF ₃	Me	Et	0
812.	Br	H	CF ₃	Me	Et	1
813.	Br	H	CF ₃	Me	Et	2
814.	Br	H	CF ₃	Et	Cl	0

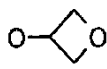
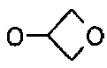
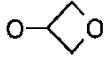
ES 2 561 981 T3

815.	Br	H	CF ₃	Et	Cl	1
816.	Br	H	CF ₃	Et	Cl	2
817.	Br	H	Cl	Et	CF ₃	0
818.	Br	H	Cl	Et	CF ₃	1
819.	Br	H	Cl	Et	CF ₃	2
820.	Br	H	CF ₃	iPr	Cl	0
821.	Br	H	CF ₃	iPr	Cl	1
822.	Br	H	CF ₃	iPr	Cl	2
823.	Br	H	Cl	iPr	CF ₃	0
824.	Br	H	Cl	iPr	CF ₃	1
825.	Br	H	Cl	iPr	CF ₃	2
826.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl	0
827.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl	1
828.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl	2
829.	Br	H	Cl	tBu	CF ₃	0
830.	Br	H	Cl	tBu	CF ₃	1
831.	Br	H	Cl	tBu	CF ₃	2
832.	Br	H	CF ₃	cPen	Cl	0
833.	Br	H	CF ₃	cPen	Cl	1
834.	Br	H	CF ₃	cPen	Cl	2
835.	Br	H	Cl	cPen	CF ₃	0
836.	Br	H	Cl	cPen	CF ₃	1
837.	Br	H	Cl	cPen	CF ₃	2
838.	Br	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	0
839.	Br	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	1
840.	Br	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	2
841.	Br	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	0
842.	Br	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	1
843.	Br	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	2
844.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	0
845.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	1
846.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	2
847.	Br	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	0
848.	Br	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	1
849.	Br	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	2
850.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
851.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
852.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
853.	Br	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	0
854.	Br	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	1

ES 2 561 981 T3

855.	Br	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	2
856.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
857.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
858.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
859.	Br	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	0
860.	Br	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	1
861.	Br	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	2
862.	Br	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	0
863.	Br	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	1
864.	Br	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	2
865.	Br	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	0
866.	Br	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	1
867.	Br	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	2
868.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	0
869.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	1
870.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	2
871.	Br	H	Me	Ph	Me	0
872.	Br	H	Me	Ph	Me	1
873.	Br	H	Me	Ph	Me	2
874.	Br	H	Me	Ph	Cl	0
875.	Br	H	Me	Ph	Cl	1
876.	Br	H	Me	Ph	Cl	2
877.	Br	H	Et	Ph	Cl	0
878.	Br	H	Et	Ph	Cl	1
879.	Br	H	Et	Ph	Cl	2
880.	Br	H	Pr	Ph	Cl	0
881.	Br	H	Pr	Ph	Cl	1
882.	Br	H	Pr	Ph	Cl	2
883.	Br	H	iPr	Ph	Cl	0
884.	Br	H	iPr	Ph	Cl	1
885.	Br	H	iPr	Ph	Cl	2
886.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl	0
887.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl	1
888.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl	2
889.	Br	H	CF ₃	Ph	Me	0
890.	Br	H	CF ₃	Ph	Me	1
891.	Br	H	CF ₃	Ph	Me	2
892.	Br	H	CF ₃	Ph	CF ₃	0
893.	Br	H	CF ₃	Ph	CF ₃	1
894.	Br	H	CF ₃	Ph	CF ₃	2

ES 2 561 981 T3

895.	Br	H	CF ₃	Ph	F	0
896.	Br	H	CF ₃	Ph	F	1
897.	Br	H	CF ₃	Ph	F	2
898.	Br	H	CF ₃	Ph	OMe	0
899.	Br	H	CF ₃	Ph	OMe	1
900.	Br	H	CF ₃	Ph	OMe	2
901.	Br	H	CF ₃	Ph	OEt	0
902.	Br	H	CF ₃	Ph	OEt	1
903.	Br	H	CF ₃	Ph	OEt	2
904.	Br	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
905.	Br	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
906.	Br	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
907.	Br	H	CF ₃	Ph	CN	0
908.	Br	H	CF ₃	Ph	CN	1
909.	Br	H	CF ₃	Ph	CN	2
910.	Br	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	0
911.	Br	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	1
912.	Br	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	2
913.	Br	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
914.	Br	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
915.	Br	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
916.	Br	H	CF ₃	Me		0
917.	Br	H	CF ₃	Me		1
918.	Br	H	CF ₃	Me		2
919.	Br	H	CF ₃	Me	H	0
920.	Br	H	CF ₃	Me	H	1
921.	Br	H	CF ₃	Me	H	2
922.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
923.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
924.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
925.	Br	H	CF ₃	Me	SMe	0
926.	Br	H	CF ₃	Me	SMe	1
927.	Br	H	CF ₃	Me	SMe	2
928.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0

ES 2 561 981 T3

929.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
930.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
931.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
932.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
933.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
934.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
935.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
936.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
937.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
938.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
939.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
940.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
941.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
942.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
943.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
944.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
945.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
946.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
947.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
948.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
949.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
950.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
951.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
952.	Br	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
953.	Br	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
954.	Br	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
955.	Br	H	CF ₃	Me	CHF ₂	0
956.	Br	H	CF ₃	Me	CHF ₂	1
957.	Br	H	CF ₃	Me	CHF ₂	2
958.	Br	H	Cl	Me	OCHF ₂	0
959.	Br	H	Cl	Me	OCHF ₂	1
960.	Br	H	Cl	Me	OCHF ₂	2
961.	Br	H	Br	Me	OCHF ₂	0
962.	Br	H	Br	Me	OCHF ₂	1
963.	Br	H	Br	Me	OCHF ₂	2
964.	Br	H	Br	Me	CF ₃	0
965.	Br	H	Br	Me	CF ₃	1
966.	Br	H	Br	Me	CF ₃	2
967.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₃	0
968.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₃	1

ES 2 561 981 T3

969.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₃	2
970.	Br	H	CHF ₂	Me	CF ₃	0
971.	Br	H	CHF ₂	Me	CF ₃	1
972.	Br	H	CHF ₂	Me	CF ₃	2
973.	Br	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
974.	Br	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
975.	Br	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
976.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	0
977.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	1
978.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	2
979.	Br	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	0
980.	Br	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	1
981.	Br	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	2
982.	Br	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	0
983.	Br	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	1
984.	Br	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	2
985.	I	H	CF ₃	Ph	Cl	0
986.	I	H	CF ₃	Ph	Cl	1
987.	I	H	CF ₃	Ph	Cl	2
988.	I	H	CF ₃	tBu	Cl	0
989.	I	H	CF ₃	tBu	Cl	1
990.	I	H	CF ₃	tBu	Cl	2
991.	I	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
992.	I	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
993.	I	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
994.	I	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
995.	I	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
996.	I	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
997.	I	H	CF ₃	Me	OMe	0
998.	I	H	CF ₃	Me	OMe	1
999.	I	H	CF ₃	Me	OMe	2
1000.	I	H	CF ₃	Me	CN	0
1001.	I	H	CF ₃	Me	CN	1
1002.	I	H	CF ₃	Me	CN	2
1003.	I	H	Cl	Et	Cl	0
1004.	I	H	Cl	Et	Cl	1
1005.	I	H	Cl	Et	Cl	2
1006.	I	H	CHF ₂	Me	Cl	0
1007.	I	H	CHF ₂	Me	Cl	1
1008.	I	H	CHF ₂	Me	Cl	2

ES 2 561 981 T3

1009.	I	H	Me	Me	Me	0
1010.	I	H	Me	Me	Me	1
1011.	I	H	Me	Me	Me	2
1012.	I	H	Me	Me	Cl	0
1013.	I	H	Me	Me	Cl	1
1014.	I	H	Me	Me	Cl	2
1015.	I	H	Cl	Me	Cl	0
1016.	I	H	Cl	Me	Cl	1
1017.	I	H	Cl	Me	Cl	2
1018.	I	H	CF ₃	Me	Cl	0
1019.	I	H	CF ₃	Me	Cl	1
1020.	I	H	CF ₃	Me	Cl	2
1021.	I	H	Cl	Me	CF ₃	0
1022.	I	H	Cl	Me	CF ₃	1
1023.	I	H	Cl	Me	CF ₃	2
1024.	I	H	CF ₃	Me	F	0
1025.	I	H	CF ₃	Me	F	1
1026.	I	H	CF ₃	Me	F	2
1027.	I	H	OMe	Me	CF ₃	0
1028.	I	H	OMe	Me	CF ₃	1
1029.	I	H	OMe	Me	CF ₃	2
1030.	I	H	CF ₃	Me	OEt	0
1031.	I	H	CF ₃	Me	OEt	1
1032.	I	H	CF ₃	Me	OEt	2
1033.	I	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
1034.	I	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
1035.	I	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
1036.	I	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
1037.	I	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
1038.	I	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
1039.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
1040.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
1041.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
1042.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1043.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1044.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1045.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	0
1046.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	1
1047.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	2
1048.	I	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0

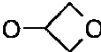
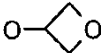
ES 2 561 981 T3

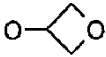
1049.	I	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
1050.	I	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
1051.	I	H	CF ₃	Me	SEt	0
1052.	I	H	CF ₃	Me	SEt	1
1053.	I	H	CF ₃	Me	SEt	2
1054.	I	H	CF ₃	Me	Me	0
1055.	I	H	CF ₃	Me	Me	1
1056.	I	H	CF ₃	Me	Me	2
1057.	I	H	CF ₃	Me	Et	0
1058.	I	H	CF ₃	Me	Et	1
1059.	I	H	CF ₃	Me	Et	2
1060.	I	H	CF ₃	Et	Cl	0
1061.	I	H	CF ₃	Et	Cl	1
1062.	I	H	CF ₃	Et	Cl	2
1063.	I	H	Cl	Et	CF ₃	0
1064.	I	H	Cl	Et	CF ₃	1
1065.	I	H	Cl	Et	CF ₃	2
1066.	I	H	CF ₃	iPr	Cl	0
1067.	I	H	CF ₃	iPr	Cl	1
1068.	I	H	CF ₃	iPr	Cl	2
1069.	I	H	Cl	iPr	CF ₃	0
1070.	I	H	Cl	iPr	CF ₃	1
1071.	I	H	Cl	iPr	CF ₃	2
1072.	I	H	CF ₃	tBu	Cl	0
1073.	I	H	CF ₃	tBu	Cl	1
1074.	I	H	CF ₃	tBu	Cl	2
1075.	I	H	Cl	tBu	CF ₃	0
1076.	I	H	Cl	tBu	CF ₃	1
1077.	I	H	Cl	tBu	CF ₃	2
1078.	I	H	CF ₃	cPen	Cl	0
1079.	I	H	CF ₃	cPen	Cl	1
1080.	I	H	CF ₃	cPen	Cl	2
1081.	I	H	Cl	cPen	CF ₃	0
1082.	I	H	Cl	cPen	CF ₃	1
1083.	I	H	Cl	cPen	CF ₃	2
1084.	I	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	0
1085.	I	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	1
1086.	I	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	2
1087.	I	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	0
1088.	I	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	1

ES 2 561 981 T3

1089.	I	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	2
1090.	I	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	0
1091.	I	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	1
1092.	I	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	2
1093.	I	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	0
1094.	I	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	1
1095.	I	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	2
1096.	I	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
1097.	I	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
1098.	I	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
1099.	I	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	0
1100.	I	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	1
1101.	I	H	OMe	CHF ₂	CF ₃	2
1102.	I	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
1103.	I	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
1104.	I	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
1105.	I	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	0
1106.	I	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	1
1107.	I	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	2
1108.	I	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	0
1109.	I	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	1
1110.	I	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	2
1111.	I	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	0
1112.	I	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	1
1113.	I	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	2
1114.	I	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	0
1115.	I	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	1
1116.	I	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	2
1117.	I	H	Me	Ph	Me	0
1118.	I	H	Me	Ph	Me	1
1119.	I	H	Me	Ph	Me	2
1120.	I	H	Me	Ph	Cl	0
1121.	I	H	Me	Ph	Cl	1
1122.	I	H	Me	Ph	Cl	2
1123.	I	H	Et	Ph	Cl	0
1124.	I	H	Et	Ph	Cl	1
1125.	I	H	Et	Ph	Cl	2
1126.	I	H	Pr	Ph	Cl	0
1127.	I	H	Pr	Ph	Cl	1
1128.	I	H	Pr	Ph	Cl	2

ES 2 561 981 T3

1129.	I	H	iPr	Ph	Cl	0
1130.	I	H	iPr	Ph	Cl	1
1131.	I	H	iPr	Ph	Cl	2
1132.	I	H	CF ₃	Ph	Cl	0
1133.	I	H	CF ₃	Ph	Cl	1
1134.	I	H	CF ₃	Ph	Cl	2
1135.	I	H	CF ₃	Ph	Me	0
1136.	I	H	CF ₃	Ph	Me	1
1137.	I	H	CF ₃	Ph	Me	2
1138.	I	H	CF ₃	Ph	CF ₃	0
1139.	I	H	CF ₃	Ph	CF ₃	1
1140.	I	H	CF ₃	Ph	CF ₃	2
1141.	I	H	CF ₃	Ph	F	0
1142.	I	H	CF ₃	Ph	F	1
1143.	I	H	CF ₃	Ph	F	2
1144.	I	H	CF ₃	Ph	OMe	0
1145.	I	H	CF ₃	Ph	OMe	1
1146.	I	H	CF ₃	Ph	OMe	2
1147.	I	H	CF ₃	Ph	OEt	0
1148.	I	H	CF ₃	Ph	OEt	1
1149.	I	H	CF ₃	Ph	OEt	2
1150.	I	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
1151.	I	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
1152.	I	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
1153.	I	H	CF ₃	Ph	CN	0
1154.	I	H	CF ₃	Ph	CN	1
1155.	I	H	CF ₃	Ph	CN	2
1156.	I	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	0
1157.	I	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	1
1158.	I	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	2
1159.	I	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1160.	I	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1161.	I	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1162.	I	H	CF ₃	Me		0
1163.	I	H	CF ₃	Me		1
1164.	I	H	CF ₃	Me		2

						
1165.	I	H	CF ₃	Me	H	0
1166.	I	H	CF ₃	Me	H	1
1167.	I	H	CF ₃	Me	H	2
1168.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
1169.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
1170.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
1171.	I	H	CF ₃	Me	SMe	0
1172.	I	H	CF ₃	Me	SMe	1
1173.	I	H	CF ₃	Me	SMe	2
1174.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
1175.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
1176.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
1177.	I	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
1178.	I	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
1179.	I	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
1180.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
1181.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
1182.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
1183.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
1184.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
1185.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
1186.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
1187.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
1188.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
1189.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
1190.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
1191.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
1192.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
1193.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
1194.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
1195.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
1196.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
1197.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
1198.	I	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
1199.	I	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
1200.	I	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
1201.	I	H	CF ₃	Me	CHF ₂	0
1202.	I	H	CF ₃	Me	CHF ₂	1

ES 2 561 981 T3

1203.	I	H	CF ₃	Me	CHF ₂	2
1204.	I	H	Cl	Me	OCHF ₂	0
1205.	I	H	Cl	Me	OCHF ₂	1
1206.	I	H	Cl	Me	OCHF ₂	2
1207.	I	H	Br	Me	OCHF ₂	0
1208.	I	H	Br	Me	OCHF ₂	1
1209.	I	H	Br	Me	OCHF ₂	2
1210.	I	H	Br	Me	CF ₃	0
1211.	I	H	Br	Me	CF ₃	1
1212.	I	H	Br	Me	CF ₃	2
1213.	I	H	CF ₃	Me	CF ₃	0
1214.	I	H	CF ₃	Me	CF ₃	1
1215.	I	H	CF ₃	Me	CF ₃	2
1216.	I	H	CHF ₂	Me	CF ₃	0
1217.	I	H	CHF ₂	Me	CF ₃	1
1218.	I	H	CHF ₂	Me	CF ₃	2
1219.	I	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
1220.	I	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
1221.	I	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
1222.	I	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	0
1223.	I	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	1
1224.	I	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃	2
1225.	I	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1226.	I	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1227.	I	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1228.	I	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	0
1229.	I	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	1
1230.	I	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂	2
1231.	H	F	CF ₃	Ph	Cl	0
1232.	H	F	CF ₃	Ph	Cl	1
1233.	H	F	CF ₃	Ph	Cl	2
1234.	H	F	CF ₃	tBu	Cl	0
1235.	H	F	CF ₃	tBu	Cl	1
1236.	H	F	CF ₃	tBu	Cl	2
1237.	H	F	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
1238.	H	F	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
1239.	H	F	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
1240.	H	F	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
1241.	H	F	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
1242.	H	F	Cl	CHF ₂	CF ₃	2

ES 2 561 981 T3

1243.	H	F	CF ₃	Me	OMe	0
1244.	H	F	CF ₃	Me	OMe	1
1245.	H	F	CF ₃	Me	OMe	2
1246.	H	F	CF ₃	Me	CN	0
1247.	H	F	CF ₃	Me	CN	1
1248.	H	F	CF ₃	Me	CN	2
1249.	H	F	Cl	Et	Cl	0
1250.	H	F	Cl	Et	Cl	1
1251.	H	F	Cl	Et	Cl	2
1252.	H	F	CHF ₂	Me	Cl	0
1253.	H	F	CHF ₂	Me	Cl	1
1254.	H	F	CHF ₂	Me	Cl	2
1255.	H	F	Me	Me	Me	0
1256.	H	F	Me	Me	Me	1
1257.	H	F	Me	Me	Me	2
1258.	H	F	Me	Me	Cl	0
1259.	H	F	Me	Me	Cl	1
1260.	H	F	Me	Me	Cl	2
1261.	H	F	Cl	Me	Cl	0
1262.	H	F	Cl	Me	Cl	1
1263.	H	F	Cl	Me	Cl	2
1264.	H	F	CF ₃	Me	Cl	0
1265.	H	F	CF ₃	Me	Cl	1
1266.	H	F	CF ₃	Me	Cl	2
1267.	H	F	Cl	Me	CF ₃	0
1268.	H	F	Cl	Me	CF ₃	1
1269.	H	F	Cl	Me	CF ₃	2
1270.	H	F	CF ₃	Me	F	0
1271.	H	F	CF ₃	Me	F	1
1272.	H	F	CF ₃	Me	F	2
1273.	H	F	OMe	Me	CF ₃	0
1274.	H	F	OMe	Me	CF ₃	1
1275.	H	F	OMe	Me	CF ₃	2
1276.	H	F	CF ₃	Me	OE _t	0
1277.	H	F	CF ₃	Me	OE _t	1
1278.	H	F	CF ₃	Me	OE _t	2
1279.	H	F	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
1280.	H	F	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
1281.	H	F	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
1282.	H	F	OCHF ₂	Me	CF ₃	0

ES 2 561 981 T3

1283.	H	F	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
1284.	H	F	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
1285.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
1286.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
1287.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
1288.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1289.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1290.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1291.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	0
1292.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	1
1293.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CN	2
1294.	H	F	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
1295.	H	F	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
1296.	H	F	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
1297.	H	F	CF ₃	Me	SEt	0
1298.	H	F	CF ₃	Me	SEt	1
1299.	H	F	CF ₃	Me	SEt	2
1300.	H	F	CF ₃	Me	Me	0
1301.	H	F	CF ₃	Me	Me	1
1302.	H	F	CF ₃	Me	Me	2
1303.	H	F	CF ₃	Me	Et	0
1304.	H	F	CF ₃	Me	Et	1
1305.	H	F	CF ₃	Me	Et	2
1306.	H	F	CF ₃	Et	Cl	0
1307.	H	F	CF ₃	Et	Cl	1
1308.	H	F	CF ₃	Et	Cl	2
1309.	H	F	Cl	Et	CF ₃	0
1310.	H	F	Cl	Et	CF ₃	1
1311.	H	F	Cl	Et	CF ₃	2
1312.	H	F	CF ₃	iPr	Cl	0
1313.	H	F	CF ₃	iPr	Cl	1
1314.	H	F	CF ₃	iPr	Cl	2
1315.	H	F	Cl	iPr	CF ₃	0
1316.	H	F	Cl	iPr	CF ₃	1
1317.	H	F	Cl	iPr	CF ₃	2
1318.	H	F	CF ₃	tBu	Cl	0
1319.	H	F	CF ₃	tBu	Cl	1
1320.	H	F	CF ₃	tBu	Cl	2
1321.	H	F	Cl	tBu	CF ₃	0
1322.	H	F	Cl	tBu	CF ₃	1

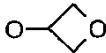
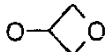
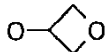
ES 2 561 981 T3

1323.	H	F	Cl	tBu	CF ₃	2
1324.	H	F	CF ₃	cPen	Cl	0
1325.	H	F	CF ₃	cPen	Cl	1
1326.	H	F	CF ₃	cPen	Cl	2
1327.	H	F	Cl	cPen	CF ₃	0
1328.	H	F	Cl	cPen	CF ₃	1
1329.	H	F	Cl	cPen	CF ₃	2
1330.	H	F	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	0
1331.	H	F	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	1
1332.	H	F	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl	2
1333.	H	F	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	0
1334.	H	F	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	1
1335.	H	F	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃	2
1336.	H	F	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	0
1337.	H	F	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	1
1338.	H	F	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl	2
1339.	H	F	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	0
1340.	H	F	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	1
1341.	H	F	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃	2
1342.	H	F	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
1343.	H	F	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
1344.	H	F	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
1345.	H	F	OMe	CHF ₂	CF ₃	0
1346.	H	F	OMe	CHF ₂	CF ₃	1
1347.	H	F	OMe	CHF ₂	CF ₃	2
1348.	H	F	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
1349.	H	F	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
1350.	H	F	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
1351.	H	F	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	0
1352.	H	F	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	1
1353.	H	F	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃	2
1354.	H	F	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	0
1355.	H	F	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	1
1356.	H	F	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl	2
1357.	H	F	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	0
1358.	H	F	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	1
1359.	H	F	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃	2
1360.	H	F	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	0
1361.	H	F	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	1
1362.	H	F	CF ₃	CH ₂ CN	Cl	2

ES 2 561 981 T3

1363.	H	F	Me	Ph	Me	0
1364.	H	F	Me	Ph	Me	1
1365.	H	F	Me	Ph	Me	2
1366.	H	F	Me	Ph	Cl	0
1367.	H	F	Me	Ph	Cl	1
1368.	H	F	Me	Ph	Cl	2
1369.	H	F	Et	Ph	Cl	0
1370.	H	F	Et	Ph	Cl	1
1371.	H	F	Et	Ph	Cl	2
1372.	H	F	Pr	Ph	Cl	0
1373.	H	F	Pr	Ph	Cl	1
1374.	H	F	Pr	Ph	Cl	2
1375.	H	F	iPr	Ph	Cl	0
1376.	H	F	iPr	Ph	Cl	1
1377.	H	F	iPr	Ph	Cl	2
1378.	H	F	CF ₃	Ph	Cl	0
1379.	H	F	CF ₃	Ph	Cl	1
1380.	H	F	CF ₃	Ph	Cl	2
1381.	H	F	CF ₃	Ph	Me	0
1382.	H	F	CF ₃	Ph	Me	1
1383.	H	F	CF ₃	Ph	Me	2
1384.	H	F	CF ₃	Ph	CF ₃	0
1385.	H	F	CF ₃	Ph	CF ₃	1
1386.	H	F	CF ₃	Ph	CF ₃	2
1387.	H	F	CF ₃	Ph	F	0
1388.	H	F	CF ₃	Ph	F	1
1389.	H	F	CF ₃	Ph	F	2
1390.	H	F	CF ₃	Ph	OMe	0
1391.	H	F	CF ₃	Ph	OMe	1
1392.	H	F	CF ₃	Ph	OMe	2
1393.	H	F	CF ₃	Ph	OEt	0
1394.	H	F	CF ₃	Ph	OEt	1
1395.	H	F	CF ₃	Ph	OEt	2
1396.	H	F	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
1397.	H	F	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
1398.	H	F	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
1399.	H	F	CF ₃	Ph	CN	0
1400.	H	F	CF ₃	Ph	CN	1
1401.	H	F	CF ₃	Ph	CN	2
1402.	H	F	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	0

ES 2 561 981 T3

1403.	H	F	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	1
1404.	H	F	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl	2
1405.	H	F	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1406.	H	F	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1407.	H	F	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1408.	H	F	CF ₃	Me		0
1409.	H	F	CH ₃	Me		1
1410.	H	F	CF ₃	Me		2
1411.	H	F	CF ₃	Me	H	0
1412.	H	F	CF ₃	Me	H	1
1413.	H	F	CF ₃	Me	H	2
1414.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
1415.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
1416.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
1417.	H	F	CF ₃	Me	SMe	0
1418.	H	F	CF ₃	Me	SMe	1
1419.	H	F	CF ₃	Me	SMe	2
1420.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
1421.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
1422.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
1423.	H	F	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
1424.	H	F	CH ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
1425.	H	F	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
1426.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
1427.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
1428.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
1429.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
1430.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
1431.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
1432.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
1433.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
1434.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
1435.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
1436.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
1437.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2

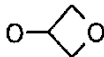
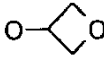
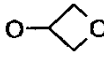
ES 2 561 981 T3

1438.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
1439.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
1440.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
1441.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
1442.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
1443.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
1444.	H	F	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
1445.	H	F	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
1446.	H	F	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
1447.	H	F	CF ₃	Me	CHF ₂	0
1448.	H	F	CF ₃	Me	CHF ₂	1
1449.	H	F	CF ₃	Me	CHF ₂	2
1450.	H	F	Cl	Me	OCHF ₂	0
1451.	H	F	Cl	Me	OCHF ₂	1
1452.	H	F	Cl	Me	OCHF ₂	2
1453.	H	F	Br	Me	OCHF ₂	0
1454.	H	F	Br	Me	OCHF ₂	1
1455.	H	F	Br	Me	OCHF ₂	2
1456.	H	F	Br	Me	CF ₃	0
1457.	H	F	Br	Me	CF ₃	1
1458.	H	F	Br	Me	CF ₃	2
1459.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl	0
1460.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl	1
1461.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl	2
1462.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
1463.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
1464.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
1465.	H	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
1466.	H	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
1467.	H	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
1468.	H	Cl	CF ₃	Me	OMe	0
1469.	H	Cl	CF ₃	Me	OMe	1
1470.	H	Cl	CF ₃	Me	OMe	2
1471.	H	Cl	CF ₃	Me	CN	0
1472.	H	Cl	CF ₃	Me	CN	1
1473.	H	Cl	CF ₃	Me	CN	2
1474.	H	Cl	CHF ₂	Me	Cl	0
1475.	H	Cl	CHF ₂	Me	Cl	1
1476.	H	Cl	CHF ₂	Me	Cl	2
1477.	H	Cl	Me	Me	Me	0

ES 2 561 981 T3

1478.	H	Cl	Me	Me	Me	1
1479.	H	Cl	Me	Me	Me	2
1480.	H	Cl	Me	Me	Cl	0
1481.	H	Cl	Me	Me	Cl	1
1482.	H	Cl	Me	Me	Cl	2
1483.	H	Cl	CF ₃	Me	Cl	0
1484.	H	Cl	CF ₃	Me	Cl	1
1485.	H	Cl	CF ₃	Me	Cl	2
1486.	H	Cl	Cl	Me	CF ₃	0
1487.	H	Cl	Cl	Me	CF ₃	1
1488.	H	Cl	Cl	Me	CF ₃	2
1489.	H	Cl	CF ₃	Me	F	0
1490.	H	Cl	CF ₃	Me	F	1
1491.	H	Cl	CF ₃	Me	F	2
1492.	H	Cl	OMe	Me	CF ₃	0
1493.	H	Cl	OMe	Me	CF ₃	1
1494.	H	Cl	OMe	Me	CF ₃	2
1495.	H	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
1496.	H	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
1497.	H	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
1498.	H	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
1499.	H	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
1500.	H	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
1501.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
1502.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
1503.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
1504.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1505.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1506.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1507.	H	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
1508.	H	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
1509.	H	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
1510.	H	Cl	CF ₃	Me	SEt	0
1511.	H	Cl	CF ₃	Me	SEt	1
1512.	H	Cl	CF ₃	Me	SEt	2
1513.	H	Cl	CF ₃	Et	Cl	0
1514.	H	Cl	CF ₃	Et	Cl	1
1515.	H	Cl	CF ₃	Et	Cl	2
1516.	H	Cl	CF ₃	iPr	Cl	0
1517.	H	Cl	CF ₃	iPr	Cl	1

ES 2 561 981 T3

1518.	H	Cl	CF ₃	iPr	Cl	2
1519.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl	0
1520.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl	1
1521.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl	2
1522.	H	Cl	Cl	tBu	CF ₃	0
1523.	H	Cl	Cl	tBu	CF ₃	1
1524.	H	Cl	Cl	tBu	CF ₃	2
1525.	H	Cl	CF ₃	cPen	Cl	0
1526.	H	Cl	CF ₃	cPen	Cl	1
1527.	H	Cl	CF ₃	cPen	Cl	2
1528.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
1529.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
1530.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
1531.	H	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
1532.	H	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
1533.	H	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
1534.	H	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
1535.	H	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
1536.	H	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
1537.	H	Cl	CF ₃	Ph	Cl	0
1538.	H	Cl	CF ₃	Ph	Cl	1
1539.	H	Cl	CF ₃	Ph	Cl	2
1540.	H	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1541.	H	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1542.	H	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1543.	H	Cl	CF ₃	Me		0
1544.	H	Cl	CF ₃	Me		1
1545.	H	Cl	CF ₃	Me		2
1546.	H	Cl	CF ₃	Me	H	0
1547.	H	Cl	CF ₃	Me	H	1
1548.	H	Cl	CF ₃	Me	H	2
1549.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
1550.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
1551.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2

ES 2 561 981 T3

1552.	H	Cl	CF ₃	Me	SMe	0
1553.	H	Cl	CF ₃	Me	SMe	1
1554.	H	Cl	CF ₃	Me	SMe	2
1555.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
1556.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
1557.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
1558.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
1559.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
1560.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
1561.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
1562.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
1563.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
1564.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
1565.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
1566.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
1567.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
1568.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
1569.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
1570.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
1571.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
1572.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
1573.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
1574.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
1575.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
1576.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
1577.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
1578.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
1579.	H	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
1580.	H	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
1581.	H	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
1582.	H	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂	0
1583.	H	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂	1
1584.	H	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂	2
1585.	H	Cl	Cl	Me	OCHF ₂	0
1586.	H	Cl	Cl	Me	OCHF ₂	1
1587.	H	Cl	Cl	Me	OCHF ₂	2
1588.	H	Cl	Br	Me	OCHF ₂	0
1589.	H	Cl	Br	Me	OCHF ₂	1
1590.	H	Cl	Br	Me	OCHF ₂	2
1591.	H	Cl	Br	Me	CF ₃	0

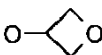
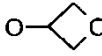
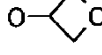
ES 2 561 981 T3

1592.	H	Cl	Br	Me	CF ₃	1
1593.	H	Cl	Br	Me	CF ₃	2
1594.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl	0
1595.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl	1
1596.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl	2
1597.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
1598.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
1599.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
1600.	H	Br	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
1601.	H	Br	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
1602.	H	Br	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
1603.	H	Br	CF ₃	Me	OMe	0
1604.	H	Br	CF ₃	Me	OMe	1
1605.	H	Br	CF ₃	Me	OMe	2
1606.	H	Br	CF ₃	Me	CN	0
1607.	H	Br	CF ₃	Me	CN	1
1608.	H	Br	CF ₃	Me	CN	2
1609.	H	Br	CHF ₂	Me	Cl	0
1610.	H	Br	CHF ₂	Me	Cl	1
1611.	H	Br	CHF ₂	Me	Cl	2
1612.	H	Br	Me	Me	Me	0
1613.	H	Br	Me	Me	Me	1
1614.	H	Br	Me	Me	Me	2
1615.	H	Br	Me	Me	Cl	0
1616.	H	Br	Me	Me	Cl	1
1617.	H	Br	Me	Me	Cl	2
1618.	H	Br	CF ₃	Me	Cl	0
1619.	H	Br	CF ₃	Me	Cl	1
1620.	H	Br	CF ₃	Me	Cl	2
1621.	H	Br	Cl	Me	CF ₃	0
1622.	H	Br	Cl	Me	CF ₃	1
1623.	H	Br	Cl	Me	CF ₃	2
1624.	H	Br	CF ₃	Me	F	0
1625.	H	Br	CF ₃	Me	F	1
1626.	H	Br	CF ₃	Me	F	2
1627.	H	Br	OMe	Me	CF ₃	0
1628.	H	Br	OMe	Me	CF ₃	1
1629.	H	Br	OMe	Me	CF ₃	2
1630.	H	Br	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
1631.	H	Br	CF ₃	Me	OCHF ₂	1

ES 2 561 981 T3

1632.	H	Br	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
1633.	H	Br	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
1634.	H	Br	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
1635.	H	Br	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
1636.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
1637.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
1638.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
1639.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1640.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1641.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1642.	H	Br	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
1643.	H	Br	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
1644.	H	Br	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
1645.	H	Br	CF ₃	Me	SEt	0
1646.	H	Br	CF ₃	Me	SEt	1
1647.	H	Br	CF ₃	Me	SEt	2
1648.	H	Br	CF ₃	Et	Cl	0
1649.	H	Br	CF ₃	Et	Cl	1
1650.	H	Br	CF ₃	Et	Cl	2
1651.	H	Br	CF ₃	iPr	Cl	0
1652.	H	Br	CF ₃	iPr	Cl	1
1653.	H	Br	CF ₃	iPr	Cl	2
1654.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl	0
1655.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl	1
1656.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl	2
1657.	H	Br	Cl	tBu	CF ₃	0
1658.	H	Br	Cl	tBu	CF ₃	1
1659.	H	Br	Cl	tBu	CF ₃	2
1660.	H	Br	CF ₃	cPen	Cl	0
1661.	H	Br	CF ₃	cPen	Cl	1
1662.	H	Br	CF ₃	cPen	Cl	2
1663.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
1664.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
1665.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
1666.	H	Br	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
1667.	H	Br	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
1668.	H	Br	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
1669.	H	Br	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
1670.	H	Br	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
1671.	H	Br	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2

ES 2 561 981 T3

1672.	H	Br	CF ₃	Ph	Cl	0
1673.	H	Br	CF ₃	Ph	Cl	1
1674.	H	Br	CF ₃	Ph	Cl	2
1675.	H	Br	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1676.	H	Br	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1677.	H	Br	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1678.	H	Br	CF ₃	Me		0
1679.	H	Br	CF ₃	Me		1
1680.	H	Br	CF ₃	Me		2
1681.	H	Br	CF ₃	Me	H	0
1682.	H	Br	CF ₃	Me	H	1
1683.	H	Br	CF ₃	Me	H	2
1684.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
1685.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
1686.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
1687.	H	Br	CF ₃	Me	SMe	0
1688.	H	Br	CF ₃	Me	SMe	1
1689.	H	Br	CF ₃	Me	SMe	2
1690.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
1691.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
1692.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
1693.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
1694.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
1695.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
1696.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
1697.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
1698.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
1699.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
1700.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
1701.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
1702.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
1703.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
1704.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
1705.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
1706.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1

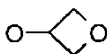
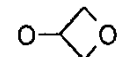
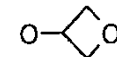
ES 2 561 981 T3

1707.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
1708.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
1709.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
1710.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
1711.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
1712.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
1713.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
1714.	H	Br	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
1715.	H	Br	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
1716.	H	Br	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
1717.	H	Br	CF ₃	Me	CHF ₂	0
1718.	H	Br	CF ₃	Me	CHF ₂	1
1719.	H	Br	CF ₃	Me	CHF ₂	2
1720.	H	Br	Cl	Me	OCHF ₂	0
1721.	H	Br	Cl	Me	OCHF ₂	1
1722.	H	Br	Cl	Me	OCHF ₂	2
1723.	H	Br	Br	Me	OCHF ₂	0
1724.	H	Br	Br	Me	OCHF ₂	1
1725.	H	Br	Br	Me	OCHF ₂	2
1726.	H	Br	Br	Me	CF ₃	0
1727.	H	Br	Br	Me	CF ₃	1
1728.	H	Br	Br	Me	CF ₃	2
1729.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl	0
1730.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl	1
1731.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl	2
1732.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
1733.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
1734.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
1735.	Me	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
1736.	Me	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
1737.	Me	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
1738.	Me	H	CF ₃	Me	OMe	0
1739.	Me	H	CF ₃	Me	OMe	1
1740.	Me	H	CF ₃	Me	OMe	2
1741.	Me	H	CF ₃	Me	CN	0
1742.	Me	H	CF ₃	Me	CN	1
1743.	Me	H	CF ₃	Me	CN	2
1744.	Me	H	CHF ₂	Me	Cl	0
1745.	Me	H	CHF ₂	Me	Cl	1
1746.	Me	H	CHF ₂	Me	Cl	2

ES 2 561 981 T3

1747.	Me	H	Me	Me	Me	0
1748.	Me	H	Me	Me	Me	1
1749.	Me	H	Me	Me	Me	2
1750.	Me	H	Me	Me	Cl	0
1751.	Me	H	Me	Me	Cl	1
1752.	Me	H	Me	Me	Cl	2
1753.	Me	H	CF ₃	Me	Cl	0
1754.	Me	H	CF ₃	Me	Cl	1
1755.	Me	H	CF ₃	Me	Cl	2
1756.	Me	H	Cl	Me	CF ₃	0
1757.	Me	H	Cl	Me	CF ₃	1
1758.	Me	H	Cl	Me	CF ₃	2
1759.	Me	H	CF ₃	Me	F	0
1760.	Me	H	CF ₃	Me	F	1
1761.	Me	H	CF ₃	Me	F	2
1762.	Me	H	OMe	Me	CF ₃	0
1763.	Me	H	OMe	Me	CF ₃	1
1764.	Me	H	OMe	Me	CF ₃	2
1765.	Me	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
1766.	Me	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
1767.	Me	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
1768.	Me	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
1769.	Me	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
1770.	Me	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
1771.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
1772.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
1773.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
1774.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1775.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1776.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1777.	Me	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
1778.	Me	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
1779.	Me	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
1780.	Me	H	CF ₃	Me	SEt	0
1781.	Me	H	CF ₃	Me	SEt	1
1782.	Me	H	CF ₃	Me	SEt	2
1783.	Me	H	CF ₃	Et	Cl	0
1784.	Me	H	CF ₃	Et	Cl	1
1785.	Me	H	CF ₃	Et	Cl	2
1786.	Me	H	CF ₃	iPr	Cl	0

ES 2 561 981 T3

1787.	Me	H	CF ₃	iPr	Cl	1
1788.	Me	H	CF ₃	iPr	Cl	2
1789.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl	0
1790.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl	1
1791.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl	2
1792.	Me	H	Cl	tBu	CF ₃	0
1793.	Me	H	Cl	tBu	CF ₃	1
1794.	Me	H	Cl	tBu	CF ₃	2
1795.	Me	H	CF ₃	cPen	Cl	0
1796.	Me	H	CF ₃	cPen	Cl	1
1797.	Me	H	CF ₃	cPen	Cl	2
1798.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
1799.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
1800.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
1801.	Me	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
1802.	Me	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
1803.	Me	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
1804.	Me	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
1805.	Me	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
1806.	Me	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
1807.	Me	H	CF ₃	Ph	Cl	0
1808.	Me	H	CF ₃	Ph	Cl	1
1809.	Me	H	CF ₃	Ph	Cl	2
1810.	Me	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1811.	Me	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1812.	Me	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1813.	Me	H	CF ₃	Me		0
1814.	Me	H	CF ₃	Me		1
1815.	Me	H	CF ₃	Me		2
1816.	Me	H	CF ₃	Me	H	0
1817.	Me	H	CF ₃	Me	H	1
1818.	Me	H	CF ₃	Me	H	2
1819.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
1820.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1

ES 2 561 981 T3

1821.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
1822.	Me	H	CF ₃	Me	SMe	0
1823.	Me	H	CF ₃	Me	SMe	1
1824.	Me	H	CF ₃	Me	SMe	2
1825.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
1826.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
1827.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
1828.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
1829.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
1830.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
1831.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
1832.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
1833.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
1834.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
1835.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
1836.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
1837.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
1838.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
1839.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
1840.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
1841.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
1842.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
1843.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
1844.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
1845.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
1846.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
1847.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
1848.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
1849.	Me	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
1850.	Me	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
1851.	Me	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
1852.	Me	H	CF ₃	Me	CHF ₂	0
1853.	Me	H	CF ₃	Me	CHF ₂	1
1854.	Me	H	CF ₃	Me	CHF ₂	2
1855.	Me	H	Cl	Me	OCHF ₂	0
1856.	Me	H	Cl	Me	OCHF ₂	1
1857.	Me	H	Cl	Me	OCHF ₂	2
1858.	Me	H	Br	Me	OCHF ₂	0
1859.	Me	H	Br	Me	OCHF ₂	1
1860.	Me	H	Br	Me	OCHF ₂	2

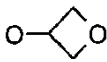
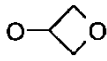
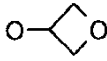
ES 2 561 981 T3

1861.	Me	H	Br	Me	CF ₃	0
1862.	Me	H	Br	Me	CF ₃	1
1863.	Me	H	Br	Me	CF ₃	2
1864.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl	0
1865.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl	1
1866.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl	2
1867.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
1868.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
1869.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
1870.	NO ₂	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
1871.	NO ₂	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
1872.	NO ₂	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
1873.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OMe	0
1874.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OMe	1
1875.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OMe	2
1876.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CN	0
1877.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CN	1
1878.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CN	2
1879.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	Cl	0
1880.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	Cl	1
1881.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	Cl	2
1882.	NO ₂	H	Me	Me	Me	0
1883.	NO ₂	H	Me	Me	Me	1
1884.	NO ₂	H	Me	Me	Me	2
1885.	NO ₂	H	Me	Me	Cl	0
1886.	NO ₂	H	Me	Me	Cl	1
1887.	NO ₂	H	Me	Me	Cl	2
1888.	NO ₂	H	CF ₃	Me	Cl	0
1889.	NO ₂	H	CF ₃	Me	Cl	1
1890.	NO ₂	H	CF ₃	Me	Cl	2
1891.	NO ₂	H	Cl	Me	CF ₃	0
1892.	NO ₂	H	Cl	Me	CF ₃	1
1893.	NO ₂	H	Cl	Me	CF ₃	2
1894.	NO ₂	H	CF ₃	Me	F	0
1895.	NO ₂	H	CF ₃	Me	F	1
1896.	NO ₂	H	CF ₃	Me	F	2
1897.	NO ₂	H	OMe	Me	CF ₃	0
1898.	NO ₂	H	OMe	Me	CF ₃	1
1899.	NO ₂	H	OMe	Me	CF ₃	2
1900.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	0

ES 2 561 981 T3

1901.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
1902.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
1903.	NO ₂	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
1904.	NO ₂	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
1905.	NO ₂	H	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
1906.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
1907.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
1908.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
1909.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1910.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1911.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1912.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
1913.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
1914.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
1915.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SEt	0
1916.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SEt	1
1917.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SEt	2
1918.	NO ₂	H	CF ₃	Et	Cl	0
1919.	NO ₂	H	CF ₃	Et	Cl	1
1920.	NO ₂	H	CF ₃	Et	Cl	2
1921.	NO ₂	H	CF ₃	iPr	Cl	0
1922.	NO ₂	H	CF ₃	iPr	Cl	1
1923.	NO ₂	H	CF ₃	iPr	Cl	2
1924.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl	0
1925.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl	1
1926.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl	2
1927.	NO ₂	H	Cl	tBu	CF ₃	0
1928.	NO ₂	H	Cl	tBu	CF ₃	1
1929.	NO ₂	H	Cl	tBu	CF ₃	2
1930.	NO ₂	H	CF ₃	cPen	Cl	0
1931.	NO ₂	H	CF ₃	cPen	Cl	1
1932.	NO ₂	H	CF ₃	cPen	Cl	2
1933.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
1934.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
1935.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
1936.	NO ₂	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
1937.	NO ₂	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
1938.	NO ₂	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
1939.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
1940.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1

ES 2 561 981 T3

1941.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
1942.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	Cl	0
1943.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	Cl	1
1944.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	Cl	2
1945.	NO ₂	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
1946.	NO ₂	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
1947.	NO ₂	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
1948.	NO ₂	H	CF ₃	Me		0
1949.	NO ₂	H	CF ₃	Me		1
1950.	NO ₂	H	CF ₃	Me		2
1951.	NO ₂	H	CF ₃	Me	H	0
1952.	NO ₂	H	CF ₃	Me	H	1
1953.	NO ₂	H	CF ₃	Me	H	2
1954.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
1955.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
1956.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
1957.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SMe	0
1958.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SMe	1
1959.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SMe	2
1960.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
1961.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
1962.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
1963.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
1964.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
1965.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
1966.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
1967.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
1968.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
1969.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
1970.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
1971.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
1972.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
1973.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
1974.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
1975.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0

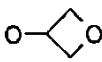
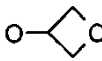
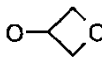
ES 2 561 981 T3

1976.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
1977.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
1978.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
1979.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
1980.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
1981.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
1982.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
1983.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
1984.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
1985.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
1986.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
1987.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CHF ₂	0
1988.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CHF ₂	1
1989.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CHF ₂	2
1990.	NO ₂	H	Cl	Me	OCHF ₂	0
1991.	NO ₂	H	Cl	Me	OCHF ₂	1
1992.	NO ₂	H	Cl	Me	OCHF ₂	2
1993.	NO ₂	H	Br	Me	OCHF ₂	0
1994.	NO ₂	H	Br	Me	OCHF ₂	1
1995.	NO ₂	H	Br	Me	OCHF ₂	2
1996.	NO ₂	H	Br	Me	CF ₃	0
1997.	NO ₂	H	Br	Me	CF ₃	1
1998.	NO ₂	H	Br	Me	CF ₃	2
1999.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl	0
2000.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl	1
2001.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl	2
2002.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
2003.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
2004.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
2005.	Cl	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
2006.	Cl	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
2007.	Cl	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
2008.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OMe	0
2009.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OMe	1
2010.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OMe	2
2011.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CN	0
2012.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CN	1
2013.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CN	2
2014.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	Cl	0
2015.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	Cl	1

ES 2 561 981 T3

2016.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	Cl	2
2017.	Cl	Cl	Me	Me	Me	0
2018.	Cl	Cl	Me	Me	Me	1
2019.	Cl	Cl	Me	Me	Me	2
2020.	Cl	Cl	Me	Me	Cl	0
2021.	Cl	Cl	Me	Me	Cl	1
2022.	Cl	Cl	Me	Me	Cl	2
2023.	Cl	Cl	CF ₃	Me	Cl	0
2024.	Cl	Cl	CF ₃	Me	Cl	1
2025.	Cl	Cl	CF ₃	Me	Cl	2
2026.	Cl	Cl	Cl	Me	CF ₃	0
2027.	Cl	Cl	Cl	Me	CF ₃	1
2028.	Cl	Cl	Cl	Me	CF ₃	2
2029.	Cl	Cl	CF ₃	Me	F	0
2030.	Cl	Cl	CF ₃	Me	F	1
2031.	Cl	Cl	CF ₃	Me	F	2
2032.	Cl	Cl	OMe	Me	CF ₃	0
2033.	Cl	Cl	OMe	Me	CF ₃	1
2034.	Cl	Cl	OMe	Me	CF ₃	2
2035.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂	0
2036.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
2037.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
2038.	Cl	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
2039.	Cl	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
2040.	Cl	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
2041.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
2042.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
2043.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
2044.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
2045.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
2046.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
2047.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
2048.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
2049.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
2050.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SEt	0
2051.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SEt	1
2052.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SEt	2
2053.	Cl	Cl	CF ₃	Et	Cl	0
2054.	Cl	Cl	CF ₃	Et	Cl	1
2055.	Cl	Cl	CF ₃	Et	Cl	2

ES 2 561 981 T3

2056.	Cl	Cl	CF ₃	iPr	Cl	0
2057.	Cl	Cl	CF ₃	iPr	Cl	1
2058.	Cl	Cl	CF ₃	iPr	Cl	2
2059.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl	0
2060.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl	1
2061.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl	2
2062.	Cl	Cl	Cl	tBu	CF ₃	0
2063.	Cl	Cl	Cl	tBu	CF ₃	1
2064.	Cl	Cl	Cl	tBu	CF ₃	2
2065.	Cl	Cl	CF ₃	cPen	Cl	0
2066.	Cl	Cl	CF ₃	cPen	Cl	1
2067.	Cl	Cl	CF ₃	cPen	Cl	2
2068.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
2069.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
2070.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
2071.	Cl	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
2072.	Cl	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
2073.	Cl	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
2074.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
2075.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1
2076.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
2077.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	Cl	0
2078.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	Cl	1
2079.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	Cl	2
2080.	Cl	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
2081.	Cl	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
2082.	Cl	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
2083.	Cl	Cl	CF ₃	Me		0
2084.	Cl	Cl	CF ₃	Me		1
2085.	Cl	Cl	CF ₃	Me		2
2086.	Cl	Cl	CF ₃	Me	H	0
2087.	Cl	Cl	CF ₃	Me	H	1
2088.	Cl	Cl	CF ₃	Me	H	2
2089.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
2090.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1

ES 2 561 981 T3

2091.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
2092.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SMe	0
2093.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SMe	1
2094.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SMe	2
2095.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
2096.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
2097.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
2098.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
2099.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
2100.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
2101.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
2102.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
2103.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
2104.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
2105.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
2106.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
2107.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
2108.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
2109.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
2110.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0
2111.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
2112.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
2113.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
2114.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
2115.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
2116.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
2117.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
2118.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
2119.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
2120.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
2121.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
2122.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂	0
2123.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂	1
2124.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂	2
2125.	Cl	Cl	Cl	Me	OCHF ₂	0
2126.	Cl	Cl	Cl	Me	OCHF ₂	1
2127.	Cl	Cl	Cl	Me	OCHF ₂	2
2128.	Cl	Cl	Br	Me	OCHF ₂	0
2129.	Cl	Cl	Br	Me	OCHF ₂	1
2130.	Cl	Cl	Br	Me	OCHF ₂	2

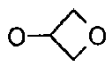
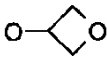
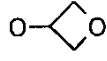
ES 2 561 981 T3

2131.	Cl	Cl	Br	Me	CF ₃	0
2132.	Cl	Cl	Br	Me	CF ₃	1
2133.	Cl	Cl	Br	Me	CF ₃	2
2134.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl	0
2135.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl	1
2136.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl	2
2137.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	Cl	0
2138.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	Cl	1
2139.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	Cl	2
2140.	Cl	Me	Cl	CHF ₂	CF ₃	0
2141.	Cl	Me	Cl	CHF ₂	CF ₃	1
2142.	Cl	Me	Cl	CHF ₂	CF ₃	2
2143.	Cl	Me	CF ₃	Me	OMe	0
2144.	Cl	Me	CF ₃	Me	OMe	1
2145.	Cl	Me	CF ₃	Me	OMe	2
2146.	Cl	Me	CF ₃	Me	CN	0
2147.	Cl	Me	CF ₃	Me	CN	1
2148.	Cl	Me	CF ₃	Me	CN	2
2149.	Cl	Me	CHF ₂	Me	Cl	0
2150.	Cl	Me	CHF ₂	Me	Cl	1
2151.	Cl	Me	CHF ₂	Me	Cl	2
2152.	Cl	Me	Me	Me	Me	0
2153.	Cl	Me	Me	Me	Me	1
2154.	Cl	Me	Me	Me	Me	2
2155.	Cl	Me	Me	Me	Cl	0
2156.	Cl	Me	Me	Me	Cl	1
2157.	Cl	Me	Me	Me	Cl	2
2158.	Cl	Me	CF ₃	Me	Cl	0
2159.	Cl	Me	CF ₃	Me	Cl	1
2160.	Cl	Me	CF ₃	Me	Cl	2
2161.	Cl	Me	Cl	Me	CF ₃	0
2162.	Cl	Me	Cl	Me	CF ₃	1
2163.	Cl	Me	Cl	Me	CF ₃	2
2164.	Cl	Me	CF ₃	Me	F	0
2165.	Cl	Me	CF ₃	Me	F	1
2166.	Cl	Me	CF ₃	Me	F	2
2167.	Cl	Me	OMe	Me	CF ₃	0
2168.	Cl	Me	OMe	Me	CF ₃	1
2169.	Cl	Me	OMe	Me	CF ₃	2
2170.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCHF ₂	0

ES 2 561 981 T3

2171.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCHF ₂	1
2172.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCHF ₂	2
2173.	Cl	Me	OCHF ₂	Me	CF ₃	0
2174.	Cl	Me	OCHF ₂	Me	CF ₃	1
2175.	Cl	Me	OCHF ₂	Me	CF ₃	2
2176.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	0
2177.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	1
2178.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂	2
2179.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	0
2180.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	1
2181.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃	2
2182.	Cl	Me	CF ₃	Me	SO ₂ Me	0
2183.	Cl	Me	CF ₃	Me	SO ₂ Me	1
2184.	Cl	Me	CF ₃	Me	SO ₂ Me	2
2185.	Cl	Me	CF ₃	Me	SEt	0
2186.	Cl	Me	CF ₃	Me	SEt	1
2187.	Cl	Me	CF ₃	Me	SEt	2
2188.	Cl	Me	CF ₃	Et	Cl	0
2189.	Cl	Me	CF ₃	Et	Cl	1
2190.	Cl	Me	CF ₃	Et	Cl	2
2191.	Cl	Me	CF ₃	iPr	Cl	0
2192.	Cl	Me	CF ₃	iPr	Cl	1
2193.	Cl	Me	CF ₃	iPr	Cl	2
2194.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl	0
2195.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl	1
2196.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl	2
2197.	Cl	Me	Cl	tBu	CF ₃	0
2198.	Cl	Me	Cl	tBu	CF ₃	1
2199.	Cl	Me	Cl	tBu	CF ₃	2
2200.	Cl	Me	CF ₃	cPen	Cl	0
2201.	Cl	Me	CF ₃	cPen	Cl	1
2202.	Cl	Me	CF ₃	cPen	Cl	2
2203.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	OMe	0
2204.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	OMe	1
2205.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	OMe	2
2206.	Cl	Me	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	0
2207.	Cl	Me	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	1
2208.	Cl	Me	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl	2
2209.	Cl	Me	CF ₃	Ph	OCHF ₂	0
2210.	Cl	Me	CF ₃	Ph	OCHF ₂	1

ES 2 561 981 T3

2211.	Cl	Me	CF ₃	Ph	OCHF ₂	2
2212.	Cl	Me	CF ₃	Ph	Cl	0
2213.	Cl	Me	CF ₃	Ph	Cl	1
2214.	Cl	Me	CF ₃	Ph	Cl	2
2215.	Cl	Me	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	0
2216.	Cl	Me	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	1
2217.	Cl	Me	Me	Me	OCH ₂ CF ₃	2
2218.	Cl	Me	CF ₃	Me		0
2219.	Cl	Me	CF ₃	Me		1
2220.	Cl	Me	CF ₃	Me		2
2221.	Cl	Me	CF ₃	Me	H	0
2222.	Cl	Me	CF ₃	Me	H	1
2223.	Cl	Me	CF ₃	Me	H	2
2224.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	0
2225.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	1
2226.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe	2
2227.	Cl	Me	CF ₃	Me	SMe	0
2228.	Cl	Me	CF ₃	Me	SMe	1
2229.	Cl	Me	CF ₃	Me	SMe	2
2230.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	0
2231.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	1
2232.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F	2
2233.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	0
2234.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	1
2235.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂	2
2236.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	0
2237.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	1
2238.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂	2
2239.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	0
2240.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	1
2241.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂	2
2242.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	0
2243.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	1
2244.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃	2
2245.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	0

2246.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	1
2247.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F	2
2248.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	0
2249.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	1
2250.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃	2
2251.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	0
2252.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	1
2253.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂	2
2254.	Cl	Me	CHF ₂	Me	CHF ₂	0
2255.	Cl	Me	CHF ₂	Me	CHF ₂	1
2256.	Cl	Me	CHF ₂	Me	CHF ₂	2
2257.	Cl	Me	CF ₃	Me	CHF ₂	0
2258.	Cl	Me	CF ₃	Me	CHF ₂	1
2259.	Cl	Me	CF ₃	Me	CHF ₂	2
2260.	Cl	Me	Cl	Me	OCHF ₂	0
2261.	Cl	Me	Cl	Me	OCHF ₂	1
2262.	Cl	Me	Cl	Me	OCHF ₂	2
2263.	Cl	Me	Br	Me	OCHF ₂	0
2264.	Cl	Me	Br	Me	OCHF ₂	1
2265.	Cl	Me	Br	Me	OCHF ₂	2
2266.	Cl	Me	Br	Me	CF ₃	0
2267.	Cl	Me	Br	Me	CF ₃	1
2268.	Cl	Me	Br	Me	CF ₃	2

Datos de RMN de compuestos seleccionados de la tabla 1:

- 5 5-Cloro-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol
N.º de compuesto 542: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.87 (s, 3H, CH₃); 4.38 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.50 (d, 1 H, S(O)CH₂); 6.92 (dd, 1 H, OCHF₂); 7.16 (s, 1 H).
- 10 5-Cloro-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol
N.º de compuesto 543: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.88 (s, 3H, CH₃); 4.59 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 6.81 (t, 1 H, OCHF₂); 7.19 (s, 1 H).
- 15 5-Bromo-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol
N.º de compuesto 788: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.85 (s, 3H, CH₃); 4.38 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.49 (d, 1H, S(O)CH₂); 6.91 (dd, 1H, OCHF₂); 7.24 (s, 1 H).
- 20 5-Bromo-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol
N.º de compuesto 789: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.88 (s, 3H, CH₃); 4.59 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 6.81 (t, 1 H, OCHF₂); 7.28 (s, 1 H).
- 5 5-Yodo-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol
N.º de compuesto 1034: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.85 (s, 3H, CH₃); 4.37 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.48 (d, 1 H, S(O)CH₂); 6.92 (dd, 1 H, OCHF₂); 7.38 (s, 1 H).
- 20 5-Yodo-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol
N.º de compuesto 1035: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.88 (s, 3H, CH₃); 4.59 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 6.81 (t, 1H, OCHF₂); 7.40 (s, 1 H).
- 2-({[5-(Cloro)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol
N.º de compuesto 35: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 4.00 (s, 3H, CH₃); 4.50 (s, 2H, S(O)CH₂); 7.36 (d, 1 H); 7.91 (d

a, 1 H).

2-({[5-(Cloro)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol

N.º de compuesto 36: RMN(CDCl₃, 400 MHz): 3.20 (s, 3H, CH₃); 4.61 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 7.40 (d a, 1 H); 7.89 (d a, 1 H).

5 2-({[3-(Difluorometil)-1-metil-5-(2,2,2-trifluoroetoxi)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol

N.º de compuesto 242: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.75 (s, 3H, CH₃); 4.41 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.51 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.74 (d x c, 1 H); 4.78 (d x q, 1 H); 6.57 (t, 1 H); 7.39 (d a, 1 H); 7.93 (d a, 1 H).

2-({[1-Metil-3,5-bis(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol

10 N.º de compuesto 230: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 4.09 (s, 3H, CH₃); 4.55 (d, 1H, S(O) CH₂); 4.66 (d, 1 H, S(O) CH₂); 7.36 (d a, 1 H); 7.93 (d a, 1 H).

2-({[3-(Difluorometil)-1-metil-5-(2,2,2-trifluoroetoxi)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-1,3-oxazol

N.º de compuesto 241: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.71 (s, 3H, CH₃); 4.39 (s, 2H, SCH₂); 4.63 (q, 2H); 5.60 (t, 1 H); 7.11(d a, 1 H); 7.69 (d a, 1 H).

2-({[3-(Difluorometil)-1-metil-5-(2,2,2-trifluoroetoxi)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol

15 N.º de compuesto 243: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.78 (s, 3H, CH₃); 4.62 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 4.69 (q, 2H); 6.54 (t, 1 H); 7.39 (d a, 1 H); 7.89 (d a, 1 H).

2-({[1-Metil-3,5-bis(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol

N.º de compuesto 231: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 4.10 (s, 3H, CH₃); 4.26 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 7.41 (d a, 1H); 7.89 (d a, 1H).

2-({[1-Metil-3,5-bis(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-1,3-oxazol

20 N.º de compuesto 229: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 4.05 (s, 3H, CH₃); 4.43 (s, 2H, SCH₂); 7.15 (d a, 1 H); 7.69 (d a, 1H).

2-({[5-(Difluorometil)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-1,3-oxazol

25 N.º de compuesto 217: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 4.02 (s, 3H, CH₃); 4.33 (s, 2H, SCH₂); 7.11 (d a, 1 H); 7.31 (t, 1 H); 7.65 (d a, 1 H).

2-({[5-(Difluorometil)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol

N.º de compuesto 218: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 4.10 (s, 3H, CH₃); 4.51 (d, 1 H, S(O) CH₂); 4.56 (d, 1 H, S(O) CH₂); 6.97 (t, 1 H); 7.38 (d a, 1 H); 7.90 (d a, 1 H).

2-({[5-(Difluorometil)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol

30 N.º de compuesto 219: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 4.10 (s, 3H, CH₃); 4.70 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 7.02 (t, 1 H); 7.39 (d a, 1 H); 7.88 (d a, 1 H).

2-({[1-Metil-5-(2,2,2-trifluoroetoxi)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-1,3-oxazol

N.º de compuesto 58: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.75 (s, 3H, CH₃); 4.36 (s, 2H, SCH₂); 4.67 (q, 2H); 7.12 (d a, 1H); 7.69 (d a, 1H).

2-({[1-Metil-5-(2,2,2-trifluoroetoxi)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol

35 N.º de compuesto 59: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.80 (s, 3H, CH₃); 4.31 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.52 (d, 1 H, S(O)CH₂); 4.76 (q, 1 H); 4.78 (q, 1 H); 7.40 (d a, 1 H); 7.93 (d a, 1 H).

2-({[1-Metil-5-(2,2,2-trifluoroetoxi)-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfonyl)-1,3-oxazol

40 N.º de compuesto 60: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.82 (s, 3H, CH₃); 4.60 (s, 2H, S(O)₂CH₂); 4.72 (q, 2H); 7.41 (d a, 1H); 7.90 (d a, 1 H).

4-Cloro-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-1,3-oxazol

N.º de compuesto 1495: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.80 (s, 3H, CH₃); 4.32 (s, 2H, SCH₂); 6.76 (t, 1 H); 7.61 (d a, 1 H).

4-Cloro-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfinil)-1,3-oxazol

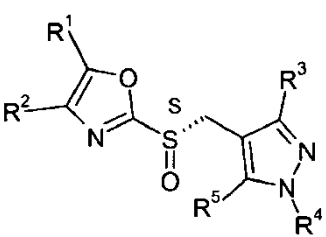
45 N.º de compuesto 1496: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 3.85 (s, 3H, CH₃); 4.39 (d, 1 H, S(O) CH₂); 4.48 (d, 1 H, S(O) CH₂); 6.90 (dxt, 1 H); 7.82 (d a, 1 H).

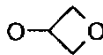
5-Cloro-2-({[5-(difluorometoxi)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-il]metil}sulfanil)-4-metil-1,3-oxazol

N.º de compuesto 2170: RMN (CDCl₃, 400 MHz): 2.09 (s, 3H, CH₃); 3.81 (s, 3H, CH₃); 4.25 (s, 2H, SCH₂); 6.74 (t, 1H).

50

Tabla 2: compuestos de fórmula (III-S)

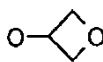
 (III-S)					
N.º de ejemplo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
2269.	H	H	CF ₃	Ph	Cl
2270.	H	H	CF ₃	tBu	Cl
2271.	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
2272.	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
2273.	H	H	CF ₃	Me	OMe
2274.	H	H	CF ₃	Me	CN
2275.	H	H	Cl	Et	Cl
2276.	H	H	CHF ₂	Me	Cl
2277.	H	H	Me	Me	Me
2278.	H	H	Me	Me	Cl
2279.	H	H	Cl	Me	Cl
2280.	H	H	CF ₃	Me	Cl
2281.	H	H	Cl	Me	CF ₃
2282.	H	H	CF ₃	Me	F
2283.	H	H	OMe	Me	CF ₃
2284.	H	H	CF ₃	Me	OEt
2285.	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
2286.	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
2287.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2288.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2289.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
N.º de ejemplo	R ¹	R ¹	R ³	R ⁴	R ⁵
2290.	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2291.	H	H	CF ₃	Me	SEt
2292.	H	H	CF ₃	Me	Me
2293.	H	H	CF ₃	Me	Et
2294.	H	H	CF ₃	Et	Cl
2295.	H	H	Cl	Et	CF ₃
2296.	H	H	CF ₃	iPr	Cl
2297.	H	H	Cl	iPr	CF ₃
2298.	H	H	CF ₃	tBu	Cl
2299.	H	H	Cl	tBu	CF ₃

2300.	H	H	CF ₃	cPen	Cl
2301.	H	H	Cl	cPen	CF ₃
2302.	H	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
2303.	H	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
2304.	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
2305.	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
2306.	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
2307.	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
2308.	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2309.	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
2310.	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
2311.	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
2312.	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
2313.	H	H	Me	Ph	Me
2314.	H	H	Me	Ph	Cl
2315.	H	H	Et	Ph	Cl
2316.	H	H	Pr	Ph	Cl
2317.	H	H	iPr	Ph	Cl
2318.	H	H	CF ₃	Ph	Cl
2319.	H	H	CF ₃	Ph	Me
N.º de ejemplo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
2320.	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃
2321.	H	H	CF ₃	Ph	F
2322.	H	H	CF ₃	Ph	OMe
2323.	H	H	CF ₃	Ph	OEt
2324.	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2325.	H	H	CF ₃	Ph	CN
2326.	H	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
2327.	H	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2328.	H	H	CF ₃	Me	
2329.	H	H	CF ₃	Me	H
2330.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2331.	H	H	CF ₃	Me	SMe
2332.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2333.	H	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2334.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2335.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2336.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2337.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F

ES 2 561 981 T3

2338.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2339.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2340.	H	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
2341.	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂
2342.	H	H	Cl	Me	OCHF ₂
2343.	H	H	Br	Me	OCHF ₂
2344.	H	H	Br	Me	CF ₃
2345.	H	H	CF ₃	Me	CF ₃
2346.	H	H	CHF ₂	Me	CF ₃
2347.	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2348.	H	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
2349.	H	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
2350.	H	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
2351.	F	H	CF ₃	Ph	Cl
2352.	F	H	CF ₃	tBu	Cl
2353.	F	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
2354.	F	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
2355.	F	H	CF ₃	Me	OMe
2356.	F	H	CF ₃	Me	CN
2357.	F	H	Cl	Et	Cl
2358.	F	H	CHF ₂	Me	Cl
2359.	F	H	Me	Me	Me
2360.	F	H	Me	Me	Cl
2361.	F	H	Cl	Me	Cl
2362.	F	H	CF ₃	Me	Cl
2363.	F	H	Cl	Me	CF ₃
2364.	F	H	CF ₃	Me	F
2365.	F	H	OMe	Me	CF ₃
2366.	F	H	CF ₃	Me	OEt
2367.	F	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
2368.	F	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
2369.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2370.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2371.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
2372.	F	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2373.	F	H	CF ₃	Me	SEt
2374.	F	H	CF ₃	Me	Me
2375.	F	H	CF ₃	Me	Et
2376.	F	H	CF ₃	Et	Cl
2377.	F	H	Cl	Et	CF ₃

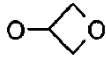
ES 2 561 981 T3

2378.	F	H	CF ₃	iPr	Cl
2379.	F	H	Cl	iPr	CF ₃
2380.	F	H	CF ₃	tBu	Cl
2381.	F	H	Cl	tBu	CF ₃
2382.	F	H	CF ₃	cPen	Cl
2383.	F	H	Cl	cPen	CF ₃
2384.	F	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
2385.	F	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
2386.	F	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
2387.	F	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
2388.	F	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
2389.	F	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
2390.	F	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2391.	F	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
2392.	F	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
2393.	F	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
2394.	F	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
2395.	F	H	Me	Ph	Me
2396.	F	H	Me	Ph	Cl
2397.	F	H	Et	Ph	Cl
2398.	F	H	Pr	Ph	Cl
2399.	F	H	iPr	Ph	Cl
2400.	F	H	CF ₃	Ph	Cl
2401.	F	H	CF ₃	Ph	Me
2402.	F	H	CF ₃	Ph	CF ₃
2403.	F	H	CF ₃	Ph	F
2404.	F	H	CF ₃	Ph	OMe
2405.	F	H	CF ₃	Ph	OEt
2406.	F	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2407.	F	H	CF ₃	Ph	CN
2408.	F	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
2409.	F	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2410.	F	H	CF ₃	Me	
2411.	F	H	CF ₃	Me	H
2412.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2413.	F	H	CF ₃	Me	SMe
2414.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2415.	F	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂

ES 2 561 981 T3

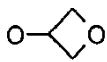
2416.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2417.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2418.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2419.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2420.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2421.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2422.	F	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
2423.	F	H	CF ₃	Me	CHF ₂
2424.	F	H	Cl	Me	OCHF ₂
2425.	F	H	Br	Me	OCHF ₂
2426.	F	H	Br	Me	CF ₃
2427.	F	H	CF ₃	Me	CF ₃
2428.	F	H	CHF ₂	Me	CF ₃
2429.	F	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2430.	F	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
2431.	F	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
2432.	F	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
2433.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl
2434.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl
2435.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
2436.	Cl	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
2437.	Cl	H	CF ₃	Me	OMe
N.º de ejemplo	R ¹	R ¹	R ³	R ⁴	R ⁵
2438.	Cl	H	CF ₃	Me	CN
2439.	Cl	H	Cl	Et	Cl
2440.	Cl	H	CHF ₂	Me	Cl
2441.	Cl	H	Me	Me	Me
2442.	Cl	H	Me	Me	Cl
2443.	Cl	H	Cl	Me	Cl
2444.	Cl	H	CF ₃	Me	Cl
2445.	Cl	H	Cl	Me	CF ₃
2446.	Cl	H	CF ₃	Me	F
2447.	Cl	H	OMe	Me	CF ₃
2448.	Cl	H	CF ₃	Me	OEt
2449.	Cl	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
2450.	Cl	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
2451.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2452.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2453.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
2454.	Cl	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me

2455.	Cl	H	CF ₃	Me	SEt
2456.	Cl	H	CF ₃	Me	Me
2457.	Cl	H	CF ₃	Me	Et
2458.	Cl	H	CF ₃	Et	Cl
2459.	Cl	H	Cl	Et	CF ₃
2460.	Cl	H	CF ₃	iPr	Cl
2461.	Cl	H	Cl	iPr	CF ₃
2462.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl
2463.	Cl	H	Cl	tBu	CF ₃
2464.	Cl	H	CF ₃	cPen	Cl
2465.	Cl	H	Cl	cPen	CF ₃
2466.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
2467.	Cl	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
N.º de ejemplo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
2468.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
2469.	Cl	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
2470.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
2471.	Cl	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
2472.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2473.	Cl	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
2474.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
2475.	Cl	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
2476.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
2477.	Cl	H	Me	Ph	Me
2478.	Cl	H	Me	Ph	Cl
2479.	Cl	H	Et	Ph	Cl
2480.	Cl	H	Pr	Ph	Cl
2481.	Cl	H	iPr	Ph	Cl
2482.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl
2483.	Cl	H	CF ₃	Ph	Me
2484.	Cl	H	CF ₃	Ph	CF ₃
2485.	Cl	H	CF ₃	Ph	F
2486.	Cl	H	CF ₃	Ph	OMe
2487.	Cl	H	CF ₃	Ph	OEt
2488.	Cl	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2489.	Cl	H	CF ₃	Ph	CN
2490.	Cl	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
2491.	Cl	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2492.	Cl	H	CF ₃	Me	

					
2493.	Cl	H	CF ₃	Me	H
2494.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2495.	Cl	H	CF ₃	Me	SMe
2496.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2497.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2498.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2499.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2500.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2501.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2502.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2503.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2504.	Cl	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
2505.	Cl	H	CF ₃	Me	CHF ₂
2506.	Cl	H	Cl	Me	OCHF ₂
2507.	Cl	H	Br	Me	OCHF ₂
2508.	Cl	H	Br	Me	CF ₃
2509.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₃
2510.	Cl	H	CHF ₂	Me	CF ₃
2511.	Cl	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2512.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
2513.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
2514.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
2515.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl
2516.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl
2517.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
2518.	Br	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
2519.	Br	H	CF ₃	Me	OMe
2520.	Br	H	CF ₃	Me	CN
2521.	Br	H	Cl	Et	Cl
2522.	Br	H	CHF ₂	Me	Cl
2523.	Br	H	Me	Me	Me
2524.	Br	H	Me	Me	Cl
2525.	Br	H	Cl	Me	Cl
2526.	Br	H	CF ₃	Me	Cl
2527.	Br	H	Cl	Me	CF ₃
2528.	Br	H	CF ₃	Me	F
2529.	Br	H	OMe	Me	CF ₃
2530.	Br	H	CF ₃	Me	OEt

ES 2 561 981 T3

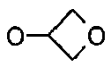
2531.	Br	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
2532.	Br	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
2533.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2534.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2535.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
2536.	Br	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2537.	Br	H	CF ₃	Me	SEt
2538.	Br	H	CF ₃	Me	Me
2539.	Br	H	CF ₃	Me	Et
2540.	Br	H	CF ₃	Et	Cl
2541.	Br	H	Cl	Et	CF ₃
2542.	Br	H	CF ₃	iPr	Cl
2543.	Br	H	Cl	iPr	CF ₃
2544.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl
2545.	Br	H	Cl	tBu	CF ₃
2546.	Br	H	CF ₃	cPen	Cl
2547.	Br	H	Cl	cPen	CF ₃
2548.	Br	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
2549.	Br	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
2550.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
2551.	Br	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
2552.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
2553.	Br	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
2554.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2555.	Br	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
2556.	Br	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
2557.	Br	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
2558.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
2559.	Br	H	Me	Ph	Me
2560.	Br	H	Me	Ph	Cl
2561.	Br	H	Et	Ph	Cl
2562.	Br	H	Pr	Ph	Cl
2563.	Br	H	iPr	Ph	Cl
2564.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl
2565.	Br	H	CF ₃	Ph	Me
2566.	Br	H	CF ₃	Ph	CF ₃
2567.	Br	H	CF ₃	Ph	F
2568.	Br	H	CF ₃	Ph	OMe
2569.	Br	H	CF ₃	Ph	OEt
2570.	Br	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂

2571.	Br	H	CF ₃	Ph	CN
2572.	Br	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
2573.	Br	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2574.	Br	H	CF ₃	Me	
2575.	Br	H	CF ₃	Me	H
2576.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2577.	Br	H	CF ₃	Me	SMe
2578.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2579.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2580.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2581.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2582.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2583.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2584.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2585.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2586.	Br	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
2587.	Br	H	CF ₃	Me	CHF ₂
2588.	Br	H	Cl	Me	OCHF ₂
2589.	Br	H	Br	Me	OCHF ₂
2590.	Br	H	Br	Me	CF ₃
2591.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₃
2592.	Br	H	CHF ₂	Me	CF ₃
2593.	Br	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2594.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
2595.	Br	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
2596.	Br	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
2597.	I	H	CF ₃	Ph	Cl
2598.	I	H	CF ₃	tBu	Cl
2599.	I	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
2600.	I	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
2601.	I	H	CF ₃	Me	OMe
2602.	I	H	CF ₃	Me	CN
2603.	I	H	Cl	Et	Cl
2604.	I	H	CHF ₂	Me	Cl
2605.	I	H	Me	Me	Me
2606.	I	H	Me	Me	Cl
2607.	I	H	Cl	Me	Cl
2608.	I	H	CF ₃	Me	Cl

ES 2 561 981 T3

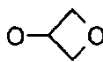
2609.	I	H	Cl	Me	CF ₃
2610.	I	H	CF ₃	Me	F
2611.	I	H	OMe	Me	CF ₃
2612.	I	H	CF ₃	Me	OEt
2613.	I	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
2614.	I	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
2615.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2616.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2617.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
2618.	I	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2619.	I	H	CF ₃	Me	SEt
2620.	I	H	CF ₃	Me	Me
2621.	I	H	CF ₃	Me	Et
2622.	I	H	CF ₃	Et	Cl
2623.	I	H	Cl	Et	CF ₃
2624.	I	H	CF ₃	iPr	Cl
2625.	I	H	Cl	iPr	CF ₃
2626.	I	H	CF ₃	tBu	Cl
2627.	I	H	Cl	tBu	CF ₃
2628.	I	H	CF ₃	cPen	Cl
2629.	I	H	Cl	cPen	CF ₃
2630.	I	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
2631.	I	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
2632.	I	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
2633.	I	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
2634.	I	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
2635.	I	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
2636.	I	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2637.	I	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
2638.	I	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
2639.	I	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
2640.	I	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
2641.	I	H	Me	Ph	Me
2642.	I	H	Me	Ph	Cl
2643.	I	H	Et	Ph	Cl
2644.	I	H	Pr	Ph	Cl
2645.	I	H	iPr	Ph	Cl
2646.	I	H	CF ₃	Ph	Cl
2647.	I	H	CF ₃	Ph	Me
2648.	I	H	CF ₃	Ph	CF ₃

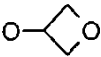
ES 2 561 981 T3

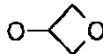
2649.	I	H	CF ₃	Ph	F
2650.	I	H	CF ₃	Ph	OMe
2651.	I	H	CF ₃	Ph	OEt
2652.	I	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2653.	I	H	CF ₃	Ph	CN
2654.	I	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
2655.	I	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2656.	I	H	CF ₃	Me	
2657.	I	H	CF ₃	Me	H
2658.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2659.	I	H	CF ₃	Me	SMe
2660.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2661.	I	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2662.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2663.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2664.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2665.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2666.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2667.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2668.	I	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
2669.	I	H	CF ₃	Me	CHF ₂
2670.	I	H	Cl	Me	OCHF ₂
2671.	I	H	Br	Me	OCHF ₂
2672.	I	H	Br	Me	CF ₃
2673.	I	H	CF ₃	Me	CF ₃
2674.	I	H	CHF ₂	Me	CF ₃
2675.	I	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2676.	I	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
2677.	I	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
2678.	I	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
2679.	H	F	CF ₃	Ph	Cl
2680.	H	F	CF ₃	tBu	Cl
2681.	H	F	CF ₃	CHF ₂	Cl
2682.	H	F	Cl	CHF ₂	CF ₃
2683.	H	F	CF ₃	Me	OMe
2684.	H	F	CF ₃	Me	CN
2685.	H	F	Cl	Et	Cl
2686.	H	F	CHF ₂	Me	Cl

ES 2 561 981 T3

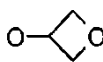
2687.	H	F	Me	Me	Me
2688.	H	F	Me	Me	Cl
2689.	H	F	Cl	Me	Cl
2690.	H	F	CF ₃	Me	Cl
2691.	H	F	Cl	Me	CF ₃
2692.	H	F	CF ₃	Me	F
2693.	H	F	OMe	Me	CF ₃
2694.	H	F	CF ₃	Me	OEt
2695.	H	F	CF ₃	Me	OCHF ₂
2696.	H	F	OCHF ₂	Me	CF ₃
2697.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2698.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2699.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
2700.	H	F	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2701.	H	F	CF ₃	Me	SEt
2702.	H	F	CF ₃	Me	Me
2703.	H	F	CF ₃	Me	Et
2704.	H	F	CF ₃	Et	Cl
2705.	H	F	Cl	Et	CF ₃
2706.	H	F	CF ₃	iPr	Cl
2707.	H	F	Cl	iPr	CF ₃
2708.	H	F	CF ₃	tBu	Cl
2709.	H	F	Cl	tBu	CF ₃
2710.	H	F	CF ₃	cPen	Cl
2711.	H	F	Cl	cPen	CF ₃
2712.	H	F	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
2713.	H	F	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
2714.	H	F	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
2715.	H	F	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
2716.	H	F	CF ₃	CHF ₂	OMe
2717.	H	F	OMe	CHF ₂	CF ₃
2718.	H	F	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2719.	H	F	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
2720.	H	F	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
2721.	H	F	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
2722.	H	F	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
2723.	H	F	Me	Ph	Me
2724.	H	F	Me	Ph	Cl
2725.	H	F	Et	Ph	Cl
2726.	H	F	Pr	Ph	Cl

2727.	H	F	iPr	Ph	Cl
2728.	H	F	CF ₃	Ph	Cl
2729.	H	F	CF ₃	Ph	Me
2730.	H	F	CF ₃	Ph	CF ₃
2731.	H	F	CF ₃	Ph	F
2732.	H	F	CF ₃	Ph	OMe
2733.	H	F	CF ₃	Ph	OEt
2734.	H	F	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2735.	H	F	CF ₃	Ph	CN
2736.	H	F	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
2737.	H	F	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2738.	H	F	CF ₃	Me	
2739.	H	F	CF ₃	Me	H
2740.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2741.	H	F	CF ₃	Me	SMe
2742.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2743.	H	F	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2744.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2745.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2746.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2747.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2748.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2749.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2750.	H	F	CHF ₂	Me	CHF ₂
2751.	H	F	CF ₃	Me	CHF ₂
2752.	H	F	Cl	Me	OCHF ₂
2753.	H	F	Br	Me	OCHF ₂
2754.	H	F	Br	Me	CF ₃
2755.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl
2756.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl
2757.	H	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃
2758.	H	Cl	CF ₃	Me	OMe
2759.	H	Cl	CF ₃	Me	CN
2760.	H	Cl	CHF ₂	Me	Cl
2761.	H	Cl	Me	Me	Me
2762.	H	Cl	Me	Me	Cl
2763.	H	Cl	CF ₃	Me	Cl
2764.	H	Cl	Cl	Me	CF ₃

2765.	H	Cl	CF ₃	Me	F
2766.	H	Cl	OMe	Me	CF ₃
2767.	H	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂
2768.	H	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃
2769.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2770.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2771.	H	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2772.	H	Cl	CF ₃	Me	SEt
2773.	H	Cl	CF ₃	Et	Cl
2774.	H	Cl	CF ₃	iPr	Cl
2775.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl
2776.	H	Cl	Cl	tBu	CF ₃
2777.	H	Cl	CF ₃	cPen	Cl
2778.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe
2779.	H	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2780.	H	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2781.	H	Cl	CF ₃	Ph	Cl
2782.	H	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2783.	H	Cl	CF ₃	Me	
2784.	H	Cl	CF ₃	Me	H
2785.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2786.	H	Cl	CF ₃	Me	SMe
2787.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2788.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2789.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2790.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2791.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2792.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2793.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CH ₃
2794.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2795.	H	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂
2796.	H	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂
2797.	H	Cl	Cl	Me	OCH ₂
2798.	H	Cl	Br	Me	OCHF ₂
2799.	H	Cl	Br	Me	CF ₃
2800.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl
2801.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	Cl
2802.	H	Br	Cl	CHF ₂	CF ₃

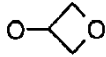
2803.	H	Br	CF ₃	Me	OMe
2804.	H	Br	CF ₃	Me	CN
2805.	H	Br	CHF ₂	Me	Cl
2806.	H	Br	Me	Me	Me
2807.	H	Br	Me	Me	Cl
2808.	H	Br	CF ₃	Me	Cl
2809.	H	Br	Cl	Me	CF ₃
2810.	H	Br	CF ₃	Me	F
2811.	H	Br	OMe	Me	CF ₃
2812.	H	Br	CF ₃	Me	OCHF ₂
2813.	H	Br	OCHF ₂	Me	CF ₃
2814.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2815.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2816.	H	Br	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2817.	H	Br	CF ₃	Me	SEt
2818.	H	Br	CF ₃	Et	Cl
2819.	H	Br	CF ₃	iPr	Cl
2820.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl
2821.	H	Br	Cl	tBu	CF ₃
2822.	H	Br	CF ₃	cPen	Cl
2823.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	OMe
2824.	H	Br	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2825.	H	Br	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2826.	H	Br	CF ₃	Ph	Cl
2827.	H	Br	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2828.	H	Br	CF ₃	Me	
2829.	H	Br	CF ₃	Me	H
2830.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2831.	H	Br	CF ₃	Me	SMe
2832.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2833.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2834.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2835.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2836.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2837.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2838.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2839.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2840.	H	Br	CHF ₂	Me	CHF ₂
2841.	H	Br	CF ₃	Me	CHF ₂

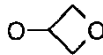
ES 2 561 981 T3

2842.	H	Br	Cl	Me	OCHF ₂
2843.	H	Br	Br	Me	OCHF ₂
2844.	H	Br	Br	Me	CF ₃
2845.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl
2846.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
2847.	Me	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
2848.	Me	H	CF ₃	Me	OMe
2849.	Me	H	CF ₃	Me	CN
2850.	Me	H	CHF ₂	Me	Cl
2851.	Me	H	Me	Me	Me
2852.	Me	H	Me	Me	Cl
2853.	Me	H	CF ₃	Me	Cl
2854.	Me	H	Cl	Me	CF ₃
2855.	Me	H	CF ₃	Me	F
2856.	Me	H	OMe	Me	CF ₃
2857.	Me	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
2858.	Me	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
2859.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2860.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2861.	Me	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2862.	Me	H	CF ₃	Me	SEt
2863.	Me	H	CF ₃	Et	Cl
2864.	Me	H	CF ₃	iPr	Cl
2865.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl
2866.	Me	H	Cl	tBu	CF ₃
2867.	Me	H	CF ₃	cPen	Cl
2868.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
2869.	Me	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2870.	Me	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2871.	Me	H	CF ₃	Ph	Cl
2872.	Me	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2873.	Me	H	CF ₃	Me	
2874.	Me	H	CF ₃	Me	H
2875.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2876.	Me	H	CF ₃	Me	SMe
2877.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2878.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2879.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂

ES 2 561 981 T3

2880.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2881.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2882.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2883.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2884.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2885.	Me	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
2886.	Me	H	CF ₃	Me	CHF ₂
2887.	Me	H	Cl	Me	OCHF ₂
2888.	Me	H	Br	Me	OCHF ₂
2889.	Me	H	Br	Me	CF ₃
2890.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl
2891.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
2892.	NO ₂	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
2893.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OMe
2894.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CN
2895.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	Cl
2896.	NO ₂	H	Me	Me	Me
2897.	NO ₂	H	Me	Me	Cl
2898.	NO ₂	H	CF ₃	Me	Cl
2899.	NO ₂	H	Cl	Me	CF ₃
2900.	NO ₂	H	CF ₃	Me	F
2901.	NO ₂	H	OMe	Me	CF ₃
2902.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
2903.	NO ₂	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
2904.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2905.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2906.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2907.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SEt
2908.	NO ₂	H	CF ₃	Et	Cl
2909.	NO ₂	H	CF ₃	iPr	Cl
2910.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl
2911.	NO ₂	H	Cl	tBu	CH ₃
2912.	NO ₂	H	CF ₃	cPen	Cl
2913.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
2914.	NO ₂	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2915.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2916.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	Cl
2917.	NO ₂	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2918.	NO ₂	H	CF ₃	Me	

					
2919.	NO ₂	H	CF ₃	Me	H
2920.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2921.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SMe
2922.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2923.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2924.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2925.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2926.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2927.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2928.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2929.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2930.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
2931.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CHF ₂
2932.	NO ₂	H	Cl	Me	OCHF ₂
2933.	NO ₂	H	Br	Me	OCHF ₂
2934.	NO ₂	H	Br	Me	CF ₃
2935.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl
2936.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl
2937.	Cl	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃
2938.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OMe
2939.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CN
2940.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	Cl
2941.	Cl	Cl	Me	Me	Me
2942.	Cl	Cl	Me	Me	Cl
2943.	Cl	Cl	CF ₃	Me	Cl
2944.	Cl	Cl	Cl	Me	CF ₃
2945.	Cl	Cl	CF ₃	Me	F
2946.	Cl	Cl	OMe	Me	CF ₃
2947.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂
2948.	Cl	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃
2949.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2950.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
2951.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2952.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SEt
2953.	Cl	Cl	CF ₃	Et	Cl
2954.	Cl	Cl	CF ₃	iPr	Cl
2955.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl
2956.	Cl	Cl	Cl	tBu	CF ₃

2957.	Cl	Cl	CF ₃	cPen	Cl
2958.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe
2959.	Cl	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
2960.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂
2961.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	Cl
2962.	Cl	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
2963.	Cl	Cl	CF ₃	Me	
2964.	Cl	Cl	CF ₃	Me	H
2965.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
2966.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SMe
2967.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
2968.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
2969.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
2970.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
2971.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
2972.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
2973.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
2974.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
2975.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂
2976.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂
2977.	Cl	Cl	Cl	Me	OCHF ₂
2978.	Cl	Cl	Br	Me	OCHF ₂
2979.	Cl	Cl	Br	Me	CF ₃
2980.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl
2981.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	Cl
2982.	Cl	Me	Cl	CHF ₂	CF ₃
2983.	Cl	Me	CF ₃	Me	OMe
2984.	Cl	Me	CF ₃	Me	CN
2985.	Cl	Me	CHF ₂	Me	Cl
2986.	Cl	Me	Me	Me	Me
2987.	Cl	Me	Me	Me	Cl
2988.	Cl	Me	CF ₃	Me	Cl
2989.	Cl	Me	Cl	Me	CF ₃
2990.	Cl	Me	CF ₃	Me	F
2991.	Cl	Me	OMe	Me	CF ₃
2992.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCHF ₂
2993.	Cl	Me	OCHF ₂	Me	CF ₃
2994.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
2995.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃

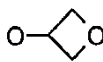
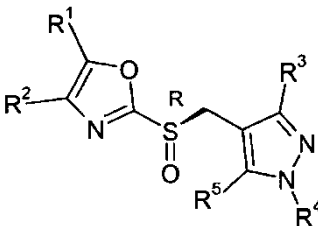
2996.	Cl	Me	CF ₃	Me	SO ₂ Me
2997.	Cl	Me	CF ₃	Me	SEt
2998.	Cl	Me	CF ₃	Et	Cl
2999.	Cl	Me	CF ₃	iPr	Cl
3000.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl
3001.	Cl	Me	Cl	tBu	CF ₃
3002.	Cl	Me	CF ₃	cPen	Cl
3003.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	OMe
3004.	Cl	Me	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3005.	Cl	Me	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3006.	Cl	Me	CF ₃	Ph	Cl
3007.	Cl	Me	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3008.	Cl	Me	CF ₃	Me	
3009.	Cl	Me	CF ₃	Me	H
3010.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3011.	Cl	Me	CF ₃	Me	SMe
3012.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3013.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3014.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3015.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3016.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3017.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3018.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3019.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3020.	Cl	Me	CHF ₂	Me	CHF ₂
3021.	Cl	Me	CF ₃	Me	CHF ₂
3022.	Cl	Me	Cl	Me	OCHF ₂
3023.	Cl	Me	Br	Me	OCHF ₂
3024.	Cl	Me	Br	Me	CF ₃

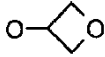
Tabla 3: compuestos de fórmula (III-R)

 (III-R)					
N.º de ejemplo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵

ES 2 561 981 T3

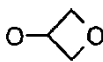
3025.	H	H	CF ₃	Ph	Cl
3026.	H	H	CF ₃	tBu	Cl
3027.	H	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
3028.	H	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
3029.	H	H	CF ₃	Me	OMe
3030.	H	H	CF ₃	Me	CN
3031.	H	H	Cl	Et	Cl
3032.	H	H	CHF ₂	Me	Cl
3033.	H	H	Me	Me	Me
3034.	H	H	Me	Me	Cl
3035.	H	H	Cl	Me	Cl
3036.	H	H	CF ₃	Me	Cl
3037.	H	H	Cl	Me	CF ₃
3038.	H	H	CF ₃	Me	F
3039.	H	H	OMe	Me	CF ₃
3040.	H	H	CF ₃	Me	OEt
3041.	H	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
3042.	H	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
3043.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3044.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3045.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
3046.	H	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3047.	H	H	CF ₃	Me	SEt
3048.	H	H	CF ₃	Me	Me
3049.	H	H	CF ₃	Me	Et
3050.	H	H	CF ₃	Et	Cl
3051.	H	H	Cl	Et	CF ₃
3052.	H	H	CF ₃	iPr	Cl
3053.	H	H	Cl	iPr	CF ₃
3054.	H	H	CF ₃	tBu	Cl
3055.	H	H	Cl	tBu	CF ₃
3056.	H	H	CF ₃	cPen	Cl
3057.	H	H	Cl	cPen	CF ₃
3058.	H	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
3059.	H	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
3060.	H	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
3061.	H	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
3062.	H	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
3063.	H	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
3064.	H	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl

ES 2 561 981 T3

3065.	H	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
3066.	H	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
3067.	H	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
3068.	H	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
3069.	H	H	Me	Ph	Me
3070.	H	H	Me	Ph	Cl
3071.	H	H	Et	Ph	Cl
3072.	H	H	Pr	Ph	Cl
3073.	H	H	iPr	Ph	Cl
3074.	H	H	CF ₃	Ph	Cl
3075.	H	H	CF ₃	Ph	Me
3076.	H	H	CF ₃	Ph	CF ₃
3077.	H	H	CF ₃	Ph	F
3078.	H	H	CF ₃	Ph	OMe
3079.	H	H	CF ₃	Ph	OEt
3080.	H	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3081.	H	H	CF ₃	Ph	CN
3082.	H	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
3083.	H	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3084.	H	H	CF ₃	Me	
3085.	H	H	CF ₃	Me	H
3086.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3087.	H	H	CF ₃	Me	SMe
3088.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3089.	H	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3090.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3091.	H	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3092.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3093.	H	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3094.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3095.	H	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3096.	H	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
3097.	H	H	CF ₃	Me	CHF ₂
3098.	H	H	Cl	Me	OCHF ₂
3099.	H	H	Br	Me	OCHF ₂
3100.	H	H	Br	Me	CF ₃
3101.	H	H	CF ₃	Me	CF ₃
3102.	H	H	CHF ₂	Me	CF ₃

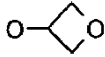
ES 2 561 981 T3

3103.	H	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3104.	H	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
3105.	H	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
3106.	H	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
3107.	F	H	CF ₃	Ph	Cl
3108.	F	H	CF ₃	tBu	Cl
3109.	F	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
3110.	F	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
3111.	F	H	CF ₃	Me	OMe
3112.	F	H	CF ₃	Me	CN
3113.	F	H	Cl	Et	Cl
3114.	F	H	CHF ₂	Me	Cl
3115.	F	H	Me	Me	Me
3116.	F	H	Me	Me	Cl
3117.	F	H	Cl	Me	Cl
3118.	F	H	CF ₃	Me	Cl
3119.	F	H	Cl	Me	CF ₃
3120.	F	H	CF ₃	Me	F
3121.	F	H	OMe	Me	CF ₃
3122.	F	H	CF ₃	Me	OEt
3123.	F	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
3124.	F	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
3125.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3126.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3127.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
3128.	F	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3129.	F	H	CF ₃	Me	SEt
3130.	F	H	CF ₃	Me	Me
3131.	F	H	CF ₃	Me	Et
3132.	F	H	CF ₃	Et	Cl
3133.	F	H	Cl	Et	CF ₃
3134.	F	H	CF ₃	iPr	Cl
3135.	F	H	Cl	iPr	CF ₃
3136.	F	H	CF ₃	tBu	Cl
3137.	F	H	ci	tBu	CF ₃
3138.	F	H	CF ₃	cPen	Cl
3139.	F	H	Cl	cPen	CF ₃
3140.	F	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
3141.	F	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
3142.	F	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl

3143.	F	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
3144.	F	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
3145.	F	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
3146.	F	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3147.	F	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
3148.	F	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
3149.	F	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
3150.	F	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
3151.	F	H	Me	Ph	Me
3152.	F	H	Me	Ph	Cl
3153.	F	H	Et	Ph	Cl
3154.	F	H	Pr	Ph	Cl
3155.	F	H	iPr	Ph	Cl
3156.	F	H	CF ₃	Ph	Cl
3157.	F	H	CF ₃	Ph	Me
3158.	F	H	CF ₃	Ph	CF ₃
3159.	F	H	CF ₃	Ph	F
3160.	F	H	CF ₃	Ph	OMe
3161.	F	H	CF ₃	Ph	OEt
3162.	F	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3163.	F	H	CF ₃	Ph	CN
3164.	F	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
3165.	F	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3166.	F	H	CF ₃	Me	
3167.	F	H	CF ₃	Me	H
3168.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3169.	F	H	CF ₃	Me	SMe
3170.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3171.	F	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3172.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3173.	F	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3174.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3175.	F	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3176.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3177.	F	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3178.	F	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
3179.	F	H	CF ₃	Me	CHF ₂
3180.	F	H	Cl	Me	OCHF ₂

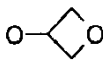
ES 2 561 981 T3

3181.	F	H	Br	Me	OCHF ₂
3182.	F	H	Br	Me	CF ₃
3183.	F	H	CF ₃	Me	CF ₃
3184.	F	H	CHF ₂	Me	CF ₃
3185.	F	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3186.	F	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
3187.	F	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
3188.	F	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
3189.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl
3190.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl
3191.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
3192.	Cl	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
3193.	Cl	H	CF ₃	Me	OMe
3194.	Cl	H	CF ₃	Me	CN
3195.	Cl	H	Cl	Et	Cl
3196.	Cl	H	CHF ₂	Me	Cl
3197.	Cl	H	Me	Me	Me
3198.	Cl	H	Me	Me	Cl
3199.	Cl	H	Cl	Me	Cl
3200.	Cl	H	CF ₃	Me	Cl
3201.	Cl	H	Cl	Me	CF ₃
3202.	Cl	H	CF ₃	Me	F
3203.	Cl	H	OMe	Me	CF ₃
3204.	Cl	H	CF ₃	Me	OEt
3205.	Cl	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
3206.	Cl	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
3207.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3208.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3209.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
3210.	Cl	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3211.	Cl	H	CF ₃	Me	SEt
3212.	Cl	H	CF ₃	Me	Me
3213.	Cl	H	CF ₃	Me	Et
3214.	Cl	H	CF ₃	Et	Cl
3215.	Cl	H	Cl	Et	CF ₃
3216.	Cl	H	CF ₃	iPr	Cl
3217.	Cl	H	Cl	iPr	CF ₃
3218.	Cl	H	CF ₃	tBu	Cl
3219.	Cl	H	Cl	tBu	CF ₃
3220.	Cl	H	CF ₃	cPen	Cl

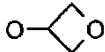
3221.	Cl	H	Cl	cPen	CF ₃
3222.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
3223.	Cl	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
3224.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
3225.	Cl	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
3226.	Cl	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
3227.	Cl	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
3228.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3229.	Cl	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
3230.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
3231.	Cl	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
3232.	Cl	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
3233.	Cl	H	Me	Ph	Me
3234.	Cl	H	Me	Ph	Cl
3235.	Cl	H	Et	Ph	Cl
3236.	Cl	H	Pr	Ph	Cl
3237.	Cl	H	iPr	Ph	Cl
3238.	Cl	H	CF ₃	Ph	Cl
3239.	Cl	H	CF ₃	Ph	Me
3240.	Cl	H	CF ₃	Ph	CF ₃
3241.	Cl	H	CF ₃	Ph	F
3242.	Cl	H	CF ₃	Ph	OMe
3243.	Cl	H	CF ₃	Ph	OEt
3244.	Cl	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3245.	Cl	H	CF ₃	Ph	CN
3246.	Cl	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
3247.	Cl	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3248.	Cl	H	CF ₃	Me	
3249.	Cl	H	CF ₃	Me	H
3250.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3251.	Cl	H	CF ₃	Me	SMe
3252.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3253.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3254.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3255.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3256.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3257.	Cl	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3258.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃

ES 2 561 981 T3

3259.	Cl	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3260.	Cl	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
3261.	Cl	H	CF ₃	Me	CHF ₂
3262.	Cl	H	Cl	Me	OCHF ₂
3263.	Cl	H	Br	Me	OCHF ₂
3264.	Cl	H	Br	Me	CF ₃
3265.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₃
3266.	Cl	H	CHF ₂	Me	CF ₃
3267.	Cl	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3268.	Cl	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
3269.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
3270.	Cl	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
3271.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl
3272.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl
3273.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
3274.	Br	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
3275.	Br	H	CF ₃	Me	OMe
3276.	Br	H	CF ₃	Me	CN
3277.	Br	H	Cl	Et	Cl
3278.	Br	H	CHF ₂	Me	Cl
3279.	Br	H	Me	Me	Me
3280.	Br	H	Me	Me	Cl
3281.	Br	H	Cl	Me	Cl
3282.	Br	H	CF ₃	Me	Cl
3283.	Br	H	Cl	Me	CF ₃
3284.	Br	H	CF ₃	Me	F
3285.	Br	H	OMe	Me	CF ₃
3286.	Br	H	CF ₃	Me	OEt
3287.	Br	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
3288.	Br	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
3289.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3290.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3291.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
3292.	Br	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3293.	Br	H	CF ₃	Me	SEt
3294.	Br	H	CF ₃	Me	Me
3295.	Br	H	CF ₃	Me	Et
3296.	Br	H	CF ₃	Et	Cl
3297.	Br	H	Cl	Et	CF ₃
3298.	Br	H	CF ₃	iPr	Cl

3299.	Br	H	Cl	iPr	CF ₃
3300.	Br	H	CF ₃	tBu	Cl
3301.	Br	H	Cl	tBu	CF ₃
3302.	Br	H	CF ₃	cPen	Cl
3303.	Br	H	Cl	cPen	CF ₃
3304.	Br	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
3305.	Br	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
3306.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
3307.	Br	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
3308.	Br	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
3309.	Br	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
3310.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3311.	Br	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
3312.	Br	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
N.º de ejemplo	R ¹	R ¹	R ³	R ⁴	R ⁵
3313.	Br	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
3314.	Br	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
3315.	Br	H	Me	Ph	Me
3316.	Br	H	Me	Ph	Cl
3317.	Br	H	Et	Ph	Cl
3318.	Br	H	Pr	Ph	Cl
3319.	Br	H	iPr	Ph	Cl
3320.	Br	H	CF ₃	Ph	Cl
3321.	Br	H	CF ₃	Ph	Me
3322.	Br	H	CF ₃	Ph	CF ₃
3323.	Br	H	CF ₃	Ph	F
3324.	Br	H	CF ₃	Ph	OMe
3325.	Br	H	CF ₃	Ph	OEt
3326.	Br	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3327.	Br	H	CF ₃	Ph	CN
3328.	Br	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
3329.	Br	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3330.	Br	H	CF ₃	Me	
3331.	Br	H	CF ₃	Me	H
3332.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3333.	Br	H	CF ₃	Me	SMe
3334.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3335.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂

3336.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3337.	Br	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3338.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3339.	Br	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3340.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3341.	Br	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
N.º de ejemplo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
3342.	Br	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
3343.	Br	H	CF ₃	Me	CHF ₂
3344.	Br	H	Cl	Me	OCHF ₂
3345.	Br	H	Br	Me	OCHF ₂
3346.	Br	H	Br	Me	CF ₃
3347.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₃
3348.	Br	H	CHF ₂	Me	CF ₃
3349.	Br	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3350.	Br	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
3351.	Br	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
3352.	Br	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
3353.	I	H	CF ₃	Ph	Cl
3354.	I	H	CF ₃	tBu	Cl
3355.	I	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
3356.	I	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
3357.	I	H	CF ₃	Me	OMe
3358.	I	H	CF ₃	Me	CN
3359.	I	H	Cl	Et	Cl
3360.	I	H	CHF ₂	Me	Cl
3361.	I	H	Me	Me	Me
3362.	I	H	Me	Me	Cl
3363.	I	H	Cl	Me	Cl
3364.	I	H	CF ₃	Me	Cl
3365.	I	H	Cl	Me	CF ₃
3366.	I	H	CF ₃	Me	F
3367.	I	H	OMe	Me	CF ₃
3368.	I	H	CF ₃	Me	OEt
3369.	I	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
3370.	I	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
3371.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3372.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3373.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
3374.	I	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me

3375.	I	H	CF ₃	Me	SEt
3376.	I	H	CF ₃	Me	Me
3377.	I	H	CF ₃	Me	Et
3378.	I	H	CF ₃	Et	Cl
3379.	I	H	Cl	Et	CF ₃
3380.	I	H	CF ₃	iPr	Cl
3381.	I	H	Cl	iPr	CF ₃
3382.	I	H	CF ₃	tBu	Cl
3383.	I	H	Cl	tBu	CF ₃
3384.	I	H	CF ₃	cPen	Cl
3385.	I	H	Cl	cPen	CF ₃
3386.	I	H	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
3387.	I	H	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
3388.	I	H	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
3389.	I	H	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
3390.	I	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
3391.	I	H	OMe	CHF ₂	CF ₃
3392.	I	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3393.	I	H	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
3394.	I	H	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
3395.	I	H	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
3396.	I	H	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
3397.	I	H	Me	Ph	Me
3398.	I	H	Me	Ph	Cl
3399.	I	H	Et	Ph	Cl
3400.	I	H	Pr	Ph	Cl
3401.	I	H	iPr	Ph	Cl
3402.	I	H	CH ₃	Ph	Cl
3403.	I	H	CF ₃	Ph	Me
3404.	I	H	CF ₃	Ph	CF ₃
3405.	I	H	CF ₃	Ph	F
3406.	I	H	CF ₃	Ph	OMe
3407.	I	H	CF ₃	Ph	OEt
3408.	I	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3409.	I	H	CF ₃	Ph	CN
3410.	I	H	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl
3411.	I	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3412.	I	H	CF ₃	Me	

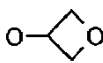
ES 2 561 981 T3

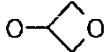
3413.	I	H	CF ₃	Me	H
3414.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3415.	I	H	CF ₃	Me	SMe
3416.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3417.	I	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3418.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3419.	I	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3420.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3421.	I	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3422.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3423.	I	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3424.	I	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
3425.	I	H	CF ₃	Me	CHF ₂
3426.	I	H	Cl	Me	OCHF ₂
3427.	I	H	Br	Me	OCHF ₂
3428.	I	H	Br	Me	CF ₃
3429.	I	H	CF ₃	Me	CF ₃
3430.	I	H	CHF ₂	Me	CF ₃
3431.	I	H	CF ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3432.	I	H	CF ₃	Me	CF ₂ CF ₃
3433.	I	H	CHF ₂	Me	OCH ₂ CF ₃
3434.	I	H	CHF ₂	Me	OCHF ₂
3435.	H	F	CF ₃	Ph	Cl
3436.	H	F	CF ₃	tBu	Cl
3437.	H	F	CF ₃	CHF ₂	Cl
3438.	H	F	Cl	CHF ₂	CF ₃
3439.	H	F	CF ₃	Me	OMe
3440.	H	F	CF ₃	Me	CN
3441.	H	F	Cl	Et	Cl
3442.	H	F	CHF ₂	Me	Cl
3443.	H	F	Me	Me	Me
3444.	H	F	Me	Me	Cl
3445.	H	F	Cl	Me	Cl
3446.	H	F	CF ₃	Me	Cl
3447.	H	F	Cl	Me	CF ₃
3448.	H	F	CF ₃	Me	F
3449.	H	F	OMe	Me	CF ₃
3450.	H	F	CF ₃	Me	OEt
3451.	H	F	CF ₃	Me	OCHF ₂
3452.	H	F	OCHF ₂	Me	CF ₃

ES 2 561 981 T3

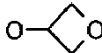
3453.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3454.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3455.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CN
3456.	H	F	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3457.	H	F	CF ₃	Me	SEt
3458.	H	F	CF ₃	Me	Me
3459.	H	F	CF ₃	Me	Et
3460.	H	F	CF ₃	Et	Cl
3461.	H	F	Cl	Et	CF ₃
3462.	H	F	CF ₃	iPr	Cl
3463.	H	F	Cl	iPr	CF ₃
3464.	H	F	CF ₃	tBu	Cl
3465.	H	F	Cl	tBu	CF ₃
3466.	H	F	CF ₃	cPen	Cl
3467.	H	F	Cl	cPen	CF ₃
3468.	H	F	CF ₃	CH ₂ cPr	Cl
3469.	H	F	Cl	CH ₂ cPr	CF ₃
3470.	H	F	CF ₃	CH ₂ CH=CH ₂	Cl
3471.	H	F	Cl	CH ₂ CH=CH ₂	CF ₃
3472.	H	F	CF ₃	CHF ₂	OMe
3473.	H	F	OMe	CHF ₂	CF ₃
3474.	H	F	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3475.	H	F	Cl	CH ₂ CF ₃	CF ₃
3476.	H	F	CF ₃	CH ₂ OMe	Cl
3477.	H	F	Cl	CH ₂ OMe	CF ₃
3478.	H	F	CF ₃	CH ₂ CN	Cl
3479.	H	F	Me	Ph	Me
3480.	H	F	Me	Ph	Cl
3481.	H	F	Et	Ph	Cl
3482.	H	F	Pr	Ph	Cl
3483.	H	F	iPr	Ph	Cl
3484.	H	F	CF ₃	Ph	Cl
3485.	H	F	CF ₃	Ph	Me
3486.	H	F	CF ₃	Ph	CF ₃
3487.	H	F	CF ₃	Ph	F
3488.	H	F	CF ₃	Ph	OMe
3489.	H	F	CF ₃	Ph	OEt
3490.	H	F	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3491.	H	F	CF ₃	Ph	CN
3492.	H	F	CF ₃	Ph(4-Cl)	Cl

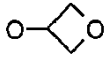
ES 2 561 981 T3

3493.	H	F	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3494.	H	F	CF ₃	Me	
3495.	H	F	CF ₃	Me	H
3496.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3497.	H	F	CF ₃	Me	SMe
3498.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3499.	H	F	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3500.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3501.	H	F	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3502.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3503.	H	F	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3504.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3505.	H	F	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3506.	H	F	CHF ₂	Me	CHF ₂
3507.	H	F	CF ₃	Me	CHF ₂
3508.	H	F	Cl	Me	OCHF ₂
3509.	H	F	Br	Me	OCHF ₂
3510.	H	F	Br	Me	CF ₃
3511.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl
3512.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl
3513.	H	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃
3514.	H	Cl	CF ₃	Me	OMe
3515.	H	Cl	CF ₃	Me	CN
3516.	H	Cl	CHF ₂	Me	Cl
3517.	H	Cl	Me	Me	Me
3518.	H	Cl	Me	Me	Cl
3519.	H	Cl	CF ₃	Me	Cl
3520.	H	Cl	Cl	Me	CF ₃
3521.	H	Cl	CF ₃	Me	F
3522.	H	Cl	OMe	Me	CF ₃
3523.	H	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂
3524.	H	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃
3525.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3526.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3527.	H	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3528.	H	Cl	CF ₃	Me	SEt
3529.	H	Cl	CF ₃	Et	Cl
3530.	H	Cl	CF ₃	iPr	Cl

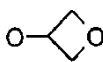
3531.	H	Cl	CF ₃	tBu	Cl
3532.	H	Cl	Cl	tBu	CF ₃
3533.	H	Cl	CF ₃	cPen	Cl
3534.	H	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe
3535.	H	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3536.	H	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3537.	H	Cl	CF ₃	Ph	Cl
3538.	H	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3539.	H	Cl	CF ₃	Me	
3540.	H	Cl	CF ₃	Me	H
3541.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3542.	H	Cl	CF ₃	Me	SMe
3543.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3544.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3545.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3546.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3547.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3548.	H	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3549.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3550.	H	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3551.	H	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂
3552.	H	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂
3553.	H	Cl	Cl	Me	OCHF ₂
3554.	H	Cl	Br	Me	OCHF ₂
3555.	H	Cl	Br	Me	CF ₃
3556.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl
3557.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	Cl
3558.	H	Br	Cl	CHF ₂	CF ₃
3559.	H	Br	CF ₃	Me	OMe
3560.	H	Br	CF ₃	Me	CN
3561.	H	Br	CHF ₂	Me	Cl
3562.	H	Br	Me	Me	Me
3563.	H	Br	Me	Me	Cl
3564.	H	Br	CF ₃	Me	Cl
3565.	H	Br	Cl	Me	CF ₃
3566.	H	Br	CF ₃	Me	F
3567.	H	Br	OMe	Me	CF ₃
3568.	H	Br	CF ₃	Me	OCHF ₂

ES 2 561 981 T3

3569.	H	Br	OCHF ₂	Me	CF ₃
3570.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3571.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3572.	H	Br	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3573.	H	Br	CF ₃	Me	SEt
3574.	H	Br	CF ₃	Et	Cl
3575.	H	Br	CF ₃	iPr	Cl
3576.	H	Br	CF ₃	tBu	Cl
3577.	H	Br	Cl	tBu	CF ₃
3578.	H	Br	CF ₃	cPen	Cl
3579.	H	Br	CF ₃	CHF ₂	OMe
3580.	H	Br	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3581.	H	Br	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3582.	H	Br	CF ₃	Ph	Cl
3583.	H	Br	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3584.	H	Br	CF ₃	Me	
3585.	H	Br	CF ₃	Me	H
3586.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3587.	H	Br	CF ₃	Me	SMe
3588.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3589.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3590.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3591.	H	Br	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3592.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3593.	H	Br	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3594.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3595.	H	Br	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3596.	H	Br	CHF ₂	Me	CHF ₂
3597.	H	Br	CF ₃	Me	CHF ₂
3598.	H	Br	Cl	Me	OCHF ₂
3599.	H	Br	Br	Me	OCHF ₂
3600.	H	Br	Br	Me	CF ₃
3601.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl
3602.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
3603.	Me	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
3604.	Me	H	CF ₃	Me	OMe
3605.	Me	H	CF ₃	Me	CN
3606.	Me	H	CHF ₂	Me	Cl

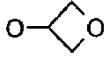
3607.	Me	H	Me	Me	Me
3608.	Me	H	Me	Me	Cl
3609.	Me	H	CF ₃	Me	Cl
3610.	Me	H	Cl	Me	CF ₃
3611.	Me	H	CF ₃	Me	F
3612.	Me	H	OMe	Me	CF ₃
3613.	Me	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
3614.	Me	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
3615.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3616.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3617.	Me	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3618.	Me	H	CF ₃	Me	SEt
3619.	Me	H	CF ₃	Et	Cl
3620.	Me	H	CF ₃	iPr	Cl
3621.	Me	H	CF ₃	tBu	Cl
3622.	Me	H	Cl	tBu	CF ₃
3623.	Me	H	CF ₃	cPen	Cl
3624.	Me	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
3625.	Me	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3626.	Me	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3627.	Me	H	CF ₃	Ph	Cl
3628.	Me	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3629.	Me	H	CF ₃	Me	
3630.	Me	H	CF ₃	Me	H
3631.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3632.	Me	H	CF ₃	Me	SMe
3633.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3634.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3635.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3636.	Me	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3637.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3638.	Me	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3639.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3640.	Me	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3641.	Me	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
3642.	Me	H	CF ₃	Me	CHF ₂
3643.	Me	H	Cl	Me	OCHF ₂
3644.	Me	H	Br	Me	OCHF ₂

3645.	Me	H	Br	Me	CF ₃
3646.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl
3647.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	Cl
3648.	NO ₂	H	Cl	CHF ₂	CF ₃
3649.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OMe
3650.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CN
3651.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	Cl
3652.	NO ₂	H	Me	Me	Me
3653.	NO ₂	H	Me	Me	Cl
3654.	NO ₂	H	CF ₃	Me	Cl
3655.	NO ₂	H	Cl	Me	CF ₃
3656.	NO ₂	H	CF ₃	Me	F
3657.	NO ₂	H	OMe	Me	CF ₃
3658.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCHF ₂
3659.	NO ₂	H	OCHF ₂	Me	CF ₃
3660.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3661.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3662.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3663.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SEt
3664.	NO ₂	H	CF ₃	Et	Cl
3665.	NO ₂	H	CF ₃	iPr	Cl
3666.	NO ₂	H	CF ₃	tBu	Cl
3667.	NO ₂	H	Cl	tBu	CF ₃
3668.	NO ₂	H	CF ₃	cPen	Cl
3669.	NO ₂	H	CF ₃	CHF ₂	OMe
3670.	NO ₂	H	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3671.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3672.	NO ₂	H	CF ₃	Ph	Cl
3673.	NO ₂	H	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3674.	NO ₂	H	CF ₃	Me	
3675.	NO ₂	H	CF ₃	Me	H
3676.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3677.	NO ₂	H	CF ₃	Me	SMe
3678.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3679.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3680.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3681.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3682.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃

3683.	NO ₂	H	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3684.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3685.	NO ₂	H	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3686.	NO ₂	H	CHF ₂	Me	CHF ₂
3687.	NO ₂	H	CF ₃	Me	CHF ₂
3688.	NO ₂	H	Cl	Me	OCHF ₂
3689.	NO ₂	H	Br	Me	OCHF ₂
3690.	NO ₂	H	Br	Me	CF ₃
3691.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl
3692.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	Cl
3693.	Cl	Cl	Cl	CHF ₂	CF ₃
3694.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OMe
3695.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CN
3696.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	Cl
3697.	Cl	Cl	Me	Me	Me
3698.	Cl	Cl	Me	Me	Cl
3699.	Cl	Cl	CF ₃	Me	Cl
3700.	Cl	Cl	Cl	Me	CF ₃
3701.	Cl	Cl	CF ₃	Me	F
3702.	Cl	Cl	OMe	Me	CF ₃
3703.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCHF ₂
3704.	Cl	Cl	OCHF ₂	Me	CF ₃
3705.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3706.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3707.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3708.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SEt
3709.	Cl	Cl	CF ₃	Et	Cl
3710.	Cl	Cl	CF ₃	iPr	Cl
3711.	Cl	Cl	CF ₃	tBu	Cl
3712.	Cl	Cl	Cl	tBu	CF ₃
3713.	Cl	Cl	CF ₃	cPen	Cl
3714.	Cl	Cl	CF ₃	CHF ₂	OMe
3715.	Cl	Cl	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl
3716.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3717.	Cl	Cl	CF ₃	Ph	Cl
3718.	Cl	Cl	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3719.	Cl	Cl	CF ₃	Me	
3720.	Cl	Cl	CF ₃	Me	H

ES 2 561 981 T3

3721.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3722.	Cl	Cl	CF ₃	Me	SMe
3723.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3724.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3725.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3726.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3727.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3728.	Cl	Cl	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3729.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3730.	Cl	Cl	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3731.	Cl	Cl	CHF ₂	Me	CHF ₂
3732.	Cl	Cl	CF ₃	Me	CHF ₂
3733.	Cl	Cl	Cl	Me	OCHF ₂
3734.	Cl	Cl	Br	Me	OCHF ₂
3735.	Cl	Cl	Br	Me	CF ₃
3736.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl
3737.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	Cl
3738.	Cl	Me	Cl	CHF ₂	CF ₃
3739.	Cl	Me	CF ₃	Me	OMe
3740.	Cl	Me	CF ₃	Me	CN
3741.	Cl	Me	CHF ₂	Me	Cl
3742.	Cl	Me	Me	Me	Me
3743.	Cl	Me	Me	Me	Cl
3744.	Cl	Me	CF ₃	Me	Cl
3745.	Cl	Me	Cl	Me	CF ₃
3746.	Cl	Me	CF ₃	Me	F
3747.	Cl	Me	OMe	Me	CF ₃
3748.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCHF ₂
3749.	Cl	Me	OCHF ₂	Me	CF ₃
3750.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CHF ₂
3751.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₃
3752.	Cl	Me	CF ₃	Me	SO ₂ Me
3753.	Cl	Me	CF ₃	Me	SEt
3754.	Cl	Me	CF ₃	Et	Cl
3755.	Cl	Me	CF ₃	iPr	Cl
3756.	Cl	Me	CF ₃	tBu	Cl
3757.	Cl	Me	Cl	tBu	CF ₃
3758.	Cl	Me	CF ₃	cPen	Cl
3759.	Cl	Me	CF ₃	CHF ₂	OMe
3760.	Cl	Me	CF ₃	CH ₂ CF ₃	Cl

3761.	Cl	Me	CF ₃	Ph	OCHF ₂
3762.	Cl	Me	CF ₃	Ph	Cl
3763.	Cl	Me	Me	Me	OCH ₂ CF ₃
3764.	Cl	Me	CF ₃	Me	
3765.	Cl	Me	CF ₃	Me	H
3766.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ OMe
3767.	Cl	Me	CF ₃	Me	SMe
3768.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CH ₂ CH ₂ F
3769.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(CH ₂ F) ₂
3770.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF ₂ CHF ₂
3771.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH ₂ CF=CH ₂
3772.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CF ₃
3773.	Cl	Me	CF ₃	Me	OCH(Me)CH ₂ F
3774.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CF ₃
3775.	Cl	Me	OCH ₂ CF ₃	Me	CHF ₂
3776.	Cl	Me	CHF ₂	Me	CHF ₂
3777.	Cl	Me	CF ₃	Me	CHF ₂
3778.	Cl	Me	Cl	Me	OCHF ₂
3779.	Cl	Me	Br	Me	OCHF ₂
3780.	Cl	Me	Br	Me	CF ₃

Los datos de RMN se midieron a 400 MHz y en CDCl₃ como disolvente. El desplazamiento químico δ está indicado en ppm (patrón TMS).

- 5 Los tiempos de retención (R_t , en minutos) y las proporciones de enantiómeros (ee) de compuestos quirales se determinaron por medio de HPLC quiral analítica [columna Chiralpak[®] IC (250 x 4,6 mm, tamaño de grano 10 μ m), temperatura 25 °C, flujo 1 ml/min, n-heptano / 2-propanol 80:20 v/v].

Datos con respecto a la tabla 2:

- N.º de compuesto 2449: R_t = 6,254 min.
 N.º de compuesto 2531: R_t = 6,585 min.
 10 N.º de compuesto 2341: R_t = 29,201 min [columna Chiralpak[®] IC (250 x 4,6 mm, tamaño de grano 10 μ m), temperatura 25 °C, flujo 0,6 ml/min, n-heptano / 2-propanol 90:10 v/v].
 N.º de compuesto 2288: R_t = 6,912 min.

Datos con respecto a la tabla 3:

- N.º de compuesto 3205: R_t = 7,873 min.
 15 N.º de compuesto 3287: R_t = 8,217 min.
 N.º de compuesto 3097: R_t = 32,132 min [columna Chiralpak[®] IC (250 x 4,6 mm, tamaño de grano 10 μ m), temperatura 25 °C, flujo 0,6 ml/min, n-heptano / 2-propanol 90:10 v/v].
 N.º de compuesto 3044: R_t = 13,384 min.

B. Ejemplos de formulación

- 20 a) Un producto en polvo se obtiene mezclando 10 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales y 90 partes en peso de talco como sustancia inerte y triturándolas en un molino de percusión.
- b) Un polvo humectable, fácilmente dispersable en agua se obtiene mezclando 25 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales, 64 partes en peso de cuarzo que contiene caolín como sustancia inerte,

10 partes en peso de ligninsulfonato de potasio y 1 parte en peso de oleoilmetiltaurinato de sodio como agente humectante y dispersante y moliéndolas en un molino de clavijas.

5 c) Un concentrado de dispersión fácilmente dispersable en agua se obtiene mezclando 20 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales con 6 partes en peso de alquilfenolpoliglicoléter (®Triton X 207), 3 partes en peso de isotridecanolpoliglicoléter (8 OE) y 71 partes en peso de aceite mineral parafrínico (intervalo de punto de ebullición por ejemplo de aproximadamente 255 a por encima de 277 °C) y moliéndolas en un molino de bolas de rozamiento hasta obtener una finura por debajo de 5 micrómetros.

10 d) Un concentrado emulsionable se obtiene a partir de 15 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales, 75 partes en peso de ciclohexanona como disolvente y 10 partes en peso de nonilfenol oxetilado como emulsionante.

e) Un producto granulado dispersable en agua se obtiene mezclando 75 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales,

15 10 partes en peso de ligninsulfonato de calcio,
5 partes en peso de laurilsulfato de sodio,
3 partes en peso de poli(alcohol vinílico) y
7 partes en peso de caolín,

moliéndolas en un molino de clavijas y granulando el polvo en un lecho fluidizado mediante pulverización de agua como líquido de granulación.

f) Un producto granulado dispersable en agua se obtiene también mezclando

20 25 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales,
5 partes en peso de 2,2'-dinaftilmetano-6,6'-disulfonato de sodio
2 partes en peso de oleoilmetiltaurinato de sodio,
1 parte en peso de poli(alcohol vinílico),
25 17 partes en peso de carbonato de calcio y
50 partes en peso de agua

homogeneizándolas en un molino coloidal y triturándolas previamente, a continuación moliéndolas en un molino de perlas y pulverizando la suspensión así obtenida en una torre de pulverización por medio de una boquilla unitaria y secándola.

C. Ejemplos biológicos

30 Los compuestos de fórmula (I) de acuerdo con la invención (y/o sus sales), a continuación designados conjuntamente como "compuestos de acuerdo con la invención", presentan una excelente acción herbicida contra un amplio espectro de plantas perjudiciales anuales mono- y dicotiledóneas de importancia económica. También plantas perjudiciales perennes difíciles de combatir que brotan de rizomas, pies de injerto u otros órganos duraderos se captan bien por los principios activos.

35 Por tanto es objeto de la presente invención también un procedimiento para combatir plantas no deseadas o para regular el crecimiento de plantas, preferentemente en cultivos de plantas, donde se esparcen uno o varios compuestos de acuerdo con la invención sobre las plantas (por ejemplo plantas perjudiciales tales como malas hierbas mono- o dicotiledóneas o plantas de cultivo no deseadas), la semilla (por ejemplo granos, semillas o órganos de proliferación vegetativa tales como tubérculos o partes de brotes con capullo) o la superficie en la que crecen las plantas (por ejemplo el área de cultivo). A este respecto pueden esparcirse los compuestos de acuerdo con la invención por ejemplo en el procedimiento de pre-siembra (eventualmente también mediante introducción en el suelo), pre-emergencia o post-emergencia. En particular se mencionan a modo de ejemplo algunos representantes de la flora de malas hierbas monocotiledóneas y dicotiledóneas que pueden controlarse mediante los compuestos de acuerdo con la invención sin que mediante la mención deba realizarse una limitación a determinadas especies.

45 Plantas perjudiciales monocotiledóneas de los géneros: *Aegilops*, *Agropyron*, *Agrostis*, *Alopecurus*, *Apera*, *Avena*, *Bracharia*, *Bromus*, *Cenchrus*, *Commelina*, *Cynodon*, *Cyperus*, *Dactyloctenium*, *Digitaria*, *Echinochloa*, *Eleocharis*, *Eleusine*, *Eragrostis*, *Eriochloa*, *Festuca*, *Fimbristylis*, *Heteranthera*, *Imperata*, *Ischaemum*, *Leptochloa*, *Lolium*, *Monochoria*, *Panicum*, *Paspalum*, *Phalaris*, *Phleum*, *Poa*, *Rottboellia*, *Sagittaria*, *Scirpus*, *Setaria*, *Sorghum*.

50 Malas hierbas dicotiledóneas de los géneros: *Abutilon*, *Amaranthus*, *Ambrosia*, *Anoda*, *Anthemis*, *Aphanes*, *Artemisia*, *Atriplex*, *Bellis*, *Bidens*, *Capsella*, *Carduus*, *Cassia*, *Centaurea*, *Chenopodium*, *Cirsium*, *Convolvulus*, *Datura*, *Desmodium*, *Emex*, *Erysimum*, *Euphorbia*, *Galeopsis*, *Galinsoga*, *Galium*, *Hibiscus*, *Ipomoea*, *Kochia*, *Lamium*, *Lepidium*, *Lindernia*, *Matricaria*, *Mentha*, *Mercurialis*, *Mullugo*, *Myosotis*, *Papaver*, *Pharbitis*, *Plantago*, *Polygonum*, *Portulaca*, *Ranunculus*, *Raphanus*, *Rorippa*, *Rotala*, *Rumex*, *Salsola*, *Senecio*, *Sesbania*, *Sida*, *Sinapis*, *Solanum*, *Sonchus*, *Sphenoclea*, *Stellaria*, *Taraxacum*, *Thlaspi*, *Trifolium*, *Urtica*, *Veronica*, *Viola*, *Xanthium*.

Si se aplican los compuestos de acuerdo con la invención antes de la germinación en la superficie de la tierra, entonces o bien se impide la emergencia de los brotes de malas hierbas completamente o las malas hierbas crecen hasta la fase de cotiledón, sin embargo paran entonces su crecimiento y mueren finalmente tras el transcurso de tres a cuatro semanas completamente.

- 5 En la aplicación de los principios activos sobre las partes de las plantas verdes en el procedimiento de post-emergencia se produce tras el tratamiento la interrupción del crecimiento y las plantas perjudiciales se detienen en la fase de crecimiento existente en el momento de la aplicación o mueren tras un cierto tiempo por completo, de modo que de esta manera se suprime de manera duradera y muy temprana una concurrencia de malas hierbas perjudiciales para las plantas de cultivo.
- 10 Aunque los compuestos de acuerdo con la invención presentan una actividad herbicida excelente frente a malas hierbas mono- y dicotiledóneas, se dañan sólo de manera insignificante o no se dañan en absoluto plantas de cultivo de cultivos de importancia económica por ejemplo cultivos dicotiledóneos de los géneros *Arachis*, *Beta*, *Brassica*, *Cucumis*, *Cucurbita*, *Helianthus*, *Daucus*, *Glycine*, *Gossypium*, *Ipomoea*, *Lactuca*, *Linum*, *Lycopersicon*, *Nicotiana*, *Phaseolus*, *Pisum*, *Solanum*, *Vicia*, o cultivos monocotiledóneos de los géneros *Allium*, *Ananas*, *Asparagus*, *Avena*, *Hordeum*, *Oryza*, *Panicum*, *Saccharum*, *Secale*, *Sorghum*, *Triticale*, *Triticum*, *Zea*, en particular *Zea* y *Triticum*, dependiendo de la estructura del respectivo compuesto de acuerdo con la invención y su cantidad de aplicación. Los presentes compuestos son muy adecuados por estos motivos para combatir selectivamente el crecimiento de plantas no deseadas en cultivos de plantas tales como plantaciones útiles agrícolas o plantaciones ornamentales.

- Además, los compuestos de acuerdo con la invención (dependiendo de su respectiva estructura y de la cantidad de aplicación esparcida) presentan propiedades reguladoras del crecimiento excelentes en plantas de cultivo. Éstos intervienen de manera reguladora en el metabolismo propio de la planta y pueden usarse con ello para influir de manera dirigida en las sustancias de la planta y para simplificar la cosecha tal como por ejemplo promoviendo la desecación y el acortamiento del crecimiento. Además son adecuados también para el control general y la inhibición del crecimiento vegetativo no deseado, sin destruir las plantas a este respecto. Una inhibición del crecimiento vegetativo desempeña en muchos cultivos monocotiledóneos y dicotiledóneos un gran papel, dado que por ejemplo puede reducirse o impedirse completamente la formación de depósitos mediante esto.

- Debido a sus propiedades herbicidas y reguladoras del crecimiento de las plantas, los principios activos también pueden usarse para combatir plantas perjudiciales en cultivos de plantas modificadas mediante ingeniería genética mediante mutagénesis convencional. En general, las plantas transgénicas se distinguen por propiedades especialmente ventajosas, por ejemplo, por resistencias a ciertos pesticidas, principalmente ciertos herbicidas, resistencias a enfermedades de plantas u organismos causantes de enfermedades de plantas, tales como ciertos insectos o microorganismos tales como hongos, bacterias o virus. Otras propiedades especiales se refieren, por ejemplo, al material recolectado con respecto a la cantidad, calidad, capacidad de almacenamiento, composición y constituyentes especiales. Así se conocen plantas transgénicas cuyo contenido de almidón está aumentado, o cuya calidad de almidón se ha alterado, o plantas en las que el material recolectado tiene una composición diferente de ácidos grasos.

- Se prefiere con respecto a los cultivos transgénicos el uso de los compuestos de acuerdo con la invención en cultivos transgénicos económicamente importantes de plantas útiles y ornamentales, por ejemplo, de cereales tales como trigo, cebada, centeno, avena, mijo, arroz y maíz o también cultivos de remolacha azucarera, algodón, soja, colza, patata, tomate, guisantes y otras hortalizas. Preferentemente pueden usarse los compuestos de acuerdo con la invención como herbicidas en cultivos de plantas útiles que son resistentes, o que se han hecho resistentes mediante ingeniería genética, a los efectos fitotóxicos de los herbicidas.

1. Acción herbicida o compatibilidad con plantas de cultivo en la preemergencia

- Se colocan semillas de plantas de cultivo o malas hierbas monocotiledóneas o dicotiledóneas en recipientes de fibra de madera en tierra arcillosa arenosa y se cubre con tierra. Los compuestos de acuerdo con la invención formulados en forma de polvos humectables (WP) se aplican entonces como suspensión acuosa con una cantidad de aplicación de agua de 600 l/ha calculados con la adición del 0,2 % de agente humectante sobre la superficie de la tierra cubierta.

- Tras el tratamiento se colocan los recipientes en el invernadero y se mantienen en buenas condiciones de crecimiento para las plantas de prueba. Tras aproximadamente 3 semanas se evalúa visualmente la acción de los preparados en comparación con controles no tratados (acción herbicida en porcentaje (%): 100 % de acción = las plantas están muertas, el 0 % de acción = como las plantas control).

- Tal como muestran los resultados, los compuestos de acuerdo con la invención presentan una buena actividad herbicida en la preemergencia contra un amplio espectro de malas hierbas y malezas. Por ejemplo, los compuestos n.º 35, 50, 51, 230, 542, 788, 789, 1034, 2285, 2449, 2531 y otros compuestos de las tablas 1 - 3 tienen acción herbicida muy buena contra plantas perjudiciales tales como por ejemplo *Avena fatua*, *Stellaria media*, *Echinochloa crus galli*, *Lolium multiflorum*, *Setaria viridis*, *Amaranthus retroflexus*, *Veronica persica*, *Matricaria inodora*, *Fallopia convolvulus* y *Alopecurus myosuroides* en el procedimiento de la preemergencia con una cantidad de aplicación de

0,32 kg y menos sustancia activa por hectárea.

5 Al mismo tiempo, los compuestos de acuerdo con la invención dejan sin dañar cultivos dicotiledóneos, tal como colza, en el propio procedimiento de la preemergencia a altas dosificaciones de principios activos. Algunas sustancias protegen además también cultivos de gramíneas como maíz. Los compuestos de acuerdo con la invención muestran parcialmente una alta selectividad y son adecuados por tanto en el procedimiento de la preemergencia para la lucha contra el crecimiento de plantas indeseado en cultivos agrícolas.

2. Acción herbicida o compatibilidad con plantas de cultivo en la postemergencia

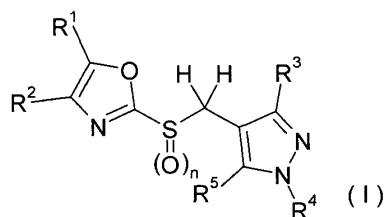
10 Se colocan semillas de plantas de cultivo o malas hierbas monocotiledóneas o dicotiledóneas en recipientes de fibra de madera en tierra arcillosa arenosa, se cubren con tierra y se ponen en el invernadero en buenas condiciones de crecimiento. De 2 a 3 semanas tras la siembra se tratan las plantas de ensayo en el estadio de una hoja. Los compuestos de acuerdo con la invención formulados en forma de polvos humectables (WP) se pulverizan entonces como suspensión acuosa con una cantidad de aplicación de agua de 600 l/ha calculado con adición del 0,2 % de agente humectante sobre las partes verdes de las plantas. Tras un tiempo de espera de aproximadamente 3 semanas de las plantas de ensayo en el invernadero en condiciones de crecimiento óptimas se estima la acción de los preparados visualmente en comparación con los controles no tratados (acción herbicida en porcentaje: 100 % de acción = las plantas están muertas, el 0 % de acción = como las plantas control).

20 Tal como muestran los resultados, los compuestos de acuerdo con la invención presentan una buena actividad herbicida en la postemergencia contra varias malas hierbas o malezas. Por ejemplo, los compuestos n.º 35, 50, 51, 542, 230, 2285 y otros compuestos de las tablas 1 - 3 tienen acción herbicida muy buena contra plantas perjudiciales tales como por ejemplo *Echinochloa crus galli*, *Lolium multiflorum*, y *Setaria viridis* en el procedimiento de la postemergencia con una cantidad de aplicación de 0,32 kg y menos sustancia activa por hectárea.

25 Al mismo tiempo, los compuestos de acuerdo con la invención dejan sin dañar cultivos dicotiledóneos, tal como colza, en el propio procedimiento de la preemergencia a altas dosificaciones de principios activos. Algunas sustancias protegen además también cultivos de gramíneas como maíz. Los compuestos de acuerdo con la invención muestran parcialmente una alta selectividad y son adecuados por tanto en el procedimiento de la postemergencia para la lucha contra el crecimiento de plantas indeseado en cultivos agrícolas.

REIVINDICACIONES

1. Compuestos de fórmula (I) y sus sales agroquímicamente compatibles



en la que los restos y los índices presentan el siguiente significado:

- 5 - n es igual a 0, 1 o 2;
 - los sustituyentes R¹ y R² se seleccionan, en cada caso independientemente entre sí, del grupo que está constituido por
- 10 - hidrógeno, halógeno, nitro, ciano, formilo, C(O)OH, hidroxilo, amino,
 - alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-carbonilo, alquil(C₁-C₆)-carbonil-alquilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₆)-carboniloxilo,
 - alcoxilo (C₁-C₆), alcoxi(C₁-C₆)-carbonilo, alcoxi(C₁-C₆)-carbonil-alquilo (C₁-C₆), alcoxi(C₁-C₆)-alquilo (C₁-C₆),
 - alcoxil(C₁-C₆)-alcoxilo (C₁-C₆), alcoxil(C₁-C₆)-carbonil-alquilo (C₁-C₆),
 - alquénilo (C₂-C₆), alquénil(C₂-C₆)-oxilo, alquínilo (C₂-C₆), alquínil(C₂-C₆)-oxilo,
 - alquil(C₁-C₆)-tio, alquil(C₁-C₆)-sulfinilo, alquil(C₁-C₆)-sulfonilo, alquil(C₁-C₆)-sulfoniloxilo, alquil(C₁-C₆)-sulfonil-
 alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-sulfinil-alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-tio-alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-tio-alcoxilo
 (C₁-C₆),
 - mono-(alquil(C₁-C₆))-amino, di-(alquil(C₁-C₆))-amino, N-(alcanoil(C₁-C₆))-amino, aminocarbonil-alquilo (C₁-
 C₆), mono-(alquil(C₁-C₆))-aminocarbonilo, di-(alquil(C₁-C₆))-aminocarbonilo, mono-(alquil(C₁-C₆))-
 aminosulfonilo, di-(alquil(C₁-C₆))-aminosulfonilo,
 - cicloalquilo (C₃-C₈), cicloalcoxilo (C₃-C₈), cicloalquil(C₃-C₈)-alquilo (C₁-C₆), cicloalquil(C₃-C₈)-alcoxilo (C₁-C₆),
 cicloalquil(C₃-C₈)-carbonilo, cicloalcoxil(C₃-C₈)-carbonilo,
 - cicloalquénilo (C₃-C₈), cicloalquénil(C₃-C₈)-oxilo, cicloalquil(C₃-C₈)-tio, cicloalquil(C₃-C₈)-sulfinilo,
 cicloalquil(C₃-C₈)-sulfonilo, cicloalquil(C₃-C₈)-sulfoniloxilo,
 - ciano-alcoxilo (C₁-C₆), ciano-alquilo (C₁-C₆),
 - -CONH-SO₂-alquilo (C₁-C₆), -NHCHO, -NHCO-alquilo (C₁-C₆), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₆), -NHCONH-alquilo
 (C₁-C₆), -NHSO₂-alquilo (C₁-C₆), -OCONH-alquilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-aminosulfonil-alquilo (C₁-C₂), di-
 alquil(C₁-C₆)-aminosulfonil-alquilo (C₁-C₆),
 - -C(O)NHR⁹, -C(O)NR⁹R¹⁰,
 - en donde R⁹ y R¹⁰ son independientemente entre sí hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆),
 haloalquilo (C₁-C₆) o
 - en donde R⁹ y R¹⁰ juntos forman un grupo alquilenilo (C₁-C₆), que puede contener un átomo de oxígeno o
 un átomo de azufre o uno o dos grupos amino o alquil(C₁-C₆)-amino,

- en donde los restos R¹ y R² mencionados anteriormente pueden estar monosustituidos o polisustituidos e
 independientemente entre sí con restos que se seleccionan del grupo que está constituido por halógeno y alquilo
 (C₁-C₆); R³ se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, halógeno, hidroxilo, ciano, nitro, amino,
 alquilo (C₁-C₄), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₄), alcoxilo (C₁-C₄), alcoxi(C₁-C₄)-alquilo (C₁-C₂), cicloalcoxilo
 (C₃-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₄)-tio, alquil(C₁-C₄)-tio-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-
 sulfinil-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonil-alquilo (C₁-C₂), di-alquil(C₁-C₄)-amino,
 alquénilo (C₂-C₄), alquínilo (C₂-C₄), alquénil(C₃-C₄)-oxilo, alquínil(C₃-C₄)-oxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alcoxilo (C₁-C₂),
 hidroxil-alquilo (C₁-C₂), hidroxil-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alquilo (C₁-C₂), fenilo, fenil-alquilo
 (C₁-C₂), fenil-alcoxilo (C₁-C₂), fenoxilo, alquil(C₁-C₄)-carboniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-
 carbonil-alquilo (C₁-C₂), alcoxi(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂) y 3-oxetaniloxilo, -
 C(O)NR⁹R¹⁰, en donde R⁹ y R¹⁰ se seleccionan, independientemente entre sí, del grupo que está constituido por
 hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), o en donde R⁹ y R¹⁰ juntos forman un grupo
 alquilenilo (C₁-C₆), que puede contener un átomo de oxígeno o un átomo de azufre o uno o dos grupos amino o
 alquil(C₁-C₆)-amino,
 R⁴ se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, alquilo (C₁-C₄), haloalquilo (C₁-C₄), fenilo, fenil-
 alquilo (C₁-C₂), cicloalquilo (C₃-C₆); cicloalquil(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₂), estando sustituido el resto cicloalquilo dado
 el caso con alquilo (C₁-C₄); alquénilo (C₂-C₄), alquínilo (C₂-C₄), alcoxi(C₁-C₄)-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-tio-
 alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfinil-alquilo (C₁-C₂), ciano-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfonil-alquilo (C₁-C₂),
 alcoxil(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂), mono-alquil(C₁-C₄)-aminocarbonil-alquilo
 (C₁-C₂), di-alquil(C₁-C₄)-aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂), hidroxil-alquilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-
 C₄), alcoxi(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfonilo; fenilsulfonilo, que está sustituido dado el caso
 con uno o varios restos iguales o distintos del grupo de halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆),

cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; alquil(C₁-C₄)-carbonilo; fenilcarbonilo, que está sustituido dado el caso con uno o varios restos iguales o distintos del grupo de halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; y alcoxil(C₁-C₄)-carbonilo, R⁵ se selecciona del grupo que está constituido por hidrógeno, halógeno, hidroxilo, ciano, nitro, amino, alquilo (C₁-C₄), haloalquilo (C₁-C₄), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₄), alcoxil(C₁-C₄)-alcoxilo (C₁-C₄), alcoxil(C₁-C₄)-alquilo (C₁-C₂), cicloalcoxilo (C₃-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₄), alquil(C₁-C₄)-tio, alquil(C₁-C₄)-tio-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-sulfinil-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonil-alquilo (C₁-C₂), di-alquil(C₁-C₄)-amino, alquenilo (C₂-C₄), haloalquenilo (C₂-C₄), ciano-alquilo (C₁-C₄), alquinilo (C₂-C₄), alquenal(C₃-C₄)-oxilo, alquinil(C₃-C₄)-oxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alcoxilo (C₁-C₂), hidroxil-alquilo (C₁-C₂), hidroxil-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alcoxilo (C₁-C₂), ciano-alquilo (C₁-C₂); fenilo, que está sustituido dado el caso con uno o varios restos iguales o distintos del grupo de halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; fenil-alquilo (C₁-C₂), que está sustituido dado el caso con uno o varios restos iguales o distintos del grupo de halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; fenil-alcoxilo (C₁-C₂); fenoxilo, que está sustituido dado el caso con uno o varios restos iguales o distintos del grupo de halógeno, nitro, ciano, alquilo (C₁-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), haloalcoxilo (C₁-C₆) o alquil(C₁-C₆)-tio; alquil(C₁-C₄)-carboniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₂), alquil(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), alcoxil(C₁-C₄)-carbonil-alquilo (C₁-C₂), aminocarbonil-alquilo (C₁-C₂) y 3-oxetaniloxilo, -C(O)NR⁹R¹⁰, en donde R⁹ y R¹⁰ se seleccionan, independientemente entre sí, del grupo que está constituido por hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), o en el que R⁹ y R¹⁰ juntos forman un grupo alquileo (C₁-C₆), que puede contener un átomo de oxígeno o un átomo de azufre o uno o dos grupos amino o alquil(C₁-C₆)-amino, y/o los restos R⁴ y R⁵ adyacentes uno con respecto a otro pueden estar enlazados entre sí de manera cíclica y/o forman un grupo alquileo (C₁-C₆), que puede contener uno o varios átomos de oxígeno y/o de azufre, pudiendo estar monosustituido o polisustituido el grupo alquileo (C₁-C₆) con halógeno y pudiendo ser iguales o distintos los respectivos sustituyentes de halógeno.

2. Compuestos según la reivindicación 1, **caracterizados porque** R¹ se selecciona del grupo que está constituido por H, halógeno, nitro, ciano, carboxilo, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), cicloalcoxilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-carbonilo, alcoxil(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalcoxil(C₃-C₆)-carbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, alquil(C₁-C₄)-tio, cicloalquil(C₃-C₆)-tio, alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfoniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfoniloxilo, alquenilo (C₂-C₃), alquinilo (C₂-C₃), alquenal(C₂-C₃)-oxilo, alquinil(C₂-C₃)-oxilo, -NHCO-alquilo (C₁-C₃), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₃), -NHCONH-alquilo (C₁-C₃), -NHSO₂-alquilo (C₁-C₃), -OCONH-alquilo (C₁-C₃), -CONHR⁹, -CONR⁹R¹⁰, en donde R⁹ y R¹⁰ son independientemente entre sí hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), en donde el resto R¹ mencionado anteriormente puede estar monosustituido o polisustituido e independientemente entre sí con restos que se seleccionan del grupo que está constituido por halógeno y alquilo (C₁-C₆).

3. Compuestos según las reivindicaciones 1 o 2, **caracterizados porque** R² se selecciona del grupo que está constituido por H, halógeno, nitro, ciano, carboxilo, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), cicloalcoxilo (C₃-C₆), alcoxilo (C₁-C₆), alquil(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-carbonilo, alcoxil(C₁-C₆)-carbonilo, cicloalcoxil(C₃-C₆)-carbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminocarbonilo, mono-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, di-(alquil(C₁-C₄))-aminosulfonilo, alquil(C₁-C₄)-tio, cicloalquil(C₃-C₆)-tio, alquil(C₁-C₄)-sulfinilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfinilo, alquil(C₁-C₄)-sulfonilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfonilo, alquil(C₁-C₄)-sulfoniloxilo, cicloalquil(C₃-C₆)-sulfoniloxilo, alquenilo (C₂-C₃), alquinilo (C₂-C₃), alquenal(C₂-C₃)-oxilo, alquinil(C₂-C₃)-oxilo, -NHCO-alquilo (C₁-C₃), -NHCO₂-alquilo (C₁-C₃), -NHCONH-alquilo (C₁-C₃), -NHSO₂-alquilo (C₁-C₃), -OCONH-alquilo (C₁-C₃), -CONHR⁹, -CONR⁹R¹⁰, en donde R⁹ y R¹⁰ son independientemente entre sí hidrógeno, alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), haloalquilo (C₁-C₆), en donde el resto R² mencionado anteriormente puede estar monosustituido o polisustituido e independientemente entre sí con restos que se seleccionan del grupo que está constituido por halógeno y alquilo (C₁-C₆).

4. Compuestos según una de las reivindicaciones 1 a 3, **caracterizados porque** R³ se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, I, CN, Me, Et, Pr, iPr, tBu, CHF₂, CF₃, OMe, OEt, OCHF₂ y OCH₂CF₃.

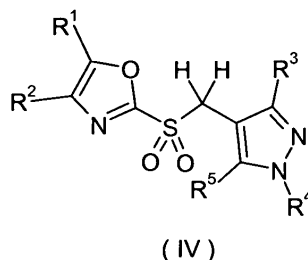
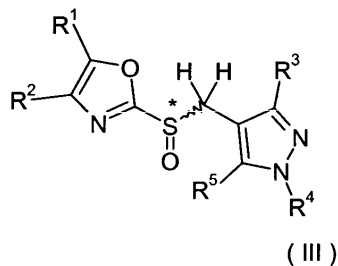
5. Compuestos según una de las reivindicaciones 1 a 4, **caracterizados porque** R⁴ se selecciona del grupo que está constituido por H, Me, Et, Pr, cPr, iPr, Bu, iBu, sBu, tBu, cPen, cHex, CHF₂, CH₂CF₃, Ph, Ph(4-Cl), CH₂cPr, CH₂cPr(2-Me), CHMeCPr, CH₂cBu, CH₂cPen, CH₂cHex, CH₂Ph, CH₂CH=CH₂, CH₂C=CH, CHMeC=CH, CH₂C=CMe, CH₂OMe, CH₂OEt, CH₂CH₂OH, CH₂CH₂OMe, CH₂CH₂OEt, CH₂CH₂C(O)Me, CH₂SMe, CH₂SO₂Me, CH₂CN, CH₂C(O)OMe, CH₂C(O)OEt, CH₂C(O)NH₂, CH₂C(O)NMe₂, CH₂C(O)Me, SO₂Me, SO₂Ph, C(O)Me, C(O)Ph y C(O)OMe.

6. Compuestos según una de las reivindicaciones 1 a 5, **caracterizados porque** R⁵ se selecciona del grupo que está constituido por H, F, Cl, Br, I, CN, Me, Et, CHF₂, CF₃, OCHF₂, OCH₂CF₃, OMe, OEt, OPr, OiPr, OtBu, SO₂Me, SO₂iPr, 3-oxetaniloxilo, OPh, OCH₂CH=CH₂, OCH₂C=CHOCH₂CHF₂, SEt, OCH₂CH₂OCH₃, SMe, OCH₂CH₂CH₂F, OCH(CH₂F)₂, OCH₂CF=CH₂, OCH(CH₃)CF₃, OCH₂CN, OCH(CH₃)CH₂F, OCH₂CF₂CHF₂ y OCH(CH₃)₂.

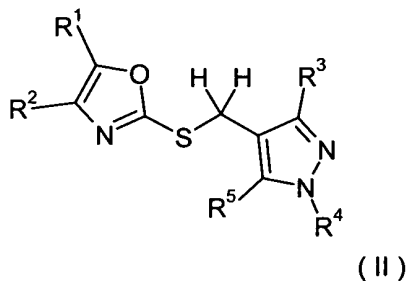
7. Compuestos según una de las reivindicaciones 1 a 6, **caracterizados porque** en la fórmula general n es igual a 1.

8. Compuestos según la reivindicación 7, **caracterizados porque** el compuesto de fórmula general (I) con n = 1 está presente con una configuración (R) o (S) con una pureza estereoquímica de más del 50 % al 100 %.

5 9. Procedimiento para la preparación de un compuesto de fórmula general (III) o de un compuesto de fórmula general (IV), en las que R¹, R², R³, R⁴, R⁵ tienen el significado mostrado de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 6

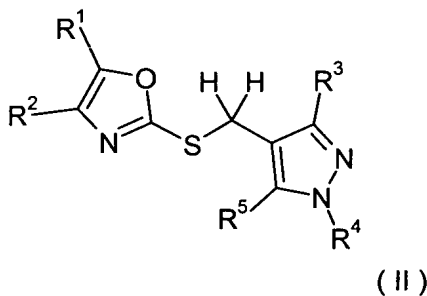


mediante oxidación de un tioéter de fórmula general (II) por medio de un agente oxidante,



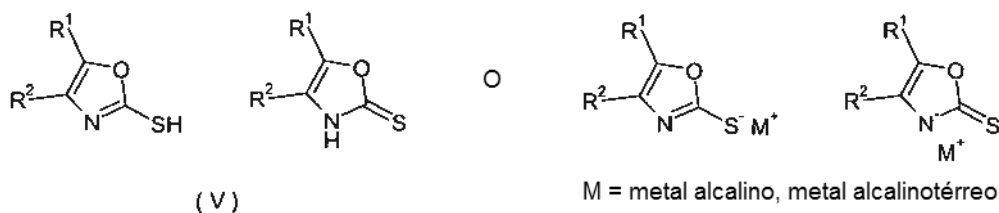
10 en la que R¹, R², R³, R⁴, R⁵ tienen el significado mostrado de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5, en donde con un equivalente del agente oxidante se obtienen los sulfóxidos de fórmula general (III) o con dos equivalentes del agente oxidante se obtienen las sulfonas de fórmula general (IV).

10. Procedimiento para la preparación de un tioéter de fórmula general (II)

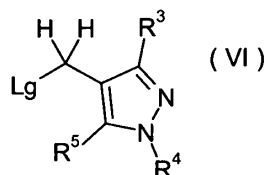


15 en la que R¹, R², R³, R⁴, R⁵ tienen los significados mostrados de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5, de acuerdo con uno de los siguientes procedimientos:

(a) reacción de 2-mercaptooxazol o una oxazol-2(3H)-tione o una sal de los mismos

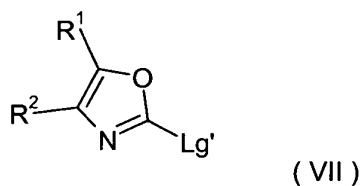


en las que R^1 , R^2 tienen los significados mostrados de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5, con un derivado de (1H-pirazol-4-ilmetilo) de fórmula general (VI)

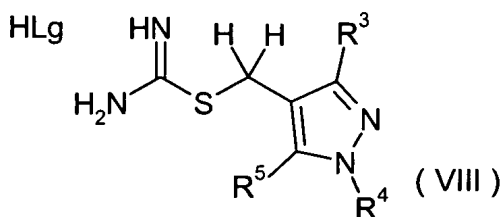


en la que R^3 , R^4 y R^5 tienen el significado mostrado de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5 y Lg significa un grupo saliente, en presencia de una base de metal alcalino o de metal alcalinotérreo o de una base orgánica en un disolvente;

(b) reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (VII),

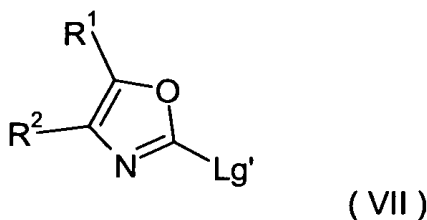


en la que R^1 , R^2 tienen los significados mostrados de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5 y Lg' significa un grupo saliente con una sal de [(1H-pirazol-4-il-metil)]-imidiotiocarbamato de fórmula general (VIII)

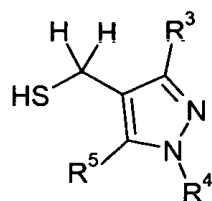


en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen el significado mostrado de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5 y Lg significa un grupo saliente en un procedimiento de un solo recipiente en presencia de una base acuosa de metal alcalino o de metal alcalinotérreo o de una base de carbonato de metal alcalino o de metal alcalinotérreo y de un disolvente;

(c) reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (VII),



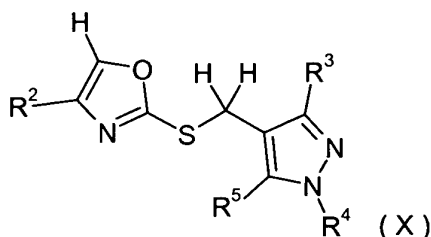
en la que R^1 , R^2 tienen los significados mostrados de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5 y Lg' significa un grupo saliente con un (1H-pirazol-4-ilmetil)-mercaptano de fórmula general (IX),



(IX)

en la que R^3 , R^4 , R^5 tienen el significado mostrado de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5 en presencia de una base de metal alcalino o de metal alcalinotérreo;

(d) reacción de un derivado de oxazol de fórmula general (X),



(X)

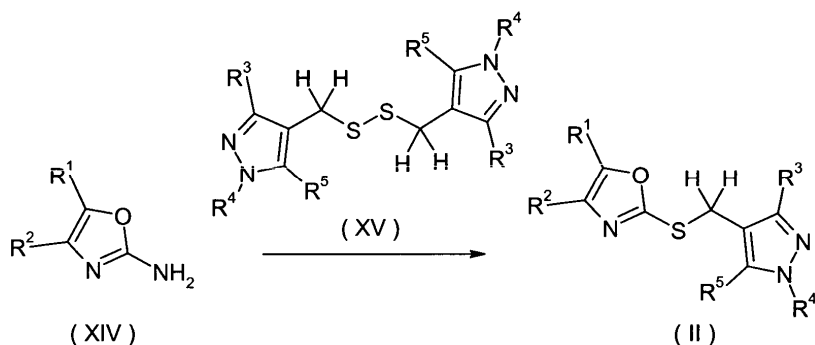
en la que R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados mostrados de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5 y R^1 corresponde a un halógeno o NO_2 de acuerdo con el siguiente esquema de reacción:



(X)

(II)

(e) reacción de un derivado de disulfuro de (1H-pirazol-4-ilmetilo) de fórmula general (XV) con 2-amino-oxazoleno de fórmula (XIV) y un agente de diazotización tal como se representa en el siguiente esquema:



(XIV)

(II)

y en el que R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 tienen los significados mostrados de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 5.

11. Procedimiento según la reivindicación 9, **caracterizado porque** el compuesto de fórmula general (II), que se obtiene de acuerdo con el procedimiento según la reivindicación 10, se usa como compuesto de partida en el procedimiento según la reivindicación 9.

12. Composiciones que contienen al menos un compuesto de fórmula general (I) de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 8.

13. Composición según la reivindicación 12, **caracterizada porque** la composición comprende al menos otro principio activo que se selecciona del grupo que está constituido por al menos otro herbicida y al menos un protector selectivo.

14. Uso de los compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 8 como reguladores del crecimiento de las plantas.

15. Uso de las composiciones de acuerdo con las reivindicaciones 12 o 13 como reguladores del crecimiento de las plantas.

5 16. Uso según las reivindicaciones 14 o 15 para la lucha contra las plantas en cultivos de plantas especiales o como regulador de la protección de plantas.