Industria y Comercio
SUPERINTENDENCIA

Radicación	16 117791 0000 0000	2016-05-05 17:03:39	
Trámite	11	PCT-PATENTE DE INVENCION CAPITULOS I Y II	
Evento	378	FASE NACIONAL INCLUIDO CAPITULO I	
Actuación	411	PRESENTACION	Folios: 850
Dependencia	2020	DIRECCION DE NUEVAS CREACIONES	
Pago #1	44409	$ 64000	

DIRECCIÓN DE NUEVAS CREACIONES
SOLICITUD FASE NACIONAL - PCT

1	**Titulo de la Invención** (200 caractares o espacios máximos)
	NUEVOS COMPUESTOS PARA EL COMBATE DE ARTRÓPODOS

2	**Datos del Solicitante**			
	Nombre:	BAYER CROPSCIENCE AKTIENGESELLSCHAFT	**Dirección Electrónica:**	patents@olartemoure.com
	Dirección:	Alfred-Nobel-Str. 50 40789 Monheim am Rhein	**Domicilio/País de constitución:**	ALEMANIA - NORDRHEIN-WESTFALEN - MONHEIM AM RHEIN

Identificación:

- ☐ CEDULA DE CIUDADANIA
- ☐ CEDULA DE EXTRANJERIA
- ☒ EMPRESA EXTRANJERA
- ☐ NIT
- ☐ PASAPORTE

Número: 900044286-

3	**Solicitantes**		
	Apellidos - Nombres o Razón Social	**Tipo**	**Identificación**
1.	BAYER CROPSCIENCE AKTIENGESELLSCHAFT	NN	900044286

4	**Datos del Inventor**

Nombre:	Werner HALLENBACH	**Dirección Electrónica:**	patents@olartemoure.com
Dirección:	Lichtenberger Str. 68, 40789 Monheim	**Domicilio/País de constitución:**	ALEMANIA - NORDRHEIN-WESTFALEN - MONHEIM

Identificación:

☐ CEDULA DE CIUDADANIA ☐ CEDULA DE EXTRANJERIA
☐ EMPRESA EXTRANJERA ☐ NIT
☐ PASAPORTE ☒ No Aplica

Número: -

5	**Inventor(es)**

	Apellidos - Nombres	**Domicilio**
1.	HALLENBACH Werner	ALEMANIA
2.	SCHWARZ Hans-Georg	ALEMANIA
3.	ILG Kerstin	ALEMANIA
4.	GORGENS Ulrich	ALEMANIA
5.	KOBBERLING Johannes	ALEMANIA
6.	TURBERG Andreas	ALEMANIA
7.	BOHNKE Niels	ALEMANIA
8.	MAUE Michael	ALEMANIA
9.	VELTEN Robert	ALEMANIA
10.	HARSCHNECK Tobias	ALEMANIA
11.	HAHN Julia Johanna	ALEMANIA
12.	HORSTMANN Sebastian	ALEMANIA

6	**Datos Inventor(es)**

	País de Residencia	Departamento/Estado	Ciudad	Dirección
1.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	MONHEIM	Lichtenberger Str. 68, 40789 Monheim
2.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	DORSTEN	Auf dem Beerenkamp 82b, 46282 Dorsten
3.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	KOLN	Neusser Wall 32 50670 Koln
4.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	RATINGEN	Fester Str. 37, 40882 Ratingen
5.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	NEUSS	Azalienstr. 30 41466 Neuss
6.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	HAAN	Sinterstr. 86 42781 Haan
7.	ALEMANIA	BERLIN	BERLIN	Sachsische Str. 41, 10713 Berlin
8.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	LANGENFELD	Brunnenstr. 18a 40764 Langenfeld
9.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	LANGENFELD	Heerstr. 17, 40764 Langenfeld
10.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	DUSSELDORF	Am Botanischen Garten 11, 40225 Dusseldorf
11.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	DUSSELDORF	Einsteinstr. 38 40598 Dusseldorf
12.	ALEMANIA	NORDRHEIN-WESTFALEN	LEVERKUSEN	Ober dem Hof 11 51381 Leverkusen

7	Datos del Representante Legal / Apoderado		
Nombre:	CARLOS R. OLARTE GARCIA	**Dirección Electrónica:**	patents@olartemoure.com
Dirección:	patents@olartemoure.com	**Domicilio/País de constitución:**	COLOMBIA - CUNDINAMARCA - BOGOTA D.C.

Identificación:

☒ CEDULA DE CIUDADANIA ☐ CEDULA DE EXTRANJERIA
☐ EMPRESA EXTRANJERA ☐ NIT
☐ PASAPORTE

Número: 79782747-

Presentación de Poder

Año de Radicación	
Número de Radicación	

8	**Datos Solicitud: PCT / WO**		
Número Solicitud:	PCT/EP2014/073795	**Fecha Solicitud:**	05/11/2014
Número Publicacion:	WO2015/067647	**Fecha Publicacion:**	14/05/2015

9	**Declaraciones de prioridad**	☒ SI ☐ NO

	(33) País de origen	Codigo del país	(31) No. Solicitud	(32) Fecha
1.	EUROP PATENT ORGANIZATION(EPO)	EP	13191610.8	05/11/2013
2.	EUROP PATENT ORGANIZATION(EPO)	EP	14181149.7	15/08/2014

10	**Reivindicaciones**			
Número reivindicaciones:	14	**Pago Reivindicaciones:**	No	

11 Reducción de tasas.

Declaro que carezco de medios económicos para presentar la solicitud de patente.

☐ SI ☒ NO

Nota: En caso de ser persona natural y carecer de medios económicos, y por lo tanto, aplique la reducción de tasas a que se refiere la resolucón vigente en tarifas, debe firmar la presente solicitud bajo la gravedad de juramento.

☐ Micro, pequeñas y medianas empresas
☐ Universidades públicas o privadas
☐ Entidades sin ánimo de lucro

Debe aportar los documentos que se indican en el numeral 17 de anexos

12 Documentos Anexos

☒ Reivindicaciones
☒ Descripción
☐ Dibujos y/o Figuras

☒ Resumen
☐ Certificado Depósito Material Biológico
☐ Uso de Conocimiento tradicional
☐ Listado de secuencias
☐ Artes finales 12 x 12 cm
☐ Poderes, si fuere el caso
☐ Copia de la primera solicitud si se reivindica prioridad
☐ Traducción simple de la primera solicitud, si se reivindica prioridad
☒ Otros Anexos

Nuevos compuestos para el combate de artrópodos

Introducción

La presente solicitud se refiere a nuevos compuestos de trifluoro, a procesos para su preparación y a su uso para el control de plagas animales, en particular artrópodos y en especial insectos, arácnidos y nematodos.

Se sabe que los compuestos sustituidos con halógeno particulares tienen actividad insecticida (documentos EP 1 911 751, WO 2012/069366, WO 2012/080376, WO 2012/107434 y WO 2012/175474).

El documento WO 2011/113756 revela derivados de triazol que tienen actividad insecticida.

También se sabe que compuestos sustituidos con halógeno particulares tienen actividades que inhiben las citoquinas (documento WO 2000/07980).

Las modernas composiciones de protección de cultivos deben cumplir muchas demandas, por ejemplo, en relación con la eficacia, la persistencia y el espectro de acción y posible uso. Las cuestiones de toxicidad y de combinabilidad con otros principios activos o adyuvantes de formulación desempeñan un papel importante, como la cuestión del gasto que requiere la síntesis de un principio activo. Además, se pueden producir resistencias. Por todas estas razones, la búsqueda de nuevos agentes de protección de cultivos nunca se puede considerar completa y hay una constante demanda de nuevos compuestos con propiedades mejoradas respecto de los compuestos conocidos al menos en relación con aspectos individuales.

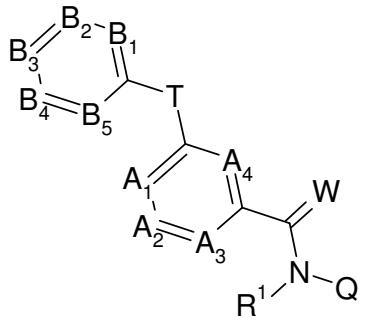
Era un objeto de la presente invención proporcionar compuestos que amplían el espectro de los plaguicidas en diversos aspectos y/o mejoran su actividad.

Sorprendentemente se halló ahora que compuestos sustituidos con halógeno particulares y sus sales tienen propiedades biológicas y son apropiados en especial para controlar plagas animales y, en consecuencia, tienen una buena utilidad en el sector de los agroquímicos y en el sector de la salud animal.

Similares compuestos ya se conocen del documento WO 2010/051926.

Síntesis

Se han hallado nuevos compuestos sustituidos con halógeno que tienen actividad insecticida, acaricida y/o parasiticida y son de la fórmula general (I):



(I)

en la que

R^1 es H, en cada caso opcionalmente sustituido alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_7, alquil C_1-C_6-carbonilo, alcoxi C_1-C_6-carbonilo, aril-alquilo (C_1-C_3), heteroaril-alquilo (C_1-C_3) o es alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, con preferencia, H o con preferencia, alquilo C_1-C_2, con máxima preferencia, H o metilo, en especial H,

los siguientes restos son los siguientes:

A_1 es CR^2 o N,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4 o N,

A_4 es CR^5 o N,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es CR^7 o N,

B_3 es CR^8 o N,

B_4 es CR^9 o N, y

B_5 es CR^{10} o N,

pero no más de tres de los restos A_1 a A_4 son N y no más de tres de los restos B_1 a B_5 son N;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C1-C6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino o *N*-alcoxi C_1-C_3-alquil C_1-C_4-amino o 1-pirrolidinilo;

si ninguno de los restos A_2 y A_3 es N, R^3 y R^4, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 5 ó 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de N y/o 0 ó 1 átomo de O y/o 0 ó 1 átomo de S; o

si ninguno de los restos A_1 y A_2 es N, R^2 y R^3, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de N;

R^8 es halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-

alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino o *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino;

W es O o S;

Q es H, formilo, hidroxilo, amino o en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, heterocicloalquilo C_1-C_5, alcoxi C_1-C_4, alquil C_1-C_6-cicloalquilo C_3-C_6, cicloalquil C_3-C_6-alquilo C_1-C_6, arilo C_6-,C_{10}-C_{14}, heteroarilo C_1-C_5, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aril-alquilo (C_1-C_3), heteroaril C_1-C_5-alquilo (C_1-C_3), *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N*-alquil C_1-C_4-carbonilamino o *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino; o

es un carbociclo de 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido; o

es un anillo heterocíclico de 4, 5 ó 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido, donde

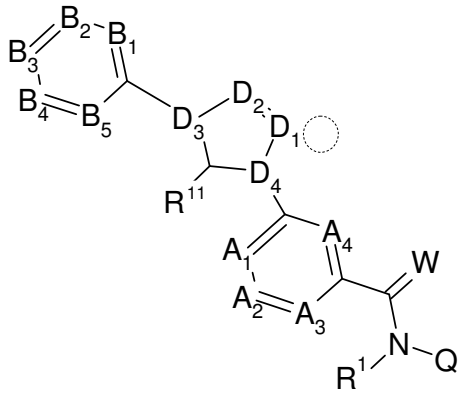
V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, alquenilo C_1-C_4, alquinilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo o *N,N*-di-(alquil C_1-C_6)amino;

T es un sistema heteroaromático de 5 miembros opcionalmente sustituido que contiene no más de 2 heteroátomos (1 ó 2 heteroátomos), tales como cuatro átomos de carbono y un (1) heteroátomo, con preferencia, un (1) átomo de nitrógeno, un (1) átomo de oxígeno o un (1) átomo de azufre o tres átomos de carbono y dos heteroátomos, con preferencia, dos átomos de

nitrógeno, un (1) átomo de nitrógeno y un (1) átomo de oxígeno o un (1) átomo de nitrógeno y un (1) átomo de azufre,

así como sus sales, N-óxidos y formas tautoméricas del compuesto de la fórmula (I).

Un aspecto de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia)



(Ia)

en la que

los restos D_1, D_2 son cada uno, de modo independiente, C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N y O;

los restos D_3 y D_4 son cada uno, de modo independiente, C o un heteroátomo seleccionado de N (es decir, los restos D_3 y D_4 son cada uno, de modo independiente, C o N);

donde como máximo uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 es/son un heteroátomo, donde uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 es un heteroátomo seleccionado de N y O en el caso de D_1 y D_2 o N en el caso de D_3 y D_4;

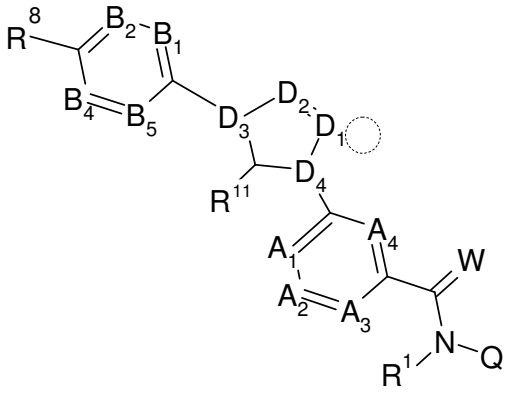
es un sistema aromático; y

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, W, Q, V y T se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3,

A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N,

así como sus sales, N-óxidos y formas tautoméricas de los compuestos de la fórmula (I).

Una realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia')



(Ia')

en la que

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_4 y B_5 se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N;

D_1 y D_2 son cada uno, de modo independiente, C-R^{11} o un heteroátomo, con preferencia, C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N, O y S, con mayor preferencia, C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N y O;

los restos D_3 y D_4 son cada uno, de modo independiente, C o un heteroátomo seleccionado de N;

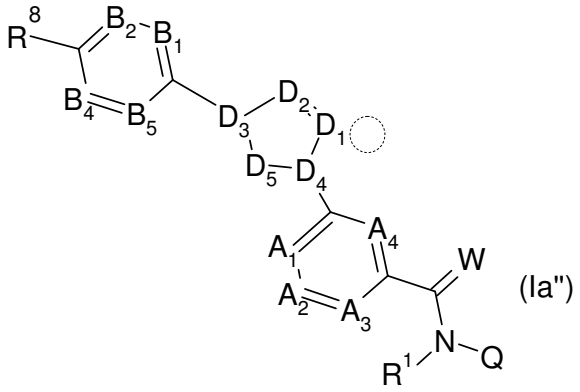
donde como máximo uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 es/son un heteroátomo, donde uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 son un heteroátomo seleccionado de N y O en el caso de D_1 y D_2 o N en el caso de D_3 y D_4;



es un sistema aromático

y R^8 es como se define en la presente, con preferencia, alquilo C_1-C_4 perfluorado.

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia'')



(Ia'')

en la que

D_1 es C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N u O;

D_2 es C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N u O;

D_3 es C o N;

D_4 es C o N;

D_5 es C-R^{11} o N;

donde como máximo uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3, D_4 y D_5 son un heteroátomo;



es un sistema aromático; y

R^1 es H, en cada caso opcionalmente sustituido alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_7, alquil C_1-C_6-carbonilo,

alcoxi C_1-C_6-carbonilo, aril-alquilo (C_1-C_3), heteroaril-alquilo (C_1-C_3) o alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_6 tales como alquilo C_1-C_2, tales como H;

los siguientes restos son los siguientes:

A_1 es CR^2 o N,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4 o N,

A_4 es CR^5 o N,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es CR^7 o N,

B_3 es CR^8 o N,

B_4 es CR^9 o N, y

B_5 es CR^{10} o N,

pero no más de tres de los restos A_1 a A_4 son N y no más de tres de los restos B_1 a B_5 son simultáneamente N;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C1-C6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino o *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino;

si ninguno de los restos A_2 y A_3 es N, R^3 y R^4, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 5 ó 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de

nitrógeno y/o 0 ó 1 átomo de oxígeno y/o 0 ó 1 átomo de azufre o

si ninguno de los restos A_1 y A_2 es N, R^2 y R^3, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de nitrógeno;

R^8 es halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C1-C6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino o *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino;

R^{11} es, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, amino o un alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, alquil C_1-C_6-oxi, alquil C_1-C_6-carbonilo, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, con preferencia, H;

W es O o S;

Q es H, formilo, hidroxilo, amino o en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, heterocicloalquilo C_1-C_5, alcoxi C_1-C_4, alquil C_1-C_6-cicloalquilo C_3-C_6, cicloalquil C_3-C_6-alquilo C_1-C_6, arilo C_6-,C_{10}-C_{14}, heteroarilo C_1-C_5, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aril-alquilo (C_1-C_3), heteroaril C_1-C_5-alquilo (C_1-C_3), *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N*-alquil C_1-C_4-carbonilamino o *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino; o

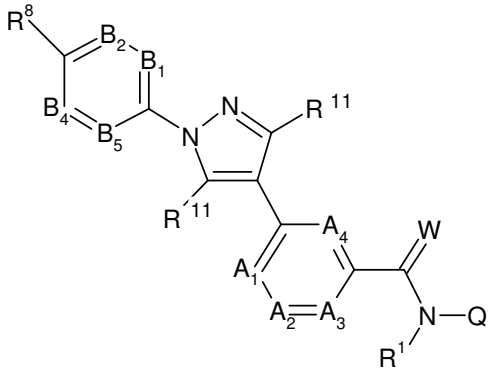
es un carbociclo de 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido; o

es un anillo heterocíclico de 4, 5 ó 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido, donde

V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, alquenilo C_1-C_4, alquinilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo o *N,N*-di-(alquil C_1-C_6)amino;

así como sus sales, N-óxidos y formas tautoméricas de los compuestos de la fórmula (Ia").

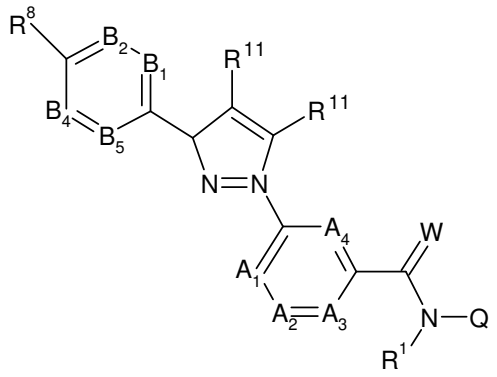
Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia''), en la que los compuestos de la fórmula (Ia") son compuestos de la fórmula (I-T3)



(I-T3)

en la que R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

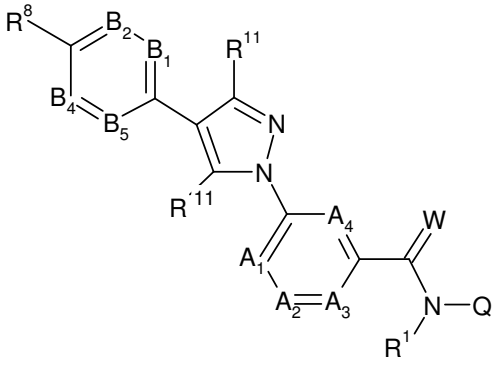
Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia''), en la que los compuestos de la fórmula (Ia") son compuestos de la fórmula (I-T2)



(I-T2)

en la que R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

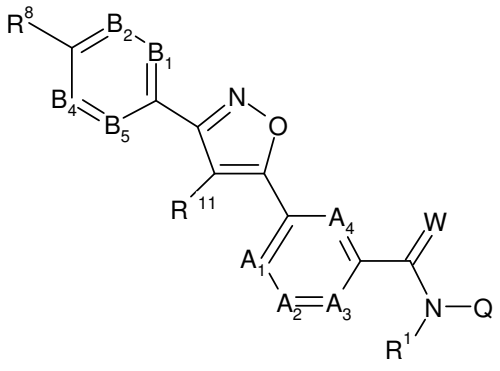
Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia''), en la que los compuestos de la fórmula (Ia") son compuestos de la fórmula (I-T4)



(I-T4)

en la que R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

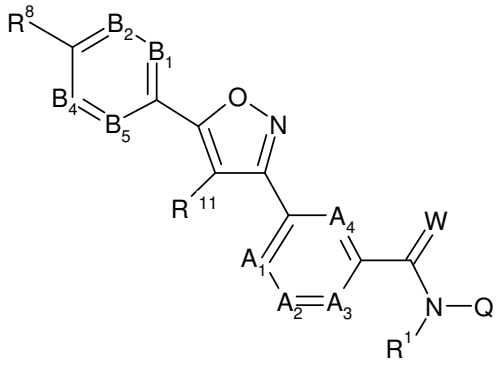
Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia''), en la que los compuestos de la fórmula (Ia") son compuestos de la fórmula (I-T22)



(I-T-22)

en la que R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (Ia''), en la que los compuestos de la fórmula (Ia") son compuestos de la fórmula (I-T23)



(I-T23)

en la que R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas y realizaciones descritos en la presente, donde R^{11} es, de modo independiente, H y W es O.

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas y realizaciones descritos en la presente, donde R^{11} es, de modo independiente, H y W es O y B_3 es C-R^8, R^8 es alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alquilo C_1-C_3 perhalogenado, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 perfluorado) o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perhalogenado, con mayor preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado).

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas y realizaciones descritos en la presente, donde los restos A_1 a A_4 y B_1 a B_5 son los siguientes:

A_1 es C-H,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4,

A_4 es C-H,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es C-H,

B_3 es CR^8,

B_4 es C-H y

B_5 es CR^{10} o N.

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas y realizaciones descritos en la presente, donde R^1 es H.

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas y realizaciones descritos en la presente, donde Q es alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor, cicloalquilo C_3-C_4, opcionalmente cicloalquilo C_3-C_4 sustituido con ciano o flúor, heterocicloalquilo C_4-C_6, 1-oxidotietan-3-ilo, 1,1-dioxidotietan-3-ilo, bencilo, piridin-2-ilmetilo, metilsulfonilo o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo.

Otra realización de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas y realizaciones descritos en la presente, donde R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 sustituido con halógeno.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde R^{11} es, de modo independiente, H.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-

alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde R^2, R^3, R^4 y R^5 son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxi C_1-C_4-imino-alquilo C_1-C_4, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino o *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde los restos A_1 a A_4 y B_1 a B_5 son los siguientes:

A_1 es C-H,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4,

A_4 es C-H,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es C-H,

B_3 es CR^8,

B_4 es C-H y

B_5 es CR^{10} o N.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde R^1 es H.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde Q es alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor o con carbonamida (–C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno),

opcionalmente cicloalquilo C_3-C_4 sustituido con ciano o flúor, heterocicloalquilo C_4-C_6, 1-oxidotietan-3-ilo, 1,1-dioxidotietan-3-ilo, bencilo, piridin-2-ilmetilo, metilsulfonilo o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde Q es 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 3,3,3-trifluoropropilo, ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopropilo, ciclobutilo, 1-cianociclopropilo, trans-2-fluorociclopropilo o cis-2-fluorociclopropilo, oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo, 1,1-dioxidotietan-3-ilo, bencilo, piridin-2-ilmetilo, metilsulfonilo o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo.

Otra realización más de la presente invención se refiere a compuestos de las fórmulas descritas en la presente, donde R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 sustituido con halógeno.

Otro aspecto se refiere a composiciones insecticidas, caracterizado por un contenido de al menos un compuesto de la fórmula (I) como se describe en la presente y un extensor y/o una sustancia tensioactiva.

Otro aspecto se refiere a un procedimiento para proteger semillas transgénicas o convencionales y la planta que surge de ellas de la infestación por plagas, caracterizado porque las semillas se tratan con al menos un compuesto de la fórmula (I) como se describe en la presente.

Otro aspecto más se refiere al uso de compuestos de la fórmula (I) como se describe en la presente o de una composición insecticida como se describe en la presente para controlar plagas.

Otro aspecto se refiere al uso de compuestos de la fórmula (I) como se describe en la presente en el control de vectores.

Otro aspecto más se refiere a semillas en las que un compuesto de la fórmula (I) como se describe en la presente se ha aplicado a las semillas como un constituyente de un recubrimiento o como otra capa u otras capas además de un recubrimiento.

Conforme a ello, otro aspecto se refiere a un procedimiento para aplicar un recubrimiento que comprende al menos un compuesto de la fórmula (I) como se describe en la presente o para aplicar un compuesto de la fórmula (I) como se describe en la presente, que se aplica a semillas como una capa u otras capas además de un recubrimiento, que comprende las etapas de a) mezcla de semillas con un material de recubrimiento que consiste o que comprende un compuesto de la fórmula (I) como se describe en la presente, b) enriquecimiento de la composición para semillas recubiertas obtenida, c) secado de la composición de semillas enriquecidas obtenida, d) desaglomeración de la composición de semillas secas obtenida.

Según la naturaleza de los sustituyentes, los compuestos de la fórmula (I) descritos en la presente pueden estar opcionalmente en forma de isómeros geométricos y/u ópticamente activos o las correspondientes mezclas isoméricas en diferentes composiciones. La invención se refiere tanto a los isómeros puros como a las mezclas isoméricas.

Los compuestos de la invención también pueden estar en forma de complejos metálicos.

Definiciones

El experto en la técnica es consciente de que, si no se establece explícitamente, las expresiones “un” o “una” como se usan en la presente

solicitud pueden significar, según la situación, “uno (1)”, “uno (1) o más” o “al menos uno (1)”.

Para todas las estructuras descritas en la presente, tales como sistemas de anillos y grupos, los átomos adyacentes no deben ser -O-O- u -O-S-.

Las estructuras que tienen una cantidad variable de posibles átomos de carbono (átomos de C) se pueden mencionar en la presente solicitud como estructuras de $C_{\text{límite inferior de átomos de carbono}}$-$C_{\text{límite superior de átomos de carbono}}$ (estructuras C_{LL}-C_{UL}), a fin de estipularlas más específicamente. Ejemplo: un grupo alquilo puede consistir en 3 a 10 átomos de carbono y en ese caso corresponde a alquilo C_3-C_{10}. Las estructuras de anillos compuestas por átomos de carbono y heteroátomos se pueden mencionar como estructuras de “de LL a UL miembros”. Un ejemplo de una estructura de anillo de 6 miembros es tolueno (una estructura de anillo de 6 miembros sustituida con un grupo metilo).

Si un término colectivo para un sustituyente, por ejemplo, alquilo (C_{LL}-C_{UL}), está al final de un sustituyente compuesto, por ejemplo, cicloalquil (C_{LL}-C_{UL})-alquilo (C_{LL}-C_{UL}), el constituyente al comienzo del sustituyente compuesto, por ejemplo, el cicloalquilo (C_{LL}-C_{UL}), puede ser mono- o polisustituido de forma igual o diferente e independientemente por el último sustituyente, por ejemplo, alquilo (C_{LL}-C_{UL}). Todos los términos colectivos usados en esta solicitud para grupos químicos, sistemas cíclicos y grupos cíclicos pueden estipularse más específicamente a través de la adición de “C_{LL}-C_{UL}” o “de LL a UL miembros”.

A menos que se defina de otro modo, la definición de términos colectivos también se aplica a estos términos colectivos en sustituyentes compuestos. Ejemplo: la definición de alquilo C_{LL}-C_{UL} también se aplica a

alquilo C_{LL}-C_{UL} como parte de un sustituyente compuesto, por ejemplo, cicloalquil C_{LL}-C_{UL}-alquilo C_{LL}-C_{UL}.

Quedará claro para el experto en la técnica que los ejemplos citados en la presente solicitud no se deberían considerar de una manera restrictiva, sino meramente describen algunas realizaciones en detalle.

En las definiciones de los símbolos dados en las fórmulas anteriores, se usaron los términos colectivos que son generalmente representativos de los siguientes sustituyentes:

El halógeno se refiere a elementos del séptimo grupo principal, con preferencia, flúor, cloro, bromo y yodo, con mayor preferencia, flúor, cloro y bromo y con mayor preferencia aún, flúor y cloro.

Ejemplos de heteroátomo son N, O, S, P, B, Si. Con preferencia, el término “heteroátomo” se refiere a N, S y O.

De acuerdo con la invención, “alquilo” –de por sí o como parte de un grupo químico– representa hidrocarburos de cadena lineal o ramificada que tienen, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono, por ejemplo, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, pentilo, 1-metilbutilo, 2-metilbutilo, 3-metilbutilo, 1,2-dimetilpropilo, 1,1-dimetilpropilo, 2,2-dimetilpropilo, 1-etilpropilo, hexilo, 1-metilpentilo, 2-metilpentilo, 3-metilpentilo, 4-metilpentilo, 1,2-dimetilpropilo, 1,3-dimetilbutilo, 1,4-dimetilbutilo, 2,3-dimetilbutilo, 1,1-dimetilbutilo, 2,2-dimetilbutilo, 3,3-dimetilbutilo, 1,1,2-trimetilpropilo, 1,2,2-trimetilpropilo, 1-etilbutilo y 2-etilbutilo. También se da preferencia a alquilos que tienen 1 a 4 átomos de carbono tales como, inter alia, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo o t-butilo. Los alquilos de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “alquenilo” –por sí mismo o como parte de un grupo químico– representa hidrocarburos de cadena lineal o ramificada que tienen, con preferencia, 2 a 6 átomos de carbono y al menos un enlace doble, por ejemplo, vinilo, 2-propenilo, 2-butenilo, 3-butenilo, 1-metil-2-propenilo, 2-metil-2-propenilo, 2-pentenilo, 3-pentenilo, 4-pentenilo, 1-metil-2-butenilo, 2-metil-2-butenilo, 3-metil-2-butenilo, 1-metil-3-butenilo, 2-metil-3-butenilo, 3-metil-3-butenilo, 1,1-dimetil-2-propenilo, 1,2-dimetil-2-propenilo, 1-etil-2-propenilo, 2-hexenilo, 3-hexenilo, 4-hexenilo, 5-hexenilo, 1-metil-2-pentenilo, 2-metil-2-pentenilo, 3-metil-2-pentenilo, 4-metil-2-pentenilo, 3-metil-3-pentenilo, 4-metil-3-pentenilo, 1-metil-4-pentenilo, 2-metil-4-pentenilo, 3-metil-4-pentenilo, 4-metil-4-pentenilo, 1,1-dimetil-2-butenilo, 1,1-dimetil-3-butenilo, 1,2-dimetil-2-butenilo, 1,2-dimetil-3-butenilo, 1,3-dimetil-2-butenilo, 2,2-dimetil-3-butenilo, 2,3-dimetil-2-butenilo, 2,3-dimetil-3-butenilo, 1-etil-2-butenilo, 1-etil-3-butenilo, 2-etil-2-butenilo, 2-etil-3-butenilo, 1,1,2-trimetil-2-propenilo, 1-etil-1-metil-2-propenilo y 1-etil-2-metil-2-propenilo. También se da preferencia a alquenilos que tienen 2 a 4 átomos de carbono tales como, inter alia, 2-propenilo, 2-butenilo o 1-metil-2-propenilo. Los alquenilos de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “alquinilo” –por sí mismo o como parte de un grupo químico– representa hidrocarburos de cadena lineal o ramificada con preferencia, que tienen 2 a 6 átomos de carbono y al menos un enlace triple, por ejemplo, 2-propinilo, 2-butinilo, 3-butinilo, 1-metil-2-propinilo, 2-pentinilo, 3-pentinilo, 4-pentinilo, 1-metil-3-butinilo, 2-metil-3-butinilo, 1-metil-2-butinilo, 1,1-dimetil-2-propinilo, 1-etil-2-propinilo, 2-

hexinilo, 3-hexinilo, 4-hexinilo, 5-hexinilo, 1-metil-2-pentinilo, 1-metil-3-pentinilo, 1-metil-4-pentinilo, 2-metil-3-pentinilo, 2-metil-4-pentinilo, 3-metil-4-pentinilo, 4-metil-2-pentinilo, 1,1-dimetil-3-butinilo, 1,2-dimetil-3-butinilo, 2,2-dimetil-3-butinilo, 1-etil-3-butinilo, 2-etil-3-butinilo, 1-etil-1-metil-2-propinilo y 2,5-hexadiinilo. También se da preferencia a alquinilos que tienen 2 a 4 átomos de carbono tales como, inter alia, etinilo, 2-propinilo o 2-butinil-2-propenilo. Los alquinilos de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “cicloalquilo” –por sí mismo o como parte de un grupo químico– representa hidrocarburos mono-, bi- o tricíclicos que tienen, con preferencia, 3 a 10 carbonos, por ejemplo, ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, cicloheptilo, ciclooctilo, biciclo[2.2.1]heptilo, biciclo[2.2.2]octilo o adamantilo. También se da preferencia a cicloalquilos que tienen 3, 4, 5, 6 ó 7 átomos de carbono tales como, inter alia, ciclopropilo o ciclobutilo. Los cicloalquilos de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “alquilcicloalquilo” representa alquilcicloalquilo mono-, bi- o tricíclico que tiene, con preferencia, 4 a 10 ó 4 a 7 átomos de carbono, por ejemplo, metilciclopropilo, etilciclopropilo, isopropilciclobutilo, 3-metilciclopentilo y 4-metilciclohexilo. También se da preferencia a alquilcicloalquilos que tienen 4, 5 ó 7 átomos de carbono tales como, inter alia, etilciclopropilo o 4-metilciclohexilo. Los alquilcicloalquilos de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “cicloalquilalquilo” representa cicloalquilalquilo mono-, bi- o tricíclico que tiene, con preferencia, 4 a 10 ó 4 a 7 átomos de carbono, por ejemplo, ciclopropilmetilo, ciclobutilmetilo, ciclopentilmetilo, ciclohexilmetilo y ciclopentiletilo. También se da preferencia a cicloalquilalquilos que tienen 4, 5 ó 7 átomos de carbono tales como, inter alia, ciclopropilmetilo o ciclobutilmetilo. Los cicloalquilalquilos de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “hidroxialquilo” representa un alcohol de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono, por ejemplo, metanol, etanol, n-propanol, isopropanol, n-butanol, isobutanol, s-butanol y t-butanol. También se da preferencia a grupos hidroxialquilo que tienen 1 a 4 átomos de carbono. Los grupos hidroxialquilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “alcoxi” representa un O-alquilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono, por ejemplo, metoxi, etoxi, n-propoxi, isopropoxi, n-butoxi, isobutoxi, s-butoxi y t-butoxi. También se da preferencia a grupos alcoxi que tienen 1 a 4 átomos de carbono. Los grupos alcoxi de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “alquilsulfanilo” representa S-alquilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono, por ejemplo, metiltio, etiltio, n-propiltio, isopropiltio, n-butiltio, isobutiltio, s-butiltio y t-butiltio. También se da preferencia a grupos alquilsulfanilo que tienen 1 a 4 átomos de carbono. Los grupos

alquilsulfanilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

Se acuerdo con la invención, “alquilsulfinilo” representa alquilsulfinilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono, por ejemplo, metilsulfinilo, etilsulfinilo, n-propilsulfinilo, isopropilsulfinilo, n-butilsulfinilo, isobutilsulfinilo, s-butilsulfinilo y t-butilsulfinilo. También se da preferencia a grupos alquilsulfinilo que tienen 1 a 4 átomos de carbono. Los grupos alquilsulfinilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “alquilsulfonilo” representa alquilsulfonilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono, por ejemplo, metilsulfonilo, etilsulfonilo, n-propilsulfonilo, isopropilsulfonilo, n-butilsulfonilo, isobutilsulfonilo, s-butilsulfonilo y t-butilsulfonilo. También se da preferencia a grupos alquilsulfonilo que tienen 1 a 4 átomos de carbono. Los grupos alquilsulfonilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “alquilcarbonilo” representa alquil-C(=O) de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 2 a 7 átomos de carbono tales como metilcarbonilo, etilcarbonilo, n-propilcarbonilo, isopropilcarbonilo, s-butilcarbonilo y t-butilcarbonilo. También se da preferencia a alquilcarbonilos que tienen 1 a 4 átomos de carbono. Los alquilcarbonilos de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, “cicloalquilcarbonilo” representa cicloalquilcarbonilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 3 a 10 átomos de carbono en el resto cicloalquilo, por

ejemplo, ciclopropilcarbonilo, ciclobutilcarbonilo, ciclopentilcarbonilo, ciclohexilcarbonilo, cicloheptilcarbonilo, ciclooctilcarbonilo, biciclo[2.2.1]heptilo, biciclo[2.2.2]octilcarbonilo y adamantilcarbonilo. También se da preferencia a cicloalquilcarbonilo que tiene 3, 5 ó 7 átomos de carbono en el resto cicloalquilo. Los grupos cicloalquilcarbonilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, "alcoxicarbonilo" –solo o como un constituyente de un grupo químico- representa alcoxicarbonilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono o que tiene 1 a 4 átomos de carbono en el resto alcoxi, por ejemplo, metoxicarbonilo, etoxicarbonilo, n-propoxicarbonilo, isopropoxicarbonilo, s-butoxicarbonilo y t-butoxicarbonilo. Los grupos alcoxicarbonilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, "alquilaminocarbonilo" representa alquilaminocarbonilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono o 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, por ejemplo, metilaminocarbonilo, etilaminocarbonilo, n-propilaminocarbonilo, isopropilaminocarbonilo, s-butilaminocarbonilo y t-butilaminocarbonilo. Los grupos alquilaminocarbonilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, "*N,N*-dialquilaminocarbonilo" representa *N,N*-dialquilaminocarbonilo de cadena lineal o ramificada que tiene, con preferencia, 1 a 6 átomos de carbono o 1 a 4 átomos de carbono en el resto alquilo, por ejemplo, *N,N*-dimetilaminocarbonilo, *N,N*-

dietilaminocarbonilo, *N,N*-di(n-propilamino)carbonilo, *N,N*-di(isopropilamino)carbonilo y *N,N*-di-(s-butilamino)carbonilo. Los grupos *N,N*-dialquilaminocarbonilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

De acuerdo con la invención, "arilo" representa un sistema aromático mono-, bi- o policíclico que tiene, con preferencia, 6 a 14, en especial 6 a 10 átomos de carbono del anillo, por ejemplo, fenilo, naftilo, antrilo, fenantrenilo, con preferencia, fenilo. Además, arilo también representa sistemas policíclicos tales como tetrahidronaftilo, indenilo, indanilo, fluorenilo, bifenilo, donde el sitio de unión está en el sistema aromático. Los grupos arilo de la invención pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

Ejemplos de arilos sustituidos son los arilalquilos, que asimismo pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes en el resto alquilo C_1-C_4 y/o arilo C_6-C_{14}. Ejemplos de tales arilalquilos incoluyen bencilo y 1-feniletilo.

De acuerdo con la invención, "heterociclo", "anillo heterocíclico" o "sistema de anillos heterocíclicos" representa un sistema de anillos carbocíclicos con al menos un anillo en el que al menos un átomo de carbono está reemplazado por un heteroátomo, con preferencia, por un heteroátomo del grupo que consiste en N, O, S, P, B, Si, Se y que es saturado, insaturado o heteroaromático y puede estar no sustituido o sustituido, donde el sitio de unión está en un átomo del anillo. A menos de que se defina de otro modo, el anillo heterocíclico contiene, con preferencia, 3 a 9 átomos del anillo, en especial 3 a 6 átomos del anillo y uno o varios, con preferencia, 1 a 4, en especial 1, 2 ó 3, heteroátomos en el anillo

heterocíclico, con preferencia, del grupo que consiste en N, O y S, a pesar de que dos átomos de oxígeno no deben ser directamente adyacentes. Los anillos heterocíclicos usualmente contienen no más de 4 átomos de nitrógeno y/o no más de 2 átomos de oxígeno y/o no más de 2 átomos de azufre. Cuando el radical heterociclilo o el anillo heterocíclico está opcionalmente sustituido, puede estar fusionado con otros anillos carbocíclicos o heterocíclicos. En el caso del heterociclilo opcionalmente sustituido, la invención también comprende sistemas policíclicos, por ejemplo, 8-azabiciclo[3.2.1]octanilo o 1-azabiciclo[2.2.1]heptilo. En el caso de heterociclilo opcionalmente sustituido, la invención también comprende sistemas esspirocíclico, por ejemplo, 1-oxa-5-azaespiro[2.3]hexilo.

Los grupos heterociclilo de la invención son, por ejemplo, piperidinilo, piperazinilo, morfolinilo, tiomorfolinilo, dihidropiranilo, tetrahidropiranilo, dioxanilo, pirrolinilo, pirrolidinilo, imidazolinilo, imidazolidinilo, tiazolidinilo, oxazolidinilo, dioxolanilo, dioxolilo, pirazolidinilo, tetrahidrofuranilo, dihidrofuranilo, oxetanilo, oxiranilo, azetidinilo, aziridinilo, oxazetidinilo, oxaziridinilo, oxazepanilo, oxazinanilo, azepanilo, oxopirrolidinilo, dioxopirrolidinilo, oxomorfolinilo, oxopiperazinilo y oxepanilo.

Son de particular significancia los heteroarilos, es decir, sistemas heteroaromáticos. De acuerdo con la invención, el término heteroarilo representa compuestos heteroaromáticos, es decir, compuestos heterocíclicos aromáticos completamente insaturados que entran bajo la definición anterior de heterociclos. Se da preferencia a anillos de 5 a 7 miembros que tienen 1 a 3, con preferencia, 1 ó 2 heteroátomos iguales o diferentes del grupo anterior. Los heteroarilos de la invención son, por ejemplo, furilo, tienilo, pirazolilo, imidazolilo, 1,2,3- y 1,2,4-triazolilo,

isoxazolilo, tiazolilo, isotiazolilo, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- y 1,2,5-oxadiazolilo, azepinilo, pirrolilo, piridilo, piridazinilo, pirimidinilo, pirazinilo, 1,3,5-, 1,2,4- y 1,2,3-triazinilo, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- y 1,2,6-oxazinilo, oxepinilo, tiepinilo, 1,2,4-triazolonilo y 1,2,4-diazepinilo. Los grupos heteroarilo de la invención también pueden estar sustituidos con uno o varios radicales iguales o diferentes.

La expresión “grupos/sustituyentes (opcionalmente) sustituidos”, tales como un radical sustituido alquilo, alquenilo, alquinilo, alcoxi, alquilsulfanilo, alquilsulfinilo, alquilsulfonilo, cicloalquilo, arilo, fenilo, bencilo, heterociclilo y heteroarilo, significa, por ejemplo, un radical sustituido derivado de una estructura de base no sustituida, donde los sustituyentes, por ejemplo, un (1) sustituyente o una pluralidad de sustituyentes, con preferencia, 1, 2, 3, 4, 5, 6 ó 7, se seleccionan de un grupo que consiste en amino, hidroxilo, halógeno, nitro, ciano, isociano, mercapto, isotiocianato, carboxilo C_1-C_4, carbonamida, SF_5, aminosulfonilo, alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alquenilo C_2-C_4, cicloalquenilo C_3-C_4, alquinilo C_2-C_4, *N*-mono-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, *N*-C_1-C_4-alcanoilamino, alcoxi C_1-C_4, alquenil C_2-C_4-oxi, alquinil C_2-C_4-oxi, cicloalcoxi C_3-C_4, cicloalquenil C_3-C_4-oxi, alcoxi C_1-C_4-carbonilo, alquenil C_2-C_4-oxicarbonilo C_2-C_4, alquinil C_2-C_4-oxicarbonilo, aril C_6-,C_{10}-,C_{14}-oxicarbonilo, alcanoílo C_1-C_4, alquenil C_2-C_4-carbonilo, alquinil C_2-C_4-carbonilo, aril C_6-,C_{10}-,C_{14}-carbonilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, cicloalquil C_3-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-tio, alquenil C_2-C_4-tio, cicloalquenil C_3-C_4-tio, alquinil C_2-C_4-tio, alquil C_1-C_4-sulfenilo y alquil C_1-C_4-sulfinilo, incluyendo ambos enantiómeros del grupo alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-mono-alquil C_1-C_4-aminosulfonilo, *N,N*-di-

alquil C_1-C_4-aminosulfonilo, alquil C_1-C_4-fosfinilo, alquil C_1-C_4-fosfonilo, incluyendo ambos enantiómeros de alquil C_1-C_4-fosfinilo y alquil C_1-C_4-fosfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-aminocarbonilo, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-aminocarbonilo, N-alcanoil C_1-C_4-aminocarbonilo, N-alcanoil C_1-C_4-N-alquil C_1-C_4-aminocarbonilo, arilo C_6-,C_{10}-,C_{14}, aril C_6-,C_{10}-,C_{14}-oxi, bencilo, benciloxi, benciltio, aril C_6-,C_{10}-,C_{14}-tio, aril C_6-,C_{10}-,C_{14}-lamino, bencilamino, heterociclilo y trialquilsililo, sustituyentes ligados por medio de un enlace doble, tales como alquilideno C_1-C_4 (por ejemplo, metilideno o etilideno), un grupo oxo, un grupo tioxo, un grupo imino y un grupo imino sustituido. Cuando dos o más radicales forman uno o varios anillos, pueden ser carbocíclicos, heterocíclicos, saturados, parcialmente saturados, insaturados, por ejemplo, incluyendo anillos aromáticos y con posterior sustitución.

Los sustituyentes mencionados a modo de ejemplo ("primer nivel de sustituyente") pueden tener opcionalmente, si contienen componentes hidrocarbonáceos, otra sustitución dentro ("segundo nivel de sustituyente"), por ejemplo, por uno o varios de los sustituyentes seleccionados cada uno, de modo independiente, de halógeno, hidroxilo, amino, nitro, ciano, isociano, azido, acilamino, un grupo oxo y un grupo imino. La expresión grupo "(opcionalmente) sustituido" comprende, con preferencia, justamente uno o dos niveles de sustituyente.

Los grupos químicos sustituidos con halógeno o los grupos halogenados de la invención (por ejemplo, alquilo o alcoxi) están mono- o polisustituidos con halógeno hasta la cantidad máxima posible de sustituyentes. Tales grupos también se mencionan como grupos halo (por ejemplo, haloalquilo). En el caso de polisustitución por halógeno, los

átomos de halógeno pueden ser iguales o diferentes y pueden estar todos ligados con un átomo de carbono o pueden estar ligados con una pluralidad de átomos de carbono. Halógeno es, en especial flúor, cloro, bromo o yodo, con preferencia, flúor, cloro o bromo y con mayor preferencia, flúor. Más en particular, los grupos sustituidos con halógeno son monohalocicloalquilo tales como 1-fluorociclopropilo, 2-fluorociclopropilo o 1-fluorociclobutilo, monohaloalquilo tales como 2-cloroetilo, 2-fluoroetilo, 1-cloroetilo, 1-fluoroetilo, clorometilo o fluorometilo; perhaloalquilo tales como triclorometilo o trifluorometilo o CF_2CF_3, polihaloalquilo tales como difluorometilo, 2-fluoro-2-cloroetilo, diclorometilo, 1,1,2,2-tetrafluoroetilo o 2,2,2-trifluoroetilo. Otros ejemplos de haloalquilos son triclorometilo, clorodifluorometilo, diclorofluorometilo, clorometilo, bromometilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, pentafluoroetilo, 3,3,3-trifluoropropilo y pentafluoro-t-butilo. Se da preferencia a haloalquilos que tienen 1 a 4 átomos de carbono y 1 a 9, con preferencia, 1 a 5, átomos de halógeno iguales o diferentes seleccionados de flúor, cloro y bromo. Se da particular preferencia a haloalquilos que tienen 1 ó 2 átomos de carbono y 1 a 5 átomos de halógeno iguales o diferentes seleccionados de flúor y cloro, tales como, inter alia, difluorometilo, trifluorometilo o 2,2-difluoroetilo. Otros ejemplos de compuestos sustituidos con halógeno son haloalcoxi tales como OCF_3, $OCHF_2$, OCH_2F, OCF_2CF_3, OCH_2CF_3, OCH_2CHF_2 y OCH_2CH_2Cl, haloalquilsulfanilos tales como difluorometiltio, trifluorometiltio, triclorometiltio, clorodifluorometiltio, 1-fluoroetiltio, 2-fluoroetiltio, 2,2-difluoroetiltio, 1,1,2,2-tetrafluoroetiltio, 2,2,2-trifluoroetiltio o 2-cloro-1,1,2-

trifluoroetiltio, haloalquilsulfinilos tales como difluorometilsulfinilo, trifluorometilsulfinilo, triclorometilsulfinilo, clorodifluorometilsulfinilo, 1-fluoroetilsulfinilo, 2-fluoroetilsulfinilo, 2,2-difluoroetilsulfinilo, 1,1,2,2-tetrafluoroetilsulfinilo, 2,2,2-trifluoroetilsulfinilo y 2-cloro-1,1,2-trifluoroetilsulfinilo, haloalquilsulfinilos tales como difluorometilsulfinilo, trifluorometilsulfinilo, triclorometilsulfinilo, clorodifluorometilsulfinilo, 1-fluoroetilsulfinilo, 2-fluoroetilsulfinilo, 2,2-difluoroetilsulfinilo, 1,1,2,2-tetrafluoroetilsulfinilo, 2,2,2-trifluoroetilsulfinilo y 2-cloro-1,1,2-trifluoroetilsulfinilo, grupos haloalquilsulfonilo tales como difluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfonilo, triclorometilsulfonilo, clorodifluorometilsulfonilo, 1-fluoroetilsulfonilo, 2-fluoroetilsulfonilo, 2,2-difluoroetilsulfonilo, 1,1,2,2-tetrafluoroetilsulfonilo, 2,2,2-trifluoroetilsulfonilo y 2-cloro-1,1,2-trifluoroetilsulfonilo.

En el caso de radicales que tienen átomos de carbono, se da preferencia a aquellos que tienen 1 a 4 átomos de carbono, en especial 1 ó 2 átomos de carbono. En general, se da preferencia a los sustituyentes del grupo de halógeno, por ejemplo, flúor y cloro, alquilo (C_1-C_4), con preferencia, metilo o etilo, haloalquilo (C_1-C_4), con preferencia, trifluorometilo, alcoxi (C_1-C_4), con preferencia, metoxi o etoxi, haloalcoxi (C_1-C_4), nitro y ciano. Se da particular preferencia aquí a los sustituyentes metilo, metoxi, flúor y cloro.

El amino sustituido como amino mono- o disustituido significa un radical del grupo de los radicales amino sustituidos que están N-sustituidos, por ejemplo, por uno o dos radicales iguales o diferentes del grupo de alquilo, hidroxi, amino, alcoxi, acilo y arilo; con preferencia, *N*-mono- y *N,N*-dialquilamino, (por ejemplo, metilamino, etilamino, *N,N*-dimetilamino, *N,N*-

dietilamino, *N,N*-di-n-propilamino, *N,N*-diisopropilamino o *N,N*-dibutilamino), grupos *N*-mono- o *N,N*-dialcoxialquilamino (por ejemplo, *N*-metoximatilamino, *N*-metoxietilamino, *N,N*-di(metoximatil)amino o *N,N*-di(metoxietil)amino), *N*-mono- y *N,N*-diarilamino, tales como anilinas opcionalmente sustituidas, acilamino, *N,N*-diacilamino, *N*-alquil-*N*-arilamino, *N*-alquil-*N*-acilamino y también *N*-heterociclos saturados; se da preferencia aquí a radicales alquilo que tienen 1 a 4 átomos de carbono; aquí, arilo es, con preferencia, fenilo o fenilo sustituido; para acilo, la definición dada más abajo se aplica, con preferencia, a alcanoílo (C_1-C_4). Lo mismo se aplica a hidroxilamino sustituido o hidrazino.

De acuerdo con la invención, la expresión “grupos amino cíclicos” comprende sistemas de anillo heteroaromáticos o alifáticos que tienen uno o varios átomos de nitrógeno. Los heterociclos son saturados o insaturados, consisten en uno o varios sistemas de anillos opcionalmente fusionados y opcionalmente contienen otros heteroátomos, por ejemplo, uno o dos átomos de nitrógeno, oxígeno y/o átomos de azufre. Además, el término también comprende grupos que tienen un anillo espiro o un sistema de anillos en puente. La cantidad de átomos que forman el grupo amino cíclico no está limitada y puede consistir, por ejemplo, en el caso de un sistema de un anillo de 3 a 8 átomos del anillo y en el caso de un sistema de dos anillos, de 7 a 11 átomos.

Ejemplos de grupos amino cíclicos que tienen grupos monocíclicos saturados e insaturados que tienen un átomo de nitrógeno como heteroátomo incluyen 1-azetidinilo, pirrolidino, 2-pirrolidin-1-ilo, 1-pirrolilo, piperidino, 1,4-dihidropirazin-1-ilo, 1,2,5,6-tetrahidropirazin-1-ilo, 1,4-dihidropiridin-1-ilo, 1,2,5,6-tetrahidropiridin-1-ilo, homopiperidinilo;

ejemplos de grupos amino cíclicos que tienen grupos monocíclicos saturados e insaturados que tienen dos o más átomos de nitrógeno como heteroátomos incluyen 1-imidazolidinilo, 1-imidazolilo, 1-pirazolilo, 1-triazolilo, 1-tetrazolilo, 1-piperazinilo, 1-homopiperazinilo, 1,2-dihidropiperazin-1-ilo, 1,2-dihidropirimidin-1-ilo, perhidropirimidin-1-ilo, 1,4-diazacicloheptan-1-ilo; ejemplos de grupos amino cíclicos que tienen grupos monocíclicos saturados e insaturados que tienen uno o dos átomos de oxígeno y uno a tres átomos de nitrógeno como heteroátomos, por ejemplo, oxazolidin-3-ilo, 2,3-dihidroisoxazol-2-ilo, isoxazol-2-ilo, 1,2,3-oxadiazin-2-ilo, morfolino, ejemplos de grupos amino cíclicos que tienen grupos monocíclicos saturados e insaturados que tienen uno a tres átomos de nitrógeno y uno a dos átomos de azufre como heteroátomos incluyen tiazolidin-3-ilo, isotiazolin-2-ilo, tiomorfolino o dioxotiomorfolino; ejemplos de grupos amino cíclicos que tienen grupos cíclicos fusionados saturados e insaturados incluyen indol-1-ilo, 1,2-dihidrobenzimidazol-1-ilo, perhidropirrolo[1,2-a]pirazin-2-ilo; ejemplos de grupos amino cíclicos que tienen grupos espirocíclicos incluyen 2-azaespiro[4,5]decan-2-ilo; ejemplos de grupos amino cíclicos que tienen grupos heterocíclico en puente incluyen 2-azabiciclo[2.2.1]heptan-7-ilo.

Amino sustituido también incluye compuestos de amonio cuaternario (sales) que tienen cuatro sustituyentes orgánicos en el átomo de nitrógeno.

Fenilo opcionalmente sustituido es, con preferencia, fenilo que no está sustituido o que está mono- o polisustituido, con preferencia, hasta trisustituido, con radicales iguales o diferentes del grupo de halógeno, alquilo (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4)-alcoxi (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4)-

alquilo (C_1-C_4), haloalquilo (C_1-C_4), haloalcoxi (C_1-C_4), alquil (C_1-C_4)-sulfanilo, haloalquil (C_1-C_4)-sulfanilo, ciano, isociano y nitro, por ejemplo, o-, m- y p-tolilo, dimetilfenilos, 2-, 3- y 4-clorofenilo, 2-, 3- y 4-fluorofenilo, 2-, 3- y 4-trifluorometil- y -triclorometilfenilo, 2,4-, 3,5-, 2,5- y 2,3-diclorofenilo, o-, m- y p-metoxifenilo, 4-heptafluorofenilo.

Cicloalquilo opcionalmente sustituido es, con preferencia, cicloalquilo que no está sustituido o que está mono- o polisustituido, con preferencia, hasta trisustituido, con radicales iguales o diferentes del grupo de halógeno, ciano, alquilo (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4)-alcoxi (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4)-alquilo (C_1-C_4), haloalquilo (C_1-C_4) y haloalcoxi (C_1-C_4), en especial con uno o dos radicales alquilo (C_1-C_4).

Heterociclilo opcionalmente sustituido es, con preferencia, heterociclilo que no está sustituido o que está mono- o polisustituido, con preferencia, hasta trisustituido, con radicales iguales o diferentes del grupo de halógeno, ciano, alquilo (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4)-alcoxi (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4)-alquilo (C_1-C_4), haloalquilo (C_1-C_4), haloalcoxi (C_1-C_4), nitro y oxo, en especial mono- o polisustituido con radicales del grupo de halógeno, alquilo (C_1-C_4), alcoxi (C_1-C_4), haloalquilo (C_1-C_4) y oxo, con máxima preferencia, sustituido con uno o dos radicales alquilo (C_1-C_4).

Ejemplos de heteroarilos sustituidos con alquilo son furilmetilo, tienilmetilo, pirazolilmetilo, imidazolilmetilo, 1,2,3- y 1,2,4-triazolilmetilo, isoxazolilmetilo, tiazolilmetilo, isotiazolilmetilo, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- y 1,2,5-oxadiazolilmetilo, azepinilmetilo, pirrolilmetilo, piridilmetilo, piridazinilmetilo, pirimidinilmetilo, pirazinilmetilo, 1,3,5-, 1,2,4- y 1,2,3-triazinilmetilo, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- y 1,2,6-oxazinilmetilo, oxepinilmetilo, tiepinilmetilo y 1,2,4-diazepinilmetilo.

Los compuestos de la invención se pueden producir en realizaciones preferidas. Las realizaciones individuales descritas en la presente pueden combinarse entre sí. No están incluidas las combinaciones que lesionan las leyes naturales y que el experto en la técnica descartará sobre la base de su conocimiento experto. Las estructuras de anillo que tienen tres o más átomos de oxígeno adyacentes, por ejemplo, están excluidas.

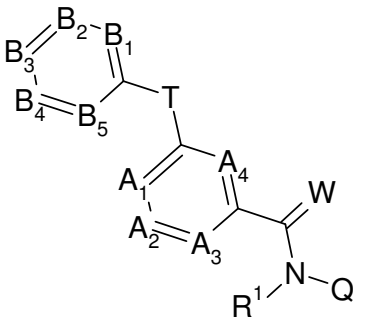
Realizaciones de los compuestos de la invención

Será obvio para el experto en la técnica que todas las realizaciones puedan estar presentes solas o en combinación.

Los compuestos de la fórmula (I), en especial compuestos de las fórmulas (Ia), (Ib), (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22) y (I-T23), pueden estar, de ser apropiado, según la naturaleza de los sustituyentes, en forma de sales, tautómeros, isómeros geométricos y/u ópticamente activos o las correspondientes mezclas isoméricas en diferentes composiciones.

De ser apropiado, los compuestos de la invención pueden estar en diversas formas polimórficas o en la forma de una mezcla de diferentes formas polimórficas. Tanto los polimorfos puros como las mezclas polimórficas forman parte del objeto de la invención y se pueden usar de acuerdo con la invención.

Las realizaciones de los compuestos de la fórmula (I) se describen en detalle a continuación:



(I)

en la que

R^1 es H, en cada caso opcionalmente sustituido alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_7, alquil C_1-C_6-carbonilo, alcoxi C_1-C_6-carbonilo, aril-alquilo (C_1-C_3), heteroaril-alquilo (C_1-C_3) o es alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, con preferencia, alquilo C_1-C_2, con máxima preferencia, metilo,

los siguientes restos son los siguientes:

A_1 es CR^2 o N,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4 o N,

A_4 es CR^5 o N,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es CR^7 o N,

B_3 es CR^8 o N,

B_4 es CR^9 o N, y

B_5 es CR^{10} o N,

pero no más de tres de los restos A_1 a A_4 son N y no más de tres de los restos B_1 a B_5 son simultáneamente N;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-

alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino o *N*-alcoxi C_1-C_3-alquil C_1-C_4-amino o 1-pirrolidinilo;

si ninguno de los restos A_2 y A_3 es N, R^3 y R^4, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 5 ó 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de nitrógeno y/o 0 ó 1 átomo de oxígeno y/o 0 ó 1 átomo de azufre o

si ninguno de los restos A_1 y A_2 es N, R^2 y R^3, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de nitrógeno;

R^8 es halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino o *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino;

W es O o S;

Q es H, formilo, hidroxilo, amino o en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, heterocicloalquilo C_1-C_5, alcoxi C_1-C_4, alquil C_1-C_6-cicloalquilo C_3-C_6, cicloalquil C_3-C_6-alquilo C_1-C_6, arilo C_6-,C_{10}-C_{14}, heteroarilo C_1-C_5, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aril-alquilo C_1-C_3, heteroaril C_1-C_5-alquilo C_1-C_3, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N*-alquil C_1-C_4-carbonilamino o *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino; o

es un carbociclo de 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido; o

es un anillo heterocíclico de 4, 5 ó 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido, donde

V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C1-C6, alquenilo C_1-C_4, alquinilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo o *N,N*-di-(alquil C_1-C_6)amino;

T es un sistema heteroaromático de 5 miembros opcionalmente sustituido que contiene no más de 2 heteroátomos, tales como cuatro átomos de carbono y un (1) heteroátomo, con preferencia, un (1) átomo de nitrógeno, un (1) átomo de oxígeno o un (1) átomo de azufre o tres átomos de carbono y dos heteroátomos, con preferencia, dos átomos de nitrógeno, un (1) átomo de nitrógeno y un (1) átomo de oxígeno o un (1) átomo de nitrógeno y un (1) átomo de azufre,

así como sus sales, N-óxidos y formas tautoméricas de los compuestos de la fórmula (I).

R^1

En una realización preferida, R^1 en un compuesto de la fórmula (I) es H, en cada caso opcionalmente sustituido metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, metoximatilo, etoximatilo, propoximatilo, metilcarbonilo, etilcarbonilo, n-propilcarbonilo, isopropilcarbonilo, s-butilcarbonilo, t-butilcarbonilo, metoxicarbonilo, etoxicarbonilo, n-propoxicarbonilo, isopropoxicarbonilo, s-butoxicarbonilo, t-butoxicarbonilo, cianometilo, 2-cianoetilo, bencilo, 4-metoxibencilo, pirid-2-ilmetilo, pirid-3-ilmetilo, pirid-4-ilmetilo, 4-cloropirid-3-ilmetilo, con máxima preferencia, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo.

En una realización de mayor preferencia aún, R^1 es H.

W

En otra realización preferida, W es O.

Q

En otra realización preferida, Q es H, en cada caso opcionalmente sustituido metilo, etilo, n-propilo, 1-metiletilo, 1,1-dimetiletilo, 1-metilpropilo, n-butilo, 2-metilpropilo, 2-metilbutilo, hidroximatilo, 2-hidroxipropilo, cianometilo, 2-cianoetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1-trifluorometiletilo, 2,2-difluoropropilo, 3,3,3-trifluoropropilo, 2,2-dimetil-3-fluoropropilo, ciclopropilo, 1-cianociclopropilo, 1-metoxicarbonilciclopropilo, 1-(*N*-metilcarbamoil)ciclopropilo, 1-(*N*-ciclopropilcarbamoil)ciclopropilo, 1-(tiocarbamoil)ciclopropilo, ciclopropilmetilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, 1-ciclopropiletilo, bis(ciclopropil)metilo, 2,2-dimetilciclopropilmetilo, 2-fenilciclopropilo, 2,2-diclorociclopropilo, trans-2-clorociclopropilo, cis-2-clorociclopropilo, 2,2-difluorociclopropilo, trans-2-fluorociclopropilo, cis-2-fluorociclopropilo, trans-4-hidroxiciclohexilo, 4-trifluorometilciclohexilo, prop-2-enilo, 2-metilprop-2-enilo, prop-2-inilo, 1,1-dimetilbut-2-inilo, 3-cloroprop-2-enilo, 3,3-dicloroprop-2-enilo, 3,3-dicloro-1,1-dimetilprop-2-enilo, fenilo, 2-clorofenilo, 3-clorofenilo, 4-clorofenilo, oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo, 1,1-dioxidotietan-3-ilo, isoxazol-3-ilmetilo, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, 1,2,4-triazol-3-ilmetilo, 3-metiloxetan-3-ilmetilo, bencilo, 2,6-difluorofenilmetilo, 3-fluorofenilmetilo, 2-fluorofenilmetilo, 2,5-difluorofenilmetilo, 1-feniletilo, 4-clorofeniletilo, 2-trifluorometilfeniletilo, 1-piridin-2-iletilo, piridin-2-ilmetilo, 5-fluoropiridin-2-ilmetilo, (6-cloropiridin-3-il)metilo, pirimidin-2-ilmetilo, metoxi, 2-etoxietilo, 2-(metilsulfanil)etilo, 1-

metil-2-(etilsulfanil)etilo, 2-metil-1-(metilsulfanil)propan-2-ilo, metoxicarbonilo, metoxicarbonilmetilo, NH_2, *N*-etilamino, *N*-allilamino, *N*,*N*-dimetilamino, *N*,*N*-dietilamino; o

Q es uno de los siguientes, cada uno sustituido con 0-4 sustituyentes V: fenilo, naftilo, piridazina, pirazina, pirimidina, triazina, piridina, pirazol, tiazol, isotiazol, oxazol, isoxazol, triazol, imidazol, furano, tiofeno, pirrol, oxadiazol, tiadiazol, donde

V es, de modo independiente, F, Cl, Br, I, ciano, nitro, metilo, etilo, difluorometilo, triclorometilo, clorodifluorometilo, diclorofluorometilo, trifluorometilo, clorometilo, bromometilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 1-cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, 1,1-difluoroetilo, pentafluoroetilo, heptafluoro-n-propilo, heptafluoroisopropilo, nonafluoro-n-butilo, ciclopropilo, ciclobutilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, 1-metiletoxi, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, *N*-metoxiiminometilo, 1-(*N*-metoxiimino)etilo, metilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo, trifluorometilsulfanilo, *N*,*N*-dimetilamino.

En otra realización preferida, Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo. Con preferencia, Q es alquilo C_1-C_3

sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (–C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno. Con mayor preferencia, Q es alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida (–C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo.

En una realización de mayor preferencia, Q es alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor tales como 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 3,3,3-trifluoropropilo; cicloalquilo C_3-C_4 tales como ciclopropilo o ciclobutilo; cicloalquilo C_3-C_4 opcionalmente sustituido tales como 1-trifluorometilciclopropilo, 1-ter-butilciclopropilo, 1-tiocarbamoilciclopropilo, 1-cianociclopropilo, trans-2-fluorociclopropilo, cis-2-fluorociclopropilo; heterocicloalquilo C_4-C_6 tales como oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo o 1,1-dioxidotietan-3-ilo; bencilo; piridin-2-ilmetilo; metilsulfonilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo.

En realización de particular preferencia, Q es alquilo C_1-C_3 sustituido con flúor tales como 2,2,2-trifluoroetilo o 3,3,3-trifluoropropilo; ciclopropilo; ciclopropilo opcionalmente sustituido tales como 1-cianociclopropilo o 1-trifluorometilciclopropilo, tietan-3-ilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetil)aminoetilo.

A1 a A4

En una realización preferida, no más de un (1) resto A_1 a A_4 es N (en otras palabras: un (1) A_1 a A_4 (con preferencia, A_2) es N); o no (0) A_1 a A_4 es N (en otras palabras: A_1 a A_4 son cada uno CR^2, CR^3, CR^4 y CR^5); o uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

En otra realización preferida, R^2, R^3, R^4 y R^5 (si el correspondiente resto A es CR) en un compuesto de la fórmula (I) son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxi C_1-C_4-imino-alquilo C_1-C_4, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino o *N*-alcoxi C_1-C_3-alquil C_1-C_4-amino o 1-pirrolidinilo.

En otra realización preferida, R^2 y R^5 son cada uno, de modo independiente, H, metilo, F y Cl.

En otra realización preferida, R^3 y R^4 son cada uno, de modo independiente, H, F, Cl, Br, I, ciano, nitro, metilo, etilo, fluorometilo, difluorometilo, clorodifluorometilo, trifluorometilo, 2,2,2-trifluoroetilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, 1-metiletoxi, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, N-metoxiiminometilo, 1-(N-

metoxiimino)etilo, metilsulfanilo, trifluorometilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo.

B1 a B5

En una realización preferida, no más de un (1) resto B_1 a B_5 es N (en otras palabras: un (1) B_1 a B_5 es N); o ninguno (0) B_1 a B_5 es N (B_1 a B_5 son cada uno CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 y CR^{10}).

En otra realización preferida, R^6, R^7, R^9 y R^{10} (si el correspondiente resto B es CR) son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino.

En otra realización preferida, R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, metilo, etilo, fluorometilo, difluorometilo, clorodifluorometilo, trifluorometilo, 2,2,2-trifluoroetilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, 1-metiletoxi, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, N-metoxiiminometilo, 1-(N-metoxiimino)etilo, metilsulfanilo, trifluorometilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno (en especial cloro, bromo, flúor), ciano, nitro, metilo, etilo, difluorometilo, clorodifluorometilo, trifluorometilo, metoxi, etoxi, 1-metiletoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, metilsulfanilo,

trifluorometilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son los sustituyentes descritos en la presente, pero R^6 y R^{10} en un compuesto no son ambos H. En otras palabras, cuando R^6 en un compuesto es H, R^{10} es uno de los otros sustituyentes descritos en la presente y viceversa.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, Cl, Br o F), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 y alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno halógeno (tales como Cl, Br o F), son cada uno alquilo C_1-C_3 o son cada uno alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, por ejemplo, peralquilo C_1-C_3 fluorado (perfluorometilo, perfluoroetilo o perfluoropropilo).

En otra realización preferida, R^6 es peralquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, perfluorometilo) y R^{10} es Cl, Br o F, con mayor preferencia, Cl o Br.

R8

En realización de particular preferencia, B_3 es C-R^8 en la que R^8 es halógeno, ciano, nitro, alquilo C_1-C_4 sustituido con halógeno, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxi C_1-C_4-imino-alquilo C_1-C_4, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino o *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino.

En otra realización preferida, R^8 es halógeno tales como flúor, cloro, bromo, yodo o alquilo C_1-C_4 sustituido con halógeno, ciano, nitro, metilo, etilo, difluorometilo, triclorometilo, clorodifluorometilo, diclorofluorometilo, trifluorometilo, clorometilo, bromometilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-

difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 1-cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, 1,1-difluoroetilo, pentafluoroetilo, pentafluoro-ter-butilo, heptafluoro-n-propilo, heptafluoroisopropilo, nonafluoro-n-butilo, nonafluoro-sec-butilo, ciclopropilo, ciclobutilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, 1-metiletoxi, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, *N*-metoxiiminometilo, 1-(*N*-metoxiimino)etilo, metilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo, trifluorometilsulfanilo, *N*,*N*-dimetilamino.

En una realización de mayor preferencia, R^8 es difluorometilo, triclorometilo, clorodifluorometilo, diclorofluorometilo, trifluorometilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 1-cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, 1,1-difluoroetilo, pentafluoroetilo, pentafluoro-ter-butilo, heptafluoro-n-propilo, heptafluoroisopropilo, nonafluoro-n-butilo, nonafluoro-sec-butilo, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo, trifluorometilsulfanilo.

En otra realización de mayor preferencia, R^8 es alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)) o alcoxi sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)).

En realización de particular preferencia, R^8 es peralquilo C_1-C_3 fluorado tales como n- o i-propilo perfluorado (-C_3F_7), etilo perfluorado (C_2F_5) o

metilo perfluorado (CF_3), con mayor preferencia, n- o i-propilo perfluorado ($-C_3F_7$) o metilo perfluorado.

A y B

En otra realización preferida, los restos A_1 a A_4 y B_1 a B_5 en compuestos de la fórmula (I) son los siguientes:

A_1 es C-H,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4,

A_4 es CR^5 o N,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es CR^7,

B_3 es CR^8,

B_4 es CR^9 y

B_5 es CR^{10} o N.

En una realización de mayor preferencia aún, los restos A_1 a A_4 y B_1 a B_5 en los compuestos de la fórmula (I) son los siguientes:

A_1 es C-H,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4,

A_4 es C-H,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es C-H,

B_3 es CR^8,

B_4 es C-H y

B_5 es CR^{10} o N.

En una realización de mayor preferencia aún, los restos A_1 a A_4 y B_1 a B_5 en los compuestos de la fórmula (I) son los siguientes:

A_1 es C-H,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4,

A_4 es C-H o N,

B_1 es CR^6,

B_2 es C-H,

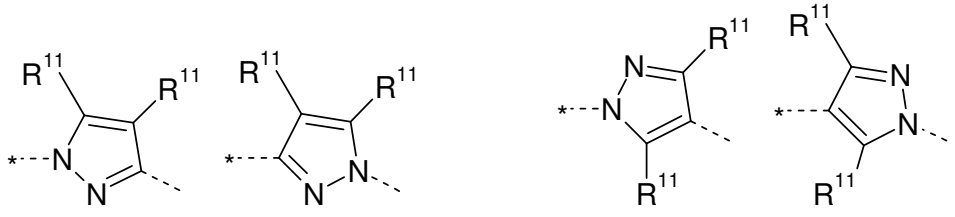
B_3 es CR^8,

B_4 es C-H y

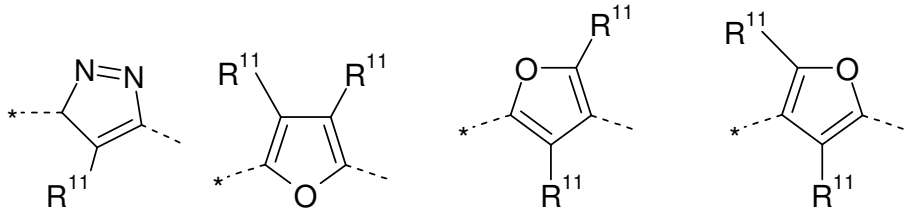
B_5 es CR^{10} o N.

T

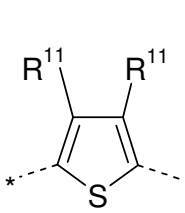
En otra realización preferida, T es uno de los sistemas heteroaromáticos de 5 miembros mostrados más abajo, donde el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-B_1-B_5) se identifica con un enlace punteado marcado con un asterisco y el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) por un enlace punteado.



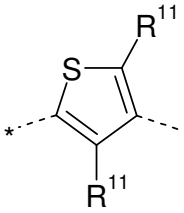
T1 T2 T3 T4



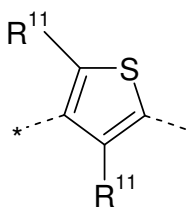
T5 T8 T9 T10



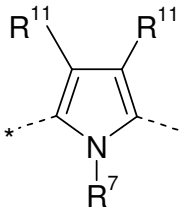
T11



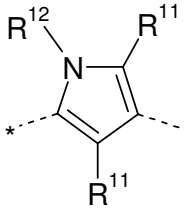
T12



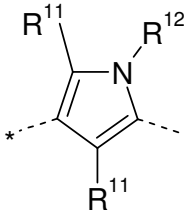
T13



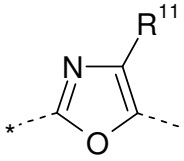
T14



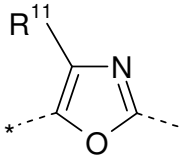
T15



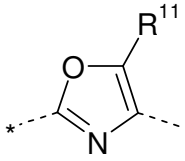
T16



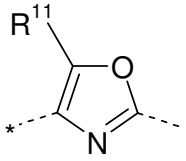
T18



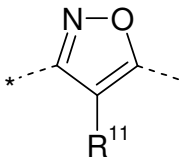
T19



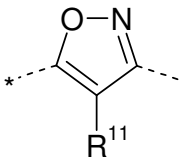
T20



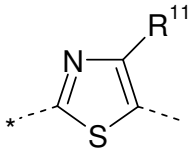
T21



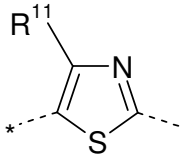
T22



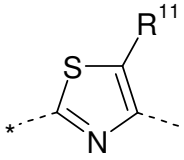
T23



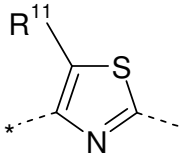
T24



T25



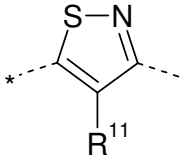
T26



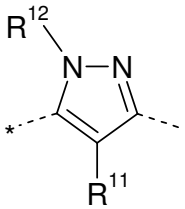
T27



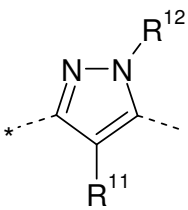
T28



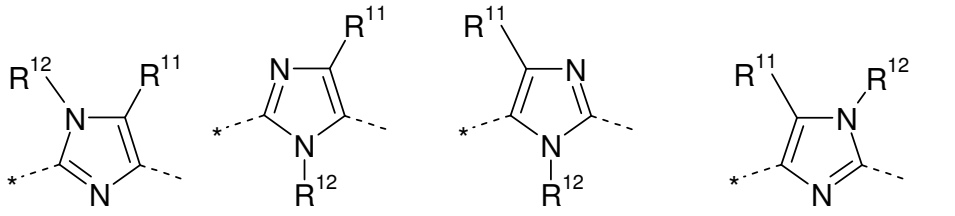
T29



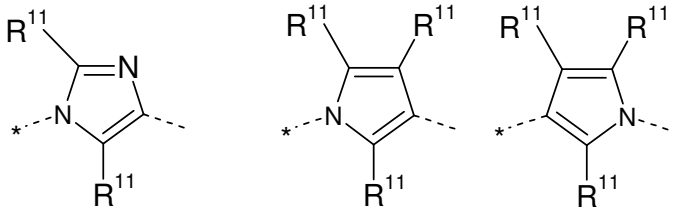
T30



T31



T32 T33 T34 T35



T45 T46 T47

donde

R^{11} es, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, amino o un alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, alquil C_1-C_6-oxi, alquil C_1-C_6-carbonilo, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, con preferencia, H; y

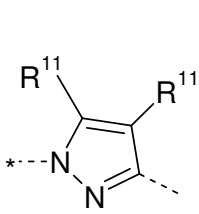
R^{12} es H, halógeno, ciano, nitro, amino o un alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, alquil C_1-C_6-oxi, alquil C_1-C_6-carbonilo, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, con preferencia, H o metilo.

En otra realización preferida, R^{11} es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, amino, metilo, etilo, 1-metiletilo, ter-butilo, trifluorometilo, difluorometilo, metoxi, etoxi, trifluorometoxi, 2,2-difluoroetoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, metilcarbonilo, etilcarbonilo, trifluorometilcarbonilo,

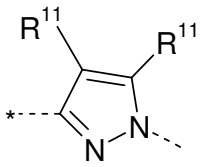
metilsulfanilo, metilsulfinilo, metilsulfonilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfanilo o trifluorometilsulfinilo.

En una realización de mayor preferencia, R^{11} es, de modo independiente, H, metilo, etilo, 2-metiletilo, 2,2-dimetiletilo, flúor, cloro, bromo, yodo, nitro, trifluorometilo o amino.

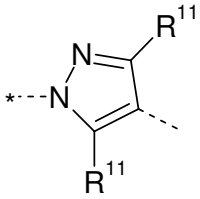
En otra realización preferida, T es uno de los sistemas heteroaromáticos de 5 miembros mostrados más abajo, donde el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-B_1-B_5) se identifica con un enlace punteado marcado con un asterisco y el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) por un enlace punteado.



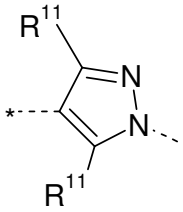
T1



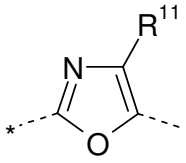
T2



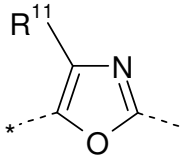
T3



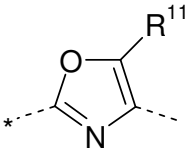
T4



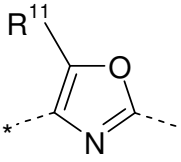
T18



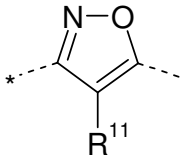
T19



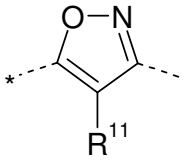
T20



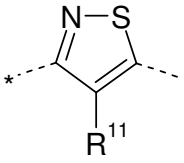
T21



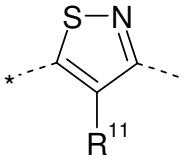
T22



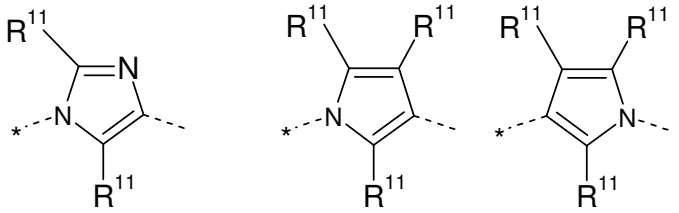
T23



T28



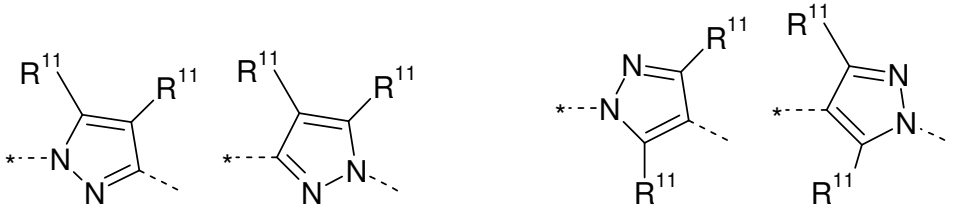
T29



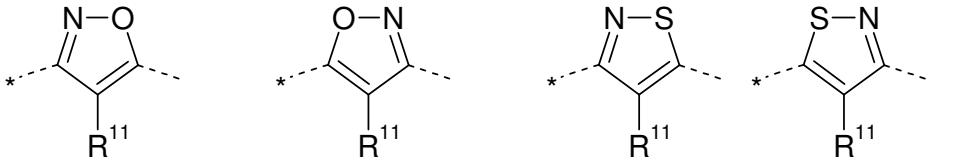
T45 T46 T47

donde R^{11} se define, de modo independiente, como se describe en la presente.

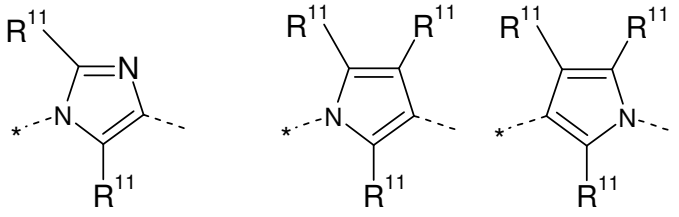
En una realización de mayor preferencia, T es uno de los sistemas heteroaromáticos de 5 miembros mostrados más abajo, donde el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-B_1-B_5) se identifica con un enlace punteado marcado con un asterisco y el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) por un enlace punteado.



T1 T2 T3 T4



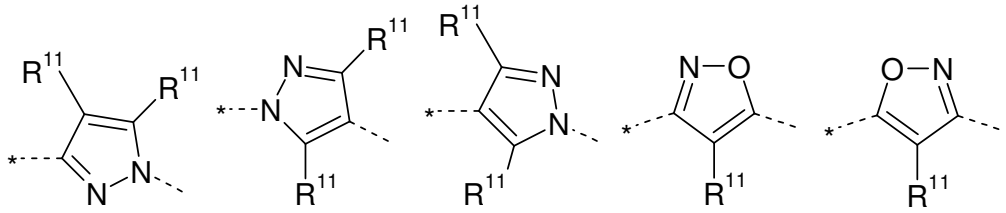
T22 T23 T28 T29



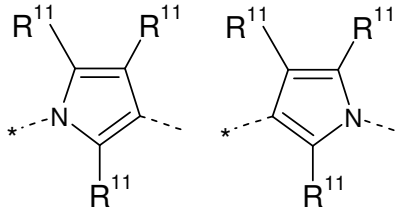
T45 T46 T47

donde R^{11} se define como se describe en la presente y n tiene los valores de 1 ó 2.

En realización de particular preferencia, T es uno de los sistemas heteroaromáticos de 5 miembros mostrados más abajo, donde el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-B_1-B_5) se identifica con un enlace punteado marcado con un asterisco y el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) por un enlace punteado.



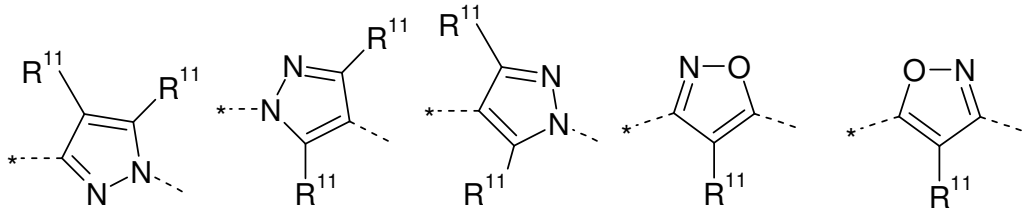
T2 T3 T4 T22 T23



T46 T47

donde R^{11} se define, de modo independiente, como se describe en la presente.

En otra realización de particular preferencia, T es uno de los sistemas heteroaromáticos de 5 miembros mostrados más abajo, donde el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-B_1-B_5) se identifica con un enlace punteado marcado con un asterisco y el enlace con el átomo de carbono del sistema de anillos (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4) por un enlace punteado.



T2 T3 T4 T22 T23

donde R^{11} se define, de modo independiente, como se describe en la presente.

En una realización de mayor preferencia aún, en la fórmula (I) y las otras formas generales detalladas en la presente,

A_1 es C-R^2 o N, con preferencia, C-R^2,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4,

A_4 es C-R^5 o N,

B_1 es CR^6,

B_2 es C-H,

B_3 es CR^8,

B_4 es C-H,

B_5 es CR^{10} o N,

R^1 es hidrógeno,

R^2 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, flúor o cloro, con preferencia, H,

R^3 es hidrógeno o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)),

R^4 es hidrógeno, cloro, flúor, alquilo C_1-C_3 (tales como -CH_3), ciclopropilo, alcoxi C_1-C_3 (tales como -O-CH_3), *N*-alquil C_1-C_4-amino (-NH-alquilo C_1-C_3 tales como -NH-CH_3), cicloalquilamino C_3 (tales como –NH-C_3H_5), *N*-alcoxi C_1-C_3-alquil C_1-C_3-amino (tales como -NH-C_2H_4-O-CH_3) o 1-pirrolidinilo, con mayor preferencia, cloro,

R^5 es hidrógeno o flúor, con preferencia, H,

R^6 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, hidrógeno, alquilo C_1-C_3 (con preferencia, R^6 y R^{10} son cada uno alquilo C_1-C_3), alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro (con preferencia, R^6 y R^{10} son cada uno cloro),

R^8 es alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)) o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)),

R^{11} es hidrógeno, ciano (CN) o amino (NH_2),

W es oxígeno o azufre, con preferencia, oxígeno,

Q es alquilo C_1-C_3, ciclopropilo, 1-(ciano)ciclopropilo, 1-(alquil C_1-C_3 perfluorado)ciclopropilo (tales como (1-(trifluorometil)ciclopropilo), 1-(alquil C_1-C_4)ciclopropilo (tales como 1-(ter-butil)ciclopropilo), 1-(tiocarbamoil)ciclopropilo, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (por ejemplo, CH_2CF_3, $CH_2CH_2CF_3$), tietan-3-ilo, N-metilpirazol-3-ilo, 2-oxo-2(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, y

T es un T seleccionado del grupo que consiste en T1 a T47, con preferencia, T2, T3, T4, T22 o T23 (con mayor preferencia, T22 o T23).

En otra realización de mayor preferencia aún, en la fórmula (I) y otras fórmulas generales detalladas en la presente,

A_1 es C-R^2 o N, con preferencia, C-R^2,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4,

A_4 es C-R^5 o N,

B_1 es CR^6,

B_2 es C-H,

B_3 es CR^8,

B_4 es C-H,

B_5 es CR^{10} o N,

R^1 es alquilo C_1-C_2 (metilo o etilo, con mayor preferencia, metilo),

R^2 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, flúor o cloro, con preferencia, H,

R^3 es hidrógeno o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)),

R^4 es hidrógeno, cloro, flúor, alquilo C_1-C_3 (tales como -CH_3), ciclopropilo, alcoxi C_1-C_3 (tales como -O-CH_3), *N*-alquil C_1-C_4-amino (-NH-alquilo C_1-C_3 tales como -NH-CH_3), cicloalquilamino C_3 (tales como –NH-C_3H_5), *N*-alcoxi C_1-C_3-alquil C_1-C_3-amino (tales como -NH-C_2H_4-O-CH_3) o 1-pirrolidinilo, con mayor preferencia, cloro,

R^5 es hidrógeno o flúor, con preferencia, H,

R^6 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, hidrógeno, alquilo C_1-C_3 (con preferencia, R^6 y R^{10} son cada uno alquilo C_1-C_3), alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro (con preferencia, R^6 y R^{10} son cada uno cloro),

R^8 es alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)) o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)),

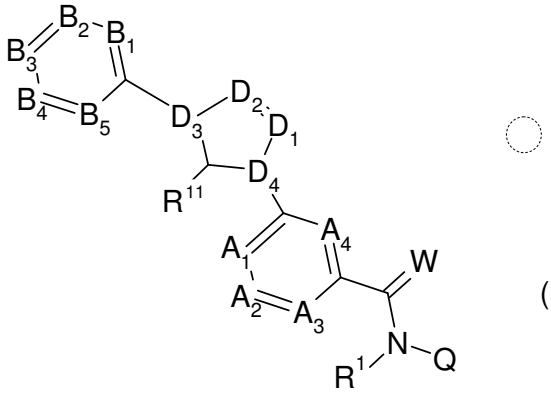
R^{11} es hidrógeno, ciano (CN) o amino (NH_2),

W es oxígeno o azufre, con preferencia, oxígeno,

Q es alquilo C_1-C_3, ciclopropilo, 1-(ciano)ciclopropilo, 1-(alquil C_1-C_3 perfluorado)ciclopropilo (tales como (1-(trifluorometil)ciclopropilo), 1-(alquil C_1-C_4)ciclopropilo (tales como 1-(ter-butil)ciclopropilo), 1-(tiocarbamoil)ciclopropilo, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (por ejemplo, CH_2CF_3, $CH_2CH_2CF_3$), tietan-3-ilo, N-metilpirazol-3-ilo, 2-oxo-2(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo y

T es un T seleccionado del grupo que consiste en T1 a T47, con preferencia, T2, T3, T4, T22 o T23 (con mayor preferencia, T22 o T23).

Otra realización preferida se refiere adicionalmente a compuestos de la fórmula (Ia)



(Ia)

en la que

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de

A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; y

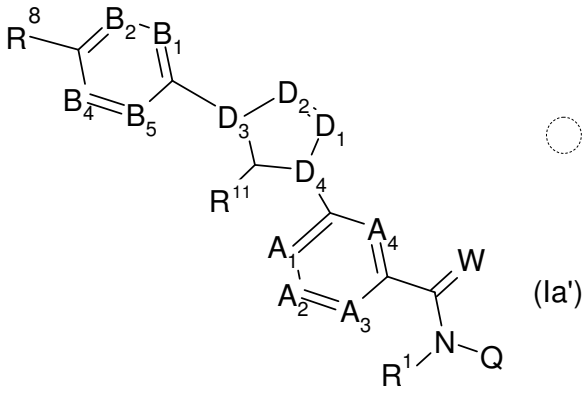
D_1 y D_2 son cada uno, de modo independiente, C-R^{11} o un heteroátomo, con preferencia, C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N, O y S, con mayor preferencia, C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N y O;

los restos D_3 y D_4 son cada uno, de modo independiente, C o un heteroátomo seleccionado de N;

donde uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 son un heteroátomo;

es un sistema aromático.

Otra realización preferida se refiere adicionalmente a compuestos de la fórmula (Ia')



(Ia')

en la que

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_4 y B_5 se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4

pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N;

D_1 y D_2 son cada uno, de modo independiente, C-R^{11} o un heteroátomo, con preferencia, C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N, O u S, con mayor preferencia, C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N u O;

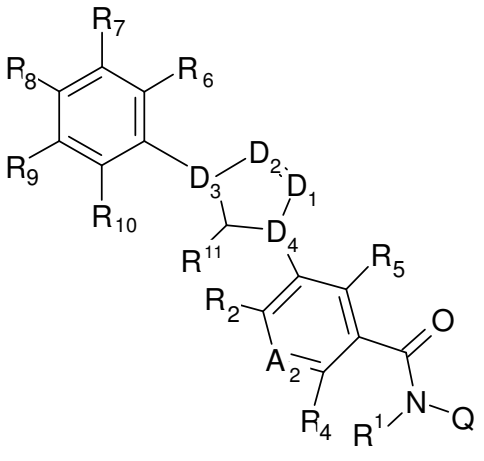
los restos D_3 y D_4 son cada uno, de modo independiente, C o un heteroátomo seleccionado de N;

donde uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 son un heteroátomo; en otras palabras, donde como máximo uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 es/son un heteroátomo, donde uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 es un heteroátomo seleccionado de N y O en el caso de D_1 y D_2 o N en el caso de D_3 y D_4;

es un sistema aromático

y R^8 es como se define en la presente, con preferencia, alquilo C_1-C_4 perfluorado.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Ib)



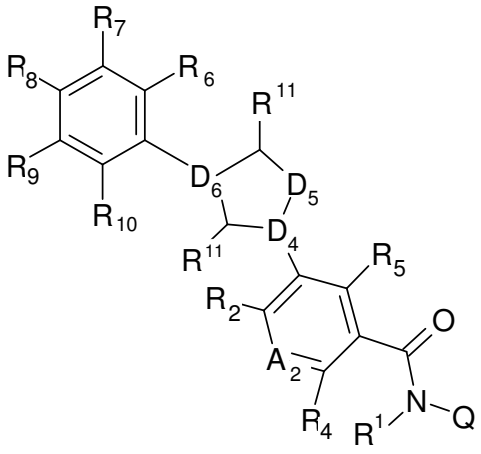
(Ib)

en la que R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{11}, A_2, Q, D_1, D_2, D_3 D_4 y se definen cada uno como se describe en la presente y donde uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 son un heteroátomo.

Dos realizaciones de particular preferencia se refieren a compuestos de la fórmula (Ib) y (Id), en la que D_1 es N, D_2 es O y D_3 y D_4 son C; o D_1 es C-R^{13}, D_2 es N y D_3 es N y D_4 es C, donde R_{13} es H, halógeno, ciano, nitro, amino o un alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, alquil C_1-C_6-oxi, alquil C_1-C_6-carbonilo, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, con preferencia, H o halógeno tales como F, Cl, Br o I y con mayor preferencia, H; y R_1 es, con preferencia, H o R_1 es, con preferencia, metilo.

Otra realización de particular preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (Ib) y (Id), en la que D_1 es O, D_2 es N y D_3 y D_4 son C; donde R_{13} es H, halógeno, ciano, nitro, amino o un alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, alquil C_1-C_6-oxi, alquil C_1-C_6-carbonilo, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, con preferencia, H o halógeno tales como F, Cl, Br o I y con mayor preferencia, H; y R_1 es, con preferencia, H o R_1 es, con preferencia, metilo.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Ic)



(Ic)

en la que R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{11}, A_2 y Q se definen cada uno como se describe en la presente y es un sistema aromático; y

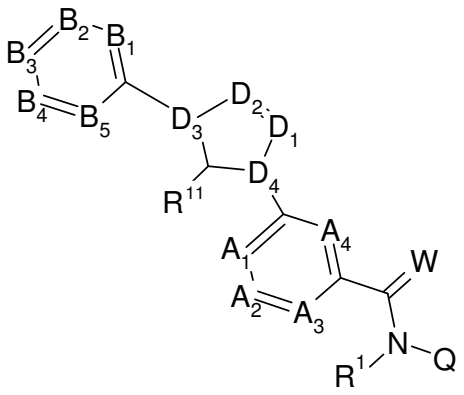
un resto seleccionado de D_4 y D_6 es N, donde el otro resto respectivo seleccionado de D_4 y D_6 es N o C; y

D_5 es N o C-R^{11};

con la condición de que no más de dos restos seleccionados de D_4, D_5 y D_6 son N.

Las realizaciones preferidas se refieren a compuestos de la fórmula (Ic), en la que D_4 es N y D_5 y D_6 son cada uno C-R^{11}; en donde D_6 es N y D_5 y D_4 son cada uno C-R^{11}; o en donde D_4 y D_5 son cada uno N y D_6 es C-R^{11}.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Id)



(Id)

en la que R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5, D_1, D_2, D_3 y D_4 y se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3 y D_4 son un heteroátomo y donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

Una realización de particular preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (Ia), (Ib), (Ic) o (Id), en la que R^8 es alquilo C_1-C_6, alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, cicloalquilo C_3-C_6, cicloalquilo C_3-C_6 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_6, alcoxi sustituido con halógeno C_1-C_6, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_6-sulfanilo sustituido con halógeno, alquil C_1-C_6-sulfinilo sustituido con halógeno, alquil C_1-C_6-sulfonilo sustituido con halógeno, *N*-alquil C_1-C_6-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino y es halógeno, ciano o nitro. Ejemplos son flúor, cloro, bromo, yodo, ciano, nitro, metilo, etilo, difluorometilo, triclorometilo, clorodifluorometilo, diclorofluorometilo, trifluorometilo, clorometilo, bromometilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 1-cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, 1,1-difluoroetilo, pentafluoroetilo, pentafluoro-ter-butilo, heptafluoro-n-propilo, heptafluoroisopropilo, nonafluoro-n-butilo, nonafluoro-sec-butilo,

ciclopropilo, ciclobutilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, 1-metiletoxi, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, *N*-metoxiiminometilo, 1-(*N*-metoxiimino)etilo, metilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo, trifluorometilsulfanilo, *N*,*N*-dimetilamino. Con mayor preferencia, R^8 es alquilo C_1-C_4 sustituido con halógeno tales como difluorometilo, triclorometilo, clorodifluorometilo, diclorofluorometilo, trifluorometilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 1-cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, 1,1-difluoroetilo, pentafluoroetilo, pentafluoro-ter-butilo, heptafluoro-n-propilo, heptafluoroisopropilo, nonafluoro-n-butilo, nonafluoro-sec-butilo; alcoxi C_1-C_4 sustituido con halógeno tales como fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi; trifluorometilsulfonilo; trifluorometilsulfinilo; o trifluorometilsulfanilo. Con mayor preferencia aún, R^8 es difluorometilo, triclorometilo, clorodifluorometilo, diclorofluorometilo, trifluorometilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 1-cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, 1,1-difluoroetilo, pentafluoroetilo, pentafluoro-ter-butilo, heptafluoro-n-propilo, heptafluoroisopropilo, nonafluoro-n-butilo, nonafluoro-sec-butilo, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo o trifluorometilsulfanilo. Con mayor preferencia, R^8 en compuestos de la

fórmula (Ib) es peralquilo C_1-C_3 fluorado tales como propilo perfluorado (-C_3F_7), etilo perfluorado (C_2F_5) o metilo perfluorado (CF_3), con máxima preferencia, propilo perfluorado (-C_3F_7) o metilo perfluorado.

Los compuestos de particular preferencia a los compuestos de la fórmula (Ia) son compuestos de la fórmula (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22) y (I-T23).

Una realización de la presente invención se refiere a compuestos de la fórmula (I-T2) y (I-T4).

Otra realización se refiere a compuestos de la fórmula (I-T3).

Otra realización se refiere a compuestos de las fórmulas (I-T22) y (I-T23).

En consecuencia, una realización de muy particular preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (I-T2). Una realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T2), en la que R^1 es H. Otra realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T2), en la que R^1 es metilo.

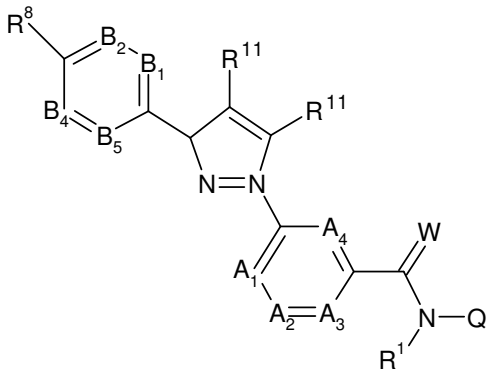
Otra realización de muy particular preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (I-T3). Una realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T3), en la que R^1 es H. Otra realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T3), en la que R^1 es metilo.

Otra realización de muy particular preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (I-T4). Una realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T4), en la que R^1 es H. Otra realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T4), en la que R^1 es metilo.

Otra realización de muy particular preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (I-T22). Una realización preferida se refiere, a su vez, a

compuestos de la fórmula (I-T22), en la que R^1 es H. Otra realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T22), en la que R^1 es metilo.

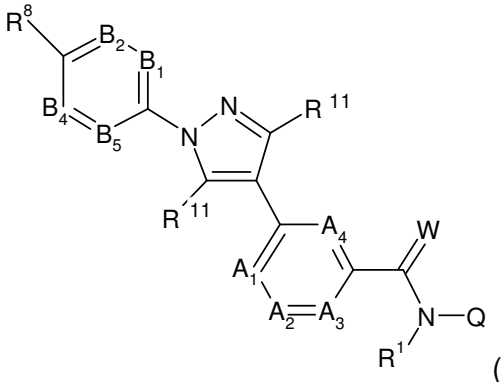
Otra realización de muy particular preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (I-T23). Una realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T23), en la que R^1 es H. Otra realización preferida se refiere, a su vez, a compuestos de la fórmula (I-T23), en la que R^1 es metilo.



(I-T2)

en la que

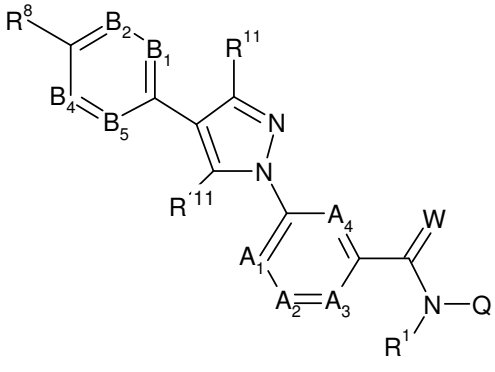
R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o



(I-T3)

en la que

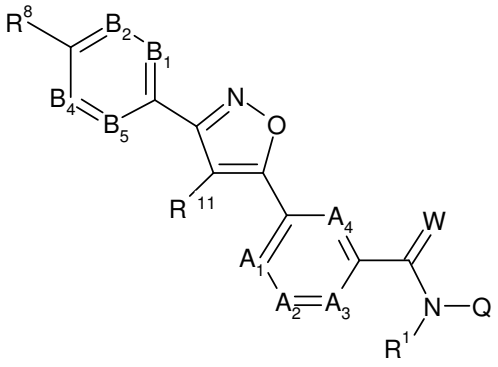
R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o



(I-T4)

en la que

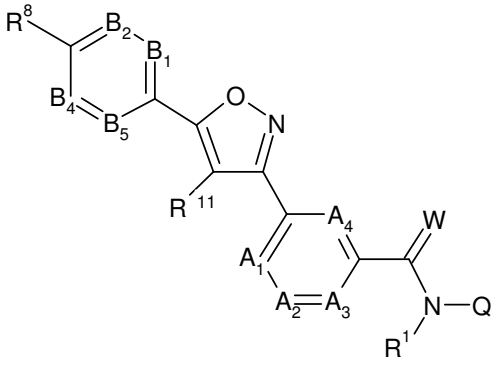
R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o



(T-22)

en la que

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o

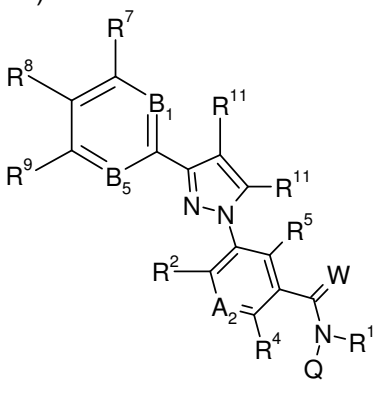


(I-T23)

en la que

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11}, Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (In) (T = T2)



(In)

en la que R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 y R^{11} se definen cada uno como se describe en la presente, en la que R^1 representa H o en la que R^1 representa metilo.

Otra realización de preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (In), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con

ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es H;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-

C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Otra realización de preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (In), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano,

nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es metilo;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

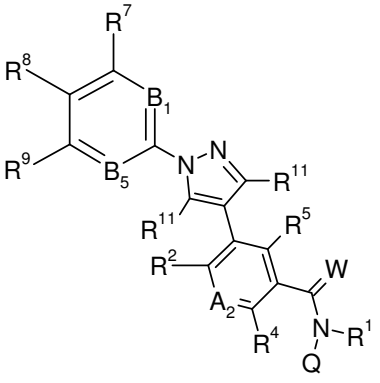
A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Ie) (T = T3)



(Ie)

en la que R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 y R^{11} se definen cada uno como se describe en la presente, en la que R^1 representa H o en la que R^1 representa metilo.

Otra realización de preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (Ie), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con

ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es H;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-

C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Otra realización de preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (Ie), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano,

nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es metilo;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, fluoro o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

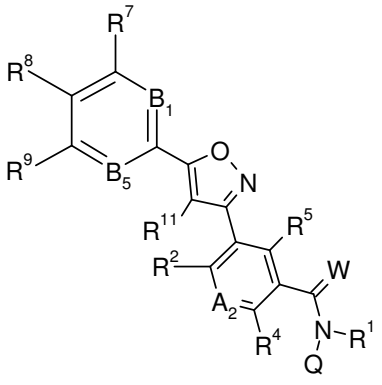
A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Otra realización de preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (If) (T = T23)



(If)

en la que R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 y R^{11} se definen cada uno como se describe en la presente, en la que R^1 representa H o en la que R^1 representa metilo.

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (If), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N$(R)_2$ donde R es, de

modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es H;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es H, halógeno, alquilo C_1-C_4 o alcoxi C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, bromo, cloro, alquilo C_1-C_2 o alcoxi C_1-C_2, con mayor preferencia, H, cloro, bromo, flúor, metilo o metoxi;

A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o flúor-sustituido metilo, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es H, halógeno, opcionalmente sustituido C_1-C_4-alquilo o alcoxi C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, flúor, cloro, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-

C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (If), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($-C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es metilo;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

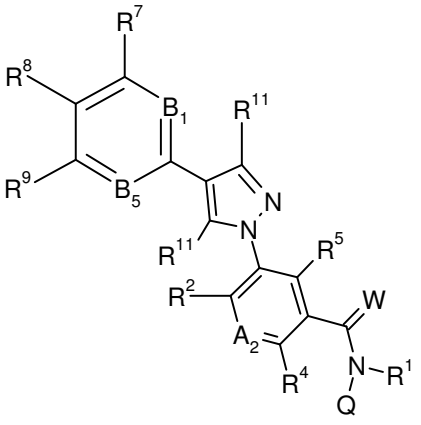
A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Otra realización de preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (Ig) (T = T4)



(Ig)

en la que R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 y R^{11} se definen cada uno como se describe en la presente, en la que R^1 representa H o en la que R^1 representa metilo.

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Ig), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con

ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es H;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-

C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Ig), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano,

nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es metilo;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

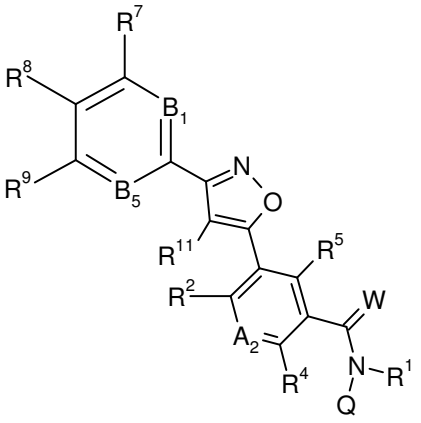
R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Otra realización de preferencia se refiere a compuestos de la fórmula (Io)

(T = T22)



(Io)

en la que R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 y R^{11} se definen cada uno como se describe en la presente, en la que R^1 representa H o en la que R^1 representa metilo.

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Io), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N$(R)_2$ donde R es, de

modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida ($–C(=O)N(R)_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es H;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Io), en la que

W es O;

Q es alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido o cicloalquilo C_3-C_6 opcionalmente sustituido o un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres sustituyentes V, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), opcionalmente alquilo C_1-C_6 sustituido con halógeno, alquenilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_6, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo;

con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno; con ciano, hidroxilo o carbonamida (-C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H o alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido; cicloalquilo C_3; cicloalquilo C_3 sustituido con ciano, sustituido con halógeno, sustituido con nitro o sustituido con alquilo C_1-C_2 halogenado; un anillo heterocíclico insaturado de 4, 5 ó 6 miembros opcionalmente sustituido con uno, dos o tres V y con uno o dos

heteroátomos seleccionados de un grupo que consiste en N, O y S, donde V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, oxo (=O), alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido con halógeno;

con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 fluorado tales como CF_3, CH_2CF_3 o $CH_2CH_2CF_3$; alquilo C_1-C_3 sustituido con carbonamida (–C(=O)N(R)$_2$ donde R es, de modo independiente, H, alquilo C_1-C_3 o alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno), tales como 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo; ciclopropilo; ciclopropilo sustituido con ciano o alquilo C_1-C_2 fluorado tales como 1-(ciano)ciclopropilo o 1-(trifluorometil)ciclopropilo); un anillo de heterocíclico de 4 miembros que contiene un heteroátomo seleccionado de un grupo que consiste en N, O y S, tales como tietan-3-ilo;

R^7 y R^9 son cada uno H;

R^{11} en cada caso es H;

R^1 es metilo;

R^2 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4, con preferencia, H, flúor, cloro o metilo;

R^4 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

R^5 es H o halógeno, con preferencia, H, flúor o cloro;

B_5 es N o C-R^{10}, con preferencia, C-R^{10} en donde

R^{10} es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3,

OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, bromo o cloro;

A_2 es N o C-R^3, con preferencia, C-R^3 en donde

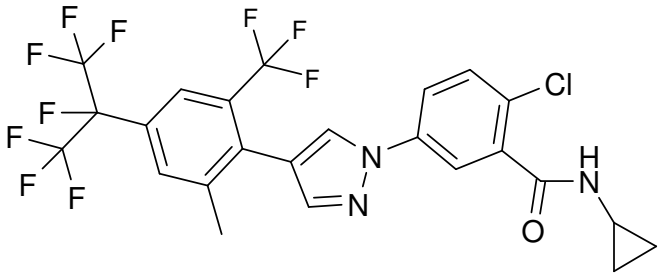
R^3 es H, halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, con preferencia, H, flúor, cloro o alquilo C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, H o metilo sustituido con fluoro, por ejemplo, perfluorometilo;

R^6 es hidrógeno, alquilo C_1-C_3, alcoxi C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, peralquilo C_1-C_3 fluorado (CF_3, C_2F_5 o C_3F_7)), alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno (con preferencia, alcoxi C_1-C_3 perfluorado (OCF_3, OC_2F_5 u OC_3F_7)), alquil C_1-C_3-sulfanilo, alquil C_1-C_3-sulfinilo, alquil C_1-C_3-sulfonilo, flúor, cloro o bromo, con preferencia, flúor, cloro, bromo, alquilo C_1-C_2, alquilo C_1-C_2 sustituido con halógeno (por ejemplo, perfluorometilo) o alcoxi C_1-C_2 opcionalmente sustituido con halógeno, con mayor preferencia, flúor, bromo, cloro, metilo, etilo, metilo fluorado o etilo fluorado (con mayor preferencia, perfluorometilo o perfluoroetilo), metoxi fluorado o etoxi fluorado (con mayor preferencia, perfluorometoxi);

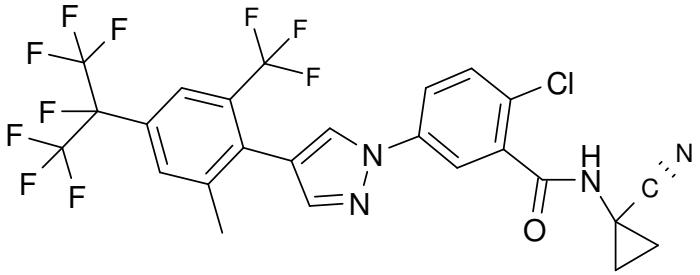
R^8 es halógeno o alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con halógeno o alcoxi opcionalmente sustituido con halógeno C_1-C_4, con preferencia, sustituido con halógeno alquilo C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno, con mayor preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno tales como alquilo C_1-

C_3 fluorado (por ejemplo, alquilo C_3 fluorado tales como perfluoropropilo).

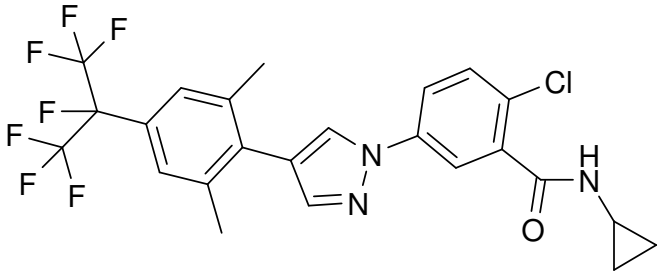
Ejemplos de compuestos de la fórmula (I) incluyen las siguientes estructuras:



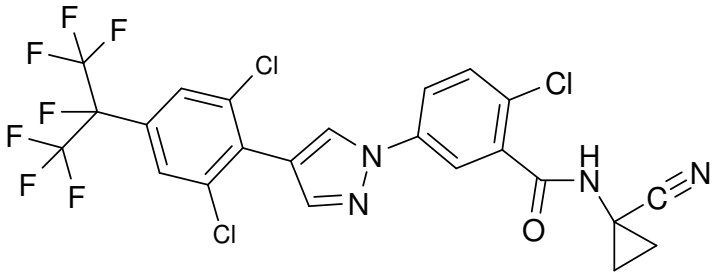
2-cloro-N-ciclopropil-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)-2-metil-6-(trifluorometil)fenil]-1H-pirazol-4-il]benzamida,



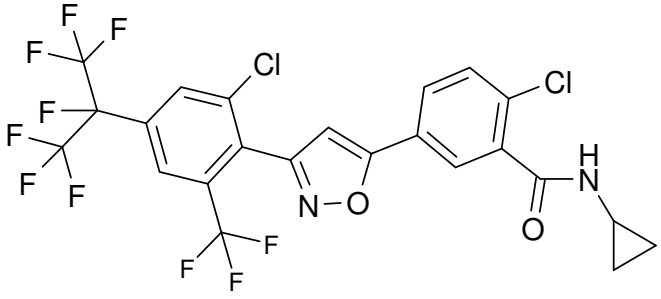
2-cloro-N-(1-cianociclopropil-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)-2-metil-6-(trifluorometil)fenil]-1H-pirazol-4-il]benzamida,



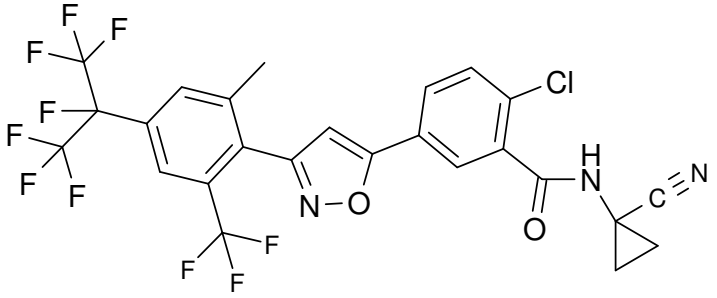
2-cloro-N-ciclopropil-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzamida,



2-cloro-N-(1-cianociclopropil)-5-[4-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzamida,

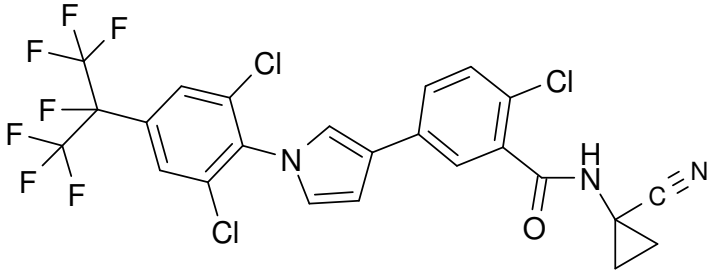


2-cloro-5-[3-[2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]isoxazol-5-il]-N-ciclopropilbenzamida,

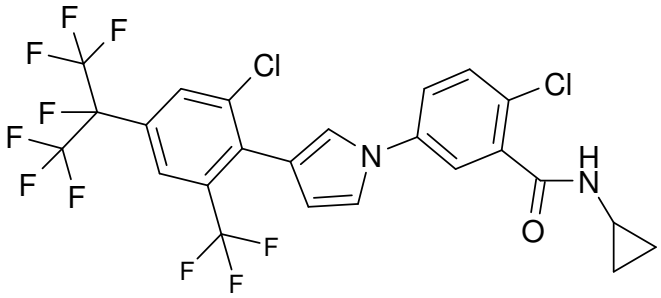


2-cloro-N-(1-cianociclopropil)-5-[3-[2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]isoxazol-5-il]benzamida,

Otros compuestos de la invención son



2-cloro-N-(1-cianociclopropil)-5-[1-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol-3-il]benzamida,



2-cloro-5-[3-[2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]pirrol-1-il]-N-ciclopropilbenzamida.

R1 Metilo

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85].

T3 - Metilo

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de

halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

T2 - Metilo

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-

C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

T4 - Metilo

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es Ch, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con

halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

T22 - Metilo

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con

halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [112].

T23 – Metilo

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con

halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

T3 - H

Una realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es hidrógeno (H) y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es

CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T3, R^{11} en T3 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

T2 - H

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es

CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T2, R^{11} en T2 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

T4 - H

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es

CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T4, R^{11} en T4 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

T22 - H

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es

CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T22, R^{11} en T22 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

T23 - H

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es

CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T23, R^{11} en T23 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] y siguientes.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que B_1 es C-R^6 y R^6 es halógeno (con preferencia, cloro o flúor), alquilo C_1-C_4, alcoxi C_1-C_4, haloalquilo C_1-C_4 (con preferencia, alquilo C_1-C_4 perfluorado), haloalcoxi C_1-C_4 (con preferencia, alcoxi C_1-C_4 perfluorado), alquil C_1-C_4-sulfanilo o alquil C_1-C_4-sulfonilo.

Las sales de los compuestos de la invención que son apropiadas de acuerdo con la invención, por ejemplo, sales por adición de bases o ácidos, son todas sales no tóxicas convencionales, con preferencia, sales agrícola y/o fisiológicamente aceptables. Se da preferencia a sales con bases inorgánicas, por ejemplo, sales de metal alcalino (por ejemplo, sales de sodio, de potasio o de cesio), sales de metal alcalinotérreo (por ejemplo, sales de calcio o de magnesio), sales de amonio o sales con bases orgánicas, en particular con aminas orgánicas, por ejemplo, sales

de trietilamonio, diciclohexilamonio, *N,N'*-dibenciletilendiamonio, piridinio, picolinio o etanolamonio, sales con ácidos inorgánicos (por ejemplo, clorhidratos, bromhidratos, dihidrosulfatos, trihidrosulfatos o fosfatos), sales con ácidos carboxílicos orgánicos o sulfoácidos orgánicos (por ejemplo, formiatos, acetatos, trifluoroacetatos, maleatos, tartratos, metansulfonatos, bencensulfonatos o 4-toluensulfonatos). Se sabe bien que las t-aminas, por ejemplo, algunos de los compuestos de la invención, son capaces de formar *N*-óxidos, que igualmente son sales de la invención.

Según la naturaleza de los sustituyentes, los compuestos de la fórmula (I) pueden estar en la forma de isómeros geométricos y/u ópticamente activos o las correspondientes mezclas isoméricas en diferentes composiciones. Estos estereoisómeros son, por ejemplo, enantiómeros, diastereómeros, atropisómeros o isómeros geométricos. Conforme a ello, la invención comprende tanto estereoisómeros puros como cualquier mezcla de estos isómeros.

La invención también se refiere a métodos para controlar plagas animales, en donde compuestos de la fórmula (I) se dejan actuar sobre plagas animales y/o su hábitat. El control de las plagas animales se lleva a cabo, con preferencia, en agricultura y foresta y en la protección de materiales. Con preferencia se excluyen de esto los métodos para el tratamiento quirúrgico o terapéutico del cuerpo humano o animal y métodos de diagnóstico se lleva a cabo sobre el cuerpo humano o animal.

La invención también se refiere al uso de los compuestos de la fórmula (I) como pesticidas, en especial agentes de protección de cultivos.

En el contexto de la presente solicitud, el término “pesticida” también comprende siempre la expresión “agente de protección de cultivos”.

Los compuestos de la fórmula (I), dadas una buena tolerancia en plantas, una favorable toxicidad de homeotermos y una buena compatibilidad ambiental, son apropiados para proteger plantas y órganos de plantas contra factores de estrés biótico y abiótico, para incrementar los rendimientos de cosecha, para mejorar la calidad del material cosechado y para controlar las plagas animales, en especial insectos, arácnidos, helmintos, nematodos y moluscos, que se encuentran en agricultura, en horticultura, en ganadería, en cultivos acuáticos, en forestas, en jardines e instalaciones de ocio, en la protección de productos almacenados y de materiales y en el sector de higiene. Se pueden usar, con preferencia, como pesticidas. Son efectivos contra especies normalmente sensibles y resistentes y contra todos o algunos estadios de desarrollo. Las plagas antes mencionadas incluyen:

Plagas del filo de Arthropoda, en particular de la clase de Arachnida, por ejemplo, Acarus spp., por ejemplo, Acarus siro, Aceria kuko, Aceria sheldoni, Aculops spp., Aculus spp., por ejemplo, Aculus fockeui, Aculus schlechtendali, Amblyomma spp., Amphitetranychus viennensis, Argas spp., Boophilus spp., Brevipalpus spp., por ejemplo, Brevipalpus phoenicis, Bryobia graminum, Bryobia praetiosa, Centruroides spp., Chorioptes spp., Dermanyssus gallinae, Dermatophagoides pteronyssinus, Dermatophagoides farinae, Dermacentor spp., Eotetranychus spp., por ejemplo, Eotetranychus hicoriae, Epitrimerus pyri, Eutetranychus spp., por ejemplo, Eutetranychus banksi, Eriophyes spp., por ejemplo, Eriophyes pyri, Glycyphagus domesticus, Halotydeus

destructor, Hemitarsonemus spp., por ejemplo, Hemitarsonemus latus (= Polyphagotarsonemus latus), Hyalomma spp., Ixodes spp., Latrodectus spp., Loxosceles spp., Neutrombicula autumnalis, Nuphersa spp., Oligonychus spp., por ejemplo, Oligonychus coniferarum, Oligonychus ilicis, Oligonychus indicus, Oligonychus mangiferus, Oligonychus pratensis, Oligonychus punicae, Oligonychus yothersi, Ornithodorus spp., Ornithonyssus spp., Panonychus spp., por ejemplo, Panonychus citri (= Metatetranychus citri), Panonychus ulmi (=Metatetranychus ulmi), Phyllocoptruta oleivora, Platytetranychus multidigituli, Polyphagotarsonemus latus, Psoroptes spp., Rhipicephalus spp., Rhizoglyphus spp., Sarcoptes spp., Scorpio maurus, Steneotarsonemus spp., Steneotarsonemus spinki, Tarsonemus spp., por ejemplo, Tarsonemus confusus, Tarsonemus pallidus, Tetranychus spp., por ejemplo, Tetranychus canadensis, Tetranychus cinnabarinus, Tetranychus turkestani, Tetranychus urticae, Trombicula alfreddugesi, Vaejovis spp., Vasates lycopersici;

de la clase de Chilopoda, por ejemplo, Geophilus spp., Scutigera spp.;

del orden o la clase de Collembola, por ejemplo, Onychiurus armatus; Sminthurus viridis;

de la clase de Diplopoda, por ejemplo, Blaniulus guttulatus;

de la clase de Insecta, por ejemplo, del orden de Blattodea, por ejemplo, Blatta orientalis, Blattella asahinai, Blattella germanica, Leucophaea maderae, Panchlora spp., Parcoblatta spp., Periplaneta spp., por ejemplo, Periplaneta americana, Periplaneta australasiae, Supella longipalpa;

del orden de Coleoptera, por ejemplo, Acalymma vittatum, Acanthoscelides obtectus, Adoretus spp., Agelastica alni, Agriotes spp.,

por ejemplo, Agriotes linneatus, Agriotes mancus, Alphitobius diaperinus, Amphimallon solstitialis, Anobium punctatum, Anoplophora spp., Anthonomus spp., por ejemplo, Anthonomus grandis, Anthrenus spp., Apion spp., Apogonia spp., Atomaria spp., por ejemplo, Atomaria linearis, Attagenus spp., Baris caerulescens, Bruchidius obtectus, Bruchus spp., por ejemplo, Bruchus pisorum, Bruchus rufimanus, Cassida spp., Cerotoma trifurcata, Ceutorrhynchus spp., por ejemplo, Ceutorrhynchus assimilis, Ceutorrhynchus quadridens, Ceutorrhynchus rapae, Chaetocnema spp., por ejemplo, Chaetocnema confinis, Chaetocnema denticulata, Chaetocnema ectypa, Cleonus mendicus, Conoderus spp., Cosmopolites spp., por ejemplo, Cosmopolites sordidus, Costelytra zealandica, Ctenicera spp., Curculio spp., por ejemplo, Curculio caryae, Curculio caryatrypes,Curculio obtusus, Curculio sayi, Cryptolestes ferrugineus, Cryptolestes pusillus, Cryptorhynchus lapathi, Cryptorhynchus mangiferae, Cylindrocopturus spp., Cylindrocopturus adspersus, Cylindrocopturus furnissi, Dermestes spp., Diabrotica spp., por ejemplo, Diabrotica balteata, Diabrotica barberi, Diabrotica undecimpunctata howardi, Diabrotica undecimpunctata undecimpunctata, Diabrotica virgifera virgifera, Diabrotica virgifera zeae, Dichocrocis spp., Dicladispa armigera, Diloboderus spp., Epilachna spp., por ejemplo, Epilachna borealis, Epilachna varivestis, Epitrix spp., por ejemplo, Epitrix cucumeris, Epitrix fuscula, Epitrix hirtipennis, Epitrix subcrinita, Epitrix tuberis, Faustinus spp., Gibbium psylloides, Gnathocerus cornutus, Hellula undalis, Heteronychus arator, Heteronyx spp., Hylamorpha elegans, Hylotrupes bajulus, Hypera postica, Hypomeces squamosus, Hypothenemus spp., por ejemplo, Hypothenemus hampei, Hypothenemus

obscurus, Hypothenemus pubescens, Lachnosterna consanguinea, Lasioderma serricorne, Latheticus oryzae, Lathridius spp., Lema spp., Leptinotarsa decemlineata, Leucoptera spp., por ejemplo, Leucoptera coffeella, Lissorhoptrus oryzophilus, Lixus spp., Luperomorpha xanthodera, Luperodes spp., Lyctus spp., Megascelis spp., Melanotus spp., por ejemplo, Melanotus longulus oregonensis, Meligethes aeneus, Melolontha spp., por ejemplo, Melolontha melolontha, Migdolus spp., Monochamus spp., Naupactus xanthographus, Necrobia spp., Niptus hololeucus, Oryctes rhinoceros, Oryzaephilus surinamensis, Oryzaphagus oryzae, Otiorhynchus spp., por ejemplo, Otiorhynchus cribricollis, Otiorhynchus ligustici, Otiorhynchus ovatus, Otiorhynchus rugosostriarus, Otiorhynchus sulcatus, Oxycetonia jucunda, Phaedon cochleariae, Phyllophaga spp., Phyllophaga helleri, Phyllotreta spp., por ejemplo, Phyllotreta armoraciae, Phyllotreta pusilla, Phyllotreta ramosa, Phyllotreta striolata, Popillia japonica, Premnotrypes spp., Prostephanus truncatus, Psylliodes spp., por ejemplo, Psylliodes affinis, Psylliodes chrysocephala, Psylliodes punctulata, Ptinus spp., Rhizobius ventralis, Rhizopertha dominica, Sitophilus spp., por ejemplo, Sitophilus granarius, Sitophilus linearis, Sitophilus oryzae, Sitophilus zeamais, Sphenophorus spp., Stegobium paniceum, Sternechus spp., por ejemplo, Sternechus paludatus, Symphyletes spp., Tanymecus spp., por ejemplo, Tanymecus dilaticollis, Tanymecus indicus, Tanymecus palliatus, Tenebrio molitor, Tenebrioides mauretanicus, Tribolium spp., por ejemplo, Tribolium audax, Tribolium castaneum, Tribolium confusum, Trogoderma spp., Tychius spp., Xylotrechus spp., Zabrus spp., por ejemplo, Zabrus tenebrioides;

del orden de Diptera, por ejemplo, Aedes spp., por ejemplo, Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes sticticus, Aedes vexans, Agromyza spp., por ejemplo, Agromyza frontella, Agromyza parvicornis, Anastrepha spp., Anopheles spp., por ejemplo, Anopheles quadrimaculatus, Anopheles gambiae, Asphondylia spp., Bactrocera spp., por ejemplo, Bactrocera cucurbitae, Bactrocera dorsalis, Bactrocera oleae, Bibio hortulanus, Calliphora erythrocephala, Calliphora vicina, Ceratitis capitata, Chironomus spp., Chrysomya spp., Chrysops spp., Chrysozona pluvialis, Cochliomya spp., Contarinia spp., por ejemplo, Contarinia johnsoni, Contarinia nasturtii, Contarinia pyrivora, Contarinia schulzi, Contarinia sorghicola, Contarinia tritici,Cordylobia anthropophaga, Cricotopus sylvestris, Culex spp., por ejemplo, Culex pipiens, Culex quinquefasciatus, Culicoides spp., Culiseta spp., Cuterebra spp., Dacus oleae, Dasineura spp., por ejemplo, Dasineura brassicae, Delia spp., por ejemplo, Delia antiqua, Delia coarctata, Delia florilega, Delia platura, Delia radicum, Dermatobia hominis, Drosophila spp., por ejemplo, Drosphila melanogaster, Drosophila suzukii, Echinocnemus spp., Fannia spp., Gasterophilus spp., Glossina spp., Haematopota spp., Hydrellia spp., Hydrellia griseola, Hylemya spp., Hippobosca spp., Hypoderma spp., Liriomyza spp., por ejemplo, Liriomyza brassicae, Liriomyza huidobrensis, Liriomyza sativae, Lucilia spp., por ejemplo, Lucilia cuprina, Lutzomyia spp., Mansonia spp., Musca spp., por ejemplo, Musca domestica, Musca domestica vicina, Oestrus spp., Oscinella frit, Paratanytarsus spp., Paralauterborniella subcincta, Pegomya spp., por ejemplo, Pegomya betae, Pegomya hyoscyami, Pegomya rubivora, Phlebotomus spp., Phorbia spp., Phormia spp., Piophila casei, Prodiplosis spp., Psila rosae,

Rhagoletis spp., por ejemplo, Rhagoletis cingulata, Rhagoletis completa, Rhagoletis fausta, Rhagoletis indifferens, Rhagoletis mendax, Rhagoletis pomonella, Sarcophaga spp., Simulium spp., por ejemplo, Simulium meridionale, Stomoxys spp., Tabanus spp., Tetanops spp., Tipula spp., por ejemplo, Tipula paludosa, Tipula simplex;

del orden de Heteroptera, por ejemplo, Anasa tristis, Antestiopsis spp., Boisea spp., Blissus spp., Calocoris spp., Campylomma livida, Cavelerius spp., Cimex spp., por ejemplo, Cimex adjunctus, Cimex hemipterus, Cimex lectularius, Cimex pilosellus, Collaria spp., Creontiades dilutus, Dasynus piperis, Dichelops furcatus, Diconocoris hewetti, Dysdercus spp., Euschistus spp., por ejemplo, Euschistus heros, Euschistus servus, Euschistus tristigmus, Euschistus variolarius, Eurygaster spp., Halyomorpha halys, Heliopeltis spp., Horcias nobilellus, Leptocorisa spp., Leptocorisa varicornis, Leptoglossus occidentalis, Leptoglossus phyllopus, Lygocoris spp., por ejemplo, Lygocoris pabulinus, Lygus spp., por ejemplo, Lygus elisus, Lygus hesperus, Lygus lineolaris, Macropes excavatus, Monalonion atratum, Nezara spp., por ejemplo, Nezara viridula, Oebalus spp., Piesma quadrata, Piezodorus spp., por ejemplo, Piezodorus guildinii, Psallus spp., Pseudacysta persea, Rhodnius spp., Sahlbergella singularis, Scaptocoris castanea, Scotinophora spp., Stephanitis nashi, Tibraca spp., Triatoma spp.;

del orden de Homoptera, por ejemplo, Acizzia acaciaebaileyanae, Acizzia dodonaeae, Acizzia uncatoides, Acrida turrita, Acyrthosipon spp., por ejemplo, Acyrthosiphon pisum, Acrogonia spp., Aeneolamia spp., Agonoscena spp., Aleyrodes proletella, Aleurolobus barodensis, Aleurothrixus floccosus, Allocaridara malayensis, Amrasca spp., por

ejemplo, Amrasca bigutulla, Amrasca devastans, Anuraphis cardui, Aonidiella spp., por ejemplo, Aonidiella aurantii, Aonidiella citrina, Aonidiella inornata, Aphanostigma piri, Aphis spp., por ejemplo, Aphis craccivora, Aphis fabae, Aphis forbesi, Aphis glycines, Aphis gossypii, Aphis hederae, Aphis illinoisensis, Aphis middletoni, Aphis nasturtii, Aphis nerii, Aphis pomi, Aphis spiraecola, Aphis viburniphila, Arboridia apicalis, Arytainilla spp., Aspidiella spp., Aspidiotus spp., por ejemplo, Aspidiotus nerii, Atanus spp., Aulacorthum solani, Bemisia tabaci, Blastopsylla occidentalis, Boreioglycaspis melaleucae, Brachycaudus helichrysi, Brachycolus spp., Brevicoryne brassicae, Cacopsylla spp., por ejemplo, Cacopsylla pyricola, Calligypona marginata, Carneocephala fulgida, Ceratovacuna lanigera, Cercopidae, Ceroplastes spp., Chaetosiphon fragaefolii, Chionaspis tegalensis, Chlorita onukii, Chondracris rosea, Chromaphis juglandicola, Chrysomphalus ficus, Cicadulina mbila, Coccomytilus halli, Coccus spp., por ejemplo, Coccus hesperidum, Coccus longulus, Coccus pseudomagnoliarum, Coccus viridis, Cryptomyzus ribis, Cryptoneossa spp., Ctenarytaina spp., Dalbulus spp., Dialeurodes citri, Diaphorina citri, Diaspis spp., Drosicha spp., Dysaphis spp., por ejemplo, Dysaphis apiifolia, Dysaphis plantaginea, Dysaphis tulipae, Dysmicoccus spp., Empoasca spp., por ejemplo, Empoasca abrupta, Empoasca fabae, Empoasca maligna, Empoasca solana, Empoasca stevensi, Eriosoma spp., por ejemplo, Eriosoma americanum, Eriosoma lanigerum, Eriosoma pyricola, Erythroneura spp., Eucalyptolyma spp., Euphyllura spp., Euscelis bilobatus, Ferrisia spp., Geococcus coffeae, Glycaspis spp., Heteropsylla cubana, Heteropsylla spinulosa, Homalodisca coagulata, Hyalopterus arundinis, Hyalopterus pruni, Icerya

spp., por ejemplo, Icerya purchasi, Idiocerus spp., Idioscopus spp., Laodelphax striatellus, Lecanium spp., por ejemplo, Lecanium corni (= Parthenolecanium corni), Lepidosaphes spp., por ejemplo, Lepidosaphes ulmi, Lipaphis erysimi, Macrosiphum spp., por ejemplo, Macrosiphum euphorbiae, Macrosiphum lilii, Macrosiphum rosae, Macrosteles facifrons, Mahanarva spp., Melanaphis sacchari, Metcalfiella spp., Metopolophium dirhodum, Monellia costalis, Monelliopsis pecanis, Myzus spp., por ejemplo, Myzus ascalonicus, Myzus cerasi, Myzus ligustri, Myzus ornatus, Myzus persicae, Myzus nicotianae, Nasonovia ribisnigri, Nephotettix spp., por ejemplo, Nephotettix cincticeps, Nephotettix nigropictus, Nilaparvata lugens, Oncometopia spp., Orthezia praelonga, Oxya chinensis, Pachypsylla spp., Parabemisia myricae, Paratrioza spp., por ejemplo, Paratrioza cockerelli, Parlatoria spp., Pemphigus spp., por ejemplo, Pemphigus bursarius, Pemphigus populivenae, Peregrinus maidis, Phenacoccus spp., por ejemplo, Phenacoccus madeirensis, Phloeomyzus passerinii, Phorodon humuli, Phylloxera spp., por ejemplo, Phylloxera devastatrix, Phylloxera notabilis, Pinnaspis aspidistrae, Planococcus spp., por ejemplo, Planococcus citri, Prosopidopsylla flava, Protopulvinaria pyriformis, Pseudaulacaspis pentagona, Pseudococcus spp., por ejemplo, Pseudococcus calceolariae, Pseudococcus comstocki, Pseudococcus longispinus, Pseudococcus maritimus, Pseudococcus viburni, Psyllopsis spp., Psylla spp., por ejemplo, Psylla buxi, Psylla mali, Psylla pyri, Pteromalus spp., Pyrilla spp., Quadraspidiotus spp., por ejemplo, Quadraspidiotus juglansregiae, Quadraspidiotus ostreaeformis, Quadraspidiotus perniciosus, Quesada gigas, Rastrococcus spp., Rhopalosiphum spp., por ejemplo, Rhopalosiphum maidis, Rhopalosiphum

oxyacanthae, Rhopalosiphum padi, Rhopalosiphum rufiabdominale, Saissetia spp., por ejemplo, Saissetia coffeae, Saissetia miranda, Saissetia neglecta, Saissetia oleae, Scaphoideus titanus, Schizaphis graminum, Selenaspidus articulatus, Sitobion avenae, Sogata spp., Sogatella furcifera, Sogatodes spp., Stictocephala festina, Siphoninus phillyreae, Tenalaphara malayensis,Tetragonocephela spp., Tinocallis caryaefoliae, Tomaspis spp., Toxoptera spp., por ejemplo, Toxoptera aurantii, Toxoptera citricidus, Trialeurodes vaporariorum, Trioza spp., por ejemplo, Trioza diospyri, Typhlocyba spp., Unaspis spp., Viteus vitifolii, Zygina spp.;

del orden de Hymenoptera, por ejemplo, Acromyrmex spp., Athalia spp., por ejemplo, Athalia rosae, Atta spp., Diprion spp., por ejemplo, Diprion similis, Hoplocampa spp., por ejemplo, Hoplocampa cookei, Hoplocampa ensayoudinea, Lasius spp., Monomorium pharaonis, Sirex spp., Solenopsis invicta, Tapinoma spp., Urocerus spp., Vespa spp., por ejemplo, Vespa crabro, Xeris spp.;

del orden de Isopoda, por ejemplo, Armadillidium vulgare, Oniscus asellus, Porcellio scaber;

del orden de Isoptera, por ejemplo, Coptotermes spp., por ejemplo, Coptotermes formosanus, Cornitermes cumulans, Cryptotermes spp., Incisitermes spp., Microtermes obesi, Odontotermes spp., Reticulitermes spp., por ejemplo, Reticulitermes flavipes, Reticulitermes hesperus;

del orden de Lepidoptera, por ejemplo, Achroia grisella, Acronicta major, Adoxophyes spp., por ejemplo, Adoxophyes orana, Aedia leucomelas, Agrotis spp., por ejemplo, Agrotis segetum, Agrotis ipsilon, Alabama spp., por ejemplo, Alabama argillacea, Amyelois transitella, Anarsia spp.,

Anticarsia spp., por ejemplo, Anticarsia gemmatalis, Argyroploce spp., Barathra brassicae, Borbo cinnara, Bucculatrix thurberiella, Bupalus piniarius, Busseola spp., Cacoecia spp., Caloptilia theivora, Capua reticulana, Carpocapsa pomonella, Carposina niponensis, Cheimatobia brumata, Chilo spp., por ejemplo, Chilo plejadellus, Chilo suppressalis, Choristoneura spp., Clysia ambiguella, Cnaphalocerus spp., Cnaphalocrocis medinalis, Cnephasia spp., Conopomorpha spp., Conotrachelus spp., Copitarsia spp., Cydia spp., por ejemplo, Cydia nigricana, Cydia pomonella, Dalaca noctuides, Diaphania spp., Diatraea saccharalis, Earias spp., Ecdytolopha aurantium, Elasmopalpus lignosellus, Eldana saccharina, Ephestia spp., por ejemplo, Ephestia elutella, Ephestia kuehniella, Epinotia spp., Epiphyas postvittana, Etiella spp., Eulia spp., Eupoecilia ambiguella, Euproctis spp., por ejemplo, Euproctis chrysorrhoea, Euxoa spp., Feltia spp., Galleria mellonella, Gracillaria spp., Grapholitha spp., por ejemplo, Grapholita molesta, Grapholita prunivora, Hedylepta spp., Helicoverpa spp., por ejemplo, Helicoverpa armigera, Helicoverpa zea, Heliothis spp., por ejemplo, Heliothis virescens Hofmannophila pseudospretella, Homoeosoma spp., Homona spp., Hyponomeuta padella, Kakivoria flavofasciata, Laphygma spp., Leucinodes orbonalis, Leucoptera spp., por ejemplo, Leucoptera coffeella, Lithocolletis spp., por ejemplo, Lithocolletis blancardella, Lithophane antennata, Lobesia spp., por ejemplo, Lobesia botrana, Loxagrotis albicosta, Lymantria spp., por ejemplo, Lymantria dispar, Lyonetia spp., por ejemplo, Lyonetia clerkella, Malacosoma neustria, Maruca ensayoulalis, Mamestra brassicae, Melanitis leda, Mocis spp., Monopis obviella, Mythimna separata, Nemapogon cloacellus, Nymphula

spp., Oiketicus spp., Oria spp., Orthaga spp., Ostrinia spp., por ejemplo, Ostrinia nubilalis, Oulema melanopus, Oulema oryzae, Panolis flammea, Parnara spp., Pectinophora spp., por ejemplo, Pectinophora gossypiella, Perileucoptera spp., Phthorimaea spp., por ejemplo, Phthorimaea operculella, Phyllocnistis citrella, Phyllonorycter spp., por ejemplo, Phyllonorycter blancardella, Phyllonorycter crataegella, Pieris spp., por ejemplo, Pieris rapae, Platynota stultana, Plodia interpunctella, Plusia spp., Plutella xylostella (= Plutella maculipennis), Prays spp., Prodenia spp., Protoparce spp., Pseudaletia spp., por ejemplo, Pseudaletia unipuncta, Pseudoplusia includens, Pyrausta nubilalis, Rachiplusia nu, Schoenobius spp., por ejemplo, Schoenobius bipunctifer, Scirpophaga spp., por ejemplo, Scirpophaga innotata, Scotia segetum, Sesamia spp., por ejemplo, Sesamia inferens, Sparganothis spp., Spodoptera spp., por ejemplo, Spodoptera eradiana, Spodoptera exigua, Spodoptera frugiperda, Spodoptera praefica, Stathmopoda spp., Stomopteryx subsecivella, Synanthedon spp., Tecia solanivora, Thermesia gemmatalis, Tinea cloacella, Tinea pellionella, Tineola bisselliella, Tortrix spp., Trichophaga tapetzella, Trichoplusia spp., por ejemplo, Trichoplusia ni, Tryporyza incertulas, Tuta absoluta, Virachola spp.;

del orden de Orthoptera o Saltatoria, por ejemplo, Acheta domesticus, Dichroplus spp., Gryllotalpa spp., por ejemplo, Gryllotalpa gryllotalpa, Hieroglyphus spp., Locusta spp., por ejemplo, Locusta migratoria, Melanoplus spp., por ejemplo, Melanoplus devastator, Schistocerca gregaria;

del orden de Phthiraptera, por ejemplo, Damalinia spp., Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phylloxera vastatrix, Phthirus pubis, Trichodectes spp.;

del orden de Psocoptera, por ejemplo, Lepinotus spp., Liposcelis spp.;

del orden de Siphonaptera, por ejemplo, Ceratophyllus spp., Ctenocephalides spp., por ejemplo, Ctenocephalides canis, Ctenocephalides felis, Pulex irritans, Tunga penetrans, Xenopsylla cheopis;

del orden de Thysanoptera, por ejemplo, Anaphothrips obscurus, Baliothrips biformis, Drepanothrips reuteri, Enneothrips flavens, Frankliniella spp., por ejemplo, Frankliniella fusca, Frankliniella occidentalis, Frankliniella schultzei, Frankliniella tritici, Frankliniella vaccinii, Frankliniella williamsi, Heliothrips spp., Hercinothrips femoralis, Rhipiphorothrips cruentatus, Scirtothrips spp., Taeniothrips cardamomi, Thrips spp., por ejemplo, Thrips palmi, Thrips tabaci;

del orden de Zygentoma (= Thysanura), por ejemplo, Ctenolepisma spp., Lepisma saccharina, Lepismodes inquilinus, Thermobia domestica;

de la clase de Symphyla, por ejemplo, Scutigerella spp., por ejemplo, Scutigerella immaculata;

plagas del filo de Mollusca, por ejemplo, de la clase de Bivalvia, por ejemplo, Dreissena spp.,

y también de la clase de Gastropoda, por ejemplo, Arion spp., por ejemplo, Arion ater rufus, Biomphalaria spp., Bulinus spp., Deroceras spp., por ejemplo, Deroceras laeve, Galba spp., Lymnaea spp., Oncomelania spp., Pomacea spp., Succinea spp.;

parásitos animales del filo de Plathelminthes y Nematoda, por ejemplo, Ancylostoma spp., por ejemplo, Ancylostoma duodenale, Ancylostoma ceylanicum, Ancylostoma braziliensis, Ascaris spp., Brugia malayi, Brugia timori, Bunostomum spp., Chabertia spp., Clonorchis spp., Cooperia spp., Dicrocoelium spp., Dictyocaulus filaria, Diphyllobothrium latum, Dracunculus medinensis, Echinococcus granulosus, Echinococcus multilocularis, Enterobius vermicularis, Faciola spp., Haemonchus spp., Heterakis spp., Hymenolepis nana, Hyostrongulus spp., Loa Loa, Nematodirus spp., Oesophagostomum spp., Opisthorchis spp., Onchocerca volvulus, Ostertagia spp., Paragonimus spp., Schistosomen spp., Strongyloides fuelleborni, Strongyloides stercoralis, Stronyloides spp., Taenia saginata, Taenia solium, Trichinella spiralis, Trichinella nativa, Trichinella britovi, Trichinella nelsoni, Trichinella pseudopsiralis, Trichostrongulus spp., Trichuris trichuria, Wuchereria bancrofti;

plagas de plantas del filo de Nematoda, es decir, nematodos fitoparásitos, en especial, Aglenchus spp., por ejemplo, Aglenchus agricola, Anguina spp., por ejemplo, Anguina tritici, Aphelenchoides spp., por ejemplo, Aphelenchoides arachidis, Aphelenchoides fragariae, Belonolaimus spp., por ejemplo, Belonolaimus gracilis, Belonolaimus longicaudatus, Belonolaimus nortoni, Bursaphelenchus spp., por ejemplo, Bursaphelenchus cocophilus, Bursaphelenchus eremus, Bursaphelenchus xylophilus, Cacopaurus spp., por ejemplo, Cacopaurus pestis, Criconemella spp., por ejemplo, Criconemella curvata, Criconemella onoensis, Criconemella ornata, Criconemella rusium, Criconemella xenoplax (= Mesocriconema xenoplax), Criconemoides spp., por ejemplo, Criconemoides ferniae, Criconemoides onoense, Criconemoides ornatum,

Ditylenchus spp., por ejemplo, Ditylenchus dipsaci, Dolichodorus spp., Globodera spp., por ejemplo, Globodera pallida, Globodera rostochiensis, Helicotylenchus spp., por ejemplo, Helicotylenchus dihystera, Hemicriconemoides spp., Hemicycliophora spp., Heterodera spp., por ejemplo, Heterodera avenae, Heterodera glycines, Heterodera schachtii, Hoplolaimus spp., Longidorus spp., por ejemplo, Longidorus africanus, Meloidogyne spp., por ejemplo, Meloidogyne chidosodi, Meloidogyne fallax, Meloidogyne hapla, Meloidogyne incognita, Meloinema spp., Nacobbus spp., Neotylenchus spp., Paraphelenchus spp., Paratrichodorus spp., por ejemplo, Paratrichodorus minor, Pratylenchus spp., por ejemplo, Pratylenchus penetrans, Pseudohalenchus spp., Psilenchus spp., Punctodera spp., Quinisulcius spp., Radopholus spp., por ejemplo, Radopholus citrophilus, Radopholus similis, Rotylenchulus spp., Rotylenchus spp., Scutellonema spp., Subanguina spp., Trichodorus spp., por ejemplo, Trichodorus obtusus, Trichodorus primitivus, Tylenchorhynchus spp., por ejemplo, Tylenchorhynchus annulatus, Tylenchulus spp., por ejemplo, Tylenchulus semipenetrans, Xiphinema spp., por ejemplo, Xiphinema index.

Además, es posible controlar, del subreino de Protozoa, del orden de Coccidia, por ejemplo, Eimeria spp.

Los compuestos de la fórmula (I) también se puede usar opcionalmente en determinadas concentraciones o tasas de aplicación como herbicidas, protectores, reguladores del crecimiento o agentes para mejorar las propiedades de las plantas, como microbicidas o gametocidas, por ejemplo, como fungicidas, antimicóticos, bactericidas, viricidas (que incluyen agentes contra viroides) o como agentes contra MLO

(organismos de tipo micoplasma) y RLO (organismos de tipo rickettsia). De ser apropiado, también se pueden usar como intermediarios o precursores para la síntesis de otros compuestos activos

La presente invención también se refiere a formulaciones y formas de uso preparadas a partir de ellas como pesticidas, por ejemplo, licores de remojado, inmersión y pulverización, que comprenden al menos un compuesto de la fórmula (I). En algunos casos, las formas de uso comprenden también pesticidas y/o adyuvantes que mejoran la acción, tales como penetrantes, por ejemplo, aceites vegetales, por ejemplo, aceite de colza, aceite de girasol, aceites minerales, por ejemplo, aceites de parafina, ésteres de alquilo de ácidos grasos vegetales, por ejemplo, éster metílico de aceite de colza o éster metílico de aceite de soja o alcoxilatos de alcanol y/o esparcidores, por ejemplo, alquilsiloxanos y/o sales, por ejemplo, sales de amonio o fosfonio orgánicas o inorgánicas, por ejemplo, sulfato de amonio o hidrógeno-fosfato de diamonio y/o promotores de la retención, por ejemplo, sulfosuccinato de dioctilo o polímeros de hidroxipropilguar y/o humectantes, por ejemplo, glicerol y/o fertilizantes, por ejemplo, fertilizantes que contienen amonio, potasio o fósforo.

Las formulaciones convencionales son, por ejemplo, líquidos solubles en agua (SL), concentrados en emulsión (EC), emulsiones en agua (EW), concentrados en suspensión (SC, SE, FS, OD), gránulos dispersables en agua (WG), gránulos (GR) y concentrados en cápsula (CS); estos y otros tipos de formulación posibles se describen, por ejemplo, por Crop Life International y en Pesticide Specifications, Manual on development and use of FAO and WHO specifications for pesticides, FAO Plant Production

and Protection Papers – 173, preparos por FAO/WHO Joint Meeting on Pesticide Specifications, 2004, ISBN: 9251048576. Las formulaciones, además de uno o varios compuestos de la fórmula (I), (Ia), (Ib) o (Ic), opcionalmente comprenden otros principios agroquímicamente activos.

Ellas son preferentemente formulaciones o formas de uso que comprenden auxiliares, por ejemplo, extensores, disolventes, promotores de espontaneidad, vehículos, emulsionantes, dispersantes, protectores de heladas, biocidas, espesantes y/u otros auxiliares, por ejemplo, adyuvantes. Un adyuvante en este contexto es un componente que mejora el efecto biológico de la formulación, sin el componente propiamente dicho que tiene cualquier efecto biológico. Los ejemplos de adyuvantes son agentes que promueven la retención, dispersión, unión con la superficie de la hoja o penetración.

Estas formulaciones se preparan de una manera conocida, por ejemplo, mezclando los compuestos de la fórmula (I)) con auxiliares tales como, por ejemplo, extensores, disolventes y/o portadores sólidos y/u otros auxiliares tales como, por ejemplo, tensioactivos. Las formulaciones se preparan ya sea en instalaciones apropiadas o incluso antes o durante la aplicación.

Los auxiliares usados pueden ser sustancias apropiadas para impartir propiedades especiales, tales como determinadas propiedades físicas, técnicas y/o biológicas a la formulación de los compuestos de la fórmula (I) o las formas de uso preparadas a partir de estas formulaciones (por ejemplo, pesticidas listas para usar tales como licores de pulverización o productos de recubrimiento de semillas).

Los extensores apropiados son, por ejemplo, agua, líquidos químicos orgánicos polares y no polares, por ejemplo, de las clases de los hidrocarburos aromáticos y no aromáticos (tales como parafinas, alquilbencenos, alquilnaftalenos, clorobencenos), los alcoholes y polioles (que, de ser apropiado, también pueden ser sustituidos, eterificados y/o esterificados), las cetonas (tales como acetona, ciclohexanona), ésteres (que incluyen grasas y aceites) y (poli)éteres, las aminas, amidas, lactamas (tales como N-alquilpirrolidonas) y lactonas no sustituidas y sustituidas, las sulfonas y sulfóxidos (tal como dimetilsulfóxido).

Si el extensor usado es agua, también es posible emplear, por ejemplo, disolventes orgánicos como disolventes auxiliares. Esencialmente, los disolventes líquidos apropiados son: compuestos aromáticos tales como xileno, tolueno o alquilnaftalenos, compuestos aromáticos clorados o hidrocarburos alifáticos clorados tales como clorobencenos, cloroetilenos o cloruro de metileno, hidrocarburos alifáticos tales como ciclohexano o parafinas, por ejemplo, fracciones de aceite mineral, aceites minerales y vegetales, alcoholes tales como butanol o glicol y sus éteres y ésteres, cetonas tales como acetona, metiletilcetona, metilisobutilcetona o ciclohexanona, disolventes fuertemente polares tales como dimetilformamida y dimetilsulfóxido y también agua.

En principio, es posible usar todos los disolventes apropiados. Los ejemplos de disolventes apropiados son hidrocarburos aromáticos tales como xileno, tolueno o alquilnaftalenos, hidrocarburos aromáticos clorados o hidrocarburos alifáticos clorados tales como clorobenceno, cloroetileno o cloruro de metileno, hidrocarburos alifáticos tales como ciclohexano, parafinas, fracciones de petróleo, aceites minerales y

vegetales, alcoholes, tales como metanol, etanol, isopropanol, butanol o glicol y sus éteres y ésteres, cetonas tales como acetona, metiletilcetona, metilisobutilcetona o ciclohexanona, disolventes fuertemente polares tales como dimetilsulfóxido y agua.

En principio, es posible usar todos los vehículos apropiados. Los vehículos útiles incluyen especialmente: por ejemplo, sales de amonio y minerales naturales molidos tales como caolines, arcillas, talco, tiza, cuarzo, attapulgita, montmorillonita o tierra de diatomeas y materiales sintéticos molidos tales como sílice finamente dividida, alúmina y silicatos naturales o sintéticos, resinas, ceras y/o fertilizantes sólidos. Las mezclas de tales vehículos se pueden usar de mismo modo. Los vehículos de utilidad para gránulos incluyen: por ejemplo, piedras naturales picadas y fraccionadas, tales como calcita, mármol, piedra pómez, sepiolita, dolomita y gránulos sintéticos de harinas inorgánicas y orgánicas y también gránulos de material orgánico tales como aserrín, papel, cáscaras de coco, mazorcas de maíz y tallos de tabaco.

También se pueden usar extensores gaseosos licuados o disolventes. Los extensores o vehículos particularmente apropiados son aquellos que son gaseosos a temperatura ambiente y a presión atmosférica, por ejemplo, gases propelentes en aerosol, tales como halohidrocarburos y también butano, propano, nitrógeno y dióxido de carbono.

Los ejemplos de emulsionantes y/o formadores de espuma, dispersantes o agentes humectantes con propiedades iónicas o no iónicas o mezclas de estos tensioactivos, son sales de ácido poliacrílico, sales de ácido lignosulfónico, sales de ácido fenolsulfónico o ácido naftalensulfónico, policondensados de óxido de etileno con alcoholes grasos o con ácidos

grasos o con aminas grasas, con fenoles sustituidos (preferentemente, alquilfenoles o arilfenoles), sales de ésteres sulfosuccínicos, derivados de taurina (preferentemente, tauratos de alquilo), ésteres fosfóricos de alcoholes polietoxilados o fenoles, ésteres grasos de polioles y derivados de los compuestos que contienen sulfatos, sulfonatos y fosfatos, por ejemplo, éteres de alquilarilpoliglicol, sulfonatos de alquilo, sulfatos de alquilo, sulfonatos de arilo, hidrolizados de proteína, licores de desecho de lignosulfito y metilcelulosa. La presencia de un tensioactivo es ventajosa si uno de los compuestos de la fórmula (I) y/o uno de los portadores inertes es insoluble en agua y cuando la aplicación tiene lugar en agua.

Otros auxiliares que pueden estar presentes en las formulaciones y las formas de uso derivadas de ellas incluyen tinturas tales como pigmentos inorgánicos, por ejemplo, óxido de hierro, óxido de titanio y azul de Prusia y tinturas orgánicas tales como tintura de alizarina, tinturas azoicas y tinturas de ftalocianina metálica y nutrientes y nutrientes en trazas tales como sales de hierro, manganeso, boro, cobre, cobalto, molibdeno y zinc.

Los componentes adicionales pueden ser estabilizantes, tales como estabilizantes de baja temperatura, conservantes, antioxidantes, fotoestabilizantes u otros agentes que mejoran la estabilidad química y/o física. Los formadores de espuma o antiespumantes también pueden estar presentes.

Además, las formulaciones y las formas de uso derivadas de ellas pueden comprender también, como auxiliares adicionales, espesantes tales como carboximatilcelulosa y polímeros naturales y sintéticos en forma de polvos, gránulos o látex tales como goma arábiga, alcohol polivinílico y

acetato de polivinilo o incluso fosfolípidos naturales tales como cefalinas y lecitinas y fosfolípicos sintéticos. Otros posibles auxiliares son aceites minerales y vegetales.

Opcionalmente, otros auxiliares pueden estar presentes en las formulaciones y las formas de uso derivadas de ellas. Los ejemplos de tales aditivos incluyen fragancias, coloides protectores, aglutinantes, adhesivos, espesantes, agentes tixotrópicos, penetrantes, promotores de la retención, estabilizantes, secuestrantes, agentes complejizantes, humectantes, dispersantes. En general, los compuestos de la fórmula (I) se pueden combinar con cualquier aditivo sólido o líquido comúnmente usado para fines de formulación.

Los promotores de retención útiles incluyen todas aquellas sustancias que reducen la tensión superficial dinámica, por ejemplo, sulfosuccinato de dioctilo o incremento de la viscoelasticidad, por ejemplo, polímeros de hidroxipropilguar.

Los penetrantes apropiados en el presente contexto son todas aquellas sustancias que se emplean usualmente para mejorar la penetración de principios activos agroquímicos en plantas. Los penetrantes se definen en este contexto por su capacidad de penetrar desde el licor de aplicación (generalmente acuoso) y/o desde el recubrimiento de pulverización en la cutícula de la planta y aumentar así la movilidad de compuestos activos en la cutícula. El método descrito en la literatura (Baur et al., 1997, Pesticide Science 51, 131-152) se puede usar para determinar su propiedad. Los ejemplos incluyen alcoxilatos de alcohol tales como etoxilato graso de coco (10) o etoxilato de isotridecilo (12), ésteres de ácido graso, por ejemplo, éster metílico de aceite de colza o éster metílico

de aceite de soja, alcoxilatos de amina grasos, por ejemplo, etoxilato de tallow amina (15) o sales de amonio y/o de fosfonio, por ejemplo, sulfato de amonio o hidrógeno-fosfato de diamonio.

Las formulaciones comprenden, preferentemente, entre el 0,00000001 y el 98% en peso del respectivo compuesto de la fórmula (I) o, con mayor preferencia, entre el 0,01% y el 95% en peso del compuesto de la fórmula (I), con máxima preferencia, entre el 0,5% y el 90% en peso del compuesto de la fórmula (I), en base al peso de la formulación.

El contenido del compuesto de la fórmula (I) en las formas de uso preparadas a partir de las formulaciones (en especial pesticidas) puede variar dentro de amplios intervalos. La concentración del compuesto de la fórmula (I) en las formas de uso está usualmente entre el 0,00000001 y el 95% en peso, preferentemente, entre el 0,00001 y el 1% en peso, en base al peso de la forma de uso. La aplicación se lleva a cabo de una manera habitual apropiada para las formas de uso.

Los compuestos de la fórmula (I) también se pueden emplear como una mezcla con uno o varios fungicidas, bactericidas, acaricidas, molusquicidas, nematicidas, insecticidas, agentes microbiológicos, especies beneficiosas, herbicidas, fertilizantes, repelentes de insectos, fitotónicos, esterilizantes, protectores, productos semioquímicos y/o reguladores del crecimiento de plantas apropiados, a fin de, por ejemplo, ampliar así el espectro de acción, prolongar la duración de la acción, incrementar la tasa de acción, prevenir la repulsión o prevenir la evolución de la resistencia. Además, las combinaciones de principios activos pueden mejorar el crecimiento de las plantas y/o la tolerancia a factores abióticos, por ejemplo, altas o bajas temperaturas, sequía o elevado

contenido de agua o salinidad del suelo. También es posible mejorar el rendimiento de la floración y fructificación, optimizar la capacidad de germinación y el desarrollo de raíces, facilitar la cosecha y mejorar los rendimientos, influir sobre la maduración, mejorar la calidad y/o el valor nutricional de los productos cosechados, prolongar la vida en almacenamiento y/o mejorar la procesabilidad de los productos cosechados.

Además, los compuestos de la fórmula (I) pueden estar presentes en una mezcla con otros principios activos o productos semioquímicos tales como atrayentes y/o repelentes de insectos y/o activadores de plantas y/o reguladores del crecimiento y/o fertilizantes. Del mismo modo, los compuestos de la fórmula (I) se pueden usar en mezclas para mejorar las propiedades de plantas tales como, por ejemplo, crecimiento, rendimiento y calidad del material cosechado.

En una particular realización de la invención, los compuestos de la fórmula (I) están en la forma de formulaciones o las formas de uso preparadas a partir de estas formulaciones en una mezcla con otros compuestos, preferentemente, aquellos que se describen más abajo.

Si uno de los compuestos mencionados más abajo se pueden producir en diferentes formas tautoméricas, estas formas también se incluyen incluso aunque no se mencionen explícitamente en cada caso.

Insecticidas/acaricidas/nematicidas

Los principios activos especificados aquí con sus nombres comunes son conocidos y se describen, por ejemplo, en The Pesticide Manual, 16th Ed., British Crop Protection Council 2012 o se pueden buscar en la Internet (por ejemplo, http://www.alanwood.net/pesticides).

(1) Inhibidores de acetilcolinesterasa (AChE), por ejemplo, carbamatos, por ejemplo, alanicarb, aldicarb, bendiocarb, benfuracarb, butocarboxim, butoxicarboxim, carbarilo, carbofurano, carbosulfano, etiofencarb, fenobucarb, formetanato, furatiocarb, isoprocarb, metiocarb, metomilo, metolcarb, oxamilo, pirimicarb, propoxur, tiodicarb, tiofanox, triazamato, trimetacarb, XMC y xililcarb; u organofosfatos, por ejemplo, acefato, azametifos, azinfos-etilo, azinfos-metilo, cadusafos, cloretoxifos, clorfenvinfos, clormefos, clorpirifos, clorpirifos-metilo, coumafos, cianofos, demetona-S-metilo, diazinona, diclorvos/DDVP, dicrotofos, dimetoato, dimetilvinfos, disulfotona, EPN, etiona, etoprofos, famfur, fenamifos, fenitrotiona, fentiona, fostiazato, heptenofos, imiciafos, isofenfos, O-(metoxiaminotiofosforil)salicilato de isopropilo, isoxationa, malationa, mecarbam, metamidofos, metidationa, mevinfos, monocrotofos, naled, ometoato, oxidemetona-metilo, paration, paration-metilo, fentoato, forato, fosalono, fosmet, fosfamidona, foxim, pirimifos-metilo, profenofos, propetamfos, protiofos, piraclofos, piridafentiona, quinalfos, sulfotep, tebupirimfos, temefos, terbufos, tetraclorvinfos, tiometona, triazofos, triclorfona y vamidotiona.

(2) Antagonistas del canal de cloruro regulado por GABA, por ejemplo, ciclodieno-organocloros, por ejemplo, clordano y endosulfano o fenilpirazoles (fiproles), por ejemplo, etiprol y fipronilo.

(3) Moduladores del canal de sodio / bloqueadores del canal de sodio regulado por voltaje, por ejemplo, piretroides, por ejemplo, acrinatrina, aletrina, d-cis-transaletrina, d-transaletrina, bifentrina, bioaletrina, isómero de s-ciclopentenilo de bioaletrina, bioresmetrina,

cicloprotrina, ciflutrina, beta-ciflutrina, cihalotrina, lambda-cihalotrina, gamma-cihalotrina, cipermetrina, alfa-cipermetrina, beta-cipermetrina, teta-cipermetrina, zeta-cipermetrina, cifenotrina [isómero (1R)-trans], deltametrina, empentrina [isómero (EZ)-(1R)], esfenvalerato, etofenprox, fenpropatrina, fenvalerato, flucitrinato, flumetrina, tau-fluvalinato, halfenprox, imiprotrina, kadetrina, permetrina, fenotrina [isómero (1R)-trans], praletrina, piretrinas (piretro), resmetrina, silafluofeno, teflutrina, tetrametrina, tetrametrina [isómero (1R))], tralometrina y transflutrina o DDT o metoxicloro.

(4) Agonistas del receptor nicotinérgicos de acetilcolina (nAChR), por ejemplo, neonicotinoides, por ejemplo, acetamiprida, clotianidina, dinotefurano, imidacloprida, nitenpiram, tiacloprida y tiametoxam o nicotina o sulfoxaflor.

(5) Activadores alostéricos del receptor nicotinérgico de acetilcolina (nAChR), por ejemplo, espinosinas, por ejemplo, espinetoram y espinosad.

(6) Activadores del canal de cloruro, por ejemplo, avermectinas/milbemicinas, por ejemplo, abamectina, benzoato de emamectina, lepimectina y milbemectina.

(7) Imitadores de la hormona juvenil, por ejemplo, análogos de la hormona juvenil, por ejemplo, hidropreno, kinopreno y metopreno o fenoxicarb o piriproxifeno.

(8) Principios activos mecanismos de acción desconocidos o no específicos, por ejemplo, haluros de alquilo, por ejemplo, bromuro de metilo y otros haluros de alquilo; o cloropicrina o fluoruro de sulfurilo o bórax o tártaro emético.

(9) Antialimentantes selectivos, por ejemplo, pimetrozina o flonicamida.

(10) Inhibidores del crecimiento de ácaros, por ejemplo, clofentezina, hexitiazox y diflovidazina o etoxazol.

(11) Disruptores microbianos de la membrana intestinal de insectos, por ejemplo, Bacillus thuringiensis subespecie israelensis, Bacillus sphaericus, Bacillus thuringiensis subespecie aizawai, Bacillus thuringiensis subespecie kurstaki, Bacillus thuringiensis subespecie tenebrionis y proteínas de plantas BT: Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1Fa, Cry2Ab, mCry3A, Cry3Ab, Cry3Bb, Cry34/35Ab1.

(12) Inhibidores de la fosforilación oxidativa, disruptores de ATP, por ejemplo, diafentiurona o compuestos de organoestaño, por ejemplo, azociclotina, cihexatina y óxido de fenbutatina o propargita o tetradifona.

(13) Desacopladores de la fosforilación oxidativa que interrumpen el gradiente de protón H, por ejemplo, clorfenapir, DNOC y sulfluramida.

(14) Antagonistas del receptor nicotinérgico de acetilcolina, por ejemplo, bensultap, clorhidrato de cartap, tiocilam y tiosultap-sodio.

(15) Inhibidores de la biosíntesis de quitina, tipo 0, por ejemplo, bistriflurona, clorfluazurona, diflubenzurona, flucicloxurona, flufenoxurona, hexaflumurona, lufenurona, novalurona, noviflumurona, teflubenzurona y triflumurona.

(16) Inhibidores de la biosíntesis de quitinta, tipo 1, por ejemplo, buprofezina.

(17) Inhibidores de la muda (en especial para Diptera, es decir, dípteros), por ejemplo, ciromazina.

(18) Agonistas del receptor de ecdisoma, por ejemplo, cromafenozida, halofenozida, metoxifenozida y tebufenozida.

(19) Agonistas octopaminérgicos, por ejemplo, amitraz.

(20) Inhibidores del transporte de electrones de complejo III, por ejemplo, hidrametilnona o acequinocilo o fluacripirim.

(21) Inhibidores del transporte de electrones de complejo I, por ejemplo, del grupo de los acaricidas METI, por ejemplo, fenazaquina, fenpiroximato, pirimidifeno, piridabeno, tebufenpirad y tolfenpirad o rotenona (Derris).

(22) Bloqueadores del canal de sodio regulado por voltaje, por ejemplo, indoxacarb o metaflumizona.

(23) Inhibidores de la acetil-CoA carboxilasa, por ejemplo, derivados de ácido tetrónico y tetrámico, por ejemplo, espirodiclofeno, espiromesifeno y espirotetramato.

(24) Inhibidores del transporte de electrones de complejo IV, por ejemplo, fosfinas, por ejemplo, fosfuro de aluminio, fosfuro de calcio, fosfina y fosfuro de zinc o cianuro.

(25) Inhibidores del transporte de electrones de complejo II, por ejemplo, cienopirafeno y ciflumetofeno.

(28) Efectores del receptor de rianodina, por ejemplo, diamidas, por ejemplo, clorantraniliprol, ciantraniliprol y flubendiamida,

otros principios activos, por ejemplo, afidopiropeno, azadiractina, benclotiaz, benzoximato, bifenazato, bromopropilato, chinometionato, criolita,

dicofol, diflovidazina, fluensulfona, flometoquina, flufenerim, flufenoxistrobina, flufiprol, fluopiram, flupiradifurona, fufenozida,

heptaflutrina, imidaclotiz, iprodiona, meperflutrina, paichongding, piflubumida, pirifluquinazona, piriminostrobina, tetrametilflutrina y yodometano; y también preparaciones basadas en Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo) y también los siguientes compuestos: 3-bromo-N-{2-bromo-4-cloro-6-[(1-ciclopropiletil)carbamoil]fenil}-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2005/077934) y 1-{2-fluoro-4-metil-5-[(2,2,2-trifluoroetil)sulfinil]fenil}-3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol-5-amina (conocida del documento WO 2006/043635), {1'-[(2E)-3-(4-clorofenil)prop-2-en-1-il]-5-fluoroespiro[indol-3,4'-piperidin]-1(2H)-il}(2-cloropiridin-4-il)metanona (conocida del documento WO 2003/106457), 2-cloro-N-[2-{1-[(2E)-3-(4-clorofenil)prop-2-en-1-il]piperidin-4-il}-4-(trifluorometil)fenil]isonicotinamida (conocida del documento WO 2006/003494), 3-(2,5-dimetilfenil)-4-hidroxi-8-metoxi-1,8-diazaespiro[4.5]dec-3-en-2-ona (conocida del documento WO 2009/049851), 3-(2,5-dimetilfenil)-8-metoxi-2-oxo-1,8-diazaespiro[4.5]dec-3-en-4-il-etilcarbonato (conocido del documento WO 2009/049851), 4-(but-2-in-1-iloxi)-6-(3,5-dimetilpiperidin-1-il)-5-fluoropirimidina (conocida del documento WO 2004/099160), 4-(but-2-in-1-iloxi)-6-(3-clorofenil)pirimidina (conocida del documento WO 2003/076415), PF1364 (CAS Reg. No. 1204776-60-2), 4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-(trifluorometil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-2-metil-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifluoroetil)amino]etil}benzamida (conocida del documento WO 2005/085216), 4-{5-[3-cloro-5-(trifluorometil)fenil]-5-(trifluorometil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il}-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifluoroetil)amino]etil}-1-naftamida (conocida del documento WO 2009/002809), 2-[2-({[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino)-5-cloro-3-metilbenzoil]-

2-metilhidrazincarboxilato de metilo (conocido del documento WO 2005/085216), 2-[2-({[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino)-5-ciano-3-metilbenzoil]-2-etilhidrazincarboxilato de metilo (conocido del documento WO 2005/085216), 2-[2-({[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino)-5-ciano-3-metilbenzoil]-2-metilhidrazincarboxilato de metilo (conocido del documento WO 2005/085216), 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino)benzoil]-2-etilhidrazincarboxilato de metilo (conocida del documento WO 2005/085216), 1-(3-cloropiridin-2-il)-N-[4-ciano-2-metil-6-(metilcarbamoil)fenil]-3-{[5-(trifluorometil)-2H-tetrazol-2-il]metil}-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2010/069502), N-[2-(5-amino-1,3,4-tiadiazol-2-il)-4-cloro-6-metilfenil]-3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento CN102057925), 3-cloro-N-(2-cianopropan-2-il)-N-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)-2-metilfenil]ftalamida (conocida del documento WO 2012/034472), 8-cloro-N-[(2-cloro-5-metoxifenil)sulfonil]-6-(trifluorometil)imidazo[1,2-a]piridin-2-carboxamida (conocida del documento WO 2010/129500), 4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-(trifluorometil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-2-metil-N-(1-oxidotietan-3-il)benzamida (conocida del documento WO 2009/080250), 4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-(trifluorometil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-2-metil-N-(1-oxidotietan-3-il)benzamida (conocida del documento WO 2012/029672), 1-[(2-cloro-1,3-tiazol-5-il)metil]-4-oxo-3-fenil-4H-pirido[1,2-a]pirimidin-1-io-2-olato (conocido del documento WO 2009/099929), 1-[(6-cloropiridin-3-il)metil]-4-oxo-3-fenil-4H-pirido[1,2-a]pirimidin-1-io-2-olato (conocido del documento WO 2009/099929), (5S,8R)-1-[(6-cloropiridin-3-il)metil]-9-nitro-2,3,5,6,7,8-

hexahidro-1H-5,8-epoxiimidazo[1,2-a]azepina (conocida del documento WO 2010/069266), (2E)-1-[(6-cloropiridin-3-il)metil]-N'-nitro-2-pentilidenhidrazincarboximidamida (conocida del documento WO 2010/060231), 4-(3-{2,6-dicloro-4-[(3,3-dicloroprop-2-en-1-il)oxi]fenoxi}propoxi)-2-metoxi-6-(trifluorometil)pirimidina (conocida del documento CN101337940), N-[2-(ter-butilcarbamoil)-4-cloro-6-metilfenil]-1-(3-cloropiridin-2-il)-3-(fluorometoxi)-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2008/134969).

Fungicidas

Los principios activos especificados en la presente por su nombre común son conocidos y se describen, por ejemplo, en el “Pesticide Manual” o en la Internet (por ejemplo: http://www.alanwood.net/pesticides).

(1) Inhibidores de la biosíntesis de ergosterol, por ejemplo, (1.1) aldimorf, (1.2) azaconazol, (1.3) bitertanol, (1.4) bromuconazol, (1.5) ciproconazol, (1.6) diclobutrazol, (1.7) difenoconazol, (1.8) diniconazol, (1.9) diniconazol-M, (1.10) dodemorf, (1.11) acetato de dodemorf, (1.12) epoxiconazol, (1.13) etaconazol, (1.14) fenarimol, (1.15) fenbuconazol, (1.16) fenhexamida, (1.17) fenpropidina, (1.18) fenpropimorf, (1.19) fluquinconazol, (1.20) flurprimidol, (1.21) flusilazol, (1.22) flutriafol, (1.23) furconazol, (1.24) furconazol-cis, (1.25) hexaconazol, (1.26) imazalilo, (1.27) sulfato de imazalilo, (1.28) imibenconazol, (1.29) ipconazol, (1.30) metconazol, (1.31) miclobutanilo, (1.32) naftifina, (1.33) nuarimol, (1.34) oxpoconazol, (1.35) paclobutrazol, (1.36) pefurazoato, (1.37) penconazol, (1.38) piperalina, (1.39) procloraz, (1.40) propiconazol, (1.41) protioconazol, (1.42) piributicarb, (1.43) pirifenox, (1.44) quinconazol, (1.45) simeconazol, (1.46) espiroxamina, (1.47) tebuconazol, (1.48)

terbinafina, (1.49) tetraconazol, (1.50) triadimefona, (1.51) triadimenol, (1.52) tridemorf, (1.53) triflumizol, (1.54) triforina, (1.55) triticonazol, (1.56) uniconazol, (1.57) uniconazol-P, (1.58) viniconazol, (1.59) voriconazol, (1.60) 1-(4-clorofenil)-2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)cicloheptanol, (1.61) 1-(2,2-dimetil-2,3-dihidro-1H-inden-1-il)-1H-imidazol-5-carboxilato de metilo, (1.62) N'-{5-(difluorometil)-2-metil-4-[3-(trimetilsilil)propoxi]fenil}-N-etil-N-metilimidoformamida, (1.63) N-etil-N-metil-N'-{2-metil-5-(trifluorometil)-4-[3-(trimetilsilil)propoxi]fenil}imidoformamida y (1.64) O-[1-(4-metoxifenoxi)-3,3-dimetilbutan-2-il]-1H-imidazol-1-carbotioato, (1.65) pirisoxazol.

(2) Inhibidores de la respiración (inhibidores de la cadena respiratoria), por ejemplo, (2.1) bixafeno, (2.2) boscalida, (2.3) carboxina, (2.4) diflumetorim, (2.5) fenfuram, (2.6) fluopiram, (2.7) flutolanilo, (2.8) fluxapiroxad, (2.9) furametpir, (2.10) furmeciclox, (2.11) mezcla de isopirazam del racemato sin-epimérico 1RS,4SR,9RS y el racemato anti-empimérico 1RS,4SR,9SR, (2.12) isopirazam (racemato anti-epimérico), (2.13) isopirazam (enantiómero anti-epimérico 1R,4S,9S), (2.14) isopirazam (enantiómero anti-epimérico 1S,4R,9R), (2.15) isopirazam (racemato sin-epimérico 1RS,4SR,9RS), (2.16) isopirazam (enantiómero sin-epimérico 1R,4S,9R), (2.17) isopirazam (enantiómero sin-epimérico 1S,4R,9S), (2.18) mepronilo, (2.19) oxicarboxina, (2.20) penflufeno, (2.21) pentiopirad, (2.22) sedaxano, (2.23) tifluzamida, (2.24) 1-metil-N-[2-(1,1,2,2-tetrafluoroetoxi)fenil]-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.25) 3-(difluorometil)-1-metil-N-[2-(1,1,2,2-tetrafluoroetoxi)fenil]-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.26) 3-(difluorometil)-N-[4-fluoro-2-(1,1,2,3,3,3-hexafluoropropoxi)fenil]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.27) N-[1-(2,4-diclorofenil)-1-metoxipropan-2-il]-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-

4-carboxamida, (2.28) 5,8-difluoro-N-[2-(2-fluoro-4-{[4-(trifluorometil)piridin-2-il]oxi}fenil)etil]quinazolin-4-amina, (2.29) benzovindiflupir, (2.30) N-[(1S,4R)-9-(diclorometilen)-1,2,3,4-tetrahidro-1,4-metanonaftalen-5-il]-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida y (2.31) N-[(1R,4S)-9-(diclorometilen)-1,2,3,4-tetrahidro-1,4-metanonaftalen-5-il]-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.32) 3-(difluorometil)-1-metil-N-(1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il)-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.33) 1,3,5-trimetil-N-(1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il)-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.34) 1-metil-3-(trifluorometil)-N-(1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il)-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.35) 1-metil-3-(trifluorometil)-N-[(3R)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.36) 1-metil-3-(trifluorometil)-N-[(3S)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.37) 3-(difluorometil)-1-metil-N-[(3S)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.38) 3-(difluorometil)-1-metil-N-[(3R)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.39) 1,3,5-trimetil-N-[(3R)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.40) 1,3,5-trimetil-N-[(3S)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (2.41) benodanilo, (2.42) 2-cloro-N-(1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il)piridin-3-carboxamida, (2.43) isofetamida.

(3) Inhibidores de la respiración (inhibidores de la cadena respiratoria) que actúan sobre el complejo III de la cadena respiratoria, por ejemplo, (3.1) ametoctradina, (3.2) amisulbrom, (3.3) azoxistrobina, (3.4) ciazofamida, (3.5) coumetoxistrobina, (3.6) coumoxistrobina, (3.5) dimoxistrobina, (3.8) enestroburina, (3.9) famoxadona, (3.10) fenamidona, (3.11)

flufenoxistrobina, (3.12) fluoxastrobina, (3.13) kresoxim-metilo, (3.14) metominostrobina, (3.15) orisastrobina, (3.16) picoxistrobina, (3.17) piraclostrobina, (3.18) pirametostrobina, (3.19) piraoxistrobina, (3.20) piribencarb, (3.21) triclopiricarb, (3.22) trifloxistrobina, (3.23) (2E)-2-(2-{[6-(3-cloro-2-metilfenoxi)-5-fluoropirimidin-4-il]oxi}fenil)-2-(metoxiimino)-N-metiletanamida, (3.24) (2E)-2-(metoxiimino)-N-metil-2-(2-{[({(1E)-1-[3-(trifluorometil)fenil]etilidene}amino)oxi]metil}fenil)etanamida, (3.25) (2E)-2-(metoxiimino)-N-metil-2-{2-[(E)-({1-[3-(trifluorometil)fenil]etoxi}imino)metil]fenil}etanamida, (3.26) (2E)-2-{2-[({[(1E)-1-(3-{[(E)-1-fluoro-2-feniletenil]oxi}fenil)etiliden]amino}oxi)metil]fenil}-2-(metoxiimino)-N-metiletanamida, (3.27) (2E)-2-{2-[({[(2E,3E)-4-(2,6-diclorofenil)but-3-en-2-iliden]amino}oxi)metil]fenil}-2-(metoxiimino)-N-metiletanamida, (3.28) 2-cloro-N-(1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il)piridin-3-carboxamida, (3.29) 5-metoxi-2-metil-4-(2-{[({(1E)-1-[3-(trifluorometil)fenil]etiliden}amino)oxi]metil}fenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-ona, (3.30) (2E)-2-{2-[({ciclopropil[(4-metoxifenil)imino]metil}sulfanil)metil]fenil}-3-metoxiprop-2-enoato de metilo, (3.31) N-(3-etil-3,5,5-trimetilciclohexil)-3-(formilamino)-2-hidroxibenzamida, (3.32) 2-{2-[(2,5-dimetilfenoxi)metil]fenil}-2-metoxi-N-metilacetamida, (4) inhibidores de mitosis y división celular, por ejemplo, (4.1) benomilo, (4.2) carbendazim, (4.3) clorfenazol, (4.4) dietofencarb, (4.5) etaboxam, (4.6) fluopicolida, (4.7) fuberidazol, (4.8) pencicurona, (4.9) tiabendazol, (4.10) tiofanato-metilo, (4.11) tiofanato, (4.12) zoxamida, (4.13) 5-cloro-7-(4-metilpiperidin-1-il)-6-(2,4,6-

trifluorofenil)[1,2,4]triazolo[1,5-a]pirimidina y (4.14) 3-cloro-5-(6-cloropiridin-3-il)-6-metil-4-(2,4,6-trifluorofenil)piridazina.

(5) Los compuestos que tienen actividad multisitio, por ejemplo, (5.1) mezcla de Bordeaux, (5.2) captafol, (5.3) captano, (5.4) clorotalonilo, (5.5) preparaciones de cobre tales como hidróxido de cobre, (5.6) naftenato de cobre, (5.7) óxido de cobre, (5.8) oxicloruro de cobre, (5.9) sulfato de cobre, (5.10) diclofluanida, (5.11) ditianona, (5.12) dodina, (5.13) base libre de dodina, (5.14) ferbam, (5.15) fluorfolpet, (5.16) folpet, (5.17) guazatina, (5.18) acetato de guazatina, (5.19) iminoctadina, (5.20) albesilato de iminoctadina, (5.21) triacetato de iminoctadina, (5.22) mancobre, (5.23) mancozeb, (5.24) maneb, (5.25) metiram, (5.26) zinc metiram, (5.27) oxina de cobre, (5.28) propamidina, (5.29) propineb, (5.30) azufre y preparaciones de azufre, por ejemplo, polisulfuro de calcio, (5.31) tiram, (5.32) tolilfluanida, (5.33) zineb, (5.34) ziram y (5.35) anilazina.

(6) Inductores de resistencia, por ejemplo, (6.1) acibenzolar-S-metilo, (6.2) isotianilo, (6.3) probenazol, (6.4) tiadinilo y (6.5) laminarina.

(7) Inhibidores de la biosíntesis de aminoácidos y proteínas, por ejemplo, (7.1), (7.2) blasticidina-S, (7.3) ciprodinilo, (7.4) kasugamicina, (7.5) clorhidrato de casugamicina hidrato, (7.6) mepanipirim, (7.7) pirimetanilo, (7.8) 3-(5-fluoro-3,3,4,4-tetrametil-3,4-dihidroisoquinolin-1-il)quinolina y (7.9) oxitetraciclina y (7.10) estreptomicina.

(8) Inhibidores de la producción de ATP, por ejemplo, (8.1) acetato de fentina, (8.2) cloruro de fentina, (8.3) hidróxido de fentina y (8.4) siltiofam.

(9) Inhibidores de la síntesis de la pared celular, por ejemplo, (9.1) bentiavalicarb, (9.2) dimetomorf, (9.3) flumorf, (9.4) iprovalicarb, (9.5)

mandipropamida, (9.6) polioxinas, (9.7) polioxorim, (9.8) validamicina A, (9.9) valifenalato y (9.10) polioxina B.

(10) Inhibidores de la síntesis de lípidos y de membrana, por ejemplo, (10.1) bifenilo, (10.2) clorneb, (10.3) diclorano, (10.4) edifenfos, (10.5) etridiazol, (10.6) yodocarb, (10.7) iprobenfos, (10.8) isoprotiolano, (10.9) propamocarb, (10.10) clorhidrato de propamocarb, (10.11) protiocarb, (10.12) pirazofos, (10.13) quintoceno, (10.14) tecnaceno y (10.15) tolclofos-metilo.

(11) Inhibidores de la biosíntesis de melanina, por ejemplo, (11.1) carpropamida, (11.2) diclocimet, (11.3) fenoxanilo, (11.4) ftalida, (11.5) piroquilona, (11.6) triciclazol y (11.7) {3-metil-1-[(4-metilbenzoil)amino]butan-2-il}carbamato de 2,2,2-trifluoroetilo.

(12) Inhibidores de la síntesis de ácido nucleico, por ejemplo, (12.1) benalaxilo, (12.2) benalaxil-M (kiralaxilo), (12.3) bupirimato, (12.4) clozilacona, (12.5) dimetirimol, (12.6) etirimol, (12.7) furalaxilo, (12.8) himexazol, (12.9) metalaxilo, (12.10) metalaxil-M (mefenoxam), (12.11) ofurace, (12.12) oxadixilo, (12.13) ácido oxolínico y (12.14) octilinona.

(13) Inhibidores de la transducción de señales, por ejemplo, (13.1) clozolinato, (13.2) fenpiclonilo, (13.3) fludioxonilo, (13.4) iprodiona, (13.5) procimidona, (13.6) quinoxifeno, (13.7) vinclozolina y (13.8) proquinazida.

(14) Desacopladores, por ejemplo, (14.1) binapacrilo, (14.2) dinocap, (14.3) ferimzona, (14.4) fluazinam y (14.5) meptildinocap.

(15) Otros compuestos, por ejemplo, (15.1) bentiazol, (15.2) betoxazina, (15.3) capsimicina, (15.4) carvona, (15.5) quinometionatm, (15.6) piriofenona (clazafenona), (15.7) cufraneb, (15.8) ciflufenamida, (15.9) cimoxanilo, (15.10) ciprosulfamida, (15.11) dazomet, (15.12) debacarb,

(15.13) diclorofeno, (15.14) diclomezina, (15.15) difenzoquat, (15.16) metilsulfato de difenzoquat, (15.17) difenilamina, (15.18) EcoMate, (15.19) fenpirazamina, (15.20) flumetover, (15.21) fluorimida, (15.22) flusulfamida, (15.23) flutianilo, (15.24) fosetil-aluminio, (15.25) fosetil-calcio, (15.26) fosetil-sodio, (15.27) hexaclorobenceno, (15.28) irumamicina, (15.29) metasulfocarb, (15.30) isotiocianato de metilo, (15.31) metrafenona, (15.32) mildiomicina, (15.33) natamicina, (15.34) dimetilditiocarbamato de níquel, (15.35) nitrotal-isopropilo, (15.36) octilinona, (15.37) oxamocarb, (15.38) oxifentiína, (15.39) pentaclorofenol y sus sales, (15.40) fenotrina, (15.41) ácido fosfórico y sus sales, (15.42) propamocarb-fosetilato, (15.43) propanosina-sodio, (15.44) pirimorf, (15.45) (2E)-3-(4-ter-butilfenil)-3-(2-cloropiridin-4-il)-1-(morfolin-4-il)prop-2-en-1-ona, (15.46) (2Z)-3-(4-ter-butilfenil)-3-(2-cloropiridin-4-il)-1-(morfolin-4-il)prop-2-en-1-ona, (15.47) pirrolnitrina, (15.48) tebufloquina, (15.49) tecloftalam, (15.50) tolnifanida, (15.51) triazoxida, (15.52) triclamida, (15.53) zarilamida, (15.54) 2-metilpropanoato de (3S,6S,7R,8R)-8-bencil-3-[({3-[(isobutiriloxi)metoxi]-4-metoxipiridin-2-il}carbonil)amino]-6-metil-4,9-dioxo-1,5-dioxonan-7-ilo, (15.55) 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]etanona, (15.56) 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]etanona, (15.57) 1-(4-{4-[5-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]etanona, (15.58) 1H-imidazol-1-carboxilato de 1-(4-metoxifenoxi)-3,3-dimetilbutan-2-ilo, (15.59) 2,3,5,6-tetracloro-4-(metilsulfonil)piridina, (15.60) 2,3-dibutil-6-clorotieno[2,3-d]pirimidin-4(3H)-ona, (15.61) 2,6-dimetil-1H,5H-

[1,4]ditiino[2,3-c:5,6-c']dipirrol-1,3,5,7(2H,6H)-tetrona, (15.62) 2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]-1-(4-{4-[(5R)-5-fenil-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)etanona, (15.63) 2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]-1-(4-{4-[(5S)-5-fenil-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)etanona, (15.64) 2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]-1-{4-[4-(5-fenil-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il)-1,3-tiazol-2-il]piperidin-1-il}etanona, (15.65) 2-butoxi-6-yodo-3-propil-4H-cromen-4-ona, (15.66) 2-cloro-5-[2-cloro-1-(2,6-difluoro-4-metoxifenil)-4-metil-1H-imidazol-5-il]piridina, (15.67) 2-fenilfenol y sales, (15.68) 3-(4,4,5-trifluoro-3,3-dimetil-3,4-dihidroisoquinolin-1-il)quinolina, (15.69) 3,4,5-tricloropiridin-2,6-dicarbonitrilo, (15.70) 3-cloro-5-(4-clorofenil)-4-(2,6-difluorofenil)-6-metilpiridazina, (15.71) 4-(4-clorofenil)-5-(2,6-difluorofenil)-3,6-dimetilpiridazina, (15.72) 5-amino-1,3,4-tiadiazol-2-tiol, (15.73) 5-cloro-N'-fenil-N'-(prop-2-in-1-il)tiofene-2-sulfonohidrazida, (15.74) 5-fluoro-2-[(4-fluorobencil)oxi]pirimidin-4-amina, (15.75) 5-fluoro-2-[(4-metilbencil)oxi]pirimidin-4-amina, (15.76) 5-metil-6-octil[1,2,4]triazolo[1,5-a]pirimidin-7-amina, (15.77) (2Z)-3-amino-2-ciano-3-fenilacrilato de etilo, (15.78) N'-(4-{[3-(4-clorobencil)-1,2,4-tiadiazol-5-il]oxi}-2,5-dimetilfenil)-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.79) N-(4-clorobencil)-3-[3-metoxi-4-(prop-2-in-1-iloxi)fenil]propanamida, (15.80) N-[(4-clorofenil)(ciano)metil]-3-[3-metoxi-4-(prop-2-in-1-iloxi)fenil]propanamida, (15.81) N-[(5-bromo-3-cloropiridin-2-il)metil]-2,4-dicloronicotinamida, (15.82) N-[1-(5-bromo-3-cloropiridin-2-il)etil]-2,4-dicloronicotinamida, (15.83) N-[1-(5-bromo-3-cloropiridin-2-il)etil]-2-fluoro-4-yodonicotinamida, (15.84) N-{(E)-[(ciclopropilmetoxi)imino][6-(difluorometoxi)-2,3-difluorofenil]metil}-2-fenilacetamida, (15.85) N-{(Z)-[(ciclopropilmetoxi)imino][6-(difluorometoxi)-

2,3-difluorofenil]metil}-2-fenilacetamida, (15.86) N'-{4-[(3-ter-butil-4-ciano-1,2-tiazol-5-il)oxi]-2-cloro-5-metilfenil}-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.87) N-metil-2-(1-{[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]acetil}piperidin-4-il)-N-(1,2,3,4-tetrahidronaftalen-1-il)-1,3-tiazol-4-carboxamida, (15.88) N-metil-2-(1-{[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]acetil}piperidin-4-il)-N-[(1R)-1,2,3,4-tetrahidronaftalen-1-il]-1,3-tiazol-4-carboxamida, (15.89) N-metil-2-(1-{[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]acetil}piperidin-4-il)-N-[(1S)-1,2,3,4-tetrahidronaftalen-1-il]-1,3-tiazol-4-carboxamida, (15.90) {6-[({[(1-metil-1H-tetrazol-5-il)(fenil)metilene]amino}oxi)metil]piridin-2-il}carbamato de pentilo, (15.91) ácido fenazin-1-carboxílico, (15.92) quinolin-8-ol, (15.93) sulfato de quinolin-8-ol (2:1), (15.94) {6-[({[(1-metil-1H-tetrazol-5-il)(fenil)metilen]amino}oxi)metil]piridin-2-il}carbamato de ter-butilo, (15.95) 1-metil-3-(trifluorometil)-N-[2'-(trifluorometil)bifenil-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.96) N-(4'-clorobifenil-2-il)-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.97) N-(2',4'-diclorobifenil-2-il)-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.98) 3-(difluorometil)-1-metil-N-[4'-(trifluorometil)bifenil-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.99) N-(2',5'-difluorobifenil-2-il)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.100) 3-(difluorometil)-1-metil-N-[4'-(prop-1-in-1-il)bifenil-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.101) 5-fluoro-1,3-dimetil-N-[4'-(prop-1-in-1-il)bifenil-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.102) 2-cloro-N-[4'-(prop-1-in-1-il)bifenil-2-il]nicotinamida, (15.103) 3-(difluorometil)-N-[4'-(3,3-dimetilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.104) N-[4'-(3,3-dimetilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]-5-fluoro-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.105) 3-(difluorometil)-N-(4'-etinilbifenil-2-il)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.106) N-(4'-etinilbifenil-2-il)-5-fluoro-1,3-dimetil-1H-pirazol-

4-carboxamida, (15.107) 2-cloro-N-(4'-etinilbifenil-2-il)nicotinamida, (15.108) 2-cloro-N-[4'-(3,3-dimetilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]nicotinamida, (15.109) 4-(difluorometil)-2-metil-N-[4'-(trifluorometil)bifenil-2-il]-1,3-tiazol-5-carboxamida, (15.110) 5-fluoro-N-[4'-(3-hidroxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.111) 2-cloro-N-[4'-(3-hidroxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]nicotinamida, (15.112) 3-(difluorometil)-N-[4'-(3-metoxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.113) 5-fluoro-N-[4'-(3-metoxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.114) 2-cloro-N-[4'-(3-metoxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenil-2-il]nicotinamida, (15.115) (5-bromo-2-metoxi-4-metilpiridin-3-il)(2,3,4-trimetoxi-6-metilfenil)metanona, (15.116) N-[2-(4-{[3-(4-clorofenil)prop-2-in-1-il]oxi}-3-metoxifenil)etil]-N2-(metilsulfonil)valinamida, (15.117) ácido 4-oxo-4-[(2-feniletil)amino]butanoico, (15.118) {6-[({[(Z)-(1-metil-1H-tetrazol-5-il)(fenil)metilen]amino}oxi)metil]piridin-2-il}carbamato de but-3-in-1-ilo, (15.119) 4-amino-5-fluoropirimidin-2-ol (forma tautomérica: 4-amino-5-fluoropirimidin-2(1H)-ona), (15.120) 3,4,5-trihidroxibenzoato de propilo, (15.121) 1,3-dimetil-N-(1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il)-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.122) 1,3-dimetil-N-[(3R)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.123) 1,3-dimetil-N-[(3S)-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.124) [3-(4-cloro-2-fluorofenil)-5-(2,4-difluorofenil)-1,2-oxazol-4-il](piridin-3-il)metanol, (15.125) (S)-[3-(4-cloro-2-fluorofenil)-5-(2,4-difluorofenil)-1,2-oxazol-4-il](piridin-3-il)metanol, (15.126) (R)-[3-(4-cloro-2-fluorofenil)-5-(2,4-difluorofenil)-1,2-oxazol-4-il](piridin-3-il)metanol, (15.127) 2-{[3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.128) tiocianato de 1-{[3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-

il]metil}-1H-1,2,4-triazol-5-ilo, (15.129) 5-(alilsulfanil)-1-{[3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-1H-1,2,4-triazol, (15.130) 2-[1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.131) 2-{[rel(2R,3S)-3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.132) 2-{[rel(2R,3R)-3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.133) tiocianato de 1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-1H-1,2,4-triazol-5-ilo, (15.134) tiocianato de 1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-1H-1,2,4-triazol-5-ilo, (15.135) 5-(allilsulfanil)-1-{[rel(2R,3S)-3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-1H-1,2,4-triazol, (15.136) 5-(alilsulfanil)-1-{[rel(2R,3R)-3-(2-clorofenil)-2-(2,4-difluorofenil)oxiran-2-il]metil}-1H-1,2,4-triazol, (15.137) 2-[(2S,4S,5S)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.138) 2-[(2R,4S,5S)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.139) 2-[(2R,4R,5R)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.140) 2-[(2S,4R,5R)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.141) 2-[(2S,4S,5R)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.142) 2-[(2R,4S,5R)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.143) 2-[(2R,4R,5S)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.144) 2-[(2S,4R,5S)-1-(2,4-diclorofenil)-5-hidroxi-2,6,6-trimetilheptan-4-il]-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-tiona, (15.145) 2-fluoro-6-(trifluorometil)-N-(1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-

il)benzamida, (15.146) 2-(6-bencilpiridin-2-il)quinazolina, (15.147) 2-[6-(3-fluoro-4-metoxifenil)-5-metilpiridin-2-il]quinazolina, (15.148) 3-(4,4-difluoro-3,3-dimetil-3,4-dihidroisoquinolin-1-il)quinolina, (15.149) ácido abscísico, (15.150) 3-(difluorometil)-N-metoxi-1-metil-N-[1-(2,4,6-triclorofenil)propan-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.151) N'-[5-bromo-6-(2,3-dihidro-1H-inden-2-iloxi)-2-metilpiridin-3-il]-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.152) N'-{5-bromo-6-[1-(3,5-difluorofenil)etoxi]-2-metilpiridin-3-il}-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.153) N'-{5-bromo-6-[(1R)-1-(3,5-difluorofenil)etoxi]-2-metilpiridin-3-il}-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.154) N'-{5-bromo-6-[(1S)-1-(3,5-difluorofenil)etoxi]-2-metilpiridin-3-il}-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.155) N'-{5-bromo-6-[(cis-4-isopropilciclohexil)oxi]-2-metilpiridin-3-il}-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.156) N'-{5-bromo-6-[(trans-4-isopropilciclohexil)oxi]-2-metilpiridin-3-il}-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.157) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-N-(2-isopropilbencil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.158) N-ciclopropil-N-(2-ciclopropilbencil)-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.159) N-(2-ter-butilbencil)-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.160) N-(5-cloro-2-etilbencil)-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.161) N-(5-cloro-2-isopropilbencil)-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.162) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-N-(2-etil-5-fluorobencil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.163) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-N-(5-fluoro-2-isopropilbencil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.164) N-ciclopropil-N-(2-ciclopropil-5-fluorobencil)-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.165) N-(2-ciclopentil-5-fluorobencil)-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-

fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.166) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-N-(2-fluoro-6-isopropilbencil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.167) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-N-(2-etil-5-metilbencil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.168) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-N-(2-isopropil-5-metilbencil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.169) N-ciclopropil-N-(2-ciclopropil-5-metilbencil)-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.170) N-(2-ter-butil-5-metilbencil)-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.171) N-[5-cloro-2-(trifluorometil)bencil]-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.172) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-N-[5-metil-2-(trifluorometil)bencil]-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.173) N-[2-cloro-6-(trifluorometil)bencil]-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.174) N-[3-cloro-2-fluoro-6-(trifluorometil)bencil]-N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.175) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-N-(2-etil-4,5-dimetilbencil)-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.176) N-ciclopropil-3-(difluorometil)-5-fluoro-N-(2-isopropilbencil)-1-metil-1H-pirazol-4-carbotioamida, (15.177) 3-(difluorometil)-N-(7-fluoro-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.178) 3-(difluorometil)-N-[(3R)-7-fluoro-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.179) 3-(difluorometil)-N-[(3S)-7-fluoro-1,1,3-trimetil-2,3-dihidro-1H-inden-4-il]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, (15.180) N'-(2,5-dimetil-4-fenoxifenil)-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.181) N'-{4-[(4,5-dicloro-1,3-tiazol-2-il)oxi]-2,5-dimetilfenil}-N-etil-N-metilimidoformamida, (15.182) N-(4-cloro-2,6-difluorofenil)-4-(2-cloro-4-fluorofenil)-1,3-dimetil-1H-pirazol-5-

amina. Todos los componentes de mezcla mencionados en las clases (1) a (15), según sea el caso, pueden formar sales con bases o ácidos apropiados si son capaces de hacerlo sobre la base de sus grupos funcionales.

Pesticidas biológicos como componentes de mezcla

Los compuestos de la fórmula (I) se pueden combinar con pesticidas biológicos.

Los pesticidas biológicos incluyen en especial bacterias, hongos, levaduras, extractos de plantas y productos formados por microorganismos, que incluyen proteínas y metabolitos secundarios.

Los pesticidas biológicos incluyen bacterias tales como bacterias formadoras de esporas, bacterias colonizadoras de raíces y bacterias que actúan como insecticidas, fungicidas o nematicidas biológicos.

Los ejemplos de tales bacterias que se usan o que se pueden usar como pesticidas biológicos son:

Bacillus amyloliquefaciens, cepa FZB42 (DSM 231179), o Bacillus cereus, en especial B. cereus cepa CNCM I-1562 o Bacillus firmus, cepa I-1582 (Número de acceso CNCM I-1582) o Bacillus pumilus, en especial cepa GB34 (Número de acceso ATCC 700814) y cepa QST2808 (Número de acceso NRRL B-30087), o Bacillus subtilis, en especial cepa GB03 (Número de acceso ATCC SD-1397), o Bacillus subtilis cepa QST713 (Número de acceso NRRL B-21661) o Bacillus subtilis cepa OST 30002 (Número de acceso NRRL B-50421) Bacillus thuringiensis, en especial B. thuringiensis subespecie israelensis (serotipo H-14), cepa AM65-52 (Número de acceso ATCC 1276), o B. thuringiensis subsp. aizawai, en especial cepa ABTS-1857 (SD-1372), o B. thuringiensis subsp. kurstaki

cepa HD-1, o B. thuringiensis subsp. tenebrionis cepa NB 176 (SD-5428), Pasteuria penetrans, Pasteuria spp. (nematodo Rotylenchulus reniformis)-PR3 (Número de acceso ATCC SD-5834), Streptomyces microflavus cepa AQ6121 (= QRD 31.013, NRRL B-50550), Streptomyces galbus cepa AQ 6047 (Número de acceso NRRL 30232).

Los ejemplos de hongos y levaduras que se usan o que se pueden usar como pesticidas biológicos son:

Beauveria bassiana, en particular cepa ATCC 74040, Coniothyrium minitans, en especial cepa CON/M/91-8 (Número de acceso DSM-9660), Lecanicillium spp., en especial cepa HRO LEC 12, Lecanicillium lecanii (antes conocido como Verticillium lecanii), en especial cepa KV01, Metarhizium anisopliae, en especial cepa F52 (DSM3884/ ATCC 90448), Metschnikowia fructicola, en especial cepa NRRL Y-30752, Paecilomyces fumosoroseus (ahora: Isaria fumosorosea), en especial cepa IFPC 200613, o cepa Apopka 97 (Número de acceso ATCC 20874), Paecilomyces lilacinus, en especial P. lilacinus cepa 251 (AGAL 89/030550), Talaromyces flavus, en especial cepa V117b, Trichoderma atroviride, en especial cepa SC_1 (Número de acceso CBS 122089), Trichoderma harzianum, en particular T. harzianum rifai T39. (Número de acceso CNCM I-952).

Los ejemplos de virus que se usan o se pueden usar como pesticidas biológicos son:

virus de granulosis Adoxophyes orana (GV), virus de granulosis Cydia pomonella (GV), virus de polihedrosis nuclear Helicoverpa armigera (NPV), mNPV de Spodoptera exigua, mNPV de Spodoptera frugiperda, NPV de Spodoptera littoralis.

También están incluidos bacterias y hongos que se añaden como 'inoculantes' a plantas o partes de plantas u órganos de plantas y que, en virtud de sus propiedades particulares, promueven el crecimiento de plantas y la salud de las plantas. Los ejemplos incluyen:

Agrobacterium spp., Azorhizobium caulinodans, Azospirillum spp., Azotobacter spp., Bradyrhizobium spp., Burkholderia spp., en especial Burkholderia cepacia (antes conocido como Pseudomonas cepacia), Gigaspora spp., o Gigaspora monosporum, Glomus spp., Laccaria spp., Lactobacillus buchneri, Paraglomus spp., Pisolithus tinctorus, Pseudomonas spp., Rhizobium spp., en especial Rhizobium trifolii, Rhizopogon spp., Scleroderma spp., Suillus spp., Streptomyces spp.

Protectores como componentes de mezcla

Los compuestos de la fórmula (I) se pueden combinar con protectores, por ejemplo, benoxacor, cloquintocet (-mexilo), ciometrinilo, ciprosulfamida, diclormida, fenclorazol (-etilo), fenclorim, flurazol, fluxofenim, furilazol, isoxadifeno (-etilo), mefenpir (-dietilo), anhídrido naftálico, oxabetrinilo, 2-metoxi-N-({4-[(metilcarbamoil)amino]fenil}sulfonil)benzamida (CAS 129531-12-0), 4-(dicloroacetil)-1-oxa-4-azaespiro[4.5]decano (CAS 71526-07-3), 2,2,5-trimetil-3-(dicloroacetil)-1,3-oxazolidina (CAS 52836-31-4).

Plantas y partes de plantas

Todas las plantas y partes de plantas se pueden tratar de acuerdo con la invención. Aquí, plantas se han de entender como todas las plantas y poblaciones de plantas tales como plantas salvajes o plantas de cultivos deseadas y no deseadas (que incluyen plantas de cultivos naturales), por ejemplo, cereales (trigo, arroz, triticale, cebada, centeno, avena), maíz, porotos de soja, patata, remolacha, caña de azúcar, tomates, guisantes y

otras especies vegetales, algodón, tabaco, colza oleaginosa y también plantas frutales (con las frutas manzanas, peras, cítricos y uvas). Las plantas de cultivo que se pueden obtener por métodos de cría y optimización convencionales o por métodos biotecnológicos y de ingeniería genética o combinaciones de estos métodos, que incluyen las plantas transgénicas y que incluyen los cultivares de plantas que se pueden proteger o no por derechos de los criadores de plantas. Las partes de plantas se han de entender como todas las partes y órganos de las plantas por encima y por debajo del suelo, tales como brotes, hojas, flores y raíces, dando como ejemplos hojas, agujas, troncos, tallos, flores, cuerpos de frutas, frutos y semillas y también tubérculos, raíces y rizomas. Las partes de plantas también incluyen material cosechado y material de propagación vegetativo y generativo, por ejemplo, esquejes, tubérculos, rizomas, cortes y semillas.

El tratamiento de acuerdo con la invención de las plantas y partes de plantas con los compuestos de la fórmula (I) se efectuó directamente o dejando que ellos actuaran sobre los alrededores, el hábitat o su espacio de almacenamiento por medio de los métodos de tratamiento habituales, por ejemplo, por inmersión, pulverización, evaporación, nebulización, dispersión, pintura, inyección y, en el caso del material de propagación, en especial en el caso de semillas, también por aplicación de uno o varios recubrimientos.

Como ya se mencionó con anterioridad, es posible de acuerdo con la invención tratar las plantas y sus partes. En una realización preferida, se tratan especies de plantas silvestres y cultivares de plantas o aquellos obtenidos por cruza biológica convencional, tales como cruza o fusión de

protoplastos y sus partes. En otra realización preferida, se tratan plantas transgénicas y cultivares de plantas obtenidos por métodos de ingeniería genética, de ser apropiado, en combinación con métodos convencionales (organismos genéticamente modificados) y sus partes. El término “partes” o “partes de plantas” se han explicado con anterioridad. Se da particular preferencia de acuerdo con la invención al tratamiento de plantas de los respectivos cultivares habituales en comercios o aquellos que están en uso. Los cultivares de plantas se han de entender como plantas que tienen nuevas propiedades (“rasgos”) y que fueron obtenidos por técnicas de cría convencionales, por mutagénesis o por técnicas de ADN recombinantes. Pueden ser cultivares, variedades, biotipos o genotipos.

Plantas transgénicas, tratamiento de semillas y eventos de integración

Las plantas transgénicas o cultivares de plantas preferidos (aquellos obtenidos por ingeniería genética) que se han de tratar de acuerdo con la invención incluyen todas las plantas que, a través de la modificación genética, recibieron material genético que imparte particulares rasgos útiles ventajosos a estas plantas. Los ejemplos de tales propiedades son mejor crecimiento de plantas, mayor tolerancia a altas o bajas temperaturas, mayor tolerancia a la sequía o a niveles de agua o salinidad del suelo, mayor rendimiento de floración, cosecha más simple, maduración acelerada, mayores rendimientos, mayor calidad y/o un mayor valor nutricional de los productos cosechados, mejor vida en almacenamiento y/o procesabilidad de los productos cosechados. Otros ejemplos y en particular ejemplos enfatizados de tales propiedades son mayor resistencia de las plantas contra plagas animales y microbianas, tales como contra insectos, arácnidos, nematodos, ácaros, babosas y

caracoles debido, por ejemplo, a las toxinas formadas en las plantas, en particular aquellas formadas en las plantas por el material genético de Bacillus thuringiensis (por ejemplo, por los genes CryIA(a), CryIA(b), CryIA(c), CryIIA, CryIIIA, CryIIIB2, Cry9c Cry2Ab, Cry3Bb y CryIF y también sus combinaciones), y también mayor resistencia de las plantas contra hongos, bacterias y/o virus fitopatógenos causada, por ejemplo, por la resistencia adquirida sistémica (SAR), sistemina, fitoalexinas, elicitores y genes de resistencia y proteínas correspondientemente expresadas y toxinas y también mayor tolerancia de las plantas a determinados principios activos herbicidas, por ejemplo, imidazolinonas, sulfonilureas, glifosato o fosfinotricina (por ejemplo, el gen "PAT"). Los genes que imparten los rasgos deseados en cuestión también pueden estar presentes en combinaciones con otros en las plantas transgénicas. Los ejemplos de plantas transgénicas incluyen las importantes plantas de cultivo, tales como cereales (trigo, arroz, triticale, cebada, centeno, avena), maíz, porotos de soja, patatas, remolacha, caña de azúcar, tomates, guisantes y otros tipos de vegetales, algodón, tabaco, colza oleaginosa y también plantas frutales (con las frutas manzanas, peras, cítricos y uvas), dando particular énfasis al maíz, porotos de soja, trigo, arroz, patatas, algodón, caña de azúcar, tabaco y colza oleaginosa. Los rasgos que se enfatizan en particular son la mayor resistencia de las plantas a los insectos, arácnidos, nematodos y babosas y caracoles.

Protección de cultivos – tipos de tratamiento

El tratamiento de las plantas y partes de plantas con los compuestos de la fórmula (I) se lleva a cabo directamente o por acción sobre sus alrededores, hábitat o espacio de almacenamiento por medio de métodos

de tratamiento convencionales, por ejemplo, por inmersión, pulverización, atomización, irrigación, evaporación, espolvoreo, nebulización, difusión, formación de espuma, pintura, propagación, inyección, irrigación, irrigación por goteo y, en el caso del material de propagación, en especial en el caso de semillas, también por tratamiento de semillas seco, tratamiento de semillas líquido, un polvo soluble en agua para tratamiento en suspensión, por incrustación, por recubrimiento con una o varias capas, etc. También es posible aplicar los compuestos de la fórmula (I) por el método de volumen ultrabajo o inyectar la forma de uso o el compuesto de la fórmula (I) propiamente dicho en el suelo.

Un tratamiento directo preferido de las plantas es la aplicación foliar, lo que significa que los compuestos de la fórmula (I) se aplican al follaje, donde el la frecuencia de tratamiento y la tasa de aplicación se han de ajustar de acuerdo con el nivel de infestación con la plaga en cuestión.

En el caso de compuestos sistémicamente activos, los compuestos de la fórmula (I) también acceden a las plantas por medio del sistema de raíces. Las plantas se tratan luego por acción de los compuestos de la fórmula (I) sobre el hábitat de la planta. Esto se puede hacer, por ejemplo, por irrigación o por mezcla en el suelo o la solución nutriente, lo que significa que el locus de la planta (por ejemplo, suelo o sistemas hidropónicos) se impregna con una forma líquida de los compuestos de la fórmula (I) o por aplicación en el suelo, es decir, los compuestos de la fórmula (I) se introducen en forma sólida (por ejemplo, en forma de gránulos) en el locus de las plantas. En el caso de cultivos de arrozales, esto se puede hacer dosificando el compuesto de la fórmula (I) en una fórmula de aplicación sólida (por ejemplo, como gránulos) en un campo de arroz inundado.

Tratamiento de semillas

El control de plagas animales por tratamiento de semillas de plantas se ha conocido durante un tiempo largo y es el objeto de constantes mejoras. Sin embargo, el tratamiento de semillas conlleva una serie de problemas que no siempre se pueden resolver de una manera satisfactoria. Así, es deseable desarrollar métodos para proteger las semillas y la planta germinante que dispensa o al menos reduce considerablemente la aplicación adicional de pesticidas durante el almacenamiento, después de la siembra o después de la emergencia de las plantas. Adicionalmente, es deseable optimizar la cantidad de ingrediente usado de modo de proporcionar una óptima protección para las semillas y la planta germinante del ataque por plagas animales, pero sin dañar la planta propiamente dicha por el principio activo empleado. En particular, los métodos para el tratamiento de semillas también tendrán en cuenta las propiedades insecticidas o nematicidas intrínsecas de plantas transgénicas resistentes a plagas o tolerantes a plagas a fin de lograr una protección óptima de las semillas y la planta germinante con un mínimo gasto de productos de protección de cultivos.

Por ello, la presente invención también se refiere más en particular a un método para la protección de semillas y plantas germinantes, del ataque de plagas, por tratamiento de semillas con uno de los compuestos de la fórmula (I). El método de acuerdo con la invención para proteger semillas y plantas germinantes contra el ataque de plagas también comprende un método en el que la semilla se trata simultáneamente en una operación o secuencialmente con un compuesto de la fórmula (I) y un componente de mezcla. También comprende un método en el que la semilla se trata en

diferentes momentos con un compuesto de la fórmula (I) y un componente de mezcla.

La invención asimismo se refiere al uso de los compuestos de la fórmula (I) para el tratamiento de semillas para proteger las semillas y la planta resultante de plagas animales.

Por otra parte, la invención también se refiere a semillas que fueron tratadas con un compuesto de la fórmula (I) para la protección de plagas animales. La invención también se refiere a semillas que fueron tratadas simultáneamente con un compuesto de la fórmula (I) y un componente de mezcla. La invención también se refiere a semillas que fueron tratadas en diferentes momentos con un compuesto de la fórmula (I) y un componente de mezcla. En el caso de semillas que fueron tratados en diferentes momentos con un compuesto de la fórmula (I) y un componente de mezcla, las sustancias individuales pueden estar presentes en la semilla en diferentes capas. En este caso, las capas que comprenden un compuesto de la fórmula (I) y componentes de mezcla se pueden separar opcionalmente por medio de una capa intermediaria. La invención también se refiere a semillas en las que un compuesto de la fórmula (I) y un componente de mezcla fueron aplicados como parte de un recubrimiento o como otra capa u otras capas además de un recubrimiento.

Por otra parte, la invención se refiere a semillas que, después del tratamiento con un compuesto de la fórmula (I), se somete a un proceso de recubrimiento con película para evitar la abrasión de polvo sobre la semilla.

Una de las ventajas que se producen cuando uno de los compuestos de la fórmula (I) actúa sistémicamente consiste en que el tratamiento de la semilla protege no sólo la semilla propiamente dicha sino también las plantas resultantes de ella, después de la emergencia, de plagas animales. De esta manera, se puede prescindir del tratamiento inmediato del cultivo al momento de la siembra o poco tiempo después.

Otra ventaja es que el tratamiento de las semillas con un compuesto de la fórmula (I) puede mejorar la germinación y la emergencia de las semillas tratadas.

Asimismo se considera ventajoso que los compuestos de la fórmula (I) también se puedan usar en especial para semillas transgénicas.

Los compuestos de la fórmula (I) también se pueden usar en combinación con composiciones de tecnología de señalización, que dan como resultado, por ejemplo, una mejor colonización por simbiontes, por ejemplo, rhizobia, micorrhizae y/o bacterias u hongos endofíticos, y/o fijación optimizada de nitrógeno.

Los compuestos de la fórmula (I) son apropiados para la protección de semillas de cualquier variedad de plantas que se usa en agricultura, en el invernadero, en forestas o en horticultura. Más en particular, esto incluye semillas de cereales (por ejemplo, trigo, cebada, centeno, mijo y avena), maíz, algodón, porotos de soja, arroz, patatas, girasoles, café, tabaco, canola, colza oleaginosa, nabos (por ejemplo, remolachas y remolachas forrajeras), maníes, hortalizas (por ejemplo, tomates, pepinos, guisantes, vegetales crucíferos, cebollas y lechuga), plantas frutales, céspedes y plantas ornamentales. Es de particular importancia el tratamiento de las

semillas de cereales (tales como trigo, cebada, centeno y avena), maíz, soja, algodón, canola, colza oleaginosa y arroz.

Como ya se mencionó con anterioridad, el tratamiento de semillas transgénicas con un compuesto de la fórmula (I) también es de particular importancia. Esto implica las semillas de plantas que, en general, contienen al menos un gen heterólogo que controla la expresión de un polipéptido que tiene propiedades en particular insecticidas y/o nematicidas en particular. Los genes heterolólogos en semillas transgénicas pueden originarse de microorganismos tales como Bacillus, Rhizobium, Pseudomonas, Serratia, Trichoderma, Clavibacter, Glomus o Glyocladium. La presente invención es apropiada en particular para el tratamiento de semillas transgénicas que contienen al menos un gen heterólogo que se origina de Bacillus sp. Es más preferible un gen heterólogo derivado de Bacillus thuringiensis.

En el contexto de la presente invención, el compuesto de la fórmula (I) se aplica a las semillas. Con preferencia, la semilla se trata en un estado en el que es suficientemente estable para evitar que el daño se produzca en el curso del tratamiento. En general, la semilla se puede tratar en cualquier momento entre la siembra y la cosecha. Es habitual usar las semillas que se han separado de la planta y liberado de mazorcas, vainas, tallos, capas, pelos o la pulpa de las frutas. Por ejemplo, es posible usar semillas que fueron cosechadas, limpiadas y secadas hasta un contenido de humedad que permite el almacenamiento. Alternativamente, también es posible usar semillas que, después de secar, se han tratado con, por ejemplo, agua y luego se vuelven a secar, por ejemplo, cebado.

En general, en el tratamiento de las semillas, se ha de asegurar que la cantidad del compuesto de la fórmula (I) y/u otros aditivos aplicados a la semilla se seleccione de modo tal que la germinación de la semilla no se vea alterada y la planta que surge de ella no esté dañada. Esto se debe asegurar en particular en el caso de principios activos que pueden exhibir efectos fitotóxicos en ciertas tasas de aplicación.

Los compuestos de la fórmula (I) se aplican en general a las semillas en una formulación apropiada. Las formulaciones y procesos apropiados para el tratamiento de semillas son conocidos por los expertos en la técnica.

Los compuestos de la fórmula (I) se pueden convertir en formulaciones de desinfección de semillas habituales, tales como soluciones, emulsiones, suspensiones, polvos, espumas, suspensiones u otras composiciones de recubrimiento para semillas y también formulaciones ULV.

Estas formulaciones se producen de una manera conocida, mezclando los compuestos de la fórmula (I) con aditivos habituales, por ejemplo, extensores convencionales y disolventes o diluyentes, tinturas, humectantes, dispersantes, emulsionantes, antiespumantes, conservantes, espesantes secundarios, adhesivos, gibberellinas y también agua.

Las tinturas que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son todas tinturas que son habituales para tales fines. Es posible usar ya sea pigmentos, que son poco solubles en agua o tinturas, que son solubles en agua. Los ejemplos incluyen las tinturas conocidas por los nombres Rhodamine B, C.I. Pigment Red 112 y C.I. Solvent Red 1.

Los humectantes útiles que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son todos sustancias que promueven la humectación y que se usan convencionalmente para la formulación de principios agroquímicamente activos. Se da preferencia al uso de naftalensulfonatos de alquilo, tales como naftalensulfonatos de diisopropilo o diisobutilo.

Los dispersantes y/o emulsionantes útiles que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son todos dispersantes no iónicos, aniónicos y catiónicos usados convencionalmente para la formulación de principios agroquímicamente activos. Se da preferencia al uso de dispersantes no iónicos o aniónicos o mezclas de dispersantes no iónicos o aniónicos. Los dispersantes no iónicos apropiados incluyen en particular polímeros de bloque de óxido de etileno / óxido de propileno, alquilfenolpoliglicoléteres y triestririlfenolpoliglicoléteres y sus derivados fosfatados o sulfatados. Los dispersantes aniónicos apropiados son en especial lignosulfonatos, sales de ácido poliacrílico y condensados de sulfonato de arilo / formaldehído.

Los antiespumantes que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son todos sustancias inhibidoras de espuma usadas convencionalmente para la formulación de principios agroquímicamente activos. Los antiespumantes siliconados y estearato de magnesio se pueden usar con preferencia.

Los conservantes que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son todos sustancias útiles para tales fines en composiciones agroquímicas. Los ejemplos incluyen diclorofeno y alcohol bencílico hemiformal.

Los espesantes secundarios que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son todos sustancias que se pueden usar para tales fines en composiciones agroquímicas. Los ejemplos preferidos incluyen derivados celulósicos, derivados de ácido acrílico, xantano, arcillas modificadas y sílice finamente dividida.

Los adhesivos útiles que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son todos aglutinantes habituales útiles en productos de desinfección de semillas. Los ejemplos preferidos incluyen polivinilpirrolidona, acetato de polivinilo, alcohol polivinílico y tilosa.

Las gibberellinas que pueden estar presentes en las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención son preferentemente las gibberellinas A1, A3 (= ácido gibberélico), A4 y A7; se da particular preferencia al uso de ácido gibberélico. Las gibberellinas son conocidas (comp. R. Wegler “Chemie der Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel” [Química de la Composiciones de Protección de Cultivos y Pesticidas], vol. 2, Springer Verlag, 1970, p. 401-412).

Las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención se pueden usar para tratar una amplia variedad de diferentes tipos de semillas ya sea directamente o después de dilución previa con agua. Por ejemplo, los concentrados o las preparaciones obtenidas de ellos por dilución con agua se pueden usar para desinfectar las semillas de cereales, tales como trigo, cebada, centeno, avena y triticale y también las semillas de maíz, arroz, colza oleaginosa, guisantes, frijoles, algodón,

girasoles, porotos de soja y nabos o incluso una amplia variedad de diferentes semillas vegetales. Las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención o sus formas de uso diluidas también se pueden usar para desinfectar semillas de plantas transgénicas.

Para el tratamiento de semillas con las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención o las formas de uso preparadas de ellas, son de utilidad todas las unidades de mezcla útiles habitualmente para la desinfección de semillas. Específicamente, el procedimiento en la desinfección de las semillas consiste en colocar las semillas en un mezclador, en operación por lotes o de forma continua, para añadir la cantidad deseada particular de las formulaciones de desinfección de semillas, ya sea como tal o después de dilución previa con agua y mezclar hasta que la formulación se distribuya de forma homogénea en la semilla. De ser apropiado, está seguido por una operación de secado.

La tasa de aplicación de las formulaciones de desinfección de semillas útiles de acuerdo con la invención se puede variar dentro de un rango relativamente amplio. Está guiada por el contenido particular de los compuestos de la fórmula (I) en las formulaciones y las semillas. Las tasas de aplicación del compuesto de la fórmula (I) están en general entre 0,001 y 50 g por kilogramo de semilla, preferentemente, entre 0,01 y 15 g por kilogramo de semilla.

Uso en la salud animal

En el sector de salud de animal, es decir, en el campo de la medicina veterinaria, los principios activos de acuerdo con la presente invención

actúan contra parásitos animales, en especial ectoparásitos o incluso, en otra realización, endoparásitos. El término “endoparásitos” incluye en especial helmintos tales como cestodos, nematodos o trematodos y protozoos tales como coccidios. Los ectoparásitos son, típicamente y con preferencia, artrópodos, en especial insectos tales como moscas (mordedoras y chupadoras), larvas de moscas parásitas, piojos, piojos de pelo, piojos de aves, pulgas y similares; o ácaros tales como garrapatas, por ejemplo, garrapatas duras o garrapatas blandas o ácaros tales como ácaros de la sarna, ácaros de la cosecha, ácaros de las aves y similares y también ectoparásitos acuáticos tales como copépodos.

En el campo de la medicina veterinaria, los compuestos de la fórmula (I) son apropiados, que tienen favorable toxicidad en homeotermos, para controlar parásitos que aparecen en la cría de animales y la ganadería, animales de cruza, animales de zoológico, animales de laboratorio, animales experimentales y animales domésticos. Son activos contra todas las etapas o las etapas específicas de desarrollo de parásitos.

El ganado agrícola incluye, por ejemplo, mamíferos, tales como ovejas, cabras, caballos, burros, camellos, búfalos, conejos, renos, ciervos y en particular vacas y cerdos; aves tales como pavos, patos, gansos y en particular gallinas; peces y crustáceos, por ejemplo, en acuacultivo; y también insectos tales como abejas.

Los animales domésticos incluyen, por ejemplo, mamíferos, tales como hámsteres, conejillos de Indias, ratas, ratones, chinchillas, hurones y en particular perros, gatos, aves de jaula, reptiles, anfibios y peces de acuario.

De acuerdo con una realización preferida, los compuestos de la fórmula (I) se administran a mamíferos.

De acuerdo con otra realización preferida, los compuestos de la fórmula (I) se administran a aves, a saber, aves de jaula y en particular aves de corral.

El uso de los compuestos de la fórmula (I) para controlar animal parásitos se pretende reducir o evitar enfermedades, casos de muerte y reducciones de rendimientos (en el caso de carne, leche, lana, cueros, huevos, miel, y similares), de modo que permiten de forma más económica y más simple el cuidado de animales y se puede lograr un mejor bienestar de los animales.

En relación con el sector de la salud animal, el término “control” o “controla” significa que los compuestos de la fórmula (I) son efectivos para reducir la incidencia del parásito particular en un animal infectado con tales parásitos en un grado inocuo. Más específicamente, “control”, en el presente contexto, significa que el compuesto de la fórmula (I) puede matar el respectivo parásito, inhibir su crecimiento o inhibir su proliferación.

Estos parásitos incluyen:

Del orden de Anoplurida, por ejemplo, Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phthirus spp., Solenopotes spp.; los ejemplos específicos son: Linognathus setosus, Linognathus vituli, Linognathus ovillus, Linognathus oviformis, Linognathus pedalis, Linognathus stenopsis, Haematopinus asini macrocephalus, Haematopinus eurysternus, Haematopinus suis, Pediculus humanus capitis, Pediculus

humanus corporis, Phylloera vastatrix, Phthirus pubis, Solenopotes capillatus;

Del orden de Mallophagida y los subórdenes Amblycerina e Ischnocerina, por ejemplo, Trimenopon spp., Menopon spp., Trinoton spp., Bovicola spp., Werneckiella spp., Lepikentron spp., Damalina spp., Trichodectes spp., Felicola spp.; los ejemplos específicos son: Bovicola bovis, Bovicola ovis, Bovicola limbata, Damalina bovis, Trichodectes canis, Felicola subrostratus, Bovicola caprae, Lepikentron ovis, Werneckiella equi;

Del orden de Diptera y los subórdenes Nematocerina y Brachycerina, por ejemplo, Aedes spp., Anopheles spp., Culex spp., Simulium spp., Eusimulium spp., Phlebotomus spp., Lutzomyia spp., Culicoides spp., Chrysops spp., Odagmia spp., Wilhelmia spp., Hybomitra spp., Atylotus spp., Tabanus spp., Haematopota spp., Philipomyia spp., Braula spp., Musca spp., Hydrotaea spp., Stomoxys spp., Haematobia spp., Morellia spp., Fannia spp., Glossina spp., Calliphora spp., Lucilia spp., Chrysomyia spp., Wohlfahrtia spp., Sarcophaga spp., Oestrus spp., Hypoderma spp., Gasterophilus spp., Hippobosca spp., Lipoptena spp., Melophagus spp., Rhinoestrus spp., Tipula spp.; los ejemplos específicos son: Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes taeniorhynchus, Anopheles gambiae, Anopheles maculipennis, Calliphora erythrocephala, Chrysozona pluvialis, Culex quinquefasciatus, Culex pipiens, Culex tarsalis, Fannia canicularis, Sarcophaga carnaria, Stomoxys calcitrans, Tipula paludosa, Lucilia cuprina, Lucilia sericata, Simulium reptans, Phlebotomus papatasi, Phlebotomus longipalpis, Odagmia ornata, Wilhelmia equina, Boophthora erythrocephala, Tabanus bromius, Tabanus spodopterus, Tabanus atratus, Tabanus sudeticus, Hybomitra ciurea, Chrysops caecutiens,

Chrysops relictus, Haematopota pluvialis, Haematopota italica, Musca autumnalis, Musca domestica, Haematobia irritans irritans, Haematobia irritans exigua, Haematobia stimulans, Hydrotaea irritans, Hydrotaea albipuncta, Chrysomya cloropyga, Chrysomya bezziana, Oestrus ovis, Hypoderma bovis, Hypoderma lineatum, Przhevalskiana silenus, Dermatobia hominis, Melophagus ovinus, Lipoptena capreoli, Lipoptena cervi, Hippobosca variegata, Hippobosca equina, Gasterophilus intestinalis, Gasterophilus haemorroidalis, Gasterophilus inermis, Gasterophilus nasalis, Gasterophilus nigricornis, Gasterophilus pecorum, Braula coeca;

Del orden de Siphonapterida, por ejemplo, Pulex spp., Ctenocephalides spp., Tunga spp., Xenopsylla spp., Ceratophyllus spp.; los ejemplos específicos son: Ctenocephalides canis, Ctenocephalides felis, Pulex irritans, Tunga penetrans, Xenopsylla cheopis;

Del orden de Heteropterida, por ejemplo, Cimex spp., Triatoma spp., Rhodnius spp., Panstrongylus spp.

Del orden de Blattarida, por ejemplo, Blatta orientalis, Periplaneta americana, Blattela germanica y Supella spp. (por ejemplo, Suppella longipalpa);

De la subclase de Acari (Acarina) y los órdenes de Meta- y Mesostigmata, por ejemplo, Argas spp., Ornithodorus spp., Otobius spp., Ixodes spp., Amblyomma spp., Rhipicephalus (Boophilus) spp., Dermacentor spp., Haemophysalis spp., Hyalomma spp., Dermanyssus spp., Rhipicephalus spp. (el género original de garrapatas multihuésped), Ornithonyssus spp., Pneumonyssus spp., Raillietia spp., Pneumonyssus spp., Sternostoma spp., Varroa spp., Acarapis spp.; los ejemplos específicos son: Argas

persicus, Argas reflexus, Ornithodorus moubata, Otobius megnini, Rhipicephalus (Boophilus) microplus, Rhipicephalus (Boophilus) decoloratus, Rhipicephalus (Boophilus) annulatus, Rhipicephalus (Boophilus) calceratus, Hyalomma anatolicum, Hyalomma aegypticum, Hyalomma marginatum, Hyalomma transiens, Rhipicephalus evertsi, Ixodes ricinus, Ixodes hexagonus, Ixodes canisuga, Ixodes pilosus, Ixodes rubicundus, Ixodes scapularis, Ixodes holocyclus, Haemaphysalis concinna, Haemaphysalis punctata, Haemaphysalis cinnabarina, Haemaphysalis otophila, Haemaphysalis leachi, Haemaphysalis longicorni, Dermacentor marginatus, Dermacentor reticulatus, Dermacentor pictus, Dermacentor albipictus, Dermacentor andersoni, Dermacentor variabilis, Hyalomma mauritanicum, Rhipicephalus sanguineus, Rhipicephalus bursa, Rhipicephalus appendiculatus, Rhipicephalus capensis, Rhipicephalus turanicus, Rhipicephalus zambeziensis, Amblyomma americanum, Amblyomma variegatum, Amblyomma maculatum, Amblyomma hebraeum, Amblyomma cajennense, Dermanyssus gallinae, Ornithonyssus bursa, Ornithonyssus sylviarum, Varroa jacobsoni;

Del orden de Actinedida (Prostigmata) y Acaridida (Astigmata), por ejemplo, Acarapis spp., Cheyletiella spp., Ornithocheyletia spp., Myobia spp., Psorergates spp., Demodex spp., Trombicula spp., Listrophorus spp., Acarus spp., Tyrophagus spp., Caloglyphus spp., Hypodectes spp., Pterolichus spp., Psoroptes spp., Chorioptes spp., Otodectes spp., Sarcoptes spp., Notoedres spp., Knemidocoptes spp., Cytodites spp. and Laminosioptes spp.; los ejemplos específicos son: Cheyletiella yasguri, Cheyletiella blakei, Demodex canis, Demodex bovis, Demodex ovis,

Demodex caprae, Demodex equi, Demodex caballi, Demodex suis, Neotrombicula autumnalis, Neotrombicula desaleri, Neoschongastia xerothermobia, Trombicula akamushi, Otodectes cynotis, Notoedres cati, Sarcoptis canis, Sarcoptes bovis, Sarcoptes ovis, Sarcoptes rupicaprae (= S. caprae), Sarcoptes equi, Sarcoptes suis, Psoroptes ovis, Psoroptes cuniculi, Psoroptes equi, Chorioptes bovis, Psoergates ovis, Pneumonyssoidic mange, Pneumonyssoides caninum, Acarapis woodi.

De la subclase de copépodos con el orden de Siphonostomatoida en particular los géneros Lepeophtheirus y Caligus; las especies Lepeophtheirus salmonis, Caligus elongatus y Caligus clemensi se pueden mencionar a modo de ejemplo y con preferencia particular.

En general, los principios activos de la invención se pueden emplear directamente cuando se usan para el tratamiento de animales. Con preferencia, se emplean (se administran) en forma de composiciones farmacéuticas que pueden comprender excipientes y/o adyuvantes farmacéuticamente aceptables conocidos en el arte previo.

En el sector de la salud animal y en ganadería, los principios activos se emplean (= se administran) de una manera conocida, por administración enteral en la forma de, por ejemplo, comprimidos, cápsulas, pociones, lechadas, gránulos, pastas, bolos, el proceso de alimentación y supositorios, pro administración parenteral, por ejemplo, por inyección (intramuscular, subcutánea, intravenos, intraperitoneal, inter alia), implantes, por administración nasal, por administración dérmica en la forma, por ejemplo, de inmersión o baño, pulverización, vertido y manchado, lavado y empolvado y también con ayuda de artículos moldeados que contienen el principio activo, tales como collares, marcas

de orejas, marcas de colas, bandas de extremidades, bozales, dispositivos de marcación, etc. Los principios activos se pueden formular como un champú o como formulaciones apropiadas aplicables en aerosoles o sprays no presurizados, por ejemplo, sprays de bomba y sprays atomizadores,

En el caso de emplear para ganadería, aves de corral, mascotas domésticas, etc., los principios activos de la invención se pueden emplear como formulaciones (por ejemplo, polvos, polvos humectables [“WP”], emulsiones, concentrados emulsionables [“EC”], composiciones de flujo libre, soluciones homogéneos y concentrados en suspensión [“SC”]), que contienen los principios activos en una cantidad del 1 % al 80 % en peso, directamente o después de diluir (por ejemplo, dilución de 100 a 10 000 veces) o se pueden usar como un baño químico.

En el caso de usar en el sector de salud animal, los principios activos de la invención, a fin de ampliar el espectro de actividad, se pueden usar en combinación con sinergistas, repelentes u otros principios activos apropiados, por ejemplo, acaricidas, insecticidas, antelmínticos, agentes antiprotozoos. Los componentes de mezcla potenciales para compuestos de la fórmula (I) de la invención pueden ser, en el caso de aplicaciones en la salud animal, uno o varios compuestos de los grupos (In-1) a (In-25).

(In-1) Inhibidores de acetilcolinesterasa (AChE), por ejemplo, carbamatos, por ejemplo, alanicarb, aldicarb, bendiocarb, benfuracarb, butocarboxim, butoxicarboxim, carbarilo, carbofurano, carbosulfano, etiofencarb, fenobucarb, formetanato, furatiocarb, isoprocarb, metiocarb, metomilo, metolcarb, oxamilo, pirimicarb, propoxur, tiodicarb, tiofanox, triazamate, trimetacarb, XMC y xililcarb; se da particular preferencia aquí, para

aplicaciones contra ectoparásitos, a bendiocarb, carbarilo, metomilo, promacilo y propoxur; o

organofosfatos, por ejemplo, acefato, azametifos, azinfos (-metilo, -etilo), cadusafos, cloretoxifos, clorfenvinfos, clormefos, clorpirifos (-metilo), coumafos, cianofos, demetona-S-metilo, diazinona, diclorvos/DDVP, dicrotofos, dimetoato, dimetilvinfos, disulfotona, EPN, etiona, etoprofos, famfur, fenamifos, fenitrotiona, fentiona, fostiazato, heptenofos, isofenfos, O-(metoxiaminotiofosforil)salicilato de isopropilo, isoxationa, malationa, mecarbam, metamidofos, metidationa, mevinfos, monocrotofos, naled, ometoato, oxidemetona-metilo, paration a, paration a-metilo, fentoato, forato, fosalona, fosmet, fosfamidona, foxim, pirimifos (-metilo), profenofos, propetamfos, protiofos, piraclofos, piridafentiona, quinalfos, sulfotep, tebupirimfos, temefos, terbufos, tetraclorvinfos, tiometona, triazofos, triclorfona y vamidotiona; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a azametifos, clorfenvinfos, clorpirifos, coumafos, citioato, diazinona (dimpilato), diclorvos (DDVP), dicrotofos, dimetoato, etiona (dietiona), famfur (famofos), fenitrotiona, fentiona (MPP), heptenofos, malationa, naled, fosmet (PMP, ftalofos) foxim, propetamfos, temefos, tetraclorvinfos (CVMP) y triclorfona/metrifonato.

(In-2) antagonistas del canal de cloruro regulado por GABA, por ejemplo, organocloros, por ejemplo, bromocicleno, clordano y endosulfano (alfa-), heptacloro, lindano y toxafeno; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a endosulfano (alfa-) y lindano; o

fiproles (fenilpirazoles), por ejemplo, acetoprol, etiprol, fipronilo, pirafluprol, piriprol, rizazol; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a fipronilo y piriprol; o

arilisoxazolinas, arilpirrolinas, arilpirrolidinas, por ejemplo, fluralaner (conocido del documento WO 2009/2024541, ej. 11-1; pero también los compuestos de los documentos WO 2012007426, WO 2012042006, WO 2012042007, WO 2012107533, WO 2012120135, WO 2012165186, WO 2012155676, WO 2012017359, WO 2012127347, WO 2012038851, WO 2012120399, WO 2012156400, WO 2012163959, WO 2011161130, WO 2011073444, WO 2011092287, WO 2011075591, WO 2011157748, WO 2007/075459, WO 2007/125984, WO 2005/085216, WO 2009/002809), afoxolaner (por ejemplo, en WO 2011149749) y arilpirrolinas estructuralmente relacionadas (conocidas, por ejemplo, de los documentos WO 2009/072621, WO 2010020522, WO 2009112275, WO 2009097992, WO 2009072621, JP 2008133273, JP 2007091708) o arilpirrolidinas (por ejemplo, en WO 2012004326, WO 2012035011, WO 2012045700, WO 2010090344, WO 2010043315, WO 2008128711, JP 2008110971) y compuestos del grupo de las llamadas metadiamidas (conocidas, por ejemplo, de los documentos WO 2012020483, WO 2012020484, WO 2012077221, WO 2012069366, WO 2012175474, WO 2011095462, WO 2011113756, WO 2011093415, WO 2005073165); se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a afoxolaner y fluaralaner.

(In-3) Moduladores del canal de sodio / bloqueadores del canal de sodio regulado por voltaje, por ejemplo, piretroides, por ejemplo, acrinatrina, aletrina (d-cis-trans, d-trans), bifentrina, bioaletrina, bioaletrina, S-ciclopentenilo, bioresmetrina, cicloprotrina, ciflutrina (beta-), cihalotrina (gamma-, lambda-), cipermetrina (alfa-, beta-, teta-, zeta-), cifenotrina [isómero (1*R*)-*trans*], deltametrina, dimeflutrina, empentrina [isómero (*EZ*)-

(1*R*)], esfenvalerato, etofenprox, fenpropatrina, fenvalerato, flucitrinato, flumetrina, fluvalinato (tau-), halfenprox, imiprotrina, metoflutrina, permetrina, fenotrina [isómero (1*R*)-trans], praletrina, proflutrina, piretrinas (piretro), resmetrina, RU 15525, silafluofeno, teflutrina, tetrametrina [isómero (1*R*))], tralometrina, transflutrina y ZXI 8901; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a los piretroides de tipo I aletrina, bioaletrina, permetrina, fenotrina, resmetrina, tetrametrina y los piretroides del tipo II (alfacianopiretroides) alfa-cipermetrina, ciflutrina (beta-), cihalotrina (lambda-), cipermetrina (alfa-, zeta-), deltametrina, fenvalerato, flucitrinato, flumetrina, fluvalinato (tau-) y los piretroides libres de éster etofenprox y silafluofeno; o compuestos organoclorados, por ejemplo, DDT o metoxicloro. Los principios activos de esta clase son muy particularmente apropiados como componentes de mezcla, dado que tienen una acción repelente por contacto de mayor duración y, en consecuencia, extienden el espectro de actividad para incluir este componente.

(In-4) Agonistas del receptor nicotinérgico de acetilcolina, por ejemplo, neonicotinoides, por ejemplo, acetamiprida, clotianidina, dinotefurano, imidacloprida, imidaclotina, nitenpiram, tiacloprida, tiametoxam; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a clotianidina, dinotefurano, imidacloprida, nitenpiram y tiacloprida; o nicotina.

(In-5) Moduladores del receptor alostérico de acetilcolina (agonistas), por ejemplo, espinosinas, por ejemplo, espinetoram y espinosad; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a espinosad y espinetoram.

(In-6) Activadores del canal de cloruro, por ejemplo, avermectinas/milbemicinas, por ejemplo, abamectina, doramectina, benzoato de emamectina, eprinomectina, ivermectina, latidectina, lepimectina, milbemicina oxima, milbemectina, moxidectina y selamectina; terpenoides de indol, por ejemplo, derivados de ácido nodulispórico, en especial ácido nodulispórico A; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a doramectina, eprinomectina, ivermectina, milbemicina oxima, moxidectina, selamectina y ácido nodulispórico A.

(In-7) Análogos de la hormona juvenil, por ejemplo, hidropreno (S-), quinopreno, metopreno (S-); o fenoxicarb; piriproxifeno; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a metopreno (S-) y piriproxifeno.

(In-8) Inhibidores del crecimiento de ácaros, por ejemplo, clofentezina, diflovidazina, hexitiazox, etoxazol; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, al etoxazol.

(In-9) Agonistas del receptor de Slo-1 y latrofilina, por ejemplo, depsipéptidos cíclicos, por ejemplo, emodépsido y su precursor PF1022A (conocido del documento EP 382173, compuesto I); se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a emodépsido.

(In-10) Inhibidores de la fosforilación oxidativa, disruptores de ATP, por ejemplo, diafentiurona.

(In-12) Antagonistas del receptor nicotinérgico de acetilcolina, por ejemplo, bensultap, cartap (clorhidrato), tiocilam y tiosultap (sodio).

(In-13) Inhibidores de la biosíntesis de quitina, tipo 0, por ejemplo, benzoilureas, por ejemplo, bistriflurona, clorfluazurona, diflubenzurona,

flucicloxurona, flufenoxurona, hexaflumurona, lufenurona, novalurona, noviflumurona, teflubenzurona y triflumurona; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a diflubenzurona, fluazurona, lufenurona y triflumurona.

(In-14) Inhibidores de la biosíntesis de quitina, tipo 1, por ejemplo, buprofezina.

(In-15) Inhibidores de la muda, por ejemplo, ciromazina y diciclanilo; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a ciromazina y diciclanilo.

(In-16) Agonistas/disruptores de ecdisona, por ejemplo, diacilhidrazinas, por ejemplo, cromafenozida, halofenozida, metoxifenozida y tebufenozida.

(In-17) Agonistas octopaminérgicos, por ejemplo, amitraz, cimiazol, clordimeform y demiditraz; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a amitraz, cimiazol y demiditraz.

(In-18) Inhibidores del transporte de electrones de complejo III, por ejemplo, hidrametilnona; acequinocilo; fluacripirim.

(In-19) Inhibidores del transporte de electrones de complejo I, por ejemplo, del grupo de los acaricidas METI, por ejemplo, fenazaquina, fenpiroximato, pirimidifeno, piridabeno, tebufenpirad, tolfenpirad; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a fenpiroximato, pirimidifeno y tolfenpirad;

(In-20) Bloqueadores del canal de sodio regulado por voltaje, por ejemplo, indoxacarb y metaflumizona; se da particular preferencia aquí, para aplicaciones contra ectoparásitos, a indoxacarb y metaflumizona.

(In-21) Inhibidores de acetil-CoA carboxilasa, por ejemplo, derivados de ácido tetrónico, por ejemplo, espirodiclofeno y espiromesifeno; o derivados de ácido tetrámico, por ejemplo, espirotetramato.

(In-22) Inhibidores del transporte de electrones de complejo II, por ejemplo, cienopirafeno.

(In-23) Efectores del receptor de rianodina, por ejemplo, diamidas, por ejemplo, flubendiamida, clorantraniliprol (Rinaxipir), ciantraniliprol (Ciazipir) y también 3-bromo-N-{2-bromo-4-cloro-6-[(1-ciclopropiletil)carbamoil]fenil}-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2005/077934) o 2-[3,5-dibromo-2-({[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino)benzoil]-1,2-dimetilhidrazincarboxilato de metilo (conocido del documento WO 2007/043677).

(In-24) Otros principios activos con mecanismo de acción desconocido, por ejemplo, azadiractina, amidoflumet, benzoximato, bifenazato, quinometionato, criolita, ciflumetofeno, dicofol, fluensulfona (5-cloro-2-[(3,4,4-trifluorobut-3-en-1-il)sulfonil]-1,3-tiazol), flufenerim, piridalilo y pirifluquinazona; y adicionalmente preparaciones a base de Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo) y los siguientes compuestos activos conocidos: 4-{[(6-bromopirid-3-il)metil](2-fluoroetil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), 4-{[(6-fluoropirid-3-il)metil](2,2-difluoroetil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), 4-{[(2-cloro-1,3-tiazol-5-il)metil](2-fluoroetil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), 4-{[(6-cloropirid-3-il)metil](2-fluoroetil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), 4-{[(6-cloropirid-3-il)metil](2,2-difluoroetil)amino}furan-

2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), 4-{[(6-cloro-5-fluoropirid-3-il)metil](metil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115643), 4-{[(5,6-dicloropirid-3-il)metil](2-fluoroetil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115646), 4-{[(6-cloro-5-fluoropirid-3-il)metil](ciclopropil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115643), 4-{[(6-cloropirid-3-il)metil](ciclopropil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento EP-A-0 539 588), 4-{[(6-cloropirid-3-il)metil](metil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento EP-A-0 539 588), [(6-cloropiridin-3-il)metil](metil)oxido-λ^4-sulfanilidencianamida (conocida del documento WO 2007/149134), [1-(6-cloropiridin-3-il)etil](metil)oxido-λ^4-sulfanilidencianamida (conocida del documento WO 2007/149134), [(6-trifluorometilpiridin-3-il)metil](metil)oxido-λ^4-sulfanilidencianamida (conocida del documento WO 2007/095229), sulfoxaflor (también conocido del documento WO 2007/149134), 11-(4-cloro-2,6-dimetilfenil)-12-hidroxi-1,4-dioxa-9-azadiespiro[4.2.4.2]tetradec-11-en-10-ona (conocida del documento WO 2006/089633), 3-(4'-fluoro-2,4-dimetilbifenil-3-il)-4-hidroxi-8-oxa-1-azaespiro[4.5]dec-3-en-2-ona (conocida del documento WO 2008/067911), 1-[2-fluoro-4-metil-5-[(2,2,2-trifluoroetil)sulfinil]fenil]-3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol-5-amina (conocida del documento WO 2006/043635), ciclopropancarboxilato de [(3S,4aR,12R,12aS,12bS)-3-[(ciclopropilcarbonil)oxi]-6,12-dihidroxi-4,12b-dimetil-11-oxo-9-(piridin-3-il)-1,3,4,4a,5,6,6a,12,12a,12b-decahidro-2H,11H-benzo[f]pirano[4,3-b]cromen-4-il]metilo (conocido del documento WO 2006/129714), 2-ciano-3-(difluorometoxi)-N-etil-bencensulfonamida (conocida del documento WO 2005/035486), N-[1-(2,3-dimetilfenil)-2-(3,5-

dimetilfenil)etil]-4,5-dihidro-2-tiazolamina (conocida del documento WO 2008/104503); penigequinolona A (conocida de los documentos EP 2248422 (compuesto I) y WO 2009/060015 (compuesto N.º 11).

(In-25) Sinergistas apropiados en el caso de usar junto con ectoparasiticidas incluyen aquí MGK264 (*N*-octilbicicloheptencarboxamida), butóxido de piperonilo (PBO) y verbutina; se da particular preferencia aquí a butóxido de piperonilo y MGK264.

Además de estos grupos, también es posible usar repelentes de corto plazo en mezclas o una aplicación combinada. Ejemplos son DEET (N,N-dietil-3-metilbenzamida), icaridina (ácido 1-piperidincarboxílico), (1S, 20S)-2-metilpiperidinil-3-ciclohexen-1-carboxamida (SS220), indalona (3,4-dihidro-2,2-dimetil-4-oxo-2H-piran-6-carboxilato de butilo), dihidronpetalactonas, nootkatona, IR3535 (éster etílico de ácido 3-[N-butil-N-acetil]-aminopropiónico), 2-etilhexano-1,3-diol, (1R,2R,5R)-2-(2-hidroxipropan-2-il)-5-metil-ciclohexan-1-ol, dimetilbencen-1,2-dicarboxilato, ácido dodecanoico, undecan-2-ona, N,N-dietil-2-fenilacetamida y aceites esenciales u otros ingredientes de plantas con acción repelente conocida, por ejemplo, borneol, calicarpenal, 1,8-cineol (eucaliptol), carvacrol, b-citronelol, a-copaeno, coumarina (o sus derivados sintéticos conocidos del documento US20120329832). Icaridina, indalone e IR3535 (éster etílico de ácido 3-[N-butil-N-acetil]-aminopropiónico) se prefieren en particular para usar contra ectoparásitos.

De los grupos (I-1) a (I-25) antes mencionados, se da preferencia a los siguientes grupos como componentes de mezcla: (In-2), (In-3), (In-4), (In-5), (In-6), (In-17), (In-25).

Los ejemplos de particular preferencia de compuestos de acción insecticida o acaricida, sinergistas o repelentes como componentes de mezcla para los compuestos de la invención de la fórmula (I) son afoxolaner, aletrina, amitraz, bioaletrina, clotianidina, ciflutrina (beta-), cihalotrina (lambda-), cimiazol, cipermetrina (alfa-, zeta-), cifenotrina, deltametrina, demiditraz, dinotefurano, doramectina, eprinomectina, etofenprox, fenvalerato, fipronilo, fluazurona, flucitrinato, flumetrina, fluralaner, fluvalinato (tau-), icaridina, imidacloprida, ivermectina, MGK264, milbemicina oxima, moxidectina, nitenpiram, permetrina, fenotrina, butóxido de piperonilo, piriprol, resmetrina, selamectina, silafluofeno, espinetoram, espinosad, tetrametrina, tiacloprida.

Control de vectores

Los compuestos de la fórmula (I) también se pueden usar en el control de vectores. En el contexto de la presente invención, un vector es un artrópodo, en especial un insecto o arácnido, capaz de transmitir patógenos, por ejemplo, virus, gusanos, organismos monocelulares y bacterias de un reservorio (planta, animal, humano, etc.) a un huésped. Los patógenos se pueden transmitir ya sea mecánicamente (por ejemplo, tracoma por moscas no picadoras) a un huésped o después de inyección (por ejemplo, parásitos de paludismo por mosquitos) en un huésped.

Los ejemplos de vectores y las enfermedades o patógenos que transmiten son:

1) Mosquitos

- Anopheles: paludismo, filariasis;

- Culex: encefalitis japonesa, filariasis, otras enfermedades virales, transmisión de gusanos;

- Aedes: fiebre amarilla, fiebre del dengue, filariasis, otras enfermedades virales;
- Simuliidae: transmisión de gusanos, en particular Onchocerca volvulus;
2) Piojos: infecciones cutáneas, tifus epidémico;
3) Pulgas: plaga, tifus endémico;
4) Moscas: tripanosomiasis; cólera, otras enfermedades bacterianas;
5) Ácaros: acariosis, tifus epidémico, rickettsialpox, tularaemia, encefalitis de Saint Louis, encefalitis transmitida por garrapatas (TBE), fiebre hemorrágica de Crimea–Congo, borreliosis;
6) Garrapatas: boreliosis tales como Borrelia duttoni, encefalitis transmitida por garrapatas, fiebre Q (Coxiella burnetii), babesiosis (Babesia canis canis).

Los ejemplos de vectores en el contexto de la presente invención son insectos, por ejemplo, áfidos, moscas, saltamontes o trips, que pueden transmitir virus de plantas a plantas. Otros vectores capaces de transmitir virus de plantas son ácaros de la araña, piojos, escarabajos y nematodos.

Otros ejemplos de vectores en el contexto de la presente invención son insectos y arácnidos tales como mosquitos, en especial de los géneros Aedes, Anopheles, por ejemplo, A. gambiae, A. arabiensis, A. funestus, A. dirus (paludismo) y Culex, piojos, pulgas, moscas, ácaros y garrapatas que pueden transmitir patógenos a animales y/o humanos.

También es posible el control de vectores si los compuestos de la fórmula (I) rompen la resistencia.

Los compuestos de la fórmula (I) son apropiados para usar en la prevención de enfermedades y/o patógenas transmitidas por vectores. Así, otro aspecto de la presente invención es el uso de compuestos de la

fórmula (I) para el control de vectores, por ejemplo, en agricultura, en horticultura, en forestas, en jardines y en instalaciones de ocio y también en la protección de materiales y productos almacenados.

Protección de materiales industriales

Los compuestos de la fórmula (I) son apropiados para proteger materiales industriales contra el ataque o la destrucción por insectos, por ejemplo, de los órdenes Coleoptera, Hymenoptera, Isoptera, Lepidoptera, Psocoptera y Zygentoma.

Los materiales industriales en el presente contexto se entienden como materiales inanimados, tales como, preferentemente, plásticos, adhesivos, tamaños, papeles y tarjetas, cuero, madera, productos de madera procesados y composiciones de recubrimiento. El uso de la invención para proteger la madera se prefiere en particular.

En otra realización, los compuestos de la fórmula (I) se usan junto con al menos otro insecticida y/o al menos un fungicida.

En otra realización, los compuestos de la fórmula (I) están en forma de un pesticida listo para usar, lo que significa que se pueden aplicar al material en cuestión sin ulteriores modificaciones. Otros insecticidas o fungicidas apropiados son en particular aquellos mencionados con anterioridad.

Sorprendentemente, también se halló que los compuestos de la fórmula (I) se pueden emplear para proteger objetos que entran en contacto con agua salina o salobre, en especial cascos, pantallas, redes, edificios, amarres y sistemas de señalización, contra ensuciamiento. Igualmente es posible usar los compuestos de la fórmula (I), solos o en combinación con otros principios activos como agentes antisuciedad.

Control de plagas animales en el sector de higiene

Los compuestos de la fórmula (I) son apropiados para controlar plagas animales en el sector de higiene. Más en particular, la invención se puede usar en el sector doméstico, en el sector de higiene y en la protección de productos almacenados, en particular para controlar insectos, arácnidos y ácaros hallados en espacios cerrados, por ejemplo, viviendas, naves industriales, oficinas, cabinas ed vehículos. Para controlar plagas animales, los compuestos de la fórmula (I) se usan solos o en combinación con otros principios activos y/o auxiliares. Se usan preferentemente en productos insecticidas domésticos. Los compuestos de la fórmula (I) son efectivos contra especies sensibles y resistentes contra cualquier estadio de desarrollo.

Estas plagas incluyen, por ejemplo, plagas de la clase Arachnida, de los órdenes Scorpiones, Araneae y Opiliones, de las clases Chilopoda y Diplopoda, de la clase Insecta, el orden Blattodea, de los órdenes Coleoptera, Dermaptera, Diptera, Heteroptera, Hymenoptera, Isoptera, Lepidoptera, Phthiraptera, Psocoptera, Saltatoria u Orthoptera, Siphonaptera y Zygentoma y de la clase Malacostraca, el orden Isopoda.

La aplicación se efectúa, por ejemplo, en aerosoles, productos de pulverización no presurizados, por ejemplo, sprays de bomba y atomización, sistemas automáticos de nebulización, nebulizadores, espumas, geles, productos de evaporación con comprimidos evaporadores hechos de celulosa o plástico, evaporadores líquidos, evaporadores de gel y membrana, evaporadores accionados por hélice, sistemas de evaporación sin energía o pasivos, papeles de polillas, bolsas de polillas y geles de polillas, como gránulos o polvos, en cebos para dispersión o estaciones de cebo.

Procesos de preparación

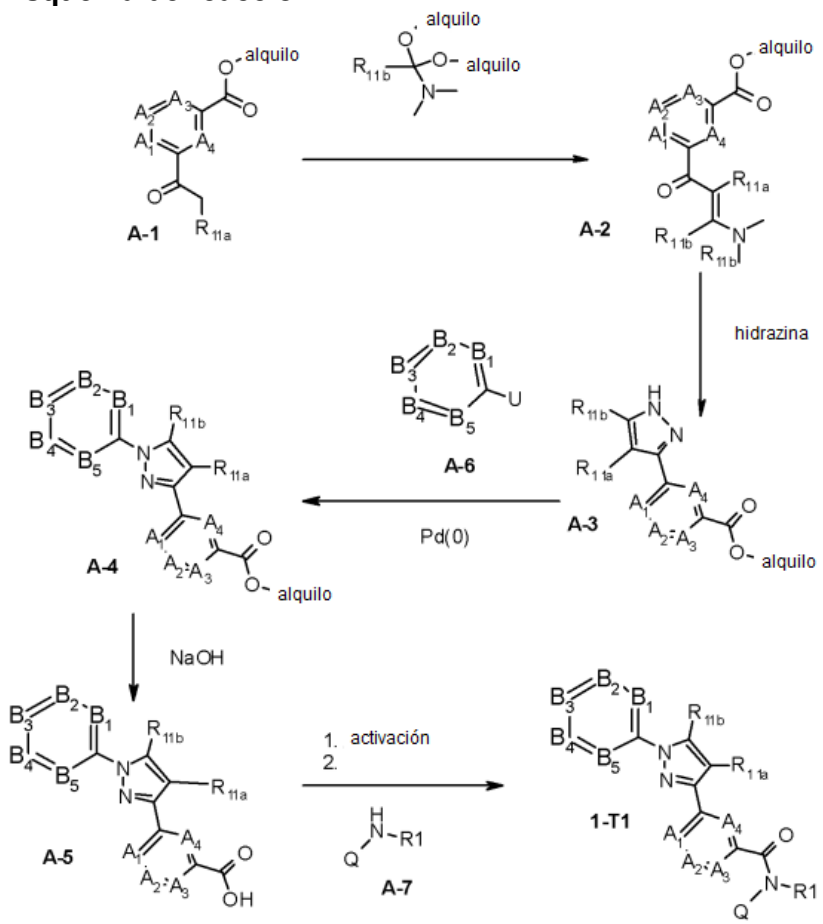
Los compuestos de la invención se pueden preparar por medio de métodos convencionales conocidos por los expertos en la técnica.

Los compuestos de la estructura (I-T1) y (I-T2) se pueden preparar por métodos ya descritos en la literatura para compuestos análogos:

Proceso I-T1

Los compuestos de la estructura (I-T1) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 1.

Esquema de reacción 1:



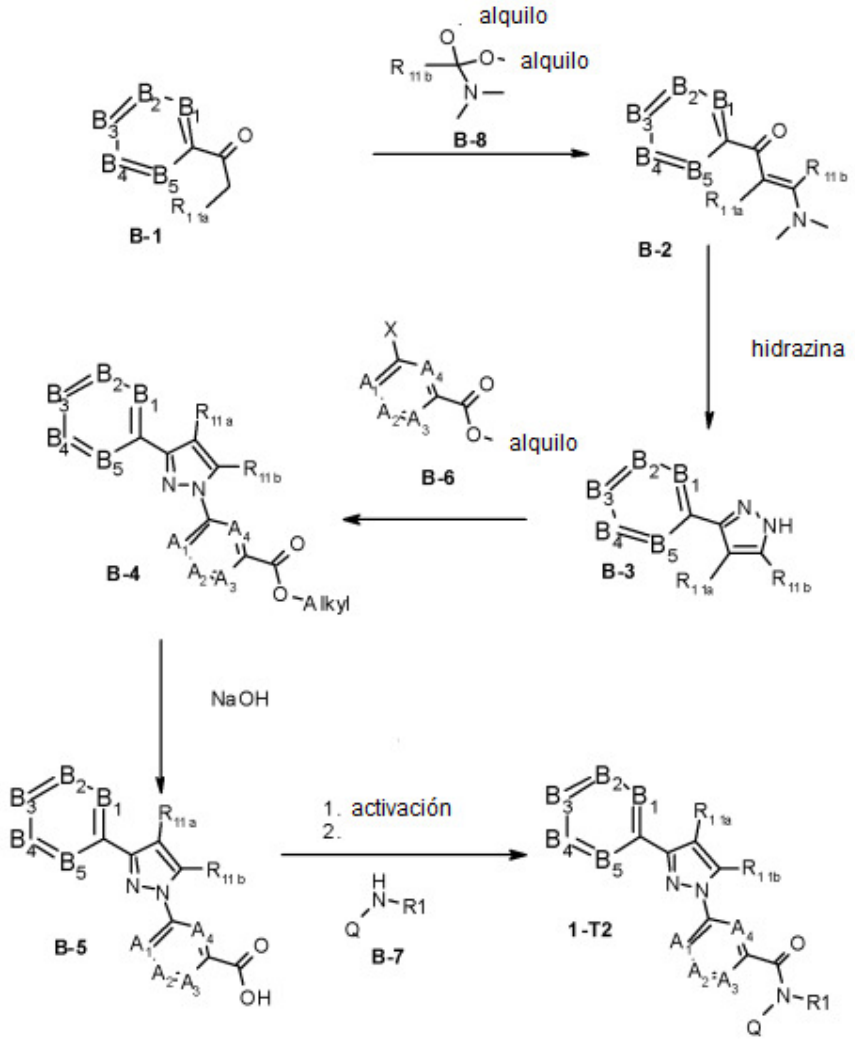
Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es, por ejemplo, bromo, yodo o triflato. Los compuestos de partida de la estructura (**A-1**) (por ejemplo, WO 2004/099146, p. 75-76) y (**A-7**) (por ejemplo, US 5.739.083 página 10, US 2003/187233A1, p. 6) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos.

Los compuestos de la estructura general (**A-2**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**A-1**) y acetales de carboxamida (**B-8**) (por ejemplo, WO 2013/009791, p. 50, Ejemplo 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Los compuestos de la estructura general (**A-3**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**A-2**) e hidrazina (por ejemplo, WO 2013/009791, p. 50, Ejemplo 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Los compuestos de la estructura general (**A-4**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**A-3**) y (**A-6**) (por ejemplo, WO 2013/009791, p. 50, Ejemplo 44). Los compuestos de la estructura general (**A-5**) se pueden preparar por analogía a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general (**A-4**) (ver, por ejemplo, los documentos WO 2010/051926 o WO 2010/133312). Los compuestos de la invención de la estructura general (**I-T1**) se pueden preparar por analogía a los procedimientos de acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida (**A-5**) y (**A-7**) (por ejemplo, los documentos WO 2010/051926 o WO 2010/133312).

Proceso I-T2

Los compuestos de la estructura (I-T2) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 2.

Esquema de reacción 2:

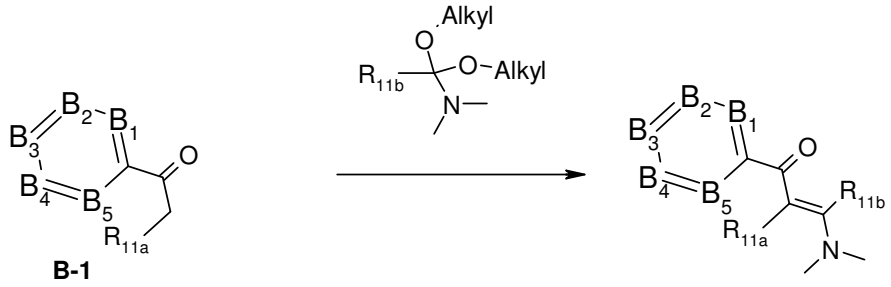


Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es, por ejemplo, Cl, Br, I o un radical de ácido borónico o éster borónico. Los compuestos de partida de la estructura (**B-1**) (por ejemplo, Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang Journal of Fluorine Chemistry, 80

(1996) p. 71 – 76; US2003/187233, p. 14, Ejemplo 21) y (**B-6**) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos.

Los compuestos de la estructura general (**B-2**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**B-1**) y acetales de carboxamida (**B-8**) (por ejemplo, WO 2006/044505, Compuesto 60, Part A; WO 2012/4604, Intermediario 2). Los compuestos de la estructura general (**B-3**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**B-2**) e hidrazina (por ejemplo, WO 2013/009791, p. 50, Ejemplo 43; WO 2004/099146, p. 75-76). Los compuestos de la estructura general (**B-4**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**B-3**) y (**B-6**) (por ejemplo, WO 2013/009791, p. 50, Ejemplo 44, X = Br). Los compuestos de la estructura general (**B-5**) se pueden preparar por analogía a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general (**B-4**) (por ejemplo, WO 2010/051926 o WO 2010/133312). Los compuestos de la invención de la estructura general (**I-T1**) se pueden preparar por analogía a los procedimientos de acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida (**B-5**) y (**B-7**) (por ejemplo, WO 2010/051926 o WO 2010/133312).

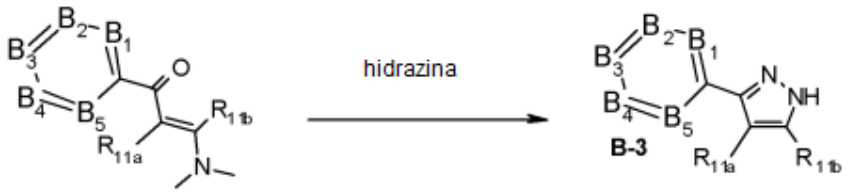
Etapa 1 Dialquilaminoalquenilación



(B-1) **(B-8)** **(B-2)**

Los compuestos de la estructura general (**B-2**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**B-1**) y (**B-8**). Los radicales B^1-B^5, alquilo y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de partida de la estructura (**B-1**) (por ejemplo, Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang Journal of Fluorine Chemistry, 80 (1996) p. 71 – 76; US2003/187233, p. 14, Ejemplo 21 [0294], US5739083, Ejemplo 6) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. La reacción se lleva a cabo haciendo reaccionar los compuestos (**B-1**) con los compuestos (**B-8**) en las condiciones conocidas en la literatura para reacciones análogas (por ejemplo, EP1204323, p. 25, Ejemplo 13).

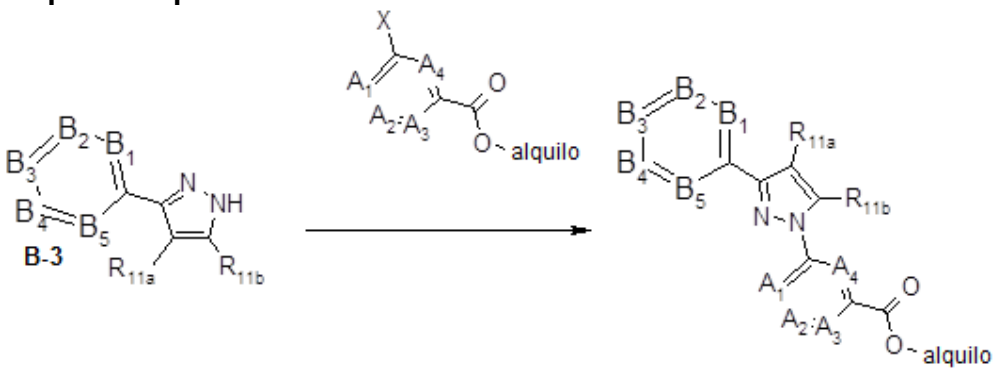
Etapa 2 Cierre del anillo pirazol



(B-2) **(B-3)**

Los compuestos de la estructura general (**B-2**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**B-2**) e hidrazina. Los radicales B^1-B^5 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. La preparación de los compuestos de partida de la estructura (**B-2**) se describió con anterioridad. La reacción se lleva a cabo haciendo reaccionar los compuestos (**B-2**) con hidrazina en las condiciones conocidas en la literatura para reacciones análogas (EP1382603, Ejemplo 3, p. 43)

Etapa 3 Acoplamiento de arilo

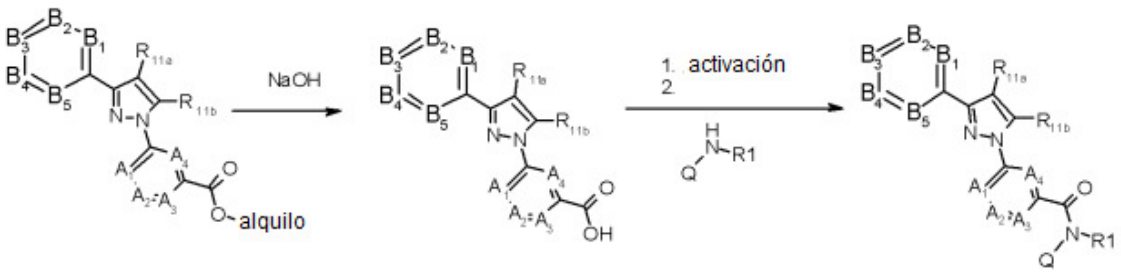


(B-3) **(B-6)** **(B-4)**

Los compuestos de la estructura general (**B-4**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**B-3**) y (**B-6**). Los radicales A^1-A^4, B^1-B^5, alquilo, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es es un radical de ácido borónico o éster borónico. La preparación de los compuestos de partida de la estructura (**B-3**) se describió con anterioridad. Los compuestos de la estructura general (**B-6**) son asequibles en comercios o se pueden preparar por procesos conocidos por los expertos en la técnica. La reacción se lleva a cabo en las

condiciones conocidas en la literatura para reacciones análogas (WO 2009140342, p. 96).

Etapas 4, 5 Hidrólisis, amidación



(B4) **(B5)** **(B7)**

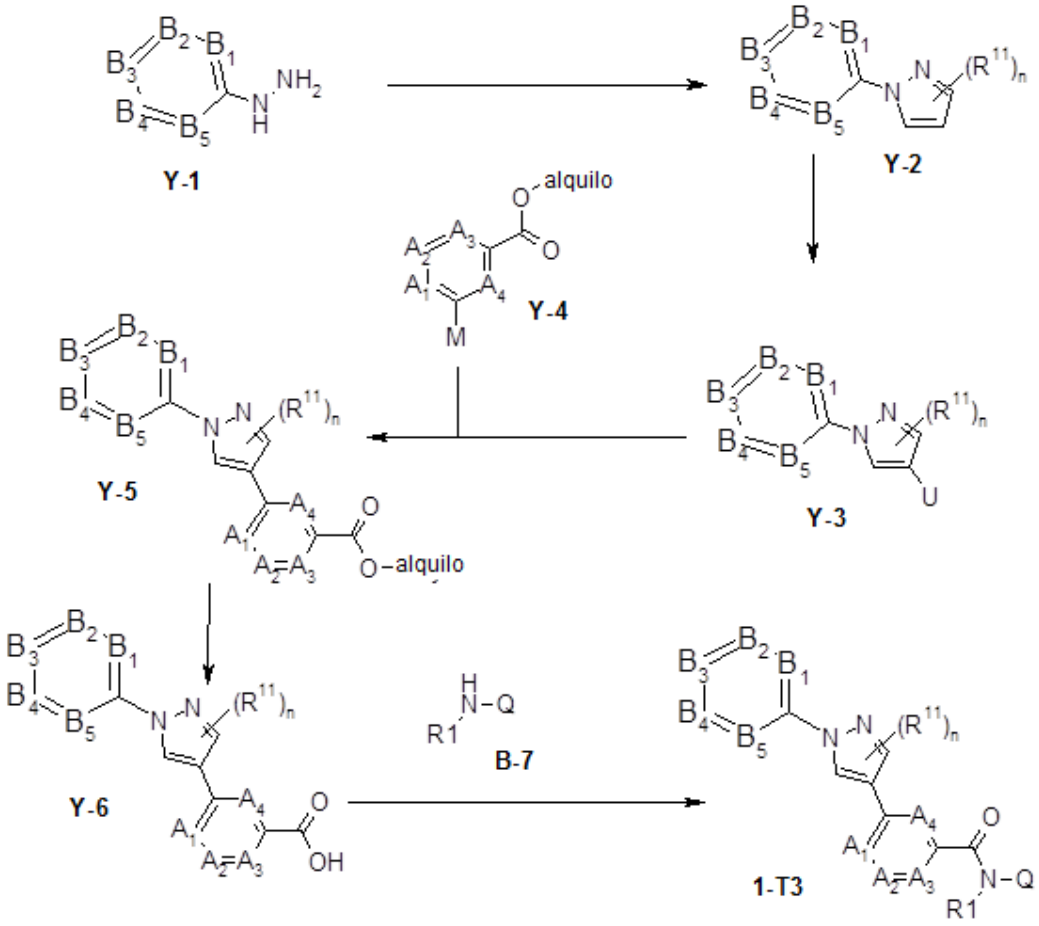
(I-T2)

Los compuestos de la invención de la estructura general (**I-T2**) se pueden preparar por analogía a los procedimientos de acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida (**B5**) y (**B7**) [WO 2010-051926; WO 2010-133312]. Los compuestos de la estructura general (**B5**) se pueden preparar análogamente a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general (**B4**) [WO 2010-051926; WO 2010-133312]. Los radicales A^1-A^4, B^1-B^5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. La preparación de los compuestos de la estructura (**B-7**) se describió con anterioridad.

Proceso I-T3

Los compuestos de la estructura (I-T3) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 3a.

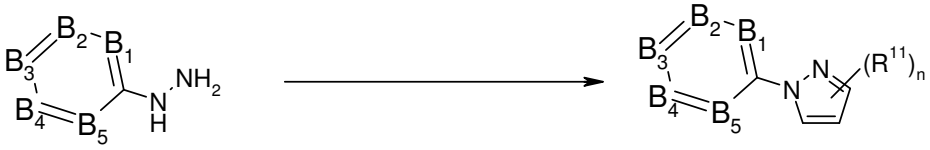
Esquema de reacción 3a



Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, Q, R^1, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. M es, por ejemplo, un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato. U es, por ejemplo, bromo, yodo o triflato. X es, por ejemplo, Cl, Br, I.

Etapa 1 Pirazol

Etapa 1 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (1-T3):



Y-1 Y-2

Los compuestos de la invención de la estructura general (Y-2) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (Y-1). Los radicales B_1-B_5 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de partida de la estructura (Y1) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen [2,6-dicloro-4-(trifluorometil)fenil]hidrazina, [3-cloro-5-(trifluorometil)-2-piridil]hidrazina, [2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]hidrazina, [2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]hidrazina, [2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]hidrazina o [2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]hidrazina. Se pueden preparar, por ejemplo, por procedimientos descritos en el documento US 2003/187233, p. 13; Haga, Takahiro et al., Heterocycles, 22 (1984), p. 117-124.

Etapa 2 Yodopirazol

Etapa 2 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (1-T3):



Y-2 Y-3

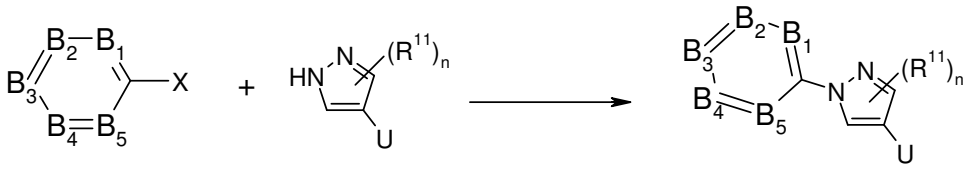
Los radicales B_1-B_5, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es, por ejemplo, bromo o yodo.

Los compuestos de la fórmula estructural (Y-3) son, por ejemplo, 1-(2,6-dicloro-4-trifluorometilfenil)-4-yodopirazol, 3-cloro-2-(4-yodopirazol-1-il)-5-(trifluorometil)piridina (CAS RN: 8611-89-2), 1-(2,6-dicloro-4-heptafluoroisopropilfenil)-4-yodopirazol, 1-(2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilfenil)-4-yodopirazol, 1-[2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]-4-yodopirazol, 1-[2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]-4-yodopirazol o 1-[2-etil-6-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4-yodopirazol.

Los compuestos de la invención de la estructura general (Y-3) se preparan haciendo reaccionar pirazoles de la estructura (Y-2) con agentes halogenantes. Los radicales B^1 a B^5 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos halogenantes apropiados son conocidos por los expertos en la técnica, por ejemplo, cloro, bromo, yodo N-clorosuccinimida, N-bromosuccinimida, N-yodosuccinimida, 1,3-dicloro-5,5-dimetilhidantoína, 1,3-dibromo-5,5-dimetilhidantoína, hipoclorito de sodio y monocloruro de yodo. Se da preferencia al uso de bromo, yodo y yodosuccinimida. Puede ser ventajoso realizar la reacción en presencia de un agente oxidante, por ejemplo, peróxido de hidrógeno. La reacción sigue las condiciones conocidas de la literatura, por ejemplo, Guo Li et al., Tetrahedron Letters 48 (2007), 4595-4599; Mary M. Kim et al., Tetrahedron Letters 49 (2008), 4026-4028.

Acoplamiento alternativo con pirazol

De modo alternativo, los compuestos de la estructura Y-3 también se pueden preparar por métodos conocidos de la literatura a través del acoplamiento directo de yodopirazoles con haluros de arilo apropiados (por ejemplo, Sammelson, Robert E. et al., J. de Organic Chemistry, 68 (2003), 8075-8079).



(Y-8) (Y-9) (Y-3)

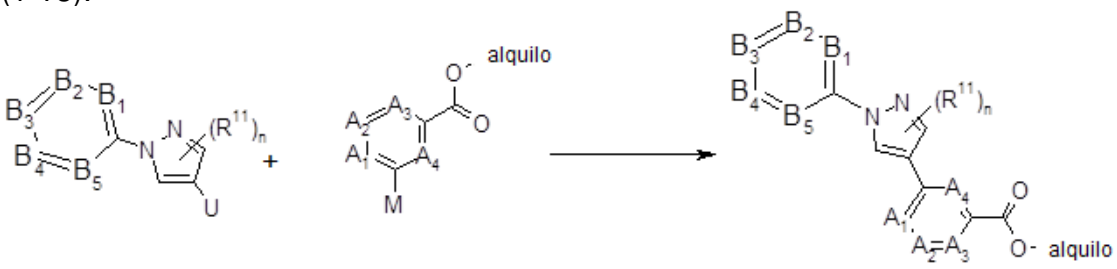
Los radicales B_1 a B_5, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es, por ejemplo, un halógeno. U es, por ejemplo, bromo, yodo o triflato.

Los compuestos de partida de la estructura (Y-8) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen 2-bromo-1,3-dicloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1-etil-3-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-bromo-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-bromo-1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno, 2-bromo-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno.

Se pueden preparar, por ejemplo, por los procedimientos descritos en el documento EP1253128, páginas 8-10.

Etapa 3 Acoplamiento de ácido borónico

Etapa 3 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (1-T3):

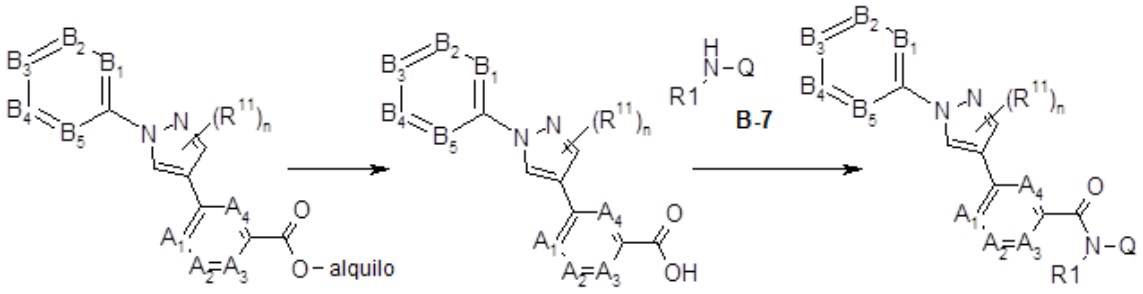


(Y-3) (Y-4) (Y-5)

Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es, por ejemplo, bromo, yodo o triflato cuando M es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato; o U es, por ejemplo, un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato cuando M es bromo, yodo o triflato.

Los compuestos de la invención de la estructura general **(Y-5)** se pueden preparar por métodos conocidos de la literatura, por medio de reacciones catalizadas con paladio de los correactivos **(Y-3)** e **(Y-4)** (por ejemplo, los documentos WO 2005/040110 o WO 2009/089508). Los compuestos de la estructura general **(Y-4)** son asequibles en comercios o se pueden preparar por procesos conocidos por los expertos en la técnica.

Etapas 4, 5 Hidrólisis, amidación



(Y-5) (Y-6)

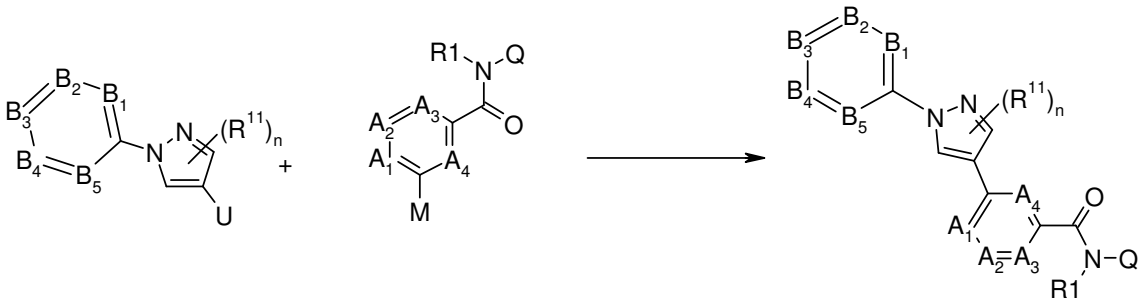
(I-T3)

Los compuestos de la invención de la estructura general **(I-T3)** se pueden preparar por analogía a los procedimientos de acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida **(Y-6)** e **(Y-7)** (por ejemplo, documentos WO 2010/051926 o WO 2010/133312). Los compuestos de la estructura general **(Y-6)** se pueden preparar por analogía a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general **(Y-5)** (por ejemplo, documentos WO 2010/051926 o WO 2010/133312). Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad.

Etapa 3 alternativa: acoplamiento con amidas

De modo alternativo, los compuestos de la invención **(I-T3)** se pueden preparar por el proceso de preparación general 3b.

Esquema de reacción 3b



(Y-3) (Y-10) (I-T3)

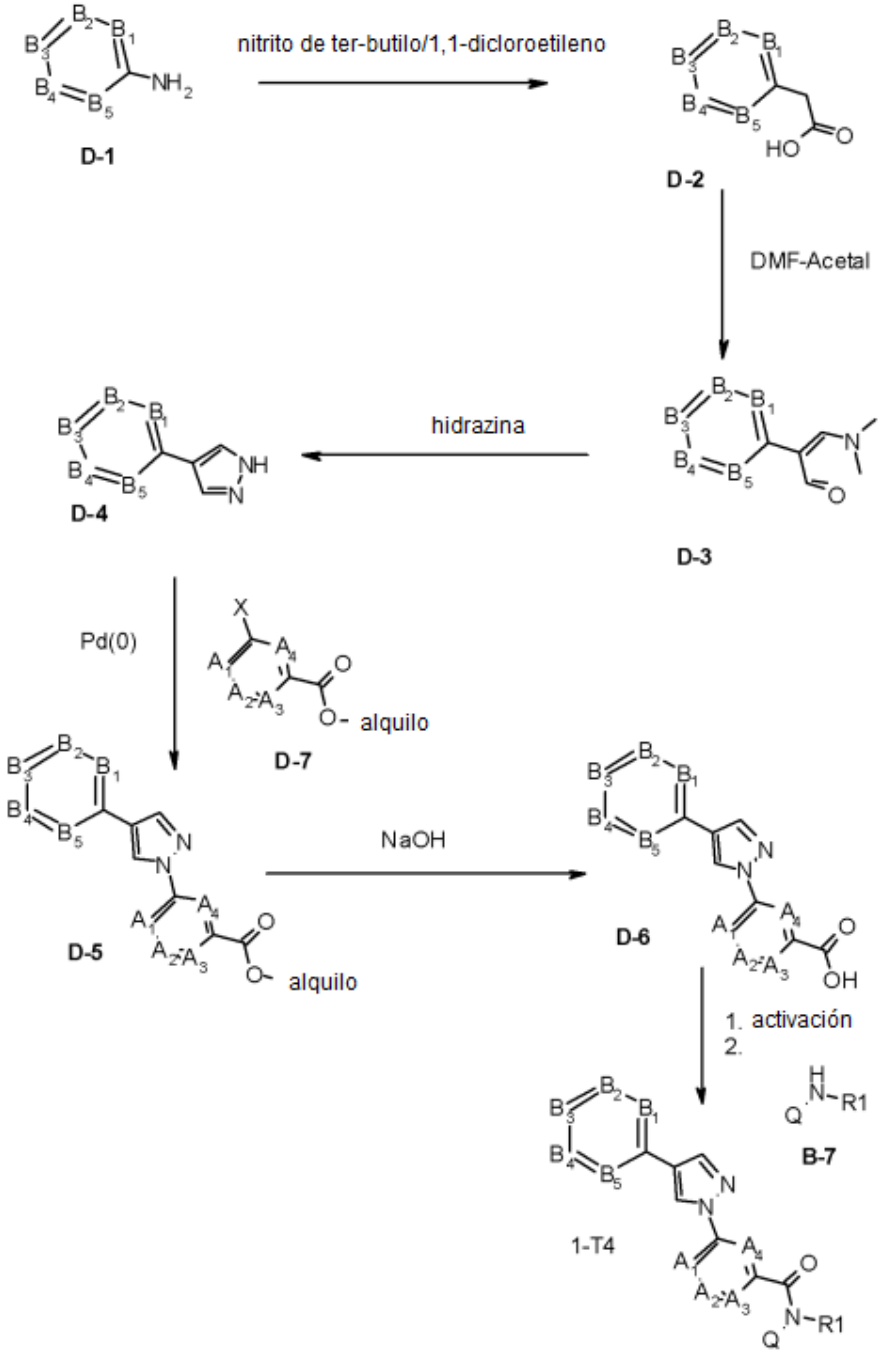
Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, Q, R^1, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es bromo, yodo o triflato cuando M es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato. U es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato cuando M es bromo, yodo o triflato.

Los compuestos de la invención de la estructura general **(I-T3)** se pueden preparar por métodos conocidos de la literatura, por medio de reacciones catalizadas con paladio de los correactivos **(Y-3) e (Y-10)** (por ejemplo, documentos WO 2005/040110 o WO 2009/089508). Los compuestos de la estructura general **(Y-10)** son asequibles en comercios o se pueden preparar por procesos conocidos por los expertos en la técnica. La preparación de compuestos de la estructura **(Y-3)** ya se ha descrito con anterioridad.

Proceso I-T4

Los compuestos de la estructura (**I-T4**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 4.

Esquema de reacción 4



Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, Q y R^1 son cada uno como se definieron con anterioridad. X es Cl, Br, I. Los compuestos de partida de la

estructura (D-1) (por ejemplo, EP2319830, p. 330) y (D-7) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos.

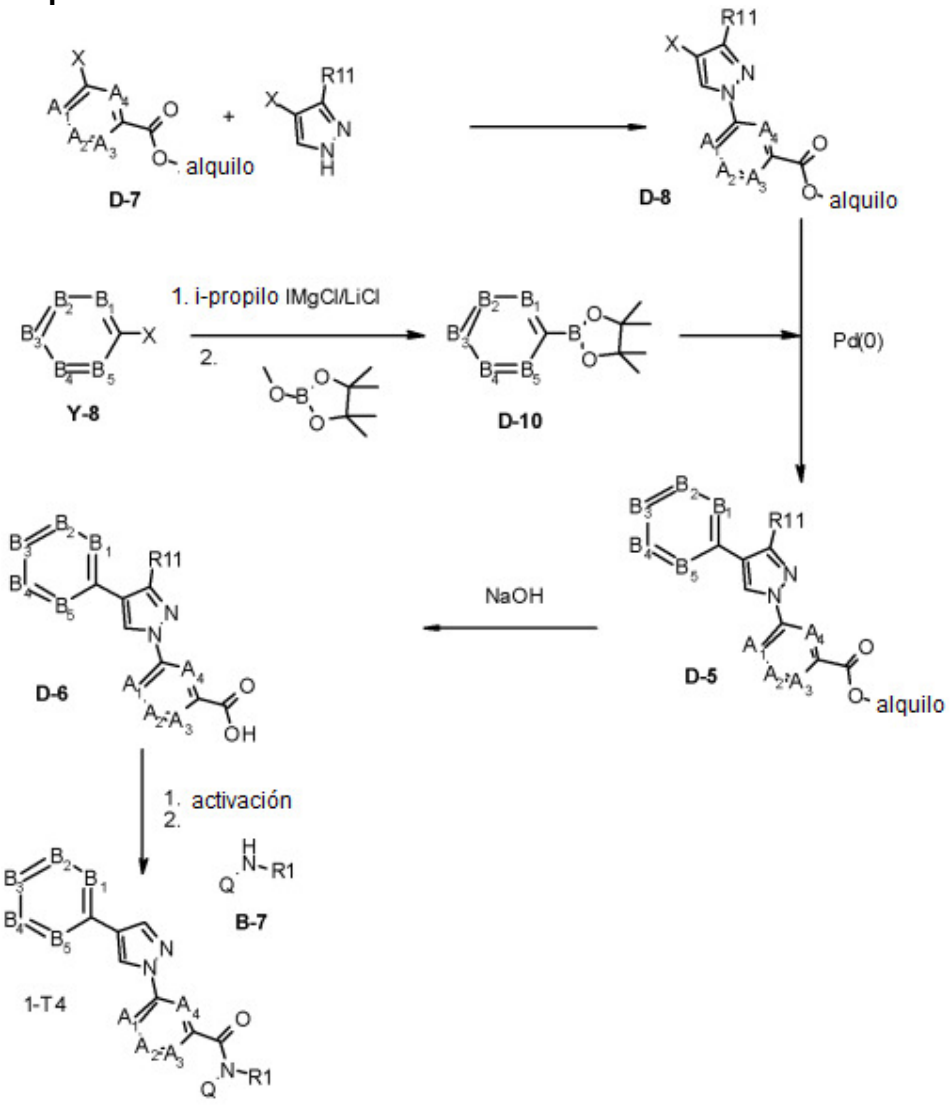
Las reacciones se pueden llevar a cabo mediante los procesos descritos en la literatura, por ejemplo, WO 2012/149236, Majumder, Supriyo et al., Advanced Synthesis and Catalysis, 351 (2009), 2013-2023 o US 5.061.705.

Los compuestos de la estructura general (**D2**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**D1**) (por ejemplo, WO 2008148868A1, p. 87). Los compuestos de la estructura general (**D3**) se pueden preparar por analogía a reacciones conocidas de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**D2**) y una sal de iminio (por ejemplo, Knorr, Rudolf; Loew, Peter; Hassel, Petra; Bronberger, Hildegard Journal of Organic Chemistry, 49 (1984) p. 1288-1290). Los compuestos de la estructura general (**D4**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**D3**) e hidrazina (por ejemplo, WO 2008080969 A1, p. 102-103, Ejemplo 104). Los compuestos de la estructura general (**D5**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los compuestos de la estructura general (**D4**) y (**D7**) (por ejemplo, WO 2013009791, p. 50, Ejemplo 44). Los compuestos de la estructura general (**D6**) se pueden preparar análogamente a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general (**D5**) [WO 2010-051926; WO 2010-133312]. Los compuestos de la invención de la estructura general (**I-T4**) se pueden preparar por analogía a los procedimientos de

acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida (**D6**) y (**D8**) [WO 2010-051926; WO 2010-133312].

Los compuestos de la estructura (I-T4) se pueden preparar alternativamente por el proceso especificado en el esquema de reacción 5.

Esquema de reacción 5:



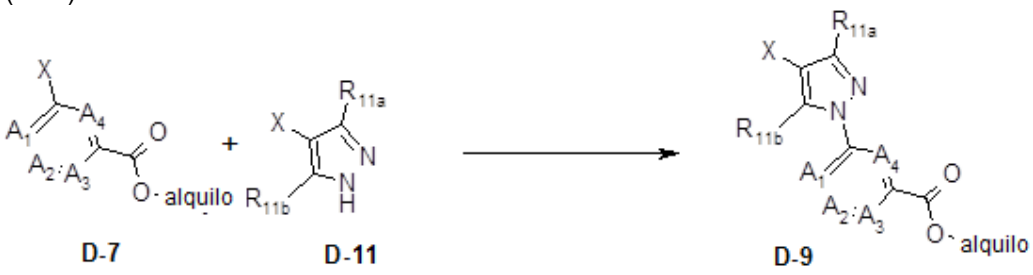
Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definen en la presente. X es Cl, Br, I. Los compuestos de partida de la

estructura (**D-7**), (**D-9**) y (**D-11**) (por ejemplo, EP1253128, p. 8-10) se conocen y algunos son asequibles en comercios o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos.

Las reacciones se pueden llevar a cabo mediante los procesos descritos en la literatura:

Etapa 1 Acoplamiento de pirazol

Etapa 1 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (**I-T4**):



D-7 D-11 D-9

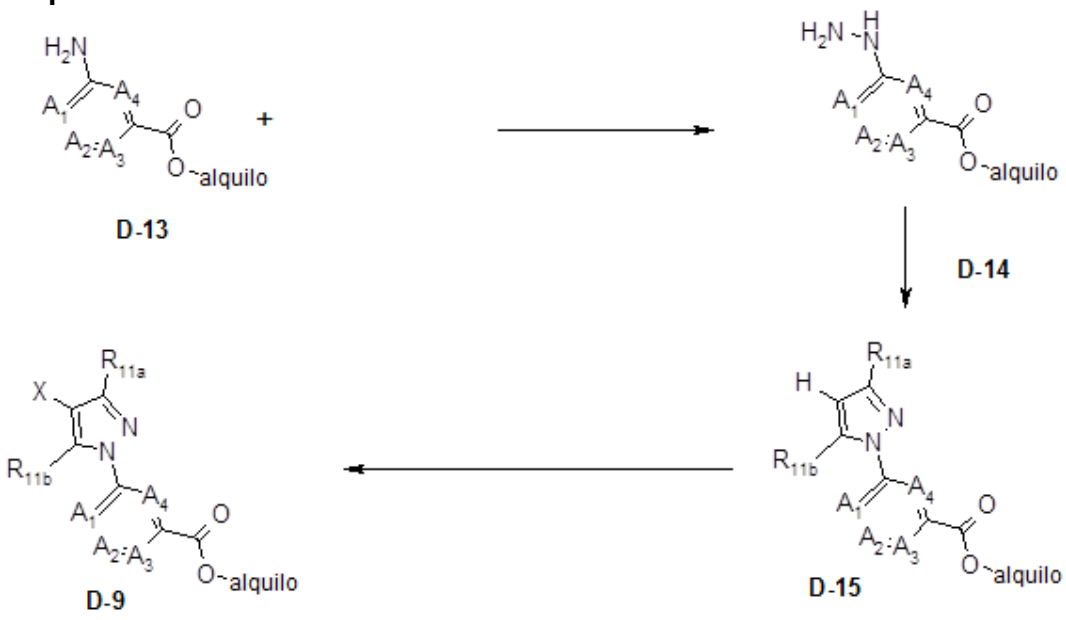
Los compuestos de la estructura general (**D-9**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**D-7**) y (**D-11**). Los radicales A^1-A^4, alquilo y X son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de partida de la estructura (**D-7**) se conocen (por ejemplo, WO 2004099146A1, p. 68-69) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen: 2-cloro-5-yodobenzoato de metilo, 2-bromo-5-yodobenzoato de etilo, 5-bromo-2-cloro-3-fluorobenzoato de metilo, 5-bromo-2-cloronicotinato de etilo. Los compuestos de partida de la estructura (**D-11**) se conocen y algunos de ellos son asequibles en comercios o se pueden preparar por medio de

procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen 4-bromopirazol, 4-bromo-3-metilpirazol, 4-bromo-3,5-dimetilpirazol y 4-bromo-3-(trifluorometil)pirazol. Los compuestos (**D-9**) aún desconocidos se pueden preparar por analogía a procesos conocidos para reunir pirazoles con sistemas aromáticos (por ejemplo, WO 2013009791, p. 50, Ejemplo 44).

Preparación alternativa de pirazol

De modo alternativo, los compuestos de la invención de la estructura general (**D9**) se pueden obtener por medio de la ruta especificada en el esquema de reacción 6.

Esquema de reacción 6:



Los radicales A_1 a A_4, alquilo y R_{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es Cl, Br, I. Los compuestos de partida de la estructura (**D-13**) se conocen (por ejemplo, WO 2004099146A1, p. 68-69) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen: 5-amino-2-clorobenzoato de metilo, 5-amino-2-clorobenzoato de etilo, 5-

amino-2-cloro-3-fluorobenzoato de metilo, 5-amino-2-cloronicotinato de etilo.

Los compuestos (**D-14**) aún desconocidos se pueden preparar por analogía a procesos conocidos para preparar arilhidrazinas (por ejemplo, WO 2004058731, p. 65).

Los compuestos de la invención de la estructura general (**D-15**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**D-14**). Los radicales A_1 a A_4, alquilo y R_{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de partida de la estructura (**D-14**) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen 2-cloro-5-hidrazinobenzoato de metilo, 2-cloro-5-hidrazinobenzoato de etilo, 2-cloro-3-fluoro-5-hidrazinobenzoato de metilo, 2-cloro-5-hidrazinonicotinato de etilo. La reacción se puede llevar a cabo análogamente a las condiciones para el cierre del anillo de pirazol conocida en la literatura (por ejemplo, Sachweh, Volker; Langhals, Heinz Chemische Berichte, 119 (1986) 1627-1639).

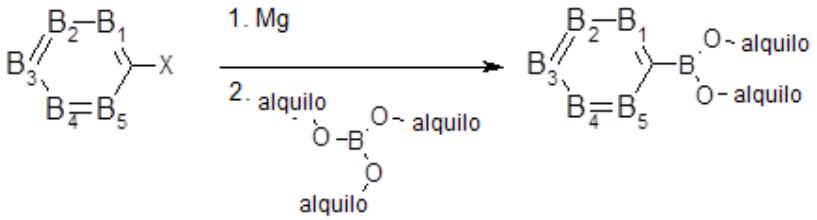
Los compuestos de la invención de la estructura general (**D9**) se preparan haciendo reaccionar pirazoles de la estructura (**D-15**) con agentes halogenantes. Los radicales A_1 a A_4, alquilo y R_{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos preferidos de la estructura (**D15**) incluyen 2-cloro-5-(pirazol-1-il)benzoato de metilo, 2-cloro-5-(pirazol-1-il)benzoato de etilo, 2-cloro-3-fluoro-5-(pirazol-1-il)benzoato de metilo, 2-cloro-5-(pirazol-1-il)-nicotinato de etilo.

Los compuestos halogenantes apropiados son conocidos por los expertos en la técnica, por ejemplo, por ejemplo, cloro, bromo, yodo, N-

clorosuccinimida, N-bromosuccinimida, N-yodosuccinimida, 1,3-dicloro-5,5-dimetilhidantoína, 1,3-dibromo-5,5-dimetilhidantoína, hipoclorito de sodio y monocloruro de yodo. Se da preferencia al uso de bromo, yodo, bromosuccinimida y yodosuccinimida. Puede ser ventajoso realizar la reacción en presencia de un agente oxidante, por ejemplo, peróxido de hidrógeno. La reacción sigue las condiciones conocidas de la literatura, por ejemplo, Guo Li et al., Tetrahedron Letters 48 (2007), 4595-4599; Mari M. Kim et al., Tetrahedron Letters 49 (2008), 4026-4028.

Etapa 2 Éster borónico

Etapa 2: Preparación de los compuestos de partida de la estructura (**D12)**



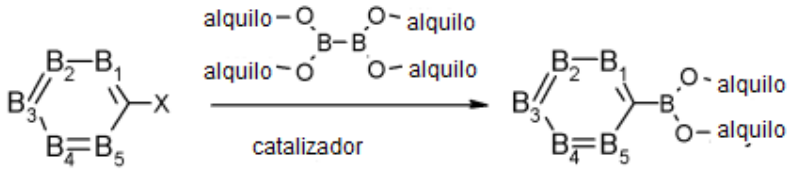
(**Y-8)** (**D-16**) (**D-12)**

Los compuestos de la invención de la estructura general (**D-12**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura (Chien, Yuh-Yih; Chou, Meng-Yen; Leung, Man-Kit; Liao, Yuan-Li; Lin, Chang-Chih; Wong, Ken-Tsung; Journal of Organic Chemistry, 67 (2002) p. 1041-1044) a partir de los materiales de partida de la estructura (**D-10**) a través de la reacción con magnesio y posterior reacción con ésteres bóricos de la estructura (**D-16**).

Los radicales B^1-B^5 y alquilo son cada uno como se definieron con anterioridad.

Los ésteres bóricos de la estructura (**D-13**) usados en la reacción se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen borato de trimetilo, borato de trietilo y 2-metoxi-4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolano.

De modo alternativo, los compuestos de la invención de la estructura general (**D-12**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura (Tang, Wenjun; Keshipeddi, Santosh; Zhang, Yongda; Wei, Xudong; Savoie, Jolaine; Patel, Nitinchandra D.; Yee, Natan K.; Senanayake, Chres H.; Organic Letters, 13 (2011) S. 1366-1369) a partir de los materiales de partida de la estructura (**D-10**) a través de la reacción con diboranes de la estructura (**D-14**) en presencia de catalizadores.

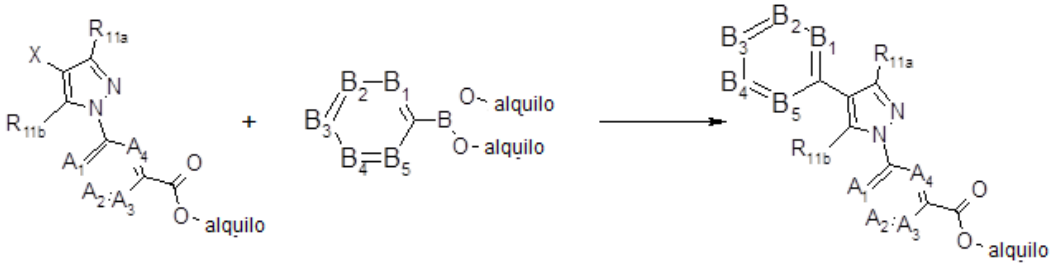


(**Y-8)** (**D-17**) (**D-12)**

Los ésteres bóricos de la estructura (**D-17**) usados en la reacción se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen 4,4,5,5-tetrametil-2-(4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-il)-1,3,2-dioxaborolano (bis(pinacolato)diboro).

Los catalizadores usados pueden ser, en particular, compuestos y complejos de paladio y Cu(I).

Etapa 3 Acoplamiento de arilo



(D-9) **(D-12)** **(D-5)**

Los compuestos de la invención de la estructura general (**D-5**) se preparan haciendo reaccionar los compuestos de la estructura (**D-9**) con éster borónicos de la estructura (**D-12**).

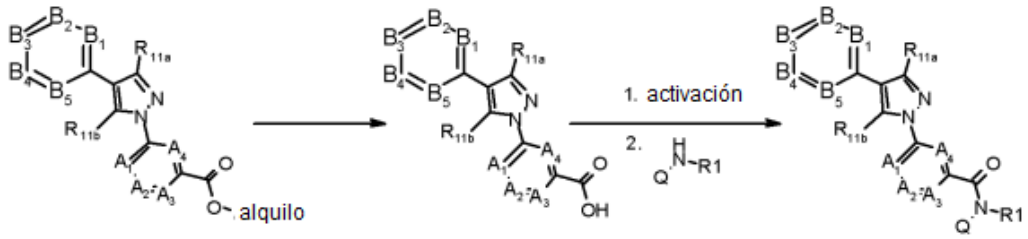
Los radicales A^1-A^4, B^1-B^5, R^{11}, alquilo y X son cada uno como se definieron con anterioridad.

La preparación de los compuestos de las estructuras (**D-9**) y (**D-12**) se describió con anterioridad.

Ejemplos de compuestos de la estructura (**D-9**) incluyen: 5-(4-bromopirazol-1-il)-2-clorobenzoato de metilo, 5-(4-yodopirazol-1-il)-2-clorobenzoato de metilo, 5-(4-bromo-3-metilpirazol-1-il)-2-clorobenzoato de etilo, 5-(4-bromo-3-(trifluorometil)pirazol-1-il)-2-clorobenzoato de metilo, 5-(4-bromo-3-(trifluorometil)pirazol-1-il)-2-clorobenzoato de metilo, 5-(4-bromo-3,5-dimetilpirazol-1-il)-2-clorobenzoato de metilo y 5-(4-bromo-3-metilpirazol-1-il)-2-cloronicotinato de etilo.

La reacción se lleva a cabo en las condiciones descritas en la literatura, por ejemplo, los documentos WO 2005040110 o WO 2009089508.

Etapas 4, 5 Hidrólisis, amidación



(D-5) **(D-6)** **(D-8)**

(I-T4)

Los compuestos de la invención de la estructura general (**I-T4**) se pueden preparar por analogía a los procedimientos de acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida (**D-6**) y (**D-8**) [WO 2010051926; WO 2010133312]. Los compuestos de la estructura general (**D-6**) se pueden preparar análogamente a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general (**D-5**) [WO 2010-051926; WO 2010133312]. Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. La preparación de los compuestos de la estructura (**D5**) se describió con anterioridad.

(I-T5): Los compuestos de la fórmula (I-T5) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Friedrich, L.E. et al. Journal of Organic Chemistry, 43 (1978), 34-38; o Huettel, R. et al. Chemische Berichte, 93 (1960), p. 1425-1432; o Sato, T et al., Bulletin of the Chemical Society of Japan, 41 (1968), p. 3017-3018.

(I-T8): Los compuestos de la fórmula (I-T8) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a los documentos EP 1 405 636, Ejemplo 5; o EP

2 301 538, p. 162; o Schmidt, Bernd et al., European Journal of Organic Chemistry, (2011), p. 4814-4822.

(I-T9): Los compuestos de la fórmula (I-T9) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Ma, Shengming et al., Chemistry-A European Journal, 9 (2003), p. 2447-2456.

(I-T10): Los compuestos de la fórmula (I-T10) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a EP 2 301 538, p. 162.

(I-T11): Los compuestos de la fórmula (I-T11) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a EP 2 301 538, p. 165.

(I-T12): Los compuestos de la fórmula (I-T12) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a EP 2 301 538, p. 164.

(I-T13): Los compuestos de la fórmula (I-T13) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a EP 2 301 538, p. 164.

(I-T14): Los compuestos de la fórmula (I-T14) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Hibi, Shigeki et al., Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 10 (2000), p. 623–626 o Wang, Xiang et al. Journal of Organic Chemistry, 72 (2007), 1476-1479; EP1405636, página 31.

(I-T15): Los compuestos de la fórmula (I-T15) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Chattopadhiai, Buddhadeb et al., Organic Letters, 13 (2011), p. 3746-3749.

(I-T16): Los compuestos de la fórmula (I-T16) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Campi, Eva M. et al. Tetrahedron Letters, 32 (1991), p. 1093-1094; o Thompson, Benjamin B. et al., Organic Letters, 13 (2011), p. 3289-3291; o Kloetzel et al. Journal of the American Chemical Society, 79 (1957), p. 4222; o Chi, Yonggui Robin et al., Journal of the American Chemical Society, 135 (2013), p. 8113-8116.

(I-T18): Los compuestos de la fórmula (I-T18) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a EP 2 311 455, p. 150; o Balaban, A.T. et al. Tetrahedron, 19 (1963), p. 2199-2207.

(I-T19): Los compuestos de la fórmula (I-T19) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a WO 2004/14366, p. 108.

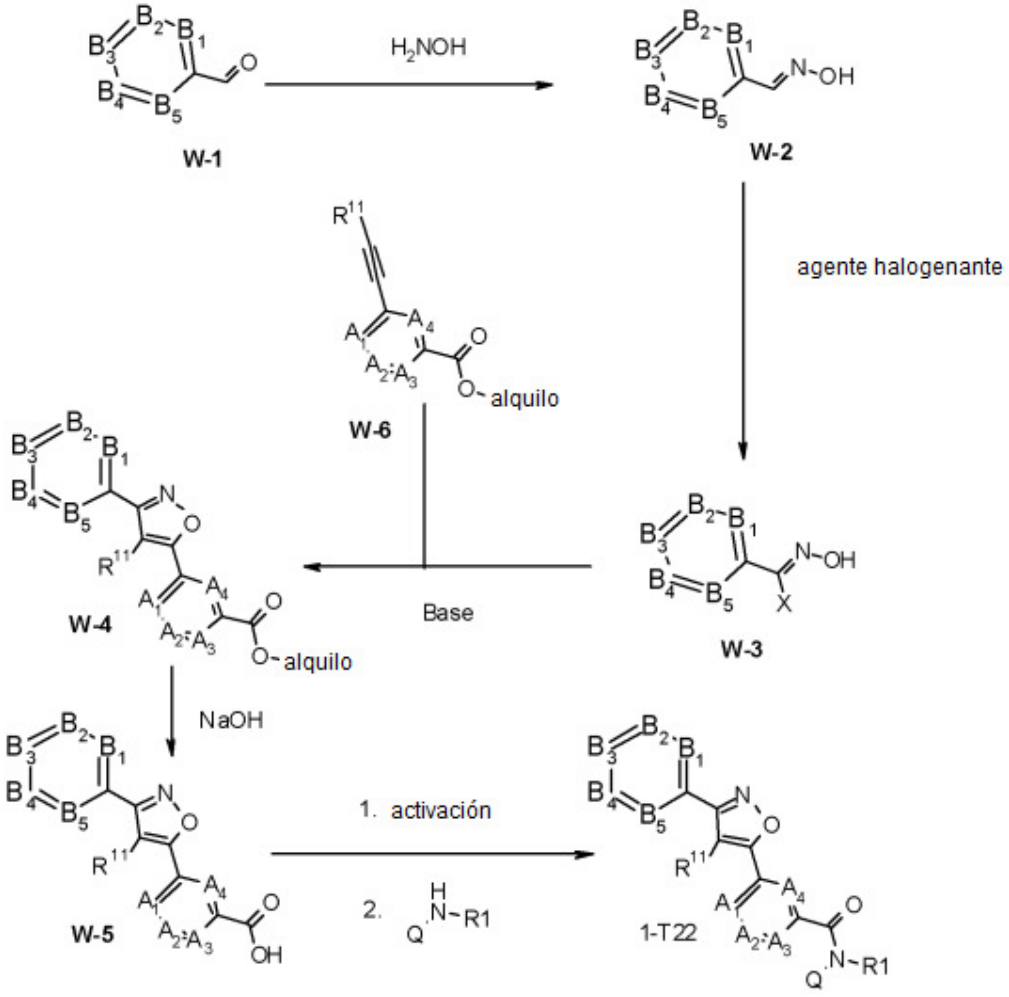
(I-T20): Los compuestos de la fórmula (I-T20) se pueden preparar, por ejemplo, analogousli a Araki, Hiroshi; Katoh, Tadashi; Inoue, Munenori; Synlett, (2006), p. 555-558; US 6.545.009, p. 27, Ejemplo 1.

(I-T21): Los compuestos de la fórmula (I-T21) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a WO 2004/72050, p. 13; o US 6,545,009, p. 27.

Proceso I-T22

Los compuestos de la estructura **(I-T22)** se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema 7.

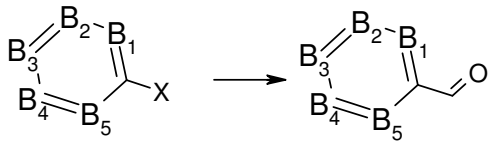
Esquema de reacción 7:



Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es Cl, Br, I. Los compuestos de partida de la estructura (W-1) y (W-6) se conocen (W1 por ejemplo, US 2011/53904 p. 19, W6 por ejemplo, WO 2012/175474, p. 117-118) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Las reacciones se llevan a cabo análogamente a las condiciones especificadas para la preparación de los compuestos (**I-T23**).

Etapa 1 Aldehído

Etapa 1 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (**I-T22**):



(**W1)** (**W2)**

Los compuestos de la invención de la estructura general (**W2**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura (US5739083, Ejemplo 2; WO 2011/23667, p. 34) a partir de los materiales de partida de la estructura (**W1**).

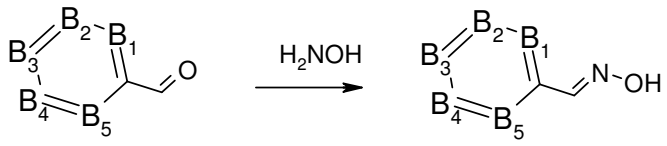
Los radicales B^1-B^5 y X son cada uno como se definieron con anterioridad. X es, por ejemplo, cloro, bromo o yodo.

Los compuestos de partida de la estructura (**B1**) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen 2-bromo-1,3-dicloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1-etil-3-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-bromo-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-bromo-1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno, 2-bromo-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno, 1,3-dimetil-2-yodo-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-yodo-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-

(trifluorometil)benceno. Se pueden preparar, por ejemplo, por los procedimientos descritos en el documento EP1253128, páginas 8-10.

Etapa 2 Oxima

Etapa 2 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (**1-T22**):



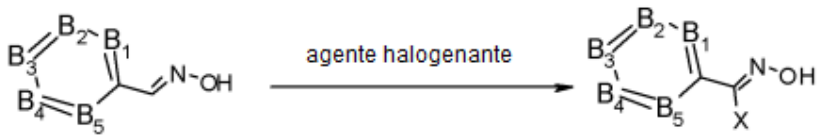
(**W2**) (**W3**)

Los compuestos de la invención de la estructura general (**W3**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**W2**). Los radicales B_1-B_5 son cada uno como se definieron con anterioridad. La preparación de los compuestos de partida de la estructura (**W2**) se describió con anterioridad. Ejemplos incluyen 2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benzaldehído, 2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benzaldehído, 2-etil-6-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benzaldehído, 2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)benzaldehído, 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)benzaldehído, 2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometoxi)benzaldehído, 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometoxi)benzaldehído. Su preparación se describió con anterioridad.

Los compuestos de la fórmula estructural (**W3**) son nuevos. Los compuestos aún desconocidos (**W3**) se pueden preparar análogamente a los procesos conocidos para preparar oximas a partir de aldehídos (H. Metzger en Houben-Weyl, volumen X/4, página 55 ff., Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Los compuestos de la fórmula estructural (**W3**) pueden estar en la forma de stereoisómeros puros, pero también en la forma de mezclas de los estereoisómeros.

Etapa 3 Cloruro de hidroxamilo

[390] Etapa 3 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (**1-T22**):



(W3) (**W4**)

Los compuestos de la invención de la estructura general (**W4**) se preparan haciendo reaccionar las oximas de la estructura (**W3**) con agentes halogenantes.

Los radicales B1-B5 son cada uno como se definieron con anterioridad. X es cloro, bromo o yodo.

Los compuestos típicos de la estructura (**W4**) son, por ejemplo, cloruro de 2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-etil-6-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de

2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometoxi)-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometoxi)-N-hidroxibencimidoílo, bromuro de 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)-N-hidroxibencimidoílo.

Los compuestos halogenantes apropiados son conocidos por los expertos en la técnica, por ejemplo, cloro, bromo, yodo, N-clorosuccinimida, N-bromosuccinimida, N-yodosuccinimida, 1,3-dicloro-5,5-dimetilhidantoína, 1,3-dibromo-5,5-dimetilhidantoína, tetracloroyodato de benciltrimetilamonio e hipoclorito de sodio. Se da preferencia al uso de reactivos de cloración.

La reacción se puede llevar a cabo usando disolventes apropiados.

Los diluyentes o disolventes útiles para llevar a cabo los procesos de acuerdo con la invención en principio incluyen todos los disolventes orgánicos que son inertes en las condiciones de reacción específicas. Ejemplos incluyen: hidrohalocarburos (por ejemplo, hidroclorocarburos, tales como tetraetileno, tetracloroetano, dicloropropano, cloruro de metileno, diclorobutano, cloroformo, tetracloruro de carbono, tricloroetano, tricloroetileno, pentacloroetano, difluorobenceno, 1,2-dicloroetano, clorobenceno, bromobenceno, diclorobenceno, clorotolueno, triclorobenceno), alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol, isopropanol, butanol), éteres (por ejemplo, etil propil éter, metil ter-butil éter, n-butil éter, anisol, fenetol, ciclohexil metil éter, dimetil éter, dietil éter, dipropil

éter, diisopropil éter, di-n-butil éter, diisobutil éter, diisoamil éter, etilenglicol dimetil éter, tetrahidrofurano, dioxano, diclorodietil éter y poliéteres de óxido de etileno y/u óxido de propileno), aminas (por ejemplo, trimetil-, trietil-, tripropil-, tributilamina, N-metilmorfolina, piridina y tetrametilendiamina), nitrohidrocarburos (por ejemplo, nitrometano, nitroetano, nitropropano, nitrobenceno, cloronitrobenceno, o-nitrotolueno; nitrilos tales como acetonitrilo, propionitrilo, butironitrilo, isobutironitrilo, benzonitrilo, m-clorobenzonitrilo), dióxido de tetrahidrotiofeno, dimetilsulfóxido, tetrametilensulfóxido, dipropilsulfóxido, bencilmetilsulfóxido, diisobutilsulfóxido, dibutilsulfóxido, diisoamilsulfóxido, sulfonas (por ejemplo, dimetilo, dietilo, dipropilo, dibutilo, difenilo, dihexilo, metiletilo, etilpropilo, etilisobutilo y pentametilensulfona), hidrocarburos alifáticos, cicloalifáticos o aromáticos (por ejemplo, pentano, hexano, heptano, octano, nonano e hidrocarburos técnicos) y también los denominados “white spirits” con componentes que tienen puntos de ebullición en el intervalo de, por ejemplo, 40 °C a 250 °C, cimeno, fracciones de petróleo dentro de un intervalo de ebullición de 70 °C a 190 °C, ciclohexano, metilciclohexano, éter de petróleo, ligroína, octano, benceno, tolueno, clorobenceno, bromobenceno, nitrobenceno, xileno, ésteres (por ejemplo, acetato de metilo, etilo, butilo e isobutilo, carbonato de dimetilo, dibutilo y etileno); amidas (por ejemplo, hexametilenfosforamida, formamida, N-metilformamida, N,N-dimetilformamida, N,N-dipropilformamida, N,N-dibutilformamida, N-metilpirrolidina, N-metilcaprolactama, 1,3-dimetil-3,4,5,6-tetrahidro-2(1H)-pirimidina, octilpirrolidona, octilcaprolactama, 1,3-dimetil-2-imidazolinadiona, N-formilpiperidina, N,N’-1,4-diformilpiperazina) y

cetonas (por ejemplo, acetona, acetofenona, metiletilcetona, metilbutilcetona).

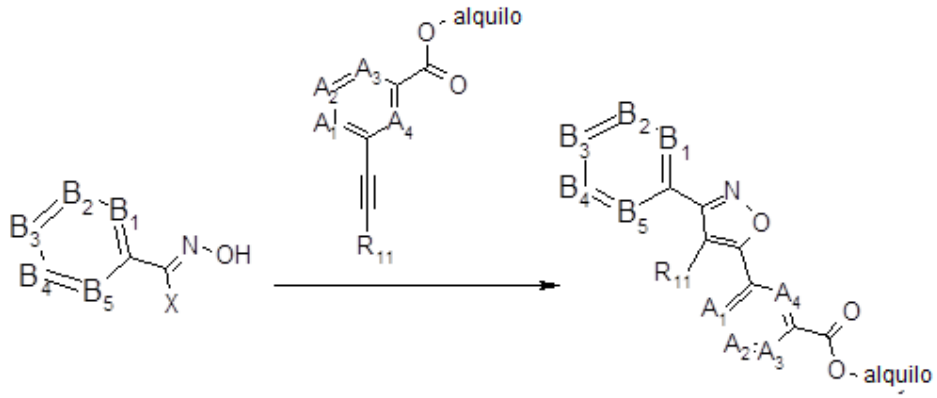
Los diluyentes preferidos usados pueden ser cualquier disolvente que no altera la reacción, por ejemplo, agua. Los ejemplos útiles son hidrocarburos aromáticos tales como benceno, tolueno, xileno o clorobenceno; hidrocarburos halogenados tales como diclorometano, cloroformo, 1,2-dicloroetano o tetracloruro de carbono, éteres de cadena abierta o cíclicos tales como dietil éter, dioxano, tetrahidrofurano o 1,2-dimetoxietano; ésteres tales como acetato de etilo y acetato de butilo; cetonas, por ejemplo, acetona, metilisobutilcetona y ciclohexanona; amidas tales como dimetilformamida y dimetilacetamida, N-metilpirrolidona; nitrilos tales como acetonitrilo o propionitrilo; y otros disolventes inertes tales como 1,3-dimetil-2-imidazolidinona; los disolventes se pueden usar solos o en combinación de 2 o más.

La reacción se puede ejecutar dentro de un amplio intervalo de temperatura. Usualmente, se lleva a cabo dentro de un intervalo de temperatura de -78 °C a 200 °C, con preferencia, a temperaturas de entre -10 y 150 °C. La reacción se puede ejecutar a presión elevada o incluso reducida. Pero, con preferencia, se lleva a cabo a presión estándar. Los tiempos de reacción están entre 0,1 y 72 horas, con preferencia, ente 1 y 24 horas.

Para llevar a cabo la reacción, se usan 1 a 3 moles, con preferencia, 1 a 1,5 moles, de agente halogenante por mol del compuesto de la estructura (**W3**) en un disolvente, por ejemplo, dimetilformamida (DMF).

Etapa 4 Cierre de anillo

[400] Etapa 4 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (**1-T22**):



(**W4**) (**W8**) (**W5**)

Los compuestos de la invención de la estructura general (**W5**) se preparan haciendo reaccionar los cloruros de hidroxamilo de la estructura (**W4**) con acetilenos de la estructura (**W8**).

Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, R^{11} y alquilo son cada uno como se definieron con anterioridad. X es halógeno, tales como cloro, bromo, yodo.

[403] La preparación de los compuestos de la estructura (**W4**) se describió con anterioridad. Los compuestos típicos de la estructura (**W4**) son, por ejemplo, cloruro de 2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-etil-6-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-

(trifluorometoxi)-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometoxi)-N-hidroxibencimidoílo, bromuro de 2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)-N-hidroxibencimidoílo.

Los compuestos de la estructura (**W8**) se conocen (WO 2012107434, p. 103) o se pueden preparar por métodos conocidos de la literatura (Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Society Reviews (2011), 40(10), 5084-5121, Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Reviews (Washington, DC, Estados Unidos) (2007), 107(3), 874-922). Los compuestos típicos de la estructura (**W8**) son, por ejemplo, 2-cloro-5-etinilbenzoato de metilo, 2-bromo-5-etinilbenzoato de etilo, 2-cloro-5-etinil-3-fluorobenzoato de metilo, 2-cloro-5-etinilnicotinato de etilo, 5-etinil-2-metilnicotinato de etilo.

La reacción se puede llevar a cabo usando disolventes apropiados.

Los diluyentes o disolventes útiles para llevar a cabo los procesos de acuerdo con la invención en principio incluyen todos los disolventes orgánicos que son inertes en las condiciones de reacción específicas. Ejemplos incluyen: hidrohalocarburos (por ejemplo, hidroclorocarburos, tales como tetraetileno, tetracloroetano, dicloropropano, cloruro de metileno, diclorobutano, cloroformo, tetracloruro de carbono, tricloroetano, tricloroetileno, pentacloroetano, difluorobenceno, 1,2-dicloroetano, clorobenceno, bromobenceno, diclorobenceno, clorotolueno, triclorobenceno), alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol, isopropanol, butanol), éteres (por ejemplo, etil propil éter, metil ter-butil éter, n-butil éter, anisol, fenetol, ciclohexil metil éter, dimetil éter, dietil éter, dipropil éter, diisopropil éter, di-n-butil éter, diisobutil éter, diisoamil éter,

etilenglicol dimetil éter, tetrahidrofurano, dioxano, diclorodietil éter y poliéteres de óxido de etileno y/u óxido de propileno), aminas (por ejemplo, trimetil-, trietil-, tripropil-, tributilamina, N-metilmorfolina, piridina y tetrametilendiamina), nitrohidrocarburos (por ejemplo, nitrometano, nitroetano, nitropropano, nitrobenceno, cloronitrobenceno, o-nitrotolueno; nitrilos tales como acetonitrilo, propionitrilo, butironitrilo, isobutironitrilo, benzonitrilo, m-clorobenzonitrilo), dióxido de tetrahidrotiofeno, dimetilsulfóxido, tetrametilensulfóxido, dipropilsulfóxido, bencilmetilsulfóxido, diisobutilsulfóxido, dibutilsulfóxido, diisoamilsulfóxido, sulfonas (por ejemplo, dimetilo, dietilo, dipropilo, dibutilo, difenilo, dihexilo, metiletilo, etilpropilo, etilisobutilo y pentametilensulfona), hidrocarburos alifáticos, cicloalifáticos o aromáticos (por ejemplo, pentano, hexano, heptano, octano, nonano e hidrocarburos técnicos) y también los denominados “white spirits” con componentes que tienen puntos de ebullición en el intervalo de, por ejemplo, 40 °C a 250 °C, cimeno, fracciones de petróleo dentro de un intervalo de ebullición de 70 °C a 190 °C, ciclohexano, metilciclohexano, éter de petróleo, ligroína, octano, benceno, tolueno, clorobenceno, bromobenceno, nitrobenceno, xileno, ésteres (por ejemplo, acetato de metilo, etilo, butilo e isobutilo, carbonato de dimetilo, dibutilo y etileno); amidas (por ejemplo, hexametilenfosforamida, formamida, N-metilformamida, N,N-dimetilformamida, N,N-dipropilformamida, N,N-dibutilformamida, N-metilpirrolidina, N-metilcaprolactama, 1,3-dimetil-3,4,5,6-tetrahidro-2(1H)-pirimidina, octilpirrolidona, octilcaprolactama, 1,3-dimetil-2-imidazolinadiona, N-formilpiperidina, N,N’-1,4-diformilpiperazina) y

cetonas (por ejemplo, acetona, acetofenona, metiletilcetona, metilbutilcetona).

Los diluyentes preferidos usados pueden ser cualquier disolvente que no altera la reacción, por ejemplo, agua. Los ejemplos útiles son hidrocarburos aromáticos tales como benceno, tolueno, xileno o clorobenceno; hidrocarburos halogenados tales como diclorometano, cloroformo, 1,2-dicloroetano o tetracloruro de carbono, éteres de cadena abierta o cíclicos tales como dietil éter, dioxano, tetrahidrofurano o 1,2-dimetoxietano; ésteres tales como acetato de etilo y acetato de butilo; cetonas, por ejemplo, acetona, metilisobutilcetona y ciclohexanona; amidas tales como dimetilformamida y dimetilacetamida, N-metilpirrolidona; nitrilos tales como acetonitrilo o propionitrilo; y otros disolventes inertes tales como 1,3-dimetil-2-imidazolidinona; los disolventes se pueden usar solos o en combinación de 2 o más.

En las reacciones de los compuestos de la estructura (**W4**) con los acetilenos de la estructura (**W8**), es posible añadir bases. Ejemplos incluyen compuestos de metal alcalinotérreo o metal alcalino (por ejemplo, hidróxidos, hidruros, óxidos y carbonatos de litio, sodio, potasio, magnesio, calcio y bario), bases de amidina o bases de guanidina (por ejemplo, 7-metil-1,5,7-triazabiciclo[4.4.0]dec-5-eno (MTBD); diazabiciclo[4.3.0]noneno (DBN), diazabiciclo[2.2.2]octano (DABCO), 1,8-diazabiciclo[5.4.0]undeceno (DBU), ciclohexiltetrabutilguanidina (CiTBG), ciclohexiltetrametilguanidina (CiTMG), N,N,N,N-tetrametil-1,8-naftalendiamina, pentametilpiperidina) y aminas, en especial aminas terciarias (por ejemplo, trietilamina, trimetilamina, tribencilamina, triisopropilamina, tributilamina, triciclohexilamina, triamilamina,

trihexilamina, N,N-dimetilanilina, N,N-dimetiltoluidina, N,N-dimetil-p-amino piridina, N-metilpirrolidina, N-metilpiperidina, N-metilimidazol, N-metilpirazol, N-metilmorfolina, N-metilhexametilendiamina, piridina, 4-pirrolidinopiridina, 4-dimetilaminopiridina, quinolina, α-picolina, β-picolina, isoquinolina, pirimidina, acridina, N,N,N',N'-tetrametilendiamina, N,N,N',N'-tetraetilendiamina, quinoxalina, N-propildiisopropilamina, N-etildiisopropilamina, N,N'-dimetilciclohexilamina, 2,6-lutidina, 2,4-lutidina o trietilendiamina).

Un adyuvante de reacción básico preferido usado puede ser una base orgánica tales como trietilamina, etildiisopropilamina, tri-n-butilamina, piridina y 4-dimetilaminopiridina; además, es posible usar, por ejemplo, las siguientes bases: hidróxidos de metal alcalino, por ejemplo, hidróxido de sodio e hidróxido de potasio; carbonatos tales como hidrógeno-carbonato de sodio y carbonato de potasio; fosfatos tales como hidrógeno-fosfato dipotásico y fosfato trisódico.

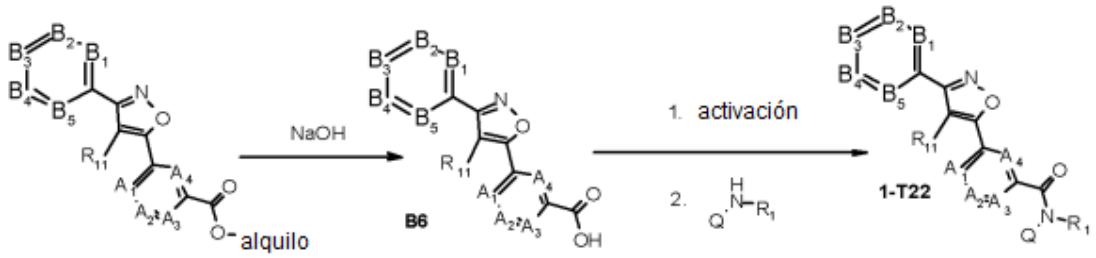
La reacción se puede ejecutar dentro de un amplio intervalo de temperatura. Usualmente, se lleva a cabo dentro de un intervalo de temperatura de -78 °C a 200 °C, con preferencia, a temperaturas de entre -10 y 150 °C. La reacción se puede ejecutar a presión elevada o incluso reducida. Pero, con preferencia, se lleva a cabo a presión estándar. Los tiempos de reacción están entre 0,1 y 72 horas, con preferencia, ente 1 y 24 horas.

Para llevar a cabo la reacción, por ejemplo, se hacen reaccionar 1-2 equivalentes molares de los compuestos de la estructura (**W8**) y 1 equivalente molar de hasta un ligero exceso de base por mol del

compuesto de la estructura (**W4**) en un disolvente, por ejemplo, dimetilformamida (DMF).

Las etapas 3 y 4 para la preparación de los compuestos de la estructura (**W5**) se pueden llevar a cabo en etapas individuales o incluso como una reacción en un recipiente.

Etapas 5, 6 Hidrólisis, amidación



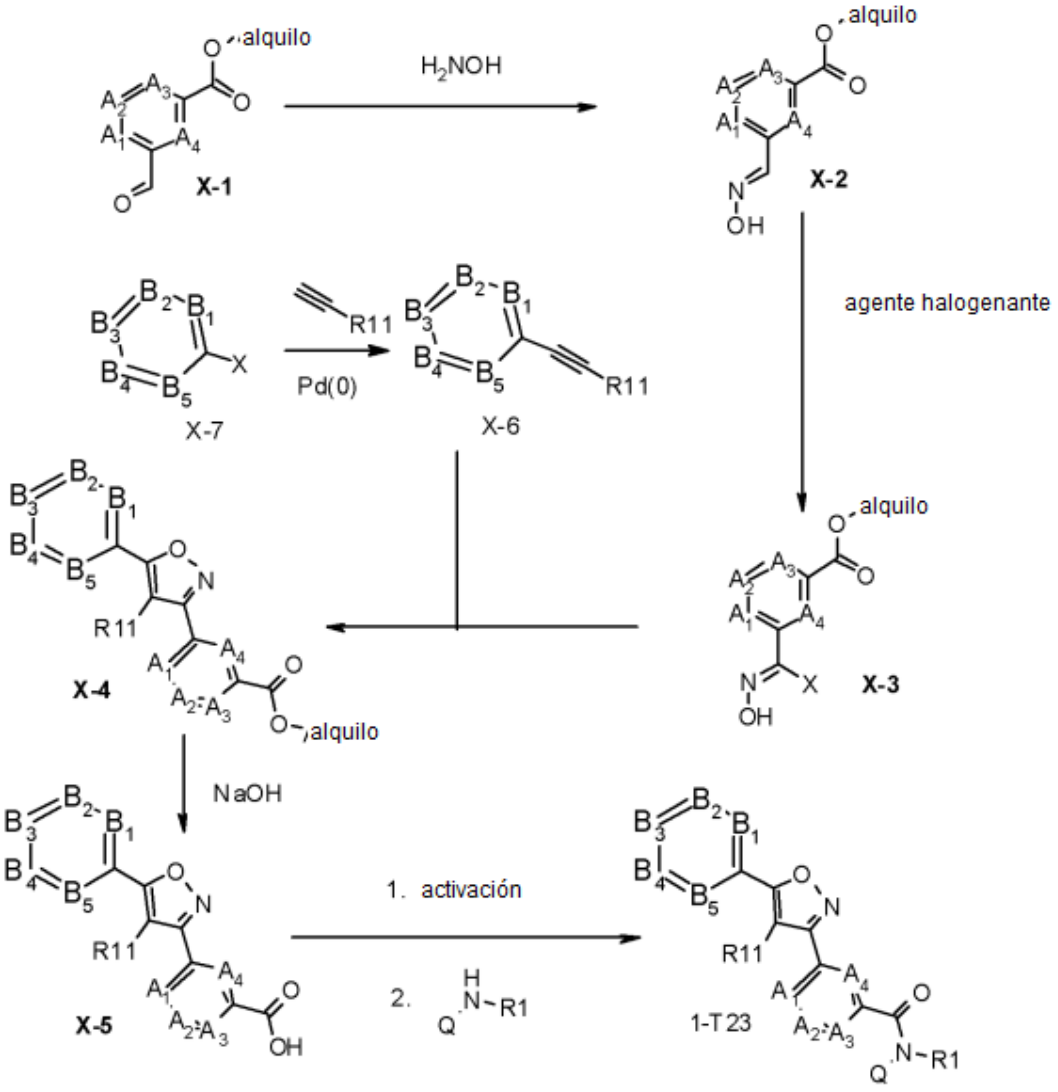
(**W5**) (**W6**) (**B7**) (**1-T22**)

[413] Los compuestos de la invención de la estructura general (**I-T22**) se pueden preparar por analogía a los procedimientos de acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida (**W6**) y (**W9**) (WO 2010051926; WO 2010133312). Los compuestos de la estructura general (**W6**) se pueden preparar análogamente a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general (**W5**) (WO 2010051926; WO 2010133312). Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad.

<u>Proceso I-T23</u>

[414] Los compuestos de la estructura (**I-T23**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 8.

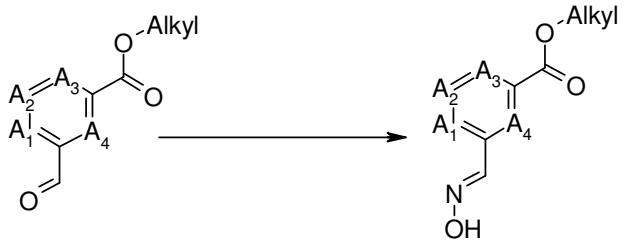
Esquema de reacción 8:



Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es, por ejemplo, Cl, Br, I.

Etapa 1 Oxima

Etapa 1 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (I-T23):



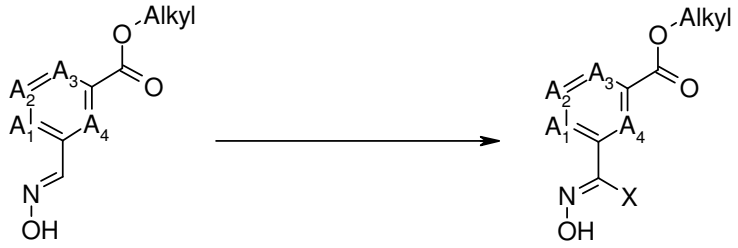
X-1 X-2

Los compuestos de la invención de la estructura general **(X-2)** se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura **(X-1)**. A^1-A^4 y alquilo son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de partida de la estructura **(X-1)** se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen 3-carbometoxibenzaldehído, 3-carbometoxi-4-clorobenzaldehído, 3-carbometoxi-4-bromobenzaldehído, 3-carbometoxi-4-fluorobenzaldehído, 3-carbometoxi-4-cloro-5-fluorobenzaldehído y los correspondientes ésteres de etilo. Se pueden preparar, por ejemplo, por los procedimientos descritos en el documento WO 2010/011584, p. 19-20; Journal of Organic Chemistry, 76 (2011), p. 1062 – 1071; WO 2012/114268, p. 137; Journal of the American Chemical Society, 108 (1986), p. 452-461.

Los compuestos aún desconocidos **(X-2)** se pueden preparar análogamente a los procesos conocidos para preparar oximas a partir de aldehídos (H. Metzger en Houben-Weyl, volumen X/4, p. 55 ff., Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Los compuestos de la fórmula estructural **(X-2)** pueden estar en la forma de estereoisómeros puros, pero también en la forma de mezclas de los estereoisómeros.

Etapa 2 Cloruro de hidroxamilo

[419] Etapa 2 del proceso de preparación para los compuestos de la invención **(I-T23):**



X-2 X-3

Los compuestos de la invención de la estructura general **(X-3)** se preparan haciendo reaccionar las oximas de la estructura **(X-2)** con agentes halogenantes.

A_1-A_4 y alquilo son cada uno como se definieron con anterioridad.

Los compuestos típicos de la estructura **(X-3)** son, por ejemplo, cloruro de carbometoxi-4-cloro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 3-carbometoxi-4-fluoro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 3-carbometoxi-4-cloro-5-fluoro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 3-carbometoxi-4-bromo-N-hidroxibencimidoílo.

Los compuestos halogenantes apropiados son conocidos por los expertos en la técnica, por ejemplo, cloro, bromo, yodo, N-clorosuccinimida, N-bromosuccinimida, N-yodosuccinimida, 1,3-dicloro-5,5-dimetilhidantoína, 1,3-dibromo-5,5-dimetilhidantoína, tetracloroyodato de benciltrimetilamonio e hipoclorito de sodio. Se da preferencia al uso de reactivos de cloración.

Los diluyentes o disolventes útiles para llevar a cabo los procesos de acuerdo con la invención en principio incluyen todos los disolventes orgánicos que son inertes en las condiciones de reacción específicas. Ejemplos incluyen: hidrohalocarburos (por ejemplo, hidroclorocarburos, tales como tetraetileno, tetracloroetano, dicloropropano, cloruro de metileno, diclorobutano, cloroformo, tetracloruro de carbono, tricloroetano, tricloroetileno, pentacloroetano, difluorobenceno, 1,2-dicloroetano, clorobenceno, bromobenceno, diclorobenceno, clorotolueno, triclorobenceno), alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol, isopropanol, butanol), éteres (por ejemplo, etil propil éter, metil ter-butil éter, n-butil éter, anisol, fenetol, ciclohexil metil éter, dimetil éter, dietil éter, dipropil éter, diisopropil éter, di-n-butil éter, diisobutil éter, diisoamil éter, etilenglicol dimetil éter, tetrahidrofurano, dioxano, diclorodietil éter y poliéteres de óxido de etileno y/u óxido de propileno), aminas (por ejemplo, trimetil-, trietil-, tripropil-, tributilamina, N-metilmorfolina, piridina y tetrametilendiamina), nitrohidrocarburos (por ejemplo, nitrometano, nitroetano, nitropropano, nitrobenceno, cloronitrobenceno, o-nitrotolueno; nitrilos tales como acetonitrilo, propionitrilo, butironitrilo, isobutironitrilo, benzonitrilo, m-clorobenzonitrilo), dióxido de tetrahidrotiofeno, dimetilsulfóxido, tetrametilensulfóxido, dipropilsulfóxido, bencilmetilsulfóxido, diisobutilsulfóxido, dibutilsulfóxido, diisoamilsulfóxido, sulfonas (por ejemplo, dimetilo, dietilo, dipropilo, dibutilo, difenilo, dihexilo, metiletilo, etilpropilo, etilisobutilo y pentametilensulfona), hidrocarburos alifáticos, cicloalifáticos o aromáticos (por ejemplo, pentano, hexano, heptano, octano, nonano e hidrocarburos técnicos) y también los denominados “white spirits” con componentes que tienen puntos de

ebullición en el intervalo de, por ejemplo, 40 °C a 250 °C, cimeno, fracciones de petróleo dentro de un intervalo de ebullición de 70 °C a 190 °C, ciclohexano, metilciclohexano, éter de petróleo, ligroína, octano, benceno, tolueno, clorobenceno, bromobenceno, nitrobenceno, xileno, ésteres (por ejemplo, acetato de metilo, etilo, butilo e isobutilo, carbonato de dimetilo, dibutilo y etileno); amidas (por ejemplo, hexametilenfosforamida, formamida, N-metilformamida, N,N-dimetilformamida, N,N-dipropilformamida, N,N-dibutilformamida, N-metilpirrolidina, N-metilcaprolactama, 1,3-dimetil-3,4,5,6-tetrahidro-2(1H)-pirimidina, octilpirrolidona, octilcaprolactama, 1,3-dimetil-2-imidazolinadiona, N-formilpiperidina, N,N'-1,4-diformilpiperazina) y cetonas (por ejemplo, acetona, acetofenona, metiletilcetona, metilbutilcetona).

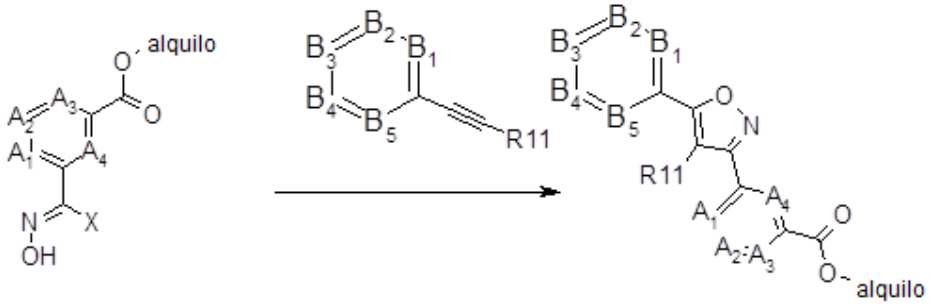
Los diluyentes preferidos usados pueden ser cualquier disolvente que no altera la reacción, por ejemplo, agua. Los ejemplos útiles son hidrocarburos aromáticos tales como benceno, tolueno, xileno o clorobenceno; hidrocarburos halogenados tales como diclorometano, cloroformo, 1,2-dicloroetano o tetracloruro de carbono, éteres de cadena abierta o cíclicos tales como dietil éter, dioxano, tetrahidrofurano o 1,2-dimetoxietano; ésteres tales como acetato de etilo y acetato de butilo; cetonas, por ejemplo, acetona, metilisobutilcetona y ciclohexanona; amidas tales como dimetilformamida y dimetilacetamida, N-metilpirrolidona; nitrilos tales como acetonitrilo o propionitrilo; y otros disolventes inertes tales como 1,3-dimetil-2-imidazolidinona; los disolventes se pueden usar solos o en combinación de 2 o más.

La reacción se puede ejecutar dentro de un amplio intervalo de temperatura. Usualmente, se lleva a cabo dentro de un intervalo de temperatura de -78 °C a 200 °C, con preferencia, a temperaturas de entre -10 y 150 °C. La reacción se puede ejecutar a presión elevada o incluso reducida. Pero, con preferencia, se lleva a cabo a presión estándar. Los tiempos de reacción están entre 0,1 y 72 horas, con preferencia, ente 1 y 24 horas.

Para llevar a cabo la reacción, se usan 1 a 3 moles, con preferencia, 1 a 1,5 moles, de agente halogenante por mol del compuesto de la estructura **(X-2)** en un disolvente, por ejemplo, dimetilformamida (DMF).

Etapa 3 Cierre de anillo

Etapa 3 del proceso de preparación para los compuestos de la invención **(1-T23):**



X-3 X-6 X-4

Los compuestos de la invención de la estructura general **(X-4)** se preparan haciendo reaccionar los cloruros de hidroxamilo de la estructura **(X-3)** con acetilenos de la estructura **(X-6)**.

A^1-A^4, B^1-B^5, R^{11} y alquilo son cada uno como se definieron con anterioridad.

Los compuestos típicos de la estructura **(X-3)** son, por ejemplo, cloruro de carbometoxi-4-cloro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 3-carbometoxi-4-

fluoro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 3-carbometoxi-4-cloro-5-fluoro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 3-carbometoxi-4-bromo-N-hidroxibencimidoílo.

Los diluyentes o disolventes útiles para llevar a cabo los procesos de acuerdo con la invención en principio incluyen todos los disolventes orgánicos que son inertes en las condiciones de reacción específicas. Ejemplos incluyen: hidrohalocarburos (por ejemplo, hidroclorocarburos, tales como tetraetileno, tetracloroetano, dicloropropano, cloruro de metileno, diclorobutano, cloroformo, tetracloruro de carbono, tricloroetano, tricloroetileno, pentacloroetano, difluorobenceno, 1,2-dicloroetano, clorobenceno, bromobenceno, diclorobenceno, clorotolueno, triclorobenceno), alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol, isopropanol, butanol), éteres (por ejemplo, etil propil éter, metil ter-butil éter, n-butil éter, anisol, fenetol, ciclohexil metil éter, dimetil éter, dietil éter, dipropil éter, diisopropil éter, di-n-butil éter, diisobutil éter, diisoamil éter, etilenglicol dimetil éter, tetrahidrofurano, dioxano, diclorodietil éter y poliéteres de óxido de etileno y/u óxido de propileno), aminas (por ejemplo, trimetil-, trietil-, tripropil-, tributilamina, N-metilmorfolina, piridina y tetrametilendiamina), nitrohidrocarburos (por ejemplo, nitrometano, nitroetano, nitropropano, nitrobenceno, cloronitrobenceno, o-nitrotolueno; nitrilos tales como acetonitrilo, propionitrilo, butironitrilo, isobutironitrilo, benzonitrilo, m-clorobenzonitrilo), dióxido de tetrahidrotiofeno, dimetilsulfóxido, tetrametilensulfóxido, dipropilsulfóxido, bencilmetilsulfóxido, diisobutilsulfóxido, dibutilsulfóxido, diisoamilsulfóxido, sulfonas (por ejemplo, dimetilo, dietilo, dipropilo, dibutilo, difenilo, dihexilo, metiletilo, etilpropilo, etilisobutilo y pentametilensulfona), hidrocarburos

alifáticos, cicloalifáticos o aromáticos (por ejemplo, pentano, hexano, heptano, octano, nonano e hidrocarburos técnicos) y también los denominados “white spirits” con componentes que tienen puntos de ebullición en el intervalo de, por ejemplo, 40 °C a 250 °C, cimeno, fracciones de petróleo dentro de un intervalo de ebullición de 70 °C a 190 °C, ciclohexano, metilciclohexano, éter de petróleo, ligroína, octano, benceno, tolueno, clorobenceno, bromobenceno, nitrobenceno, xileno, ésteres (por ejemplo, acetato de metilo, etilo, butilo e isobutilo, carbonato de dimetilo, dibutilo y etileno); amidas (por ejemplo, hexametilenfosforamida, formamida, N-metilformamida, N,N-dimetilformamida, N,N-dipropilformamida, N,N-dibutilformamida, N-metilpirrolidina, N-metilcaprolactama, 1,3-dimetil-3,4,5,6-tetrahidro-2(1H)-pirimidina, octilpirrolidona, octilcaprolactama, 1,3-dimetil-2-imidazolinadiona, N-formilpiperidina, N,N’-1,4-diformilpiperazina) y cetonas (por ejemplo, acetona, acetofenona, metiletilcetona, metilbutilcetona).

Los diluyentes preferidos usados pueden ser cualquier disolvente que no altera la reacción, por ejemplo, agua. Los ejemplos útiles son hidrocarburos aromáticos tales como benceno, tolueno, xileno o clorobenceno; hidrocarburos halogenados tales como diclorometano, cloroformo, 1,2-dicloroetano o tetracloruro de carbono, éteres de cadena abierta o cíclicos tales como dietil éter, dioxano, tetrahidrofurano o 1,2-dimetoxietano; ésteres tales como acetato de etilo y acetato de butilo; cetonas, por ejemplo, acetona, metilisobutilcetona y ciclohexanona; amidas tales como dimetilformamida y dimetilacetamida, N-metilpirrolidona; nitrilos tales como acetonitrilo o propionitrilo; y otros

disolventes inertes tales como 1,3-dimetil-2-imidazolidinona; los disolventes se pueden usar solos o en combinación de 2 o más.

En las reacciones de los compuestos de la estructura **(X-3)** con los acetilenos de la estructura (X-6), es posible añadir bases. Ejemplos incluyen compuestos de metal alcalinotérreo o metal alcalino (por ejemplo, hidróxidos, hidruros, óxidos y carbonatos de litio, sodio, potasio, magnesio, calcio y bario), bases de amidina o bases de guanidina (por ejemplo, 7-metil-1,5,7-triazabiciclo[4.4.0]dec-5-eno (MTBD); diazabiciclo[4.3.0]noneno (DBN), diazabiciclo[2.2.2]octano (DABCO), 1,8-diazabiciclo[5.4.0]undeceno (DBU), ciclohexiltetrabutilguanidina (CiTBG), ciclohexiltetrametilguanidina (CiTMG), N,N,N,N-tetrametil-1,8-naftalendiamina, pentametilpiperidina) y aminas, en especial aminas terciarias (por ejemplo, trietilamina, trimetilamina, tribencilamina, triisopropilamina, tributilamina, tricyclohexilamina, triamilamina, trihexilamina, N,N-dimetilanilina, N,N-dimetiltoluidina, N,N-dimetil-p-aminopiridina, N-metilpirrolidina, N-metilpiperidina, N-metilimidazol, N-metilpirazol, N-metilmorfolina, N-metilhexametilendiamina, piridina, 4-pirrolidinopiridina, 4-dimetilaminopiridina, quinolina, α-picolina, β-picolina, isoquinolina, pirimidina, acridina, N,N,N',N'-tetrametilendiamina, N,N,N',N'-tetraetilendiamina, quinoxalina, N-propildiisopropilamina, N-etildiisopropilamina, N,N'-dimetilciclohexilamina, 2,6-lutidina, 2,4-lutidina o trietilendiamina).

Un adyuvante de reacción básico preferido usado puede ser una base orgánica tales como trietilamina, etildiisopropilamina, tri-n-butilamina, piridina y 4-dimetilaminopiridina; además, es posible usar, por ejemplo, las siguientes bases: hidróxidos de metal alcalino, por ejemplo, hidróxido de

sodio e hidróxido de potasio; carbonatos tales como hidrógeno-carbonato de sodio y carbonato de potasio; fosfatos tales como hidrógeno-fosfato dipotásico y fosfato trisódico.

La reacción se puede ejecutar dentro de un amplio intervalo de temperatura. Usualmente, se lleva a cabo dentro de un intervalo de temperatura de -78 °C a 200 °C, con preferencia, a temperaturas de entre -10 y 150 °C. La reacción se puede ejecutar a presión elevada o incluso reducida. Pero, con preferencia, se lleva a cabo a presión estándar. Los tiempos de reacción están entre 0,1 y 72 horas, con preferencia, ente 1 y 24 horas.

Para llevar a cabo la reacción, por ejemplo, se hacen reaccionar 1-2 equivalentes molares de los compuestos de la estructura **(X-6)** y 1 equivalente molar de hasta un ligero exceso de base por mol del compuesto de la estructura **(X-3)** en un disolvente, por ejemplo, dimetilformamida (DMF).

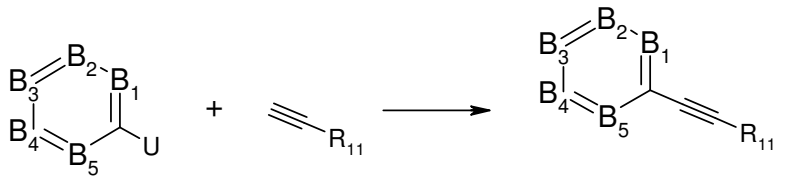
Las etapas 2 y 3 para la preparación de los compuestos de la estructura **(X-4)** se pueden llevar a cabo en etapas individuales o incluso como una reacción en un recipiente.

Etapas 4, 5 Hidrólisis, amidación

Las últimas etapas (etapas 4 y 5) para la preparación de los compuestos de la invención (1-T23), hidrólisis del éster carboxílico **(X-4)** y amidación del ácido carboxílico X-5, se pueden llevar a cabo por medio de los procesos generales descritos con anterioridad (esquema de reacción) para hidrólisis del éster y amidación del ácido carboxílio.

Etapa 6 Preparación de los acetilenos

[440] Etapa 6 Preparación de los compuestos de partida de la estructura **(X-6)**



X-7 X-8 X-6

Los radicales B_1-B_5, R^{11} y U son cada uno como se definieron con anterioridad. U es, por ejemplo, bromo, yodo o triflato.

Los compuestos de la invención de la estructura general **(X-6)** se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura (Chinchilla, Rafael et al., Chemical Society Reviews (2011), 40(10), p. 5084-5121, Chinchilla, Rafael et al., Chemical Reviews (Washington, DC, Estados Unidos) (2007), 107(3), p. 874-922) a partir de los materiales de partida de la estructura **(X-7)** con catálisis por medio de catalizadores de metales de transición que comprende paladio y cobre.

Los compuestos de partida de la estructura **(X-7)** se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Ejemplos incluyen 2-bromo-1,3-dicloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1-etil-3-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-bromo-1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-bromo-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-bromo-1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno, 2-bromo-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno.

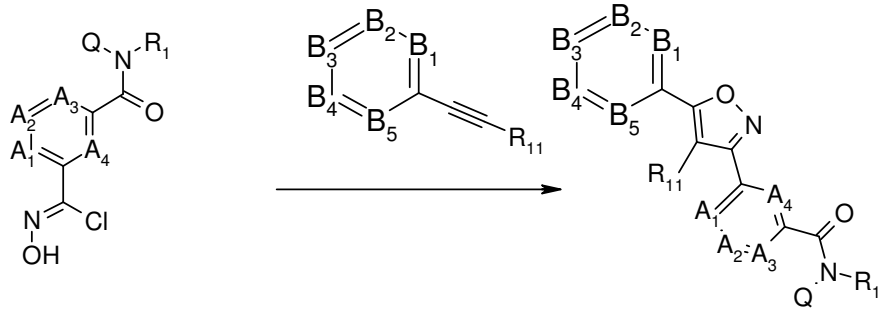
Se pueden preparar, por ejemplo, por los procedimientos descritos en el documento EP 1 253 128, páginas 8-10.

Los compuestos de partida de la estructura **(X-8)** se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Si R^6=H, es posible usar en este proceso un grupo protector más que R^6. Los grupos protectores apropiados son, por ejemplo, trimetilsililo, trietilsililo y dimetilhidroximetilo. Otros grupos protectores apropiados para introducción y desprendimiento se describen en la literatura [ver listas en Greene's protective groups in organic synthesis, 4ta edición, P. G. M. Wuts, T. W. Greene, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007, páginas 927-933].

Etapa 3 alternativa: acoplamiento con amidas

De modo alternativo, los compuestos de la invención **(I-T23)** se pueden preparar por medio del proceso de preparación general B (Esquema de reacción 9).

Esquema de reacción 9:



X-9 X-6 X-4

Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad.

Los compuestos de la invención de la estructura general **(X-4)** se preparan haciendo reaccionar los cloruros de hidroxamilo de la estructura **(X-9)** con acetilenos de la estructura **(X-6)**.

La preparación de los compuestos de la estructura **(X-6)** se describió con anterioridad. Los compuestos de la estructura **(X-9)** se preparan análogamente a la preparación antes descrita de los compuestos de la estructura **(X-3).**

Los compuestos típicos de la estructura **(X-3)** son, por ejemplo, cloruro de 4-cloro-3-(ciclopropilcarbamoil)-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 3-(ciclopropilcarbamoil)-4-fluoro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 4-cloro-3-(ciclopropilcarbamoil)-5-fluoro-N-hidroxibencimidoílo, cloruro de 4-bromo-3-(ciclopropilcarbamoil)-N-hidroxibencimidoílo.

(I-T24): Los compuestos de la fórmula (I-24) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Furukawa, Hirotoshi et al. Heterocycles, 79 (2009), p. 303-309; US 6.545.009, p. 34, Ejemplo 111.

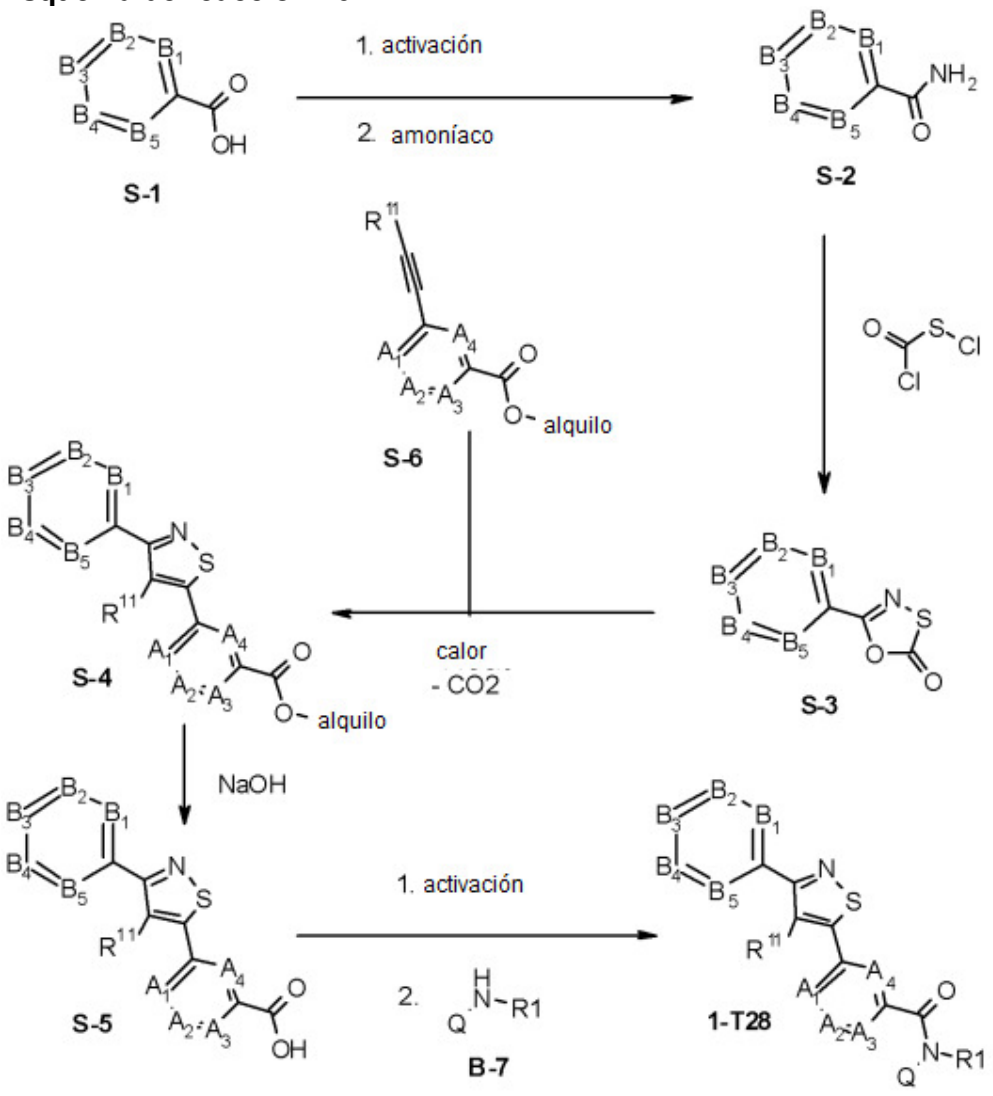
(I-T25): Los compuestos de la fórmula (I-25) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a WO 2004/14366, p. 113.

(I-T26): Los compuestos de la fórmula (I-26) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Chihiro, Masatoshi et al., Journal of Medicinal Chemistry, 38 (1995), p. 353-358.

(I-T27): Los compuestos de la fórmula (I-27) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a US 6.545.009, p. 31, Ejemplo 74.

Los compuestos de la estructura **(I-T28)** se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 10.

Esquema de reacción 10



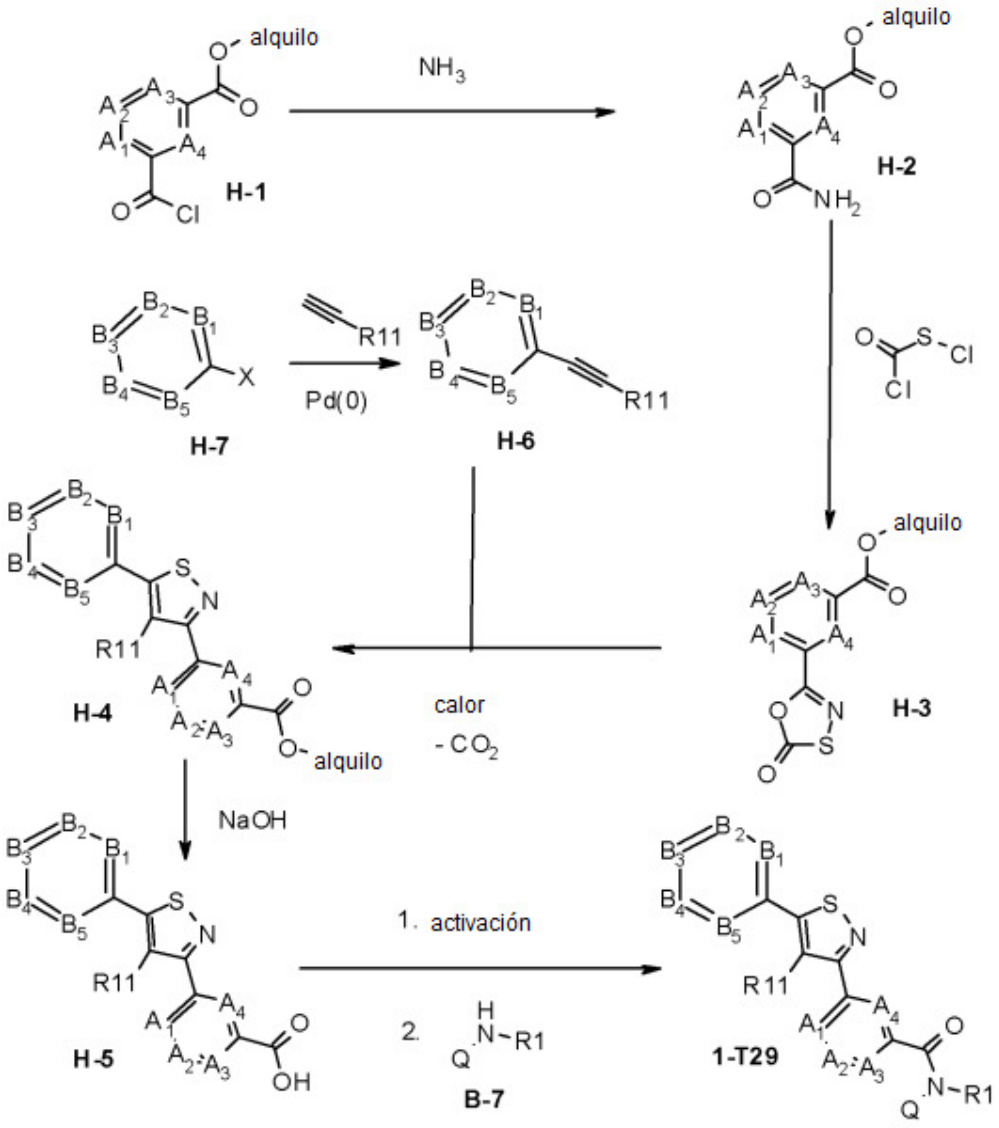
Los radicales A^1-A^4, B^1-B^5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de partida de la estructura **(S-1)** se conocen (por ejemplo, US 5.739.083 p. 10 o WO 2012/175474, p. 117-118) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Las reacciones se llevan a cabo en las condiciones especificadas en la

literatura (por ejemplo, Abdelrahman S. Mayhoub et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) p. 2427-2434 o WO 2009/023372).

Proceso I-T29

Los compuestos de la estructura (**I-T29**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 11.

Esquema de reacción 3:



Los radicales A^1-A^4, B^1-B^5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de partida de la estructura **(H-1)** y **(H-7)** se conocen (por ejemplo, US 3.725.417 p. 7 o WO 2012/175474, p. 117-118) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos. Las reacciones se llevan a cabo en las condiciones especificadas en la literatura (por ejemplo, Abdelrahman S. Mayhoub et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) p. 2427-2434 o WO 2009/023372).

Proceso I-T30

(I-T30): Los compuestos de la fórmula (I-T30) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a WO 2011/9484, p. 104; o Gamber, Gabriel G. et al., Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), p. 1447-1451.

(I-T31): Los compuestos de la fórmula (I-T31) se pueden preparar, por ejemplo, analogousli a Bishop, Brian C. et al., Sintesis, (2004), p. 43-52; o Heller, Stefen T. et al., Organic Letters, 8 (2006), p. 2675-2678; o Baddar, F.G. et al. Journal of Heterocíclico Chemistry, 15 (1978), p. 385-393.

(I-T32): Los compuestos de la fórmula (I-T32) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), p. 4911-4920.

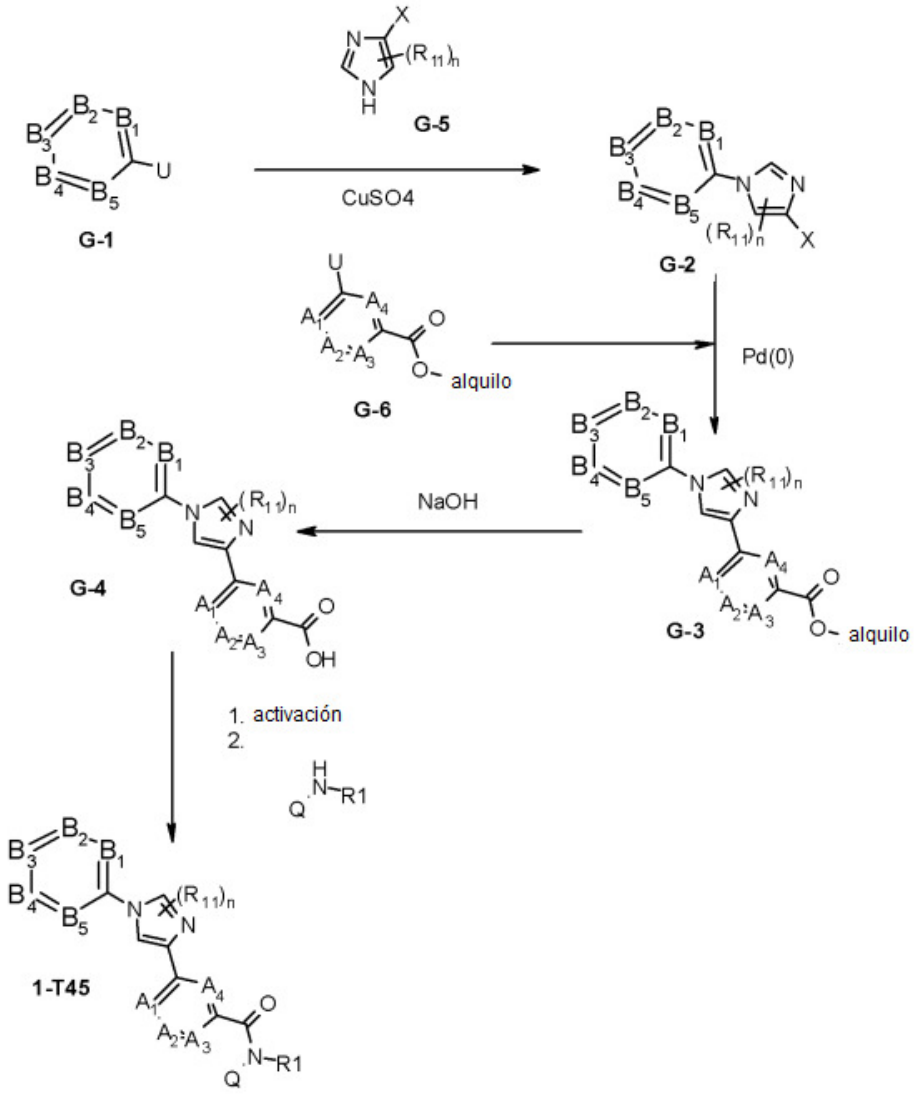
(I-T33): Los compuestos de la fórmula (I-T33) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), p. 4911-4920; o WO 2004/91610, p. 70.

(I-T34): Los compuestos de la fórmula (I-T34) se pueden preparar, por ejemplo, analogousli a Al-Tel, Taleb et al., Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), p. 8373-8385.

(I-T35): Los compuestos de la fórmula (I-T35) se pueden preparar, por ejemplo, análogamente a Yang, Shu-wie et al., Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), p. 182-185; o Kennedy, Andrew J. et al, Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), p. 3524-3548.

Los compuestos de la estructura (I-T45) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 12.

Esquema de reacción 12



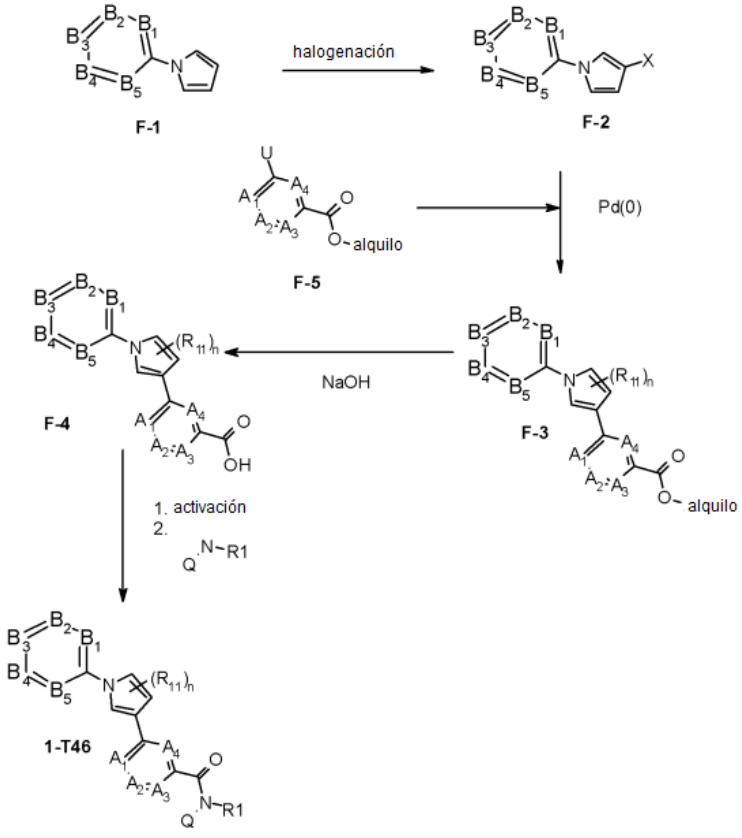
Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato. X es bromo, yodo o triflato. Los compuestos de partida de la estructura (**G-1**), (**G-5**) y (**G6**) se conocen o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos.

Las reacciones se pueden llevar a cabo mediante los procesos descritos en la literatura (ver, por ejemplo, Etapa G1->G2 US 2013/0012532, p. 29).

Proceso I-T46

Los compuestos de la estructura (I-T46) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 13.

Esquema de reacción 13



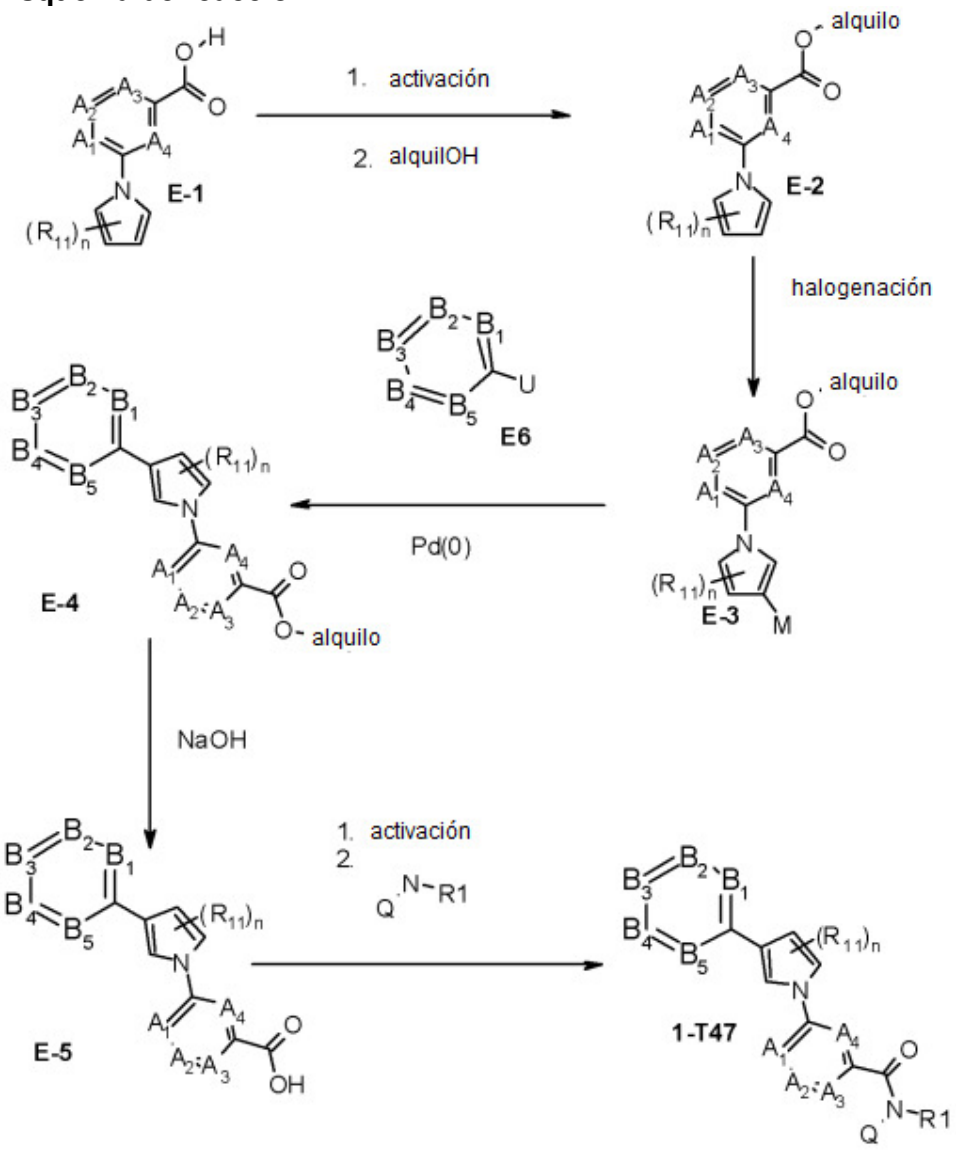
Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato. X es bromo, yodo o triflato. Los compuestos de partida de la estructura (**F-1**) y (**F-5**) se conocen (por ejemplo, F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos.

Las reacciones se pueden llevar a cabo mediante los procesos descritos en la literatura, por ejemplo, US 2009/209476, p. 18-19.

Proceso I-T47

Los compuestos de la estructura (**I-T47**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 14.

Esquema de reacción 14



Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es bromo, yodo o triflato cuando M es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato. U es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato cuando M es bromo, yodo o triflato. Los

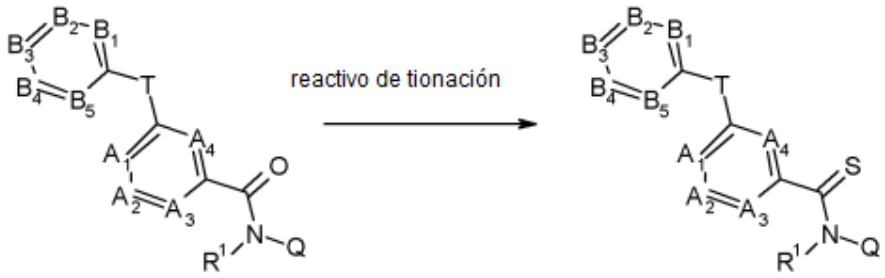
compuestos de partida de la estructura (**E-1**) y (**E-6**) se conocen (por ejemplo, Liu, Kun et al., Journal of Medicinal Chemistry, 51 (2008), p. 7843-7854; o Cornet, Stephanie M. et al., Transactions, (2003), p. 4395-4405) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos.

Las reacciones se pueden llevar a cabo mediante los procesos descritos en la literatura, por ejemplo, US 2009/209476, p. 18-19.

Proceso para preparar tioamidas

Los compuestos de la estructura (**Ii**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 15 a partir de los compuestos de la estructura (**Ih**) a través de la reacción con reactivos de transferencia de azufre.

Esquema de reacción 15:



(Ih) (2) (Ii)

Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, T y R^1 son cada uno como se definieron con anterioridad. El reactivo de tionación (**2**) usado puede ser, por ejemplo, P_4S_{10} o reactivo de Lawesson (2,4-disulfuro de 2,4-bis(4-metoxifenil)-1,3,2,4-ditiadifosfetano).

La preparación de los compuestos (**Ih**) se describió con anterioridad.

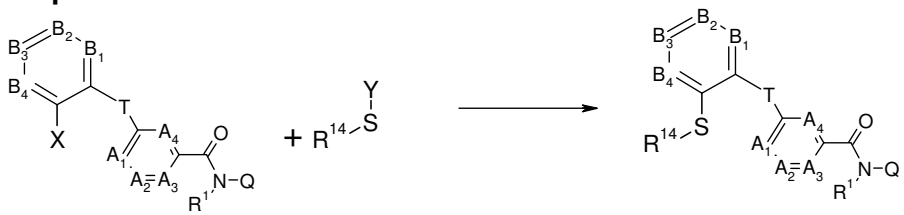
Los reactivos de tionación son asequibles en comercios o se pueden preparar por procesos conocidos por los expertos en la técnica o por analogía a esos procesos.

La reacción se lleva a cabo por analogía a procedimientos conocidos de la literatura para tionar carbonamidas *(por ejemplo,* WO 2012056372, p. 77; WO 2003066050, p. 31).

Proceso para preparar (Ik)

Los compuestos de la invención (**Ik**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 16 a partir de los compuestos (**Ij**) a través de la reacción con compuestos de azufre de la estructura (**Y-3**).

Esquema de reacción 16



(**Ij**) (Y-3) (**Ik**)

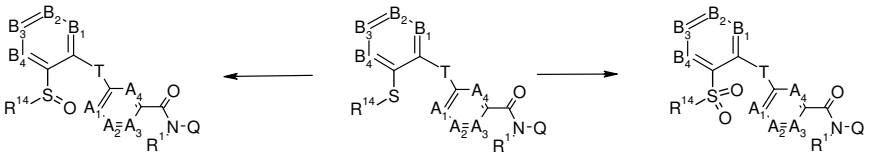
Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B4, alquilo, Q, R^1, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es un grupo saliente apropiado, por ejemplo, flúor, cloro, bromo o yodo. R^{14} es alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido. Y es hidrógeno o un metal alcalino, por ejemplo, sodio o litio.

La reacción se lleva a cabo por analogía a procedimientos conocidos de la literatura para introducción de radicales alquiltio dentro de sistemas aromáticos [por ejemplo, Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Ejemplo 63, p. 97].

Proceso para preparar (Ika) y (Ikb)

Los compuestos de la invención (**Ika**) y (**Ikb**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 17 a partir de los compuestos de la estructura (Ik) a través de la reacción con reactivos oxidantes.

Esquema de reacción 17:



(**Ika**) (**Ik**) (**Ikb**)

Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B4, alquilo, Q, R^1, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. R^{14} es alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido.

La preparación de los compuestos de la estructura (**Ik**) se describió con anterioridad.

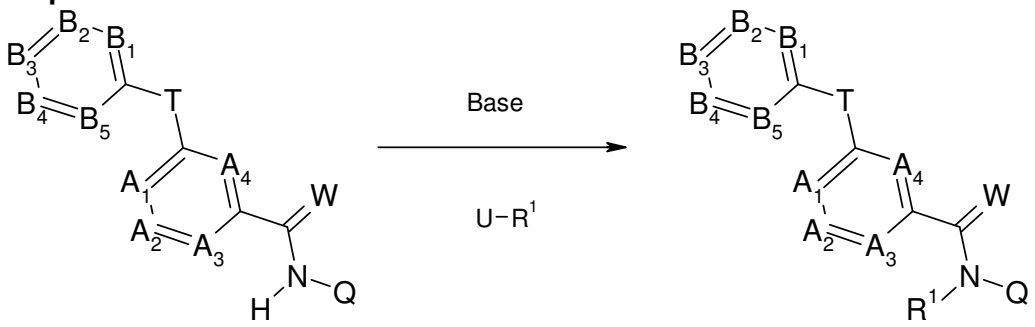
Los agentes oxidantes usados pueden ser reactivos conocidos por los expertos en la técnica de la literatura para la preparación de sulfóxidos y sulfonas. Son asequibles en comercios o se pueden preparar por procesos conocidos por los expertos en la técnica o por analogía a esos procesos. Ejemplos incluyen: peróxido de hidrógeno, ácido peroxiacético, ácido 3-cloroperbenzoico y ácido trifluoroperoxiacético.

La reacción se lleva a cabo por analogía a procedimientos conocidos de la literatura para la preparación de sulfóxidos y sulfonas [derivados de sulfóxido: WO 2006/097766; WO 2005/019151; derivados de sulfona: WO 2008/125214; WO 2005/121087].

Proceso para preparar compuestos de N-alquilo

Los compuestos de la estructura (**I**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 18 a partir de los compuestos de la estructura (**Im**) a través de la reacción con agentes alquilantes.

Esquema de reacción 18:



(**Im**) (**I**)

Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo y Q son cada uno como se definieron con anterioridad. U es, por ejemplo, bromo, yodo o triflato. R^1 es en cada caso primario o secundario, alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido, alquenilo C_3-C_6, alquinilo C_3-C_6, cicloalquilo C_4-C_7, alquil C_1-C_6-carbonilo, alcoxi C_1-C_6-carbonilo, aril-alquilo (C_1-C_3), heteroaril-alquilo (C_1-C_3). W es oxígeno.

Los compuestos de la estructura U-R^1 son asequibles en comercios o conocidos de la literatura o se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura. Ejemplos incluyen: cloruro de metilo, bromuro de metilo, yoduro de metilo, dimetilsulfato, triflato de metilo, bromuro de etilo, yoduro de etilo, sulfato de dietilo y triflato de etilo.

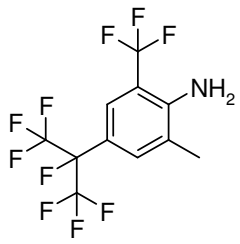
Las bases usadas para la reacción son asequibles en comercios. Ejemplos incluyen compuestos de metal alcalinotérreo y metal alcalino (por ejemplo, hidróxidos, hidruros, óxidos y carbonatos de litio, sodio, potasio, magnesio, calcio y bario), por ejemplo, sodio hidruro, hidróxido de

sodio e hidróxido de potasio; carbonatos tales como hidrógeno-carbonato de sodio y carbonato de potasio.

La reacción se lleva a cabo por analogía a procedimientos conocidos de la literatura para N-alquilación de amidas secundarias (por ejemplo, G.L. Gisele, A. Lüttringhaus, Synthesis (1971) p. 266, para una reseña, ver: B.C. Challis, J.A. Challis in: The Chemistry of Functional Groups, The Chemistry of Amides, S. Patay, J. Zabicky, editores, Interscience Publishers, Londres, 1970, p. 734 ff).

Preparación del material de partida 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina

El material de partida 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina de la estructura (**D-1a**) no se ha descrito hasta ahora en la literatura. La preparación se pueden llevar a cabo por medio de 2 diferentes procesos.

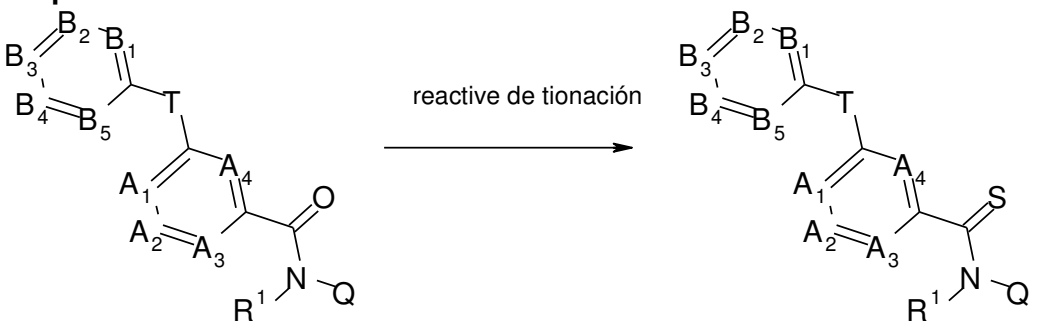


D-1a

Proceso para preparar tioamidas

Los compuestos de la estructura (**Ii**) se pueden preparar por el proceso descrito en el esquema de reacción 15 a partir de los compuestos de la estructura (**Ih**) por reacción con reactivos de transferencia de azufre.

Esquema de reacción 15



(Ih) (2) (Ii)

Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, T y R^1 son cada uno como se definieron con anterioridad. Los reactivos de tionación (**2**) usados pueden ser, por ejemplo, P_4S_{10} o reactivo de Lawesson (2,4-disulfuro de 2,4-bis(4-metoxifenil)-1,3,2,4-ditiadifosfetano).

La preparación de los compuestos (**Ih**) se describió con anterioridad.

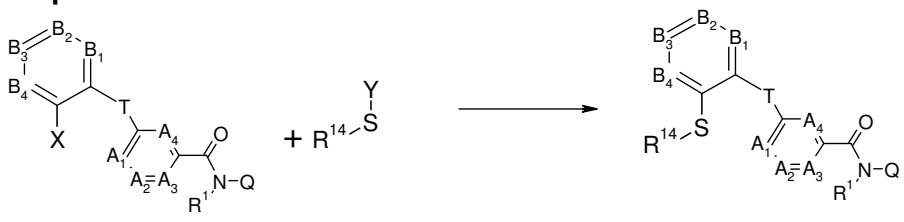
Los reactivos de tionación son asequibles en comercios o se pueden preparar por procesos conocidos por los expertos en la técnica o por analogía a esos procesos.

La reacción se lleva a cabo por analogía a procedimientos conocidos de la literatura para tionación de carbonamidas *(por ejemplo,* WO 2012056372, p. 77; WO 2003066050, p. 31).

Proceso para preparar (Ik)

Los compuestos de la invención (**Ik**) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción 16 a partir de los compuestos (**Ij**) por reacción con compuestos de azufre de la estructura (**Y-3**).

Esquema de reacción 16



(**Ij**) (Y-3) (**Ik**)

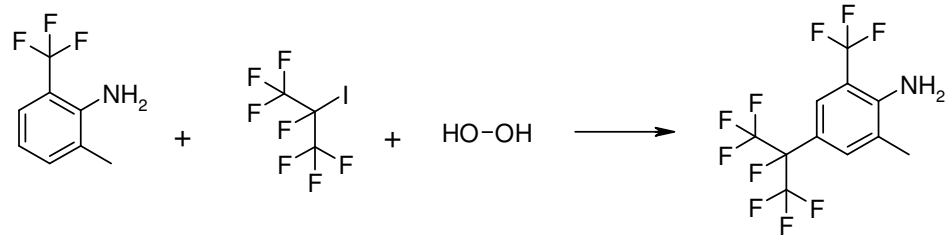
Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B4, alquilo, Q, R^1, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. X es un grupo saliente apropiado, por ejemplo, flúor, cloro, bromo o yodo. R^{14} es alquilo C_1-C_6 opcionalmente sustituido. Y es hidrógeno o un metal alcalino, por ejemplo, sodio o litio.

La reacción se lleva a cabo por analogía a procedimientos conocidos de la literatura para introducción de radicales alquiltio en compuestos aromáticos [por ejemplo, Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Ejemplo 63, p. 97].

Proceso 1:

4-Heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina de la estructura (**K-1**) se pueden preparar procediendo a partir de 2-metil-6-trifluorometilanilina por el proceso especificado en el esquema de reacción 1, por reacción con yoduro de heptafluoroisopropilo en presencia de peróxido de hidrógeno.

Esquema de reacción 4



K-1

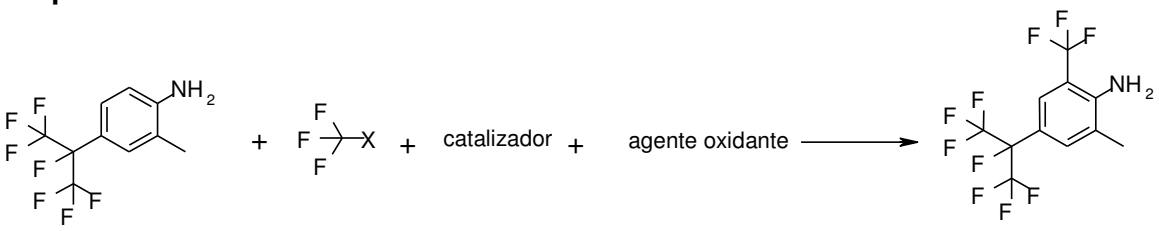
2-metil-6-trifluorometilanilina se conoce de la literatura (John P. Chupp, Terry M. Baltazor, Michael J. Miller y Mark J. Pozzo, J. Org. Chem. 49 (1984), 4711-4716 o Thomas E. Nickson J. Org. Chem. 51 (1986) 3903-3904) y yoduro de heptafluoroisopropilo está disponible en comercios.

La reacción se lleva a cabo por analogía a procesos conocidos para trifluorometilación de compuestos aromáticos (Tatsuhito Kino, Yu Nagase, Yuhki Ohtsuka, Kioko Yamamoto, Daisuke Uraguchi, Kenji Tokuhisa y Tetsu Yamakawa, Journal of Fluorine Chemistry 131 (2010) 98–105).

Proceso 2

Además, 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina de la estructura (**K-1**) se pueden preparar procediendo a partir de 4-heptafluoroisopropil-2-metilanilina por el proceso especificado en el esquema 2, por reacción con trifluorometilsulfinato de sodio en presencia de agentes de oxidación y catalizadores de metales de transición.

Esquema de reacción 5



D-1a

X es Br, I, $NaSO_2^-$ (trifluorometilsulfinato de sodio), KSO_2^- (trifluorometilsulfinato de potasio). Se da particular preferencia a trifluorometilsulfinato de sodio.

Se conoce la 4-Heptafluoroisopropil-2-metilanilina (US2004/92762).

Los catalizadores apropiados son metales de transición tales como sulfato de hierro (II), nitrato de hierro (III), triflato de cobre (II) o ferroceno. Se da particular preferencia a sulfato de hierro (II).

Los agentes de oxidación apropiados son, en particular, peróxidos tales como peróxido de hidrógeno, hidroperóxido de ter-butilo o peroxodisulfato de sodio, peroxodisulfato de potasio, peroxomonosulfato de sodio o peroxomonosulfato de potasio. Se da particular preferencia a hidroperóxido de ter-butilo.

Al llevar a cabo la reacción, se pueden usar disolventes apropiados.

Los diluyentes o disolventes útiles para la realización de los procesos de acuerdo con la invención en principio incluyen todos los disolventes orgánicos que son inertes en las condiciones de reacción específicas. Ejemplos incluyen: nitrilos tales como acetonitrilo, propionitrilo, butironitrilo, isobutironitrilo; agua, dióxido de tetrahidrotiofeno, dimetilsulfóxido, tetrametilensulfóxido, dipropilsulfóxido, diisobutilsulfóxido, dibutilsulfóxido, diisoamilsulfóxido, sulfonas (por ejemplo, dimetilo, dietilo, dipropilo, dibutilo, dihexilo, metiletilo, etilpropilo, etilisobutilo y pentametilensulfona); hidrocarburos alifáticos, cicloalifáticos (por ejemplo, pentano, hexano, heptano, octano, nonano e hidrocarburos técnicos) y también los denominados “white spirits” que tienen componentes que tienen puntos de ebullición en el intervalo de, por ejemplo, 40 °C a 250 °C, fracciones de petróleo dentro de un intervalo de ebullición de 70 °C a 190 °C, ciclohexano, metilciclohexano, éter de petróleo, ligroína, octano.

Los diluyentes preferidos usados pueden ser cualquier disolvente que no altera la reacción, por ejemplo, agua; nitrilos tales como acetonitrilo,

propionitrilo, butironitrilo, isobutironitrilo. Los disolventes se pueden usar solos o en una combinación de 2 o más.

Se pueden usar bases en las reacciones. Ejemplos incluyen compuestos de metal alcalinotérreo o metal alcalino (por ejemplo, hidróxido, hidruros, óxidos y carbonatos de litio, sodio, potasio, magnesio, calcio y bario).

Un adyuvante de reacción básico preferido usado puede ser hidrógeno-carbonato de sodio; además, es posible usar, por ejemplo, las siguientes bases: hidróxidos de metal alcalino, por ejemplo, hidróxido de sodio e hidróxido de potasio; carbonatos tales como hidrógeno-carbonato de sodio y carbonato de potasio; fosfatos tales como sodio dihidrógeno-fosfato, hidrógeno-fosfato dipotásico y fosfato trisódico.

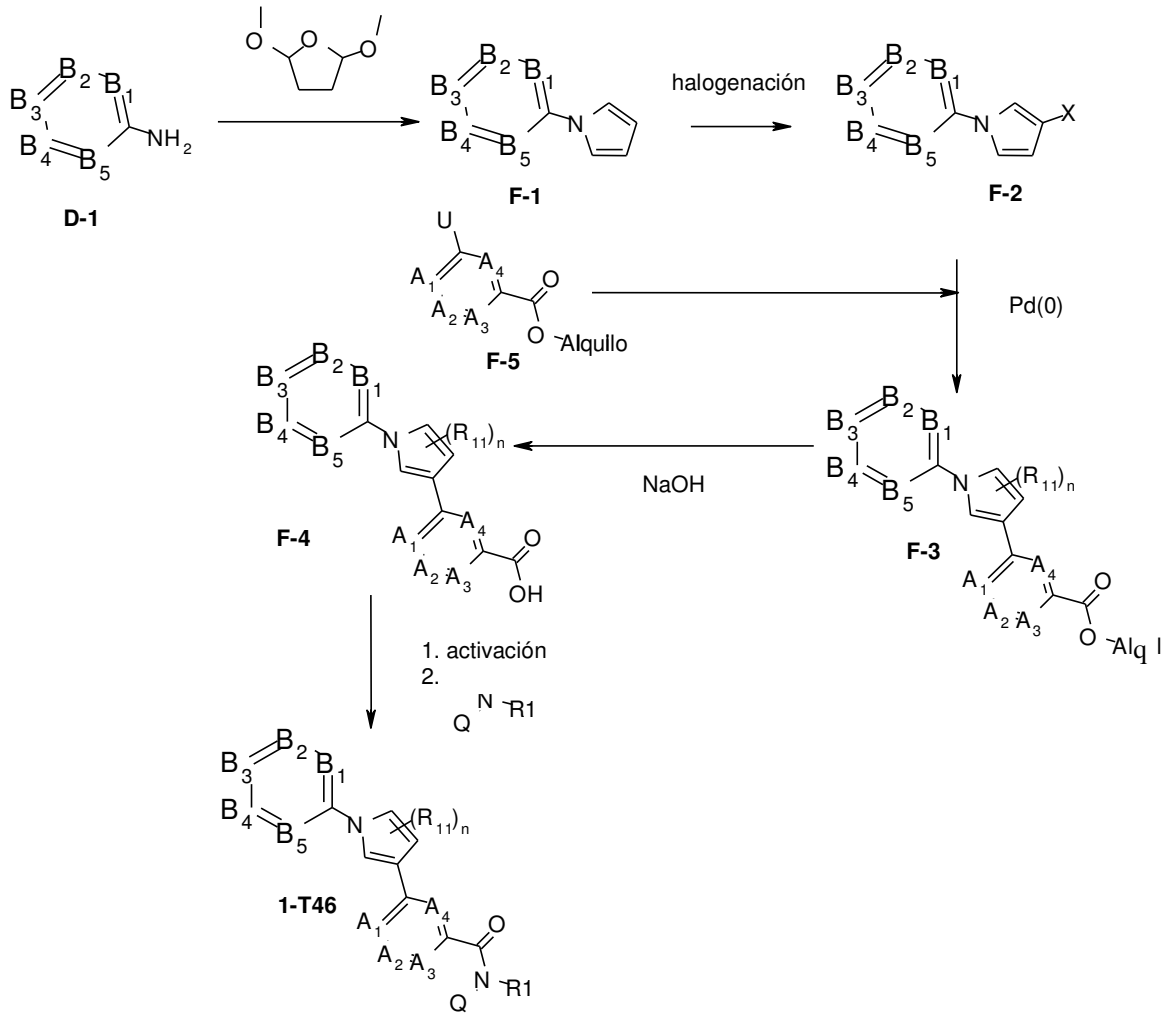
La reacción se puede llevar a cabo dentro de un amplio intervalo de temperaturas. Usualmente se lleva a cabo dentro de un intervalo de temperaturas de -78 a 200 °C, con preferencia, a temperaturas de entre -10 y 150 °C. La reacción se puede ejecutar a presión elevada o incluso reducida. Pero, con preferencia, se lleva a cabo a presión estándar. Los tiempos de reacción están entre 0,1 y 72 horas, con preferencia, ente 1 y 24 horas.

Para llevar a cabo la reacción, se pueden usar 1 a 10 moles, con preferencia, 1 a 4 moles, de agente de trifluorometilación; se usan 1 a 20 moles, con preferencia, 1 a 8 moles de agente de oxidación y 0,01 a 1 moles, con preferencia, 0,05 a 0,4 moles de catalizador por mol de 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina en un disolvente o mezcla de disolventes, por ejemplo, en una mezcla de acetonitrilo y agua.

Proceso I-T46 extendido

Los compuestos de la estructura (I-T46) se pueden preparar por el proceso especificado en el esquema de reacción.

Esquema de reacción 6



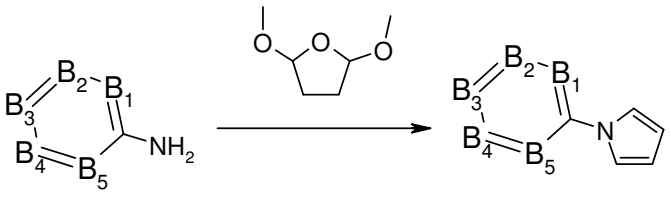
Los radicales A_1-A_4, B_1-B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato. X es bromo, yodo o triflato. Los compuestos de partida de la estructura (**F-1**) y (**F-5**) se conocen (por ejemplo, **F-1**: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, información de

soporte páginas 1 ff.) o se pueden preparar por medio de procedimientos conocidos (por ejemplo, de **D-1**).

Las reacciones se pueden llevar a cabo mediante los procesos descritos en la literatura, por ejemplo, US2009/209476, p. 18-19.

Etapa 1 Cierre de anillo pirrol

Etapa 1 para el proceso de preparación para los compuestos de la invención (**I-T46**):



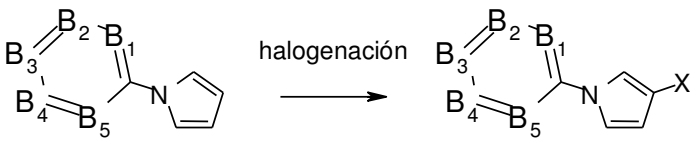
D-1 F-1b F-1

Los compuestos de la invención de la estructura general (**F-1**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**D-1**) y (**F-1b**). Los radicales B^1-B^5 son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de las estructuras (**D-1**) se conocen de la literatura (por ejemplo, US2002/198399, WO 2009/30457, página 28) o se pueden preparar por métodos conocidos de la literatura. El compuesto (**F1-b**) está disponible en comercios. Representantes típicos de los compuestos de la estructura (**D-1**) incluyen 2-amino-1,3-dicloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-amino-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)-etil]benceno, 2-amino-1-etil-3-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno, 2-amino-1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-amino-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometil)benceno, 2-amino-1-cloro-

5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno, 2-amino-1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-3-(trifluorometoxi)benceno. La reacción se lleva a cabo en las condiciones conocidas para compuestos análogos en la literatura (por ejemplo, Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, información de soporte páginas 1 ff.)

Etapa 2 halogenación

Etapa 1 para el proceso de preparación para los compuestos de la invención (**I-T46**):



F-1 F-2

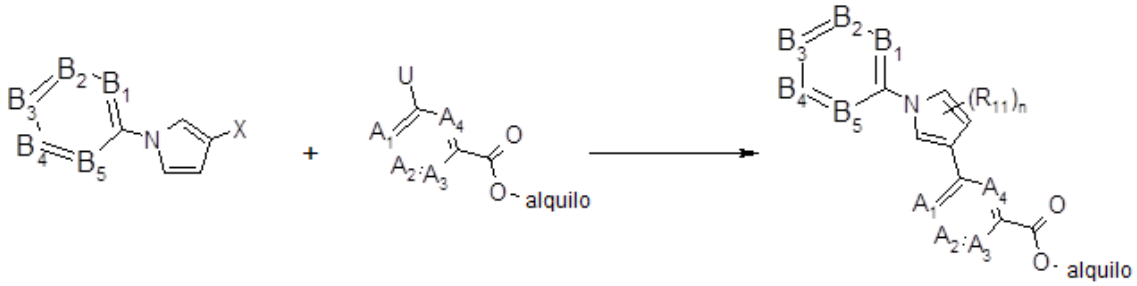
Los compuestos de la invención de la estructura general (**F-2**) se pueden preparar por analogía a procedimientos conocidos de literatura a partir de los materiales de partida de la estructura (**F-1**) por halogenación. Los radicales B^1-B^5 son cada uno como se definieron con anterioridad. Los compuestos de las estructuras (**F-1**) se conocen de la literatura (por ejemplo, F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), p. 1761-1764, información de soporte página 1 ff.) o se pueden preparar por medio del método descrito con anterioridad. Representantes típicos de los compuestos de la estructura (**F-1**) incluyen 1-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol, 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol, 1-[2-etil-6-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol, 1-[2-cloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-

1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]pirrol, 1-[2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]pirrol, 1-[1-cloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometoxi)fenil]pirrol, 1-[1-metil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometoxi)fenil]pirrol.

Los compuestos halogenantes apropiados son conocidos por los expertos en la técnica, por ejemplo, bromo, yodo, N-bromosuccinimida, N-yodosuccinimida, 1,3-dibromo-5,5-dimetilhidantoína y tetracloroyodato de benciltrimetilamonio. Se da preferencia al uso de bromo, yodo y yodosuccinimida. La reacción respeta las condiciones conocidas de la literatura (por ejemplo, Tatsuta; Itoh Bulletin of the Chemical Society of Japan, 67 (1994) 1449-1455).

Etapa 3 Acoplamiento de ácido borónico

Etapa 3 del proceso de preparación para los compuestos de la invención (**I-T46**):



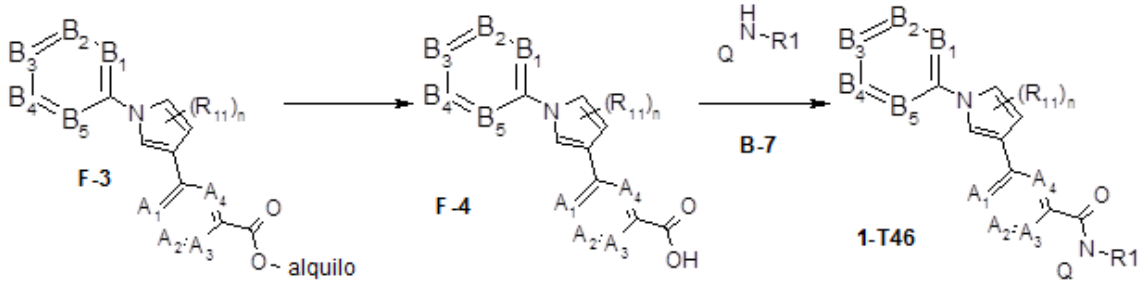
F-2 F-5 F-3

Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, n y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad. U es, por ejemplo, un ácido borónico, éster borónico o trifluoroboronato, X es bromo, yodo o triflato.

Los compuestos de la invención de la estructura general (**F-3**) se pueden preparar por procesos conocidos de la literatura por medio de reacciones

catalizadas con paladio de los correactivos de la estructura general (**F-2**) y (**F-5**) (por ejemplo, WO 2005/040110 o WO 2009/089508). Los compuestos de la estructura general (**F-5**) son asequibles en comercios o se pueden preparar por procesos conocidos por los expertos en la técnica.

Etapas 4, 5 hidrólisis, amidación



Los compuestos de la invención de la estructura general (**I-T46**) se pueden preparar por analogía a los procedimientos de acoplamiento de péptidos conocidos de la literatura a partir de los materiales de partida (**F-4**) y (**B-7**) (por ejemplo, WO 2010/051926 o WO 2010/133312). Los compuestos de la estructura general (**F-4**) se pueden preparar por analogía a procesos conocidos de la literatura por hidrólisis de éster a partir de compuestos de la estructura general (**F-3**) (por ejemplo, WO 2010/051926 o WO 2010/133312). Los radicales A_1 a A_4, B_1 a B_5, alquilo, Q, R^1 y R^{11} son cada uno como se definieron con anterioridad.

Q

En una realización de mayor preferencia Q en un compuesto de la fórmula (I) o (Ia‘‘) o (IT-2) o (I-T3) o (I-T4) o (I-T22) o (I-T23) o (I-T46) es alquilo C_1-C_4, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor o 1-cianopropilo o piridina tales como 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 3,3,3-trifluoropropilo, piridin-2-ilmetilo o (1-

cianociclopropil)metilo; cicloalquilo C_3-C_4 tales como ciclopropilo o ciclobutilo; cicloalquilo C_3-C_4 opcionalmente sustituido tales como coiclopropilo sustituido con alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con flúor (por ejemplo, 1-trifluorometil-ciclopropilo, 1-ter-butilciclopropilo), 1-tiocarbamoilciclopropilo, 1-carbamoilciclopropilo, 1-cianociclopropilo, trans-2-fluorociclopropilo, cis-2-fluorociclopropilo; heterocicloalquilo C_4-C_6 tales como oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo o 1,1-dioxidotietan-3-ilo; o cada caso alquil C_1-C_4-bencilo opcionalmente sustituido; pirazol (tales como N-metilpirazol-3-ilo), piridina; metilsulfonilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo.

En realización de particular preferencia Q en un compuesto de la fórmula (I) o (Ia“) o (IT-2) o (I-T3) o (I-T4) o (I-T22) o (I-T23) o (I-T46) es alquilo C_1-C_3 sustituido con flúor tales como 2,2,2-trifluoroetilo o 3,3,3-trifluoropropilo; ciclopropilo; ciclopropilo opcionalmente sustituido ciano, alquilo C_1-C_4 tales como 1-cianociclopropilo o 1-trifluorometilciclopropilo; tietan-3-ilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetil)aminoetilo.

Fórmula (I)

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46 y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46 y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2 o T4 y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T3 o T46 y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T22 o T23 y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2 o T4, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T3 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o

alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T22 o T23, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9]. En este contexto, una realización de particular preferencia se refiere a compuestos en los que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4).

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2, B_4 y B_5 son, respectivamente, CR^6, CR^7, CR^9 y CR^{10} en la que R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde

al menos un sustituyente es un halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9]. En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno halógeno (tales como Cl, Br o F), cada alquilo C_1-C_3 o cada alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, por ejemplo, peralquilo C_1-C_3 fluorado (perfluorometilo, perfluoroetilo o perfluoropropilo).

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2 y B_4 son, respectivamente, CR^6, CR^7 y CR^9 y B^5 es N, en la que R^6, R^7 y R^9 son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es un halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima

preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2, B_4 y B_5 son, respectivamente, CR^6, CR^7, CR^9 y CR^{10} en la que R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es un halógeno, cada R^{11} es, de modo independiente, H, amino (NH_2) o ciano, con preferencia, H, W es O, R^1 es H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, con preferencia, H o metilo y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9]. En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno halógeno (tales como Cl, Br o F), cada alquilo C_1-C_3 o cada alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, por ejemplo, peralquilo C_1-C_3 fluorado (perfluorometilo, perfluoroetilo o perfluoropropilo).

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2 y B_4 son, respectivamente, CR^6, CR^7 y CR^9 y B^5 es N, en la que R^6, R^7 y R^9 son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino,

N,N-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es un halógeno, cada R^{11} es, de modo independiente, H, amino (NH_2) o ciano, con preferencia, H, W es O, R^1 es H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, con preferencia, H o metilo y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2, B_4 y B_5 son, respectivamente, CR^6, CR^7, CR^9 y CR^{10} en la que R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es un halógeno, cada R^{11} es, de modo independiente, H, amino (NH_2) o ciano, con preferencia, H, W es O, R^1 es H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, con preferencia, H o metilo, Q es alquilo C_1-C_4, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor o 1-cianopropilo o piridina tales como 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 3,3,3-

trifluoropropilo, piridin-2-ilmetilo o (1-cianociclopropil)metilo; cicloalquilo C_3-C_4 tales como ciclopropilo o ciclobutilo; cicloalquilo C_3-C_4 opcionalmente sustituido tales como ciclopropilo sustituido con alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con flúor (por ejemplo, 1-trifluorometilciclopropilo, 1-ter-butilciclopropilo), 1-tiocarbamoilciclopropilo, 1-carbamoilciclopropilo, 1-cianociclopropilo, trans-2-fluorociclopropilo, cis-2-fluorociclopropilo; heterocicloalquilo C_4-C_6 tales como oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo o 1,1-dioxidotietan-3-ilo; o en cada caso bencilo opcionalmente sustituido con alquilo C_1-C_4; pirazol (tales como N-metilpirazol-3-ilo), piridina; metilsulfonilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con flúor tales como 2,2,2-trifluoroetilo o 3,3,3-trifluoropropilo; ciclopropilo; ciclopropilo opcionalmente sustituido tales como 1-cianociclopropilo o 1-trifluorometilciclopropilo, tietan-3-ilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetil)aminoetilo y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9]. En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno halógeno (tales como Cl, Br o F), cada alquilo C_1-C_3 o cada alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, por ejemplo, peralquilo C_1-C_3 fluorado (perfluorometilo, perfluoroetilo o perfluoropropilo).

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2 y

B_4 son, respectivamente, CR^6, CR^7 y CR^9 y B^5 es N, en la que R^6, R^7 y R^9 son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es un halógeno, cada R^{11} es, de modo independiente, H, amino (NH_2) o ciano, con preferencia, H, W es O, R^1 es H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, con preferencia, H o metilo, Q es alquilo C_1-C_4, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor o 1-cianopropilo o piridina tales como 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 3,3,3-trifluoropropilo, piridin-2-ilmetilo o (1-cianociclopropil)metilo; cicloalquilo C_3-C_4 tales como ciclopropilo o ciclobutilo; cicloalquilo C_3-C_4 opcionalmente sustituido tales como ciclopropilo sustituido con alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con flúor (por ejemplo, 1-trifluorometilciclopropilo, 1-ter-butilciclopropilo), 1-tiocarbamoilciclopropilo, 1-carbamoilciclopropilo, 1-cianociclopropilo, trans-2-fluorociclopropilo, cis-2-fluorociclopropilo; heterocicloalquilo C_4-C_6 tales como oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo o 1,1-dioxidotietan-3-ilo; o en cada caso bencilo opcionalmente sustituido con alquilo C_1-C_4; pirazol (tales como N-metilpirazol-3-ilo), piridina; metilsulfonilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con flúor tales como 2,2,2-trifluoroetilo o 3,3,3-trifluoropropilo; ciclopropilo; ciclopropilo opcionalmente sustituido tales como 1-cianociclopropilo o 1-trifluorometilciclopropilo, tietan-3-ilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-

trifluoroetil)aminoetilo y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [9].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2, B_4 y B_5 son, respectivamente, CR^6, CR^7, CR^9 y CR^{10} en la que R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxi-iminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es un halógeno, cada R^{11} es, de modo independiente, H, amino (NH_2) o ciano, con preferencia, H, W es O, R^1 es H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, con preferencia, H o metilo, Q es alquilo C_1-C_4, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetil-amino)etilo, alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor o 1-cianopropilo o piridina tales como 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2-difluoro-etilo, 3,3,3-trifluoropropilo, piridin-2-ilmetilo o (1-cianociclopropil)metilo; cicloalquilo C_3-C_4 tales como ciclopropilo o ciclobutilo; cicloalquilo C_3-C_4 opcionalmente sustituido tales como ciclopropilo sustituido con alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con flúor (por ejemplo, 1-trifluorometilciclopropilo, 1-ter-butilciclo-propilo), 1-tiocarbamoilciclopropilo, 1-carbamoilciclopropilo, 1-cianociclopropilo,

trans-2-fluoro-ciclopropilo, cis-2-fluorociclopropilo; heterocicloalquilo C_4-C_6 tales como oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo o 1,1-dioxidotietan-3-ilo; o en cada caso bencilo opcionalmente sustituido con alquilo C_1-C_4; pirazol (tales como N-metilpirazol-3-ilo), piridina; metilsulfonilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con flúor tales como 2,2,2-trifluoroetilo o 3,3,3-trifluoropropilo; ciclopropilo; ciclopropilo opcionalmente sustituido tales como 1-cianociclopropilo o 1-trifluorometilciclopropilo, tietan-3-ilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetil)-aminoetilo, A_1 es CR^2 o N, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4 y A_4 es CR^5 o N, donde R^2 es H, alquilo C_1-C_4 o halógeno (tales como metilo, F, Cl o H), R^3 es H o alquilo C_1-C_4 halogenado (tales como H o -CF_3), R^4 es H, alquilo C_1-C_4, alquil C_1-C_4-amina (tales como –NH-CH_3), ciclopropilamina, alcoxi C_1-C_4 (tales como –O-CH_3), alcoxi C_1-C_4-alquil C_1-C_4-amina (tales como NH-CH_2-CH_2-O-CH_3) o halógeno (tales como F o Cl). En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno halógeno (tales como Cl, Br o F), cada alquilo C_1-C_3 o cada alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, por ejemplo, peralquilo C_1-C_3 fluorado (perfluorometilo, perfluoroetilo o perfluoropropilo).

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que T es T2, T3, T4, T22, T23 o T46, B3 es C-R8 y R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno, con mayor preferencia, en la que R8 es alquilo (C_1-C_6) perfluorado, alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, con máxima preferencia, alquilo (C_1-C_4) perfluorado, alcoxi (C_1-C_4), en la que B_1, B_2 y B_4 son, respectivamente, CR^6, CR^7 y CR^9 y B^5 es N, en la que R^6, R^7 y R^9

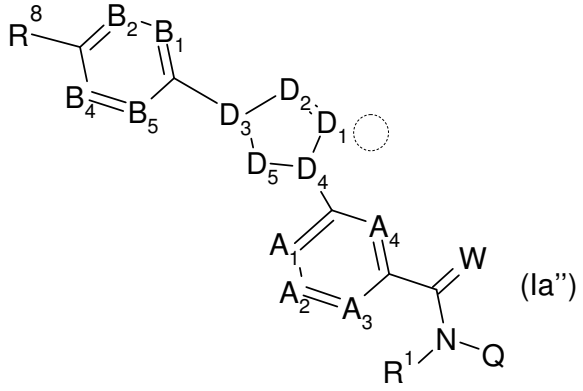
son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro o alquilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino, cada uno de los cuales está sustituido con al menos un sustituyente seleccionado de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es un halógeno, cada R^{11} es, de modo independiente, H, amino (NH_2) o ciano, con preferencia, H, W es O, R^1 es H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, s-butilo, t-butilo, con preferencia, H o metilo, Q es alquilo C_1-C_4, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor o 1-cianopropilo o piridina tales como 2,2,2-trifluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 3,3,3-trifluoropropilo, piridin-2-ilmetilo o (1-ciano-ciclopropil)metilo; cicloalquilo C_3-C_4 tales como ciclopropilo o ciclobutilo; cicloalquilo C_3-C_4 opcionalmente sustituido tales como ciclopropilo sustituido con alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido con flúor (por ejemplo, 1-trifluorometilciclopropilo, 1-ter-butilciclopropilo), 1-tiocarbamoilciclopropilo, 1-carbamoil-ciclopropilo, 1-cianociclopropilo, trans-2-fluorociclopropilo, cis-2-fluorociclopropilo; heterocicloalquilo C_4-C_6 tales como oxetan-3-ilo, tietan-3-ilo, 1-oxidotietan-3-ilo o 1,1-dioxidotietan-3-ilo; o en cada caso bencilo opcionalmente sustituido con alquilo C_1-C_4; pirazol (tales como N-metilpirazol-3-ilo), piridina; metilsulfonilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo, con preferencia, alquilo C_1-C_3 sustituido con flúor tales como 2,2,2-trifluoroetilo o 3,3,3-trifluoropropilo; ciclopropilo; ciclopropilo opcionalmente sustituido tales como 1-cianociclopropilo o 1-trifluorometilciclopropilo, tietan-3-ilo; o 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetil)aminoetilo, A_1 es CR^2 o N, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4 y A_4 es

CR^5 o N, donde R^2 es H, alquilo C_1-C_4 o halógeno (tales como metilo, F, Cl o H), R^3 es H o alquilo C_1-C_4 halogenado (tales como H o $–CF_3$), R^4 es H, alquilo C_1-C_4, alquil C_1-C_4-amina (tales como $–NH-CH_3$), ciclopropilamina, alcoxi C_1-C_4 (tales como $–O-CH_3$), alcoxi C_1-C_4-alquil C_1-C_4-amina (tales como $NH-CH_2-CH_2-O-CH_3$) o halógeno (tales como F o Cl).

En otra realización preferida, R^6 es peralquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, perfluorometil) y R^{10} es Cl, Br o F, con mayor preferencia, Cl o Br.

Fórmula (Ia'')

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Ia'')



(Ia'')

en donde un D seleccionado de D1 y D2 es N y el otro D respectivo seleccionado de D1 y D2 es O; o D4 es N y un D seleccionado de D1 y D5 es N; o D3 es N y D1, D2 y D5 son cada uno C-R11 y D4 es C y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [12].

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (Ia''), en la que R8 es un alquilo (C_1-C_6), alcoxi (C_1-C_6) o alquilsulfanilo, cada uno de los cuales está sustituido, donde los sustituyentes se seleccionan de halógeno e hidroxilo, donde al menos un sustituyente es halógeno y un D seleccionado de D1 y D2 es N y el otro D respectivo seleccionado de D1 y D2 es O; o D4 es N y un D seleccionado de D1 y D5 es N; o D3 es N y

D1, D2 y D5 son cada uno C-R11 y D4 es C y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [12].

En una realización preferida, no más de un (1) resto B_1 a B_5 es N (en otras palabras: uno (1) B_1 a B_5 es N); o no (0) B_1 a B_5 es N (B_1 a B_5 son CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 y CR^{10}).

En otra realización preferida, R^6, R^7, R^9 y R^{10} (si el correspondiente resto B es CR) son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso alquilo C_1-C_4 opcionalmente sustituido, cicloalquilo C_3-C_4, alcoxi C_1-C_4, *N*-alcoxiiminoalquilo, alquil C_1-C_4-sulfanilo, alquil C_1-C_4-sulfinilo, alquil C_1-C_4-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino.

En otra realización preferida, R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, metilo, etilo, fluorometilo, difluorometilo, clorodifluorometilo, trifluorometilo, 2,2,2-trifluoroetilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, 1-metiletoxi, fluorometoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, pentafluoroetoxi, N-metoxiiminometilo, 1-(N-metoxiimino)etilo, metilsulfanilo, trifluorometilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno (en especial cloro, bromo, flúor), ciano, nitro, metilo, etilo, difluorometilo, clorodifluorometilo, trifluorometilo, metoxi, etoxi, 1-metiletoxi, difluorometoxi, clorodifluorometoxi, diclorofluorometoxi, trifluorometoxi, 2,2,2-trifluoroetoxi, 2-cloro-2,2-difluoroetoxi, metilsulfanilo, trifluorometilsulfanilo, metilsulfonilo, metilsulfinilo, trifluorometilsulfonilo, trifluorometilsulfinilo.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son los sustituyentes descritos en la presente, pero R^6 y R^{10} en un compuesto no son ambos H. En otras palabras, si R^6 en un compuesto es H, R^{10} es uno de los otros sustituyentes descritos en la presente y viceversa.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, Cl, Br o F), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno.

En otra realización preferida, R^6 y R^{10} son cada uno halógeno (tales como Cl, Br o F), cada alquilo C_1-C_3 o cada alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, por ejemplo, peralquilo C_1-C_3 fluorado (perfluorometilo, perfluoroetilo o perfluoropropilo).

En otra realización preferida, R^6 es peralquilo C_1-C_3 fluorado (por ejemplo, perfluorometilo) y R^{10} es Cl, Br o F, con mayor preferencia, Cl o Br.

T46 – metilo

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] ff.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] ff.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5

es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] ff.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es metilo, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] ff.

T46 - H

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0112].

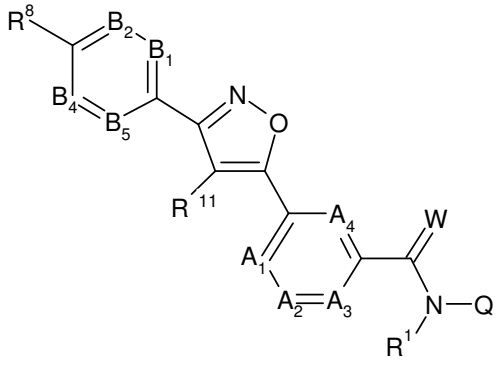
Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O, A_1 es CR^2, A_2 es CR^3 o N, A_3 es CR^4, A_4 es CR^5, B_1 es CR^6, B_2 es CR^7, B_3 es CR^8, B_4 es CR^9, B_5 es CR^{10} y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] ff.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de

halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] ff.

Otra realización preferida se refiere a compuestos de la fórmula (I), en la que R^1 es H, T es T46, R^{11} en T46 es H, W es O, A_1 es CH, A_2 es CH o N, A_3 es CR^4, A_4 es CH, B_1 es CR^6, B_2 es CH, B_3 es CR^8, B_4 es CH, B_5 es CR^{10}, donde R^6 y R^{10} son cada uno un sustituyente seleccionado de halógeno (con preferencia, cloro, bromo o flúor), alquilo C_1-C_3, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, alcoxi C_1-C_3 o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno y todos los otros parámetros son como se definen en el punto [85] y el punto [0113] ff.

Otra realización se refiere a compuestos de la fórmula (I-T46):



(I-T46)

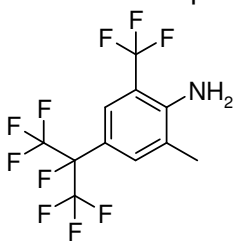
en la que

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q y W se definen cada uno como se describe en la presente, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N; o donde uno o dos restos seleccionados de A_1, A_2, A_3, A_4 pueden ser N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

Otra realización se refiere a compuestos de la fórmula (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) o (I-T46), en la que R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se describe en el punto [0120].

Otra realización se refiere a compuestos de la fórmula (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) o (I-T46), en la que R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se describe en el punto [0121].

Otra realización preferida se refiere al compuesto D-1a

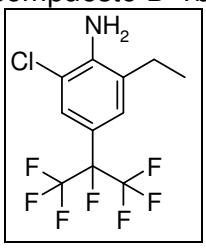


D-1a

Otra realización se refiere al uso del compuesto D-1a para la preparación de compuestos de la fórmula (I).

Otra realización se refiere a un proceso para preparar un compuesto de la fórmula (I), con preferencia, en la que T = T4, que comprende el uso del compuesto D-1a, con preferencia, en una secuencia de reacción de acuerdo con el Esquema de reacción 4.

Otra realización se refiere al compuesto D-1b

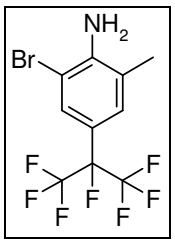


D-1b

Otra realización se refiere al uso del compuesto D-1b para la preparación de compuestos de la fórmula (I).

Otra realización se refiere a un proceso para preparar un compuesto de la fórmula (I), con preferencia, en la que T = T4, que comprende el uso del compuesto D-1b, con preferencia, en una secuencia de reacción de acuerdo con el Esquema de reacción 4.

Otra realización se refiere al compuesto D-1c



D-1c

Otra realización se refiere al uso del compuesto D-1c para la preparación de compuestos de la fórmula (I).

Otra realización se refiere a un proceso para preparar un compuesto de la fórmula (I), con preferencia, en la que T = T4, que comprende el uso del compuesto D-1c, con preferencia, en una secuencia de reacción de acuerdo con el Esquema de reacción 4.

Otra realización se refiere a el compuesto 2-(3,5-dicloro-4-hidrazinofenil)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol.

Otra realización se refiere al uso del compuesto 2-(3,5-dicloro-4-hidrazino-fenil)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol para la preparación de compuestos de la fórmula (I).

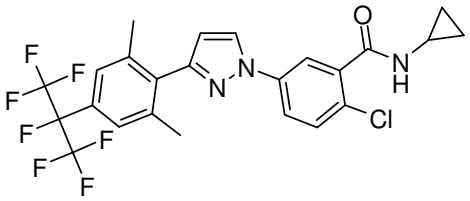
Otra realización se refiere a un proceso para preparar un compuesto de la fórmula (I), con preferencia, en la que T = T4, que comprende el uso del compuesto 2-(3,5-dicloro-4-hidrazino-fenil)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-

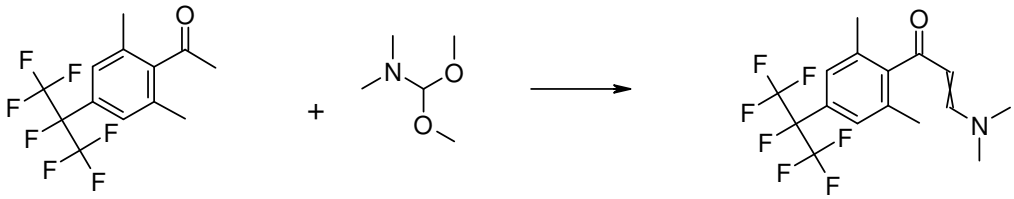
2-ol, con preferencia, en una secuencia de reacción de acuerdo con el Esquema de reacción 4.

Experimental

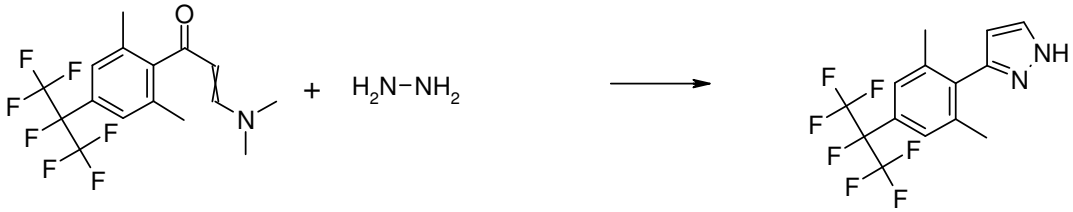
Proceso de preparación I-T2

Ejemplo I-T2-1

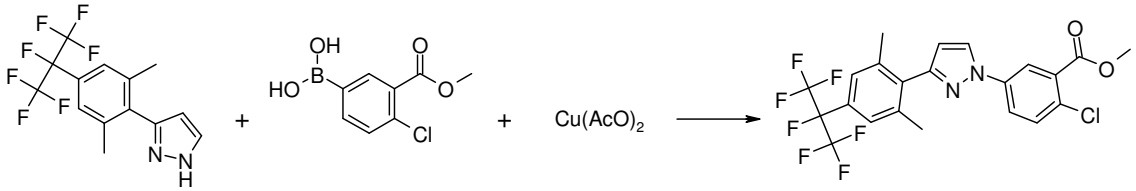




710 mg (2,24 mmol) de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]etanona se añadieron a 401 mg (3.36 mmol) de N,N-dimetilformamida dimetilacetal y la mezcla se calentó a reflujo durante 5 horas. Para la elaboración, la mezcla se enfrió un poco y todos los constituyentes volátiles se evaporaron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se cromatografió usando un cartucho con 40 g de gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 50:50 (v/v). Se obtuvieron 675 mg de 3-(dimetilamino)-1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]prop-2-en-1-ona.

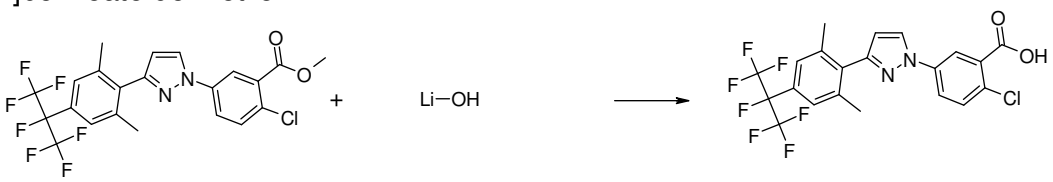


1,2 g (3.23 mmol) de 3-(dimetilamino)-1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]prop-2-en-1-ona se añadieron a 15,5 ml de etanol y 170 mg (3,39 mmol) de hidrato de hidrazina y 192 mg (3,2 mmol) de ácido acético glacial se añadieron. La mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 7 horas. A continuación, se añadieron otros 170 mg (3,39 mmol) de hidrato de hidrazina y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante otras 4 horas. Si bien la conversión aún era incompleta, se añadieron otros 190 mg (3,2 mmol) de ácido acético glacial y la mezcla se agitó a 60 °C durante 17 horas. Para la elaboración, la mezcla se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida y el residuo se dividió entre acetato de etilo y agua. La fase orgánica se eliminó, se lavó con agua, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Como residuo, quedaron 1,04 g de (3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-1H-pirazol remained

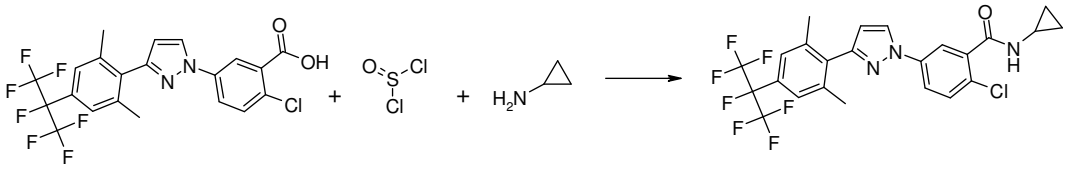


23 ml de diclorometano, 353 mg (4,46 mmol) de piridina, 609 mg (3,35 mmol) de acetato de cobre (II), 958 mg (4,46 mmol) de ácido 3-carboximetil-4-clorofenilborónico y 760 mg (2,23 mmol) de (3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-1H-pirazol se cargaron inicialmente y luego se añadieron 1,1 g de tamiz molecular 3 Å recién molido. La mezcla luego se agitó a temperatura ambiente durante 20 horas. Para la elaboración, la mezcla se filtró a través de una capa de kieselguhr y se lavó bien con diclorometano. El filtrado se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se

llevó a cabo primero usando un cartucho con 40 g de gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 95:5 a 75:25 (v/v). Las fracciones que contenían producto se concentraron y se cromatografiaron usando un segundo cartucho con 40 g de gel de sílice con tolueno como eluyente. Después de concentrar, se obtuvieron 628 mg de 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoato de metilo.



609 mg (1,19 mmol) de 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoato de metilo se cargaron inicialmente en una mezcla de 14 ml de dioxano y se añadieron 5 ml de agua, 53 mg (1,25 mmol) de hidróxido de litio hidrato y la mezcla se agitó a temperatura ambiente. Después de 2 horas, se añadieron otros 25 mg (0,6 mmol) de hidróxido de litio hidrato se añadieron y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante otra hora. Después de ello, los constituyentes volátiles se removieron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre ácido clorhídrico diluido y diclorometano. La fase orgánica se eliminó y la fase acuosa se extrajo dos veces con diclorometano. Las fases orgánicas combinadas se lavaron luego con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Como residuo, se obtuvieron 554 mg de ácido 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoico.



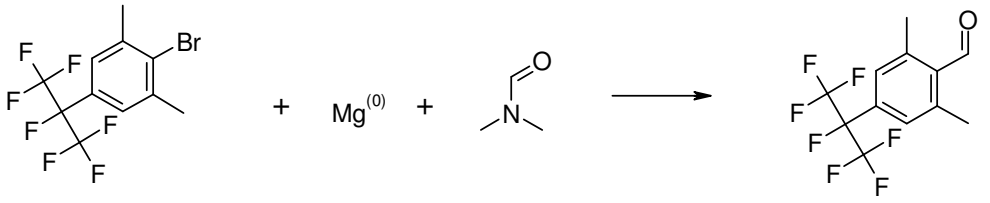
100 mg (0,2 mmol) de ácido 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoico se cargaron inicialmente en 2 ml de tolueno seco, luego se añadieron 120 mg (1 mmol) de cloruro de tionilo (SOCl2) y 1 gota de dimetilformamida (DMF) y la mezcla se calentó hasta reflujo. Después de terminara la producción de gas, la mezcla se agitó a reflujo durante otros 30 minutos y luego se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se disolvió en 1 ml de diclorometano seco y se añadió gota a gota a una solución de 29 mg (0,5 mmol) de ciclopropilamina en 1 ml de diclorometano a 0 °C. La mezcla luego se agitó a temperatura ambiente durante 2 horas. Para la elaboración, la mezcla se vertió en solución acuosa al 5% de hidrógeno-carbonato de sodio y la fase orgánica se eliminó, se lavó con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo usando un cartucho con 40 g de gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 50:50 (v/v). Se obtuvieron 159,5 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzamida (compuesto **I-T2-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4.9, masa (m/z) = 534 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 8.29 (d, J=2.5 Hz, 1 H), 7.82-7.85 (m, 2H), 7.52 (d, J=8.8 Hz, 1 H), 7.44 (s, 2 H), 6.97 (s (amplio),

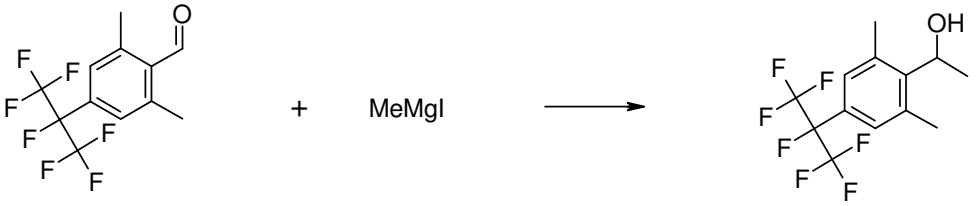
1 H (N-H)), 6.54 (d, J=2.5 Hz, 1 H), 2.82-2.86 (m, 1H), 0.74-0.79 (m, 2 H), 0.59-0.61 (m, 2 H).

Preparación de los compuestos de partida:

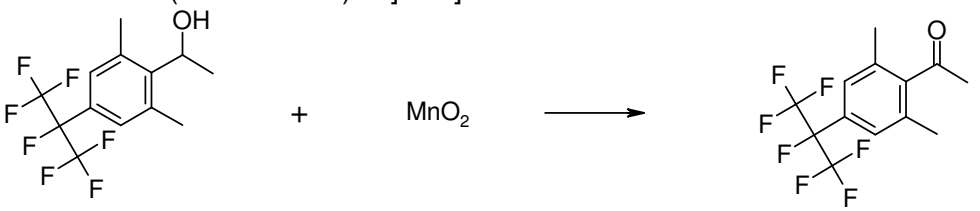


271 mg (11,1 mg de átomo) de virutas de magnesio se cargaron inicialmente, se cubrieron con un poco de tetrahidrofurano seco y, después de la adición de algunas gotas de una solución de 3 g (8,49 mmol) de 2-bromo-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno (preparado de acuerdo con el documento US2003/187233, p. 6, Ejemplo 2/4 [0080]) en 10 ml de tetrahidrofurano seco, se añadió una miga de yodo. Para iniciar la reacción, la mezcla se calentó hasta 60 °C. Después de haber iniciado la reacción, se añadió el resto de la solución que contenía el 2-bromo-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno gota a gota a 60 °C. Después de finalizada la adición, la mezcla se agitó a 60 °C durante otra hora. Después de ello, la mezcla se enfrió hasta 0 °C con un baño de hielo y 1,86 g (25,4 mmol) de N,N-dimetilformamida, disueltos en 5 ml de tetrahidrofurano seco, se añadieron gota a gota. A continuación, la mezcla se agitó sin enfriamiento hasta que la mezcla hubiera alcanzado temperatura ambiente. Para la elaboración, la mezcla se vertió en solución acuosa saturada de cloruro de amonio. Las fases se separaron; la fase acuosa se extrajo con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio,

se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Como residuo, quedaron 2,34 g de 2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benzaldehído, que se usó sin purificación en la siguiente etapa.



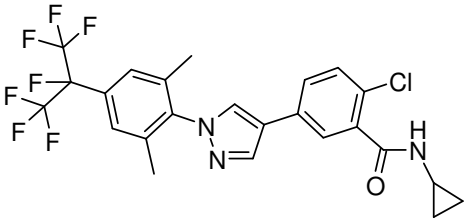
2,34 g (7,74 mmol) de 2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benzaldehído se cargaron inicialmente en 15,5 ml de tetrahidrofurano seco y se añadieron 2,58 ml (7,74 mmol) de una solución 3 M de yoduro de metilmagnesio en dietil éter gota a gota mientras se enfriaba con un baño de hielo. Posteriormente, la mezcla se agitó sin enfriamiento durante otra hora. Para la elaboración, la mezcla se vertió en 100 ml de solución acuosa saturada de cloruro de amonio. La mezcla se extrajo dos veces con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se cromatografió usando un cartucho de 40 g que contenía gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 70:30 (v/v) y dio 1,0 g de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]etanol.



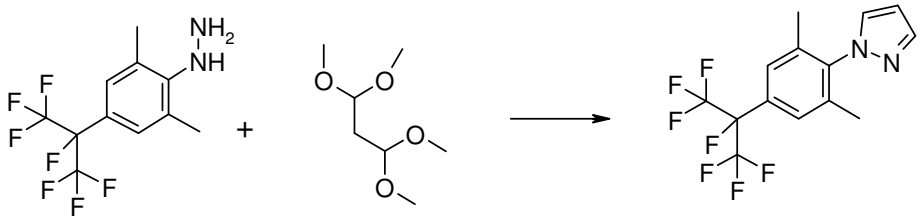
1,49 g (4,68 mmol) de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]etanol se cargaron inicialmente en 84 ml de tolueno y se añadieron 10,8 g (124 mmol) de óxido de manganeso (IV). La mezcla se calentó hasta reflujo mientras se agitaba durante una hora. A esto le siguió enfriamiento, filtrando a través de una capa de kieselguhr y lavando a través de acetato de etilo. El filtrado se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se cromatografió usando un cartucho con 50 g de gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 95:5 a 70:30 (v/v). Se obtuvieron 1,03 g de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]etanona.

Proceso de preparación I-T3

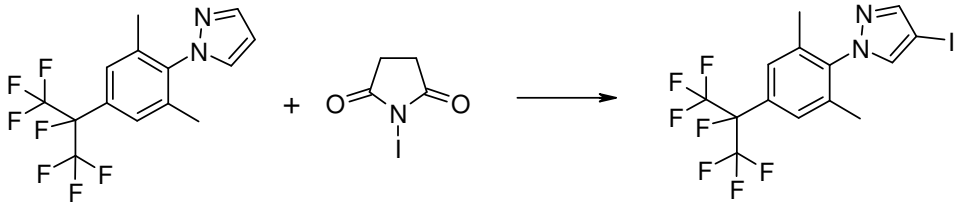
Ejemplo I-T3-1:



La preparación del precursor [2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]hidrazina se describe en la literatura (US 2003/187233).

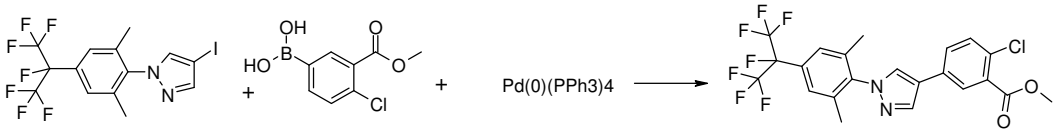


Un recipiente de 25 ml se cargó inicialmente con 3,41 g (11,2 mmol) de [2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]hidrazina (base libre) en 13 ml de etanol. A continuación, se añadieron 1,84 g (11,2 mmol) de tetrametoxipropano y posteriormente 0,55 g (5,6 mmol) de ácido sulfúrico al 96%. La mezcla de reacción se calentó a reflujo durante 2 h. El etanol se evaporó en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre acetato de etilo y solución acuosa saturada de hidrógeno-carbonato de sodio. La fase orgánica se eliminó, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se destiló en un Kugelrohr a presión reducida a 1 mbar y 150 °C y dio 2,5 g de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol.

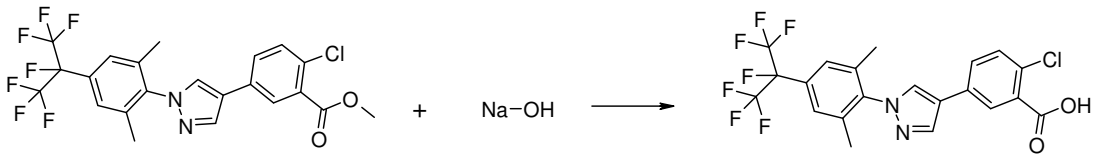


Un recipiente de 250 ml se cargó inicialmente con 2,5 g (7,34 mmol) de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol en 30 ml de acetonitrilo y 8,3 g (36,9 mmol) de N-yodosuccinimida en 50 ml de acetonitrilo se añadieron gota a gota. Posteriormente, la mezcla se calentó hasta reflujo. Para la elaboración, la mezcla se concentró y el residuo se dividió entre agua y acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó, se lavó primero con solución acuosa saturada de hidrógeno-sulfito de sodio, luego con solución saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró. El residuo se purificó por

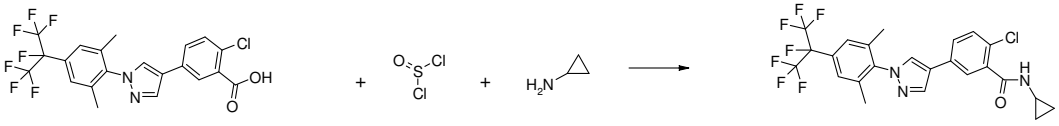
cromatografía con gel de sílice por medio de un gradiente de 90:10 a 70:30 (v/v) en ciclohexano/acetato de etilo. Después de concentrar las fracciones que contenían el producto, se obtuvieron 2,5 g de un residuo, que consistía en 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4-yodopirazol y algo de tolueno.



Un recipiente de 100 ml se cargó inicialmente con 280 mg (0,6 mmol) de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4-yodopirazol y 0,129 g (0,60 mmol) de ácido [4-cloro-3-(metoxicarbonil)fenil]borónico en 21 ml de isopropanol y por último se añadieron 1,84 ml (1,84 mmol) de solución desgasificada 1 molar de hidrógeno-carbonato de sodio. Se añadieron 0,035 g (0,03 mmol) de tetrakis(trifenilfosfina)paladio (0). A continuación, la mezcla se calentó hasta reflujo. Para la elaboración, la mezcla se concentró en un evaporador rotativo y el residuo se dividió entre agua y acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó, se lavó una vez con solución saturada de cloruro de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se purificó por cromatografía con gel de sílice por medio de un gradiente de 90:10 a 70:30 (v/v) en ciclohexano/acetato de etilo y dio 151 mg de 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]benzoato de metilo.



0,151 g (0,29 mmol) de 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]benzoato de metilo se cargaron inicialmente en 11 ml de metanol y se añadieron 0,3 ml (0,3 mmol) de solución 1 M de hidróxido de sodio. Posteriormente, la mezcla se calentó a reflujo durante 6 horas, el exceso de disolvente se evaporó a presión reducida y el residuo se extrajo con ácido clorhídrico diluido y se extrajo tres veces con acetato de etilo. Los extractos combinados se lavaron con solución saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron y dieron 130 mg de ácido 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]benzoico.



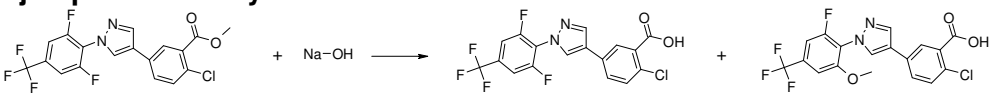
0,134 g (0,27 mmol) de ácido 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]benzoico se disolvieron en 1,26 ml de tolueno y se añadieron 0,161 g (1,35 mmol) de cloruro de tionilo. La mezcla se calentó hasta 80 °C durante 2 horas. A esto le siguió la concentración a presión reducida. El residuo se disolvió en 1,26 ml de diclorometano y se añadió gota a gota a una solución de 39 mg (0,67 mmol) de ciclopropilamina en 0,63 ml de diclorometano a 0 °C mientras se

enfriaba y la solución se enfrió. Para la elaboración, se añadió solución acuosa al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio y la fase orgánica se eliminó, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se separó con gel de sílice con un gradiente de ciclohexano/acetato de etilo de 9:1 a 7:3 (v/v) y dio 46 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]benzamida (compuesto **I-T3-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4.36, masa (m/z) = 534 [M+H]+.

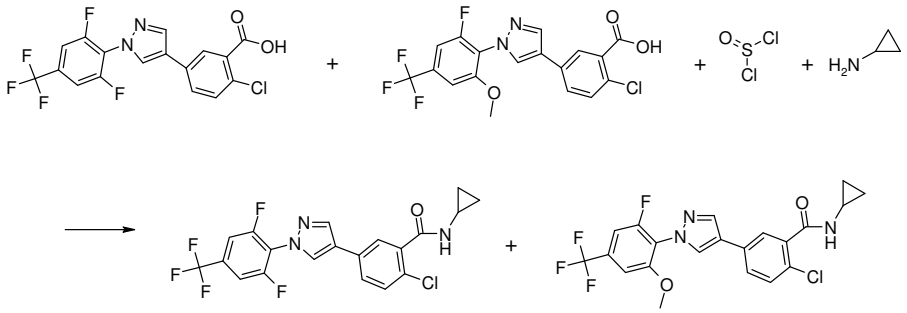
RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ = 8.11 (s, 1 H), 8.06 (s, 1 H), 7.68 (d, J1=2.2 Hz, 1 H), 7.62-7.65 (dd, J1=8.4 Hz, J2=2.2 Hz, 1H), 7.45 (d, J=8.4 Hz, 1 H), 6.9 (s (amplio), 1 H (N-H)), 3.97 (s, 3 H), 2.82-2.88 (m, 1H), 0.76-0.8 (m, 2 H), 0.57-0.61 (m, 2 H).

Ejemplos I-T3-48 y IT-T3-50



2,46 g (5,9 mmol) de 2-cloro-5-[1-[2,6-difluoro-4-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzoato de metilo se cargaron inicialmente en 127 ml de metanol y se añadieron 5,9 mg (5,9 mmol) de solución 1 molar de hidróxido de sodio. La mezcla se calentó a reflujo durante 2 horas. Después de ello, la mezcla se enfrió y la mayor parte del metanol se eliminó en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo acuoso se extrajo con diclorometano. El extracto se descartó. La fase acuosa se fijó en pH 1 con ácido clorhídrico al 33% y se extrajo dos veces con diclorometano. Los extractos combinados se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron. Se obtuvieron 1,41 g de residuo como una mezcla 45:55 (superficie de LC-

MS) de ácido 2-cloro-5-[1-[2,6-difluoro-4-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzoico y ácido 2-cloro-5-[1-[2-fluoro-6-metoxi-4-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzoico.



700 mg (aproximadamente 1,7 mmol) de una mezcla 45:55 (superficie de LC-MS) de ácido 2-cloro-5-[1-[2,6-difluoro-4-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzoico y ácido 2-cloro-5-[1-[2-fluoro-6-metoxi-4-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzoico se disolvieron en 6,6 ml de tolueno y 1,34 g (8,7 mmol) de cloruro de tionilo se añadieron. La mezcla se calentó hasta 80 °C durante 2 horas. Después de ello, todos los constituyentes volátiles se extrajeron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se disolvió en 3,3 ml de diclorometano y se añadió gota a gota a una solución de 248 mg (4,34 mmol) de ciclopropilamina en 3,3 ml de diclorometano a 0 °C. La mezcla luego se agitó sin enfriamiento durante 2 horas. Después de ello, la solución se lavó con solución acuosa al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró. El residuo se cromatografió usando un cartucho con 40 g de gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 50:50 (v/v). Se obtuvieron 240 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[1-[2,6-difluoro-4-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzamida (Ejemplo **I-T3-48**)

HPLC-MS[a)]: logP = 3.2, masa (m/z) = 442 [M+H]+.

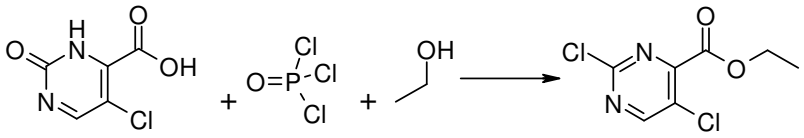
RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 8.26 (s, 1 H), 8.19 (s, 1H), 7.61-7.69 (m, 4H), 7.46 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 6.94 (s, 1 H (amplio)), 2.82-2.88 (m, 1H), 0.75-0.80 (m, 2 H), 0.58-0.62 (m, 2 H).

y 2-cloro-N-ciclopropil-5-[1-[2-fluoro-6-metoxi-4-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzamida (Ejemplo **I-T3-50**).

HPLC-MS[a)]: logP = 3.1, masa (m/z) = 454 [M+H]+.

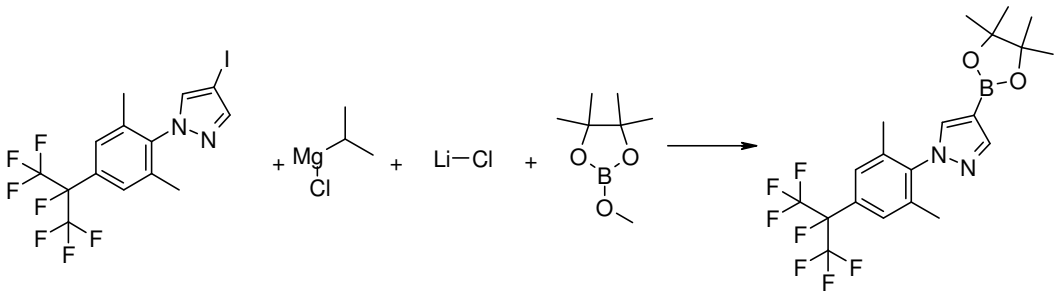
RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 8.13 (s, 1 H), 8.11 (s, 1H), 7.67 (d, J = 2.2 Hz, 1 H), 7.62 (dd, J_1 = 8.3 Hz, J_2 = 2.2 Hz, 1 H), 7.45 (d, J = 8.3 Hz, 1H), 7.32 (s, 1 H), 7.30 (s, 1 H), 6.91 (s, 1 H (amplio)), 3.90 (s, 3 H), 2.83-2.87 (m, 1H), 0.75-0.79 (m, 2 H), 0.57-0.61 (m, 2 H).

Ejemplo I-T3-121:



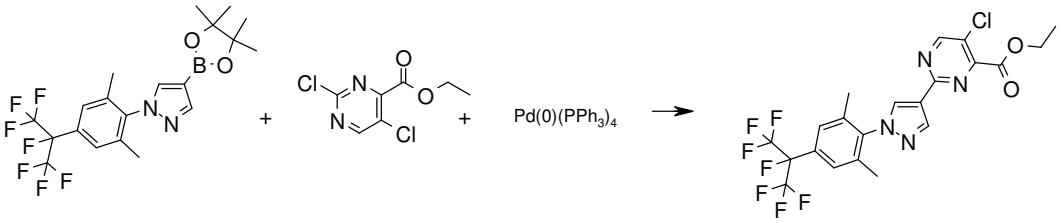
4,6 ml (49,6 mmol) de oxicloruro de fósforo se cargaron inicialmente y se introdujeron 1,3 g (7,44 mmol) de ácido 5-cloro-2-oxo-1H-pirimidin-6-carboxílico (asequible en comercios o se pueden preparar por métodos conocidos de la literatura (por ejemplo, Gacek, Michel; Ongstad, Leif; Undheim, Kjell; Acta Chemica Scandinavica, Series B: Organic Chemistry and Biochemistry B33(2), (1979), p. 150-1)). La mezcla se calentó gradualmente y se mantuvo a reflujo durante 2 horas. Después de ello, la mezcla se enfrió un poco y el exceso de oxicloruro de fósforo se extrajo en un evaporador rotativo a presión reducida. 20 ml de etanol seco se añadieron al residuo y la mezcla luego se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Después de ello, el exceso de etanol se extrajo en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se extrajo en

diclorometano y se lavó tres veces con solución acuosa saturada de hidrógeno-carbonato de sodio. Las fases acuosas se reextrajeron con diclorometano, luego las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se cromatografió usando un cartucho con 15 g de gel de sílice con un gradiente de ciclohexano puro a 50:50 (v/v) ciclohexano/acetato de etilo y dio 115 mg de 2,5-dicloropirimidin-4-carboxilato de etilo.



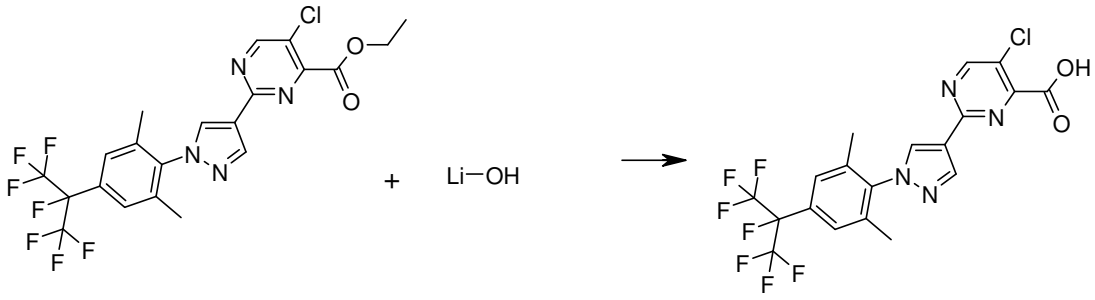
Un recipiente de tres bocas de 25 ml secado se cargó inicialmente con 5,94 ml (7,72 mmol) de una solución 1,3 molar de complejo de cloruro de i-propilmagnesio / cloruro de litio y una solución de 4-yodo-1-[2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]pirazol (para la preparación ver el Ejemplo **I-T3-1**) en 3,4 ml de tetrahidrofurano seco se añadió gota a gota. La agitación de la mezcla a temperatura ambiente continuó durante la noche y luego la mezcla se enfrió hasta -20 °C y se añadieron 1,63 g (10,2 mmol) de 2-metoxi-4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolano gota a gota. La mezcla se agitó a 0-10 °C durante otra hora. Para la elaboración, la mezcla se vertió en 30 ml de solución acuosa saturada de cloruro de amonio y se diluyó con ciclohexano. Las fases se separaron; la fase acuosa se reextrajo con ciclohexano. Las fases orgánicas combinadas se lavaron primero con solución acuosa saturada

de hidrógeno-carbonato de sodio y luego con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Después de cromatografía usando un cartucho de 40 g que contenía gel de sílice con un gradiente procediendo a partir de ciclohexano puro hasta 80:20 (v/v) de ciclohexano/acetato de etilo, se obtuvieron 0,6 g de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4-(4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-il)pirazol.

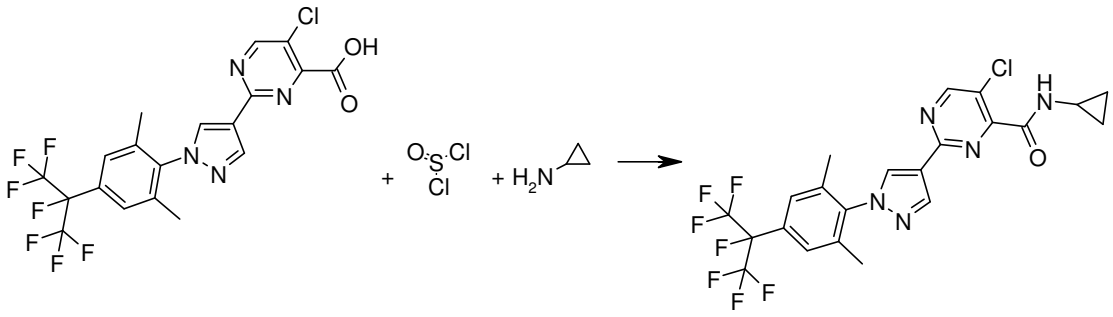


155 mg (0,7 mmol) de 2,5-dicloropirimidin-4-carboxilato de etilo y 327 mg (0,7 mmol) de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4-(4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-il)pirazol se cargaron inicialmente en 25 ml de dioxano y se añadieron 234 mg (2,2 mmol) de carbonato de sodio y 1,25 ml de agua. La mezcla se desgasificó con argón y luego se añadieron 81 mg (0,07 mmol) de tetrakis(trifenilfosfina)paladio (0). La mezcla se desgasificó una vez más con argón y se agitó a 100 °C durante la noche. A la mañana siguiente, la mezcla se enfrió y el solvente se extrajo en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre agua y acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó, se lavó una vez con solución acuosa saturada de cloruro de sodio y luego se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo usando un cartucho con 15 g de gel de sílice y un gradiente procediendo a partir

de ciclohexano puro como una mezcla de 70:30 (v/v) ciclohexano/acetato de etilo. Se obtuvieron 120 mg de 5-cloro-2-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]pirimidin-4-carboxilato de etilo.



0,120 g (0,23 mmol) de 5-cloro-2-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]pirimidin-4-carboxilato de etilo se cargaron inicialmente en una mezcla de 4,1 ml de dioxano y 1,44 ml de agua y se añadieron 31 mg (0,74 mmol) de hidróxido de litio monohidrato. Posteriormente, la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 4 horas, luego el exceso de disolvente se evaporó a presión reducida y el residuo se extrajo con ácido clorhídrico diluido y se extrajo tres veces con diclorometano. Los extractos combinados se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron y dieron 115 mg de ácido 5-cloro-2-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]pirimidin-4-carboxílico crudo.

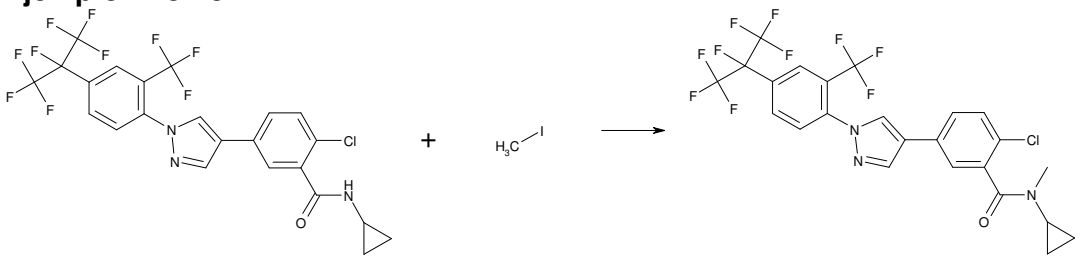


0,110 g (0,22 mmol) de ácido 5-cloro-2-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]pirimidin-4-carboxílico crudo se disolvieron en 2 ml de tolueno y se añadieron 0,132 g (1,1 mmol) de cloruro de tionilo y una gota de dimetilformamida. La mezcla se calentó hasta 80 °C durante 2 horas. A esto le siguió la concentración a presión reducida. El residuo se disolvió en 1 ml de diclorometano y se añadió gota a gota a una solución de 32 mg (0,55 mmol) de ciclopropilamina en 1 ml de diclorometano a 0 °C mientras se enfriaba y la mezcla luego se agitó sin enfriamiento durante 2 horas. Para la elaboración, se añadió solución acuosa al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio y la fase orgánica se eliminó, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se separó usando un cartucho con 15 g de gel de sílice con un gradiente de ciclohexano/acetato de etilo de 9:1 a 7:3 (v/v) y dio 49 mg de 5-cloro-N-ciclopropil-2-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-4-il]pirimidin-4-carboxamida (compuesto **I-T3-121)**.

HPLC-MS[a)]: logP = 4.5, masa (m/z) = 536 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 8.84 (s, 1 H), 8.46 (s, 1 H), 8.44 (s, 1H), 7.87 (s, 1 H (amplio)), 7.55 (s, 2 H), 2.84-2.91 (m, 1 H), 2.2 (s, 6 H), 0.79-0.83 (m, 2 H), 0.64-0.68 (m, 2 H).

Ejemplo I-T3-134:



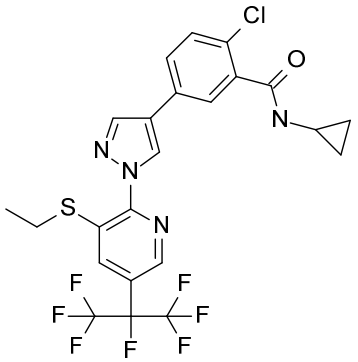
A una mezcla, enfriada hasta 0 °C, de 6,5 mg (0,163 mmol) de hidruro de sodio (60% en aceite mineral) en 2 ml de tetrahidrofurano seco se añadieron 49,3 mg (0,08 mmol) de 2-cloro-N-ciclopropil-5-{1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)-2-(trifluorometil)fenil]-1H-pirazol-4-il}benzamida. Después de 30 minutos, se añadieron 35 mg (0,24 mmol) de yoduro de metilo y la mezcla se agitó a 0 °C y durante 1 hora, luego se calentó hasta temperatura ambiente durante el curso de 1 hora y se agitó a temperatura ambiente durante otras 14 horas. Después de ello, la mezcla se añadió al agua y se extrajo con acetato de etilo, la fase orgánica se secó sobre sulfato de sodio y el solvente se eliminó a presión reducida. El residuo se purificó por cromatografía en gel de sílice en fase inversa (C_18) con agua/acetonitrilo (gradiente) como eluyente. Se obtuvieron 40,0 mg (0,068 mmol, 78%) de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[5-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-3-il]benzamida (compuesto **I-T3-134**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4.88, masa (m/z) = 588 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d_6-DMSO): δ (ppm) = 8.82 (s, 1 H), 8.43 (s, 1 H), 8.25 (d, 1H), 8.11 (d, 1 H), 8.06 (d, 1 H), 7.81 (d, 1 H), 7.75 (m, 1 H), 7.54 (d, 1 H), 3.02 (s, 3 H), 2.72 (m, 1 H), 0.55 (m, 2 H), 0.46 (m, 2 H).

Ejemplo I-T3-156:

2-Cloro-*N*-ciclopropil-5-{1-[3-(etilsulfanil)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1H-pirazol-4-il}benzamida



2-(4-Bromo-1H-pirazol-1-il)-3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridina

1,0 g (3,16 mmol) de 2,3-dicloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridina se añadieron gota a gota a una suspensión de 0,51 g (3,48 mmol) de 4-bromo-1H-pirazol y 2,58 g (7,91 mmol) de carbonato de cesio en 10,0 ml de dimetilformamida p.a. La reacción se agitó a temperatura ambiente durante 3 h. La mezcla de reacción luego se diluyó con acetato de etilo y luego se lavó con solución acuosa semisaturada de cloruro de amonio. La fase acuosa luego se extrajo repetidamente con acetato de etilo y las fases orgánicas combinadas se lavaron posteriormente con agua destilada y solución saturada de cloruro de sodio. La fase orgánica se secó sobre sulfato de magnesio, se filtró y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El producto crudo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice.

Esto da 1,34 g (3,14 mmol) de 2-(4-bromo-1*H*-pirazol-1-il)-3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridina en forma de un aceite incoloro.

HPLC-MS[a)]: logP = 4.74, masa (m/z) = 428 $[M+H]^+$.

RMN de ^1H (400 MHz, D6-DMSO): 8.90 (s, 1H), 8.67 (s, 1H), 8.63 (d, 1H), 8.06 (s, 1H).

2-Cloro-5-{1-[3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}-*N*-ciclopropilbenzamida

150 mg (0,35 mmol) de 2-(4-bromo-1*H*-pirazol-1-il)-3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridina, 136 mg (0,42 mmol) de 2-cloro-*N*-ciclopropil-5-(4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-il)benzamida, 59 mg (0,70 mmol) de hidrógeno-carbonato de sodio y 20 mg de tetrakis(trifenilfosfina)paladio (0,01 mmol) se disolvieron en una mezcla de 1,5 ml de dioxano y 0,5 ml de agua destilada. Los disolventes se saturaron con argón durante aproximadamente 30 minutos antes de usar, pasando gas arbgón a través de los disolventes. La mezcla de reacción se calentó en un baño de aceite hasta 100 °C durante 16 horas. Después de haber enfriado la mezcla de reacción hasta temperatura ambiente, la mezcla se mezcló con agua y el producto crudo se extrajo repetidamente con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre sulfato de magnesio y se filtraron a través de gel de sílice. Los disolventes se removieron en un evaporador rotativo a presión reducida. El producto crudo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice.

Esto dio 25 mg (0,05 mmol) de 2-cloro-5-{1-[3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}-*N*-ciclopropilbenzamida en forma de un sólido incoloro.

HPLC-MS[a)]: logP = 4.08, masa (m/z) = 541 $[M+H]^+$.

RMN de 1H (400 MHz, D6-DMSO): 9.02(s,1H), 8.89(s,1H), 8.61(d,1H), 8.54-8.52(m,1H), 8.50(s,1H), 7.83-7.81(m,2H), 7.52(d,1H), 2.87-2.81(m,1H), 0.74-0.65(m,2H), 0.60-0.50(m,2H)

2-Cloro-*N*-ciclopropil-5-{1-[3-(etilsulfanil)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}benzamida

300 mg (0,55 mmol) de 2-cloro-5-{1-[3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}-*N*-ciclopropilbenzamida se disolvieron en 5,0 ml de DMF abs. y se enfriaron con un baño de hielo seco / acetona. A la mezcla de reacción enfriada se añadió gota a gota una solución de 81,6 mg (0,97 mmol) de etanotiolato de sodio en 5 ml de DMF abs. Después de 3 horas, la mezcla de reacción se calentó hasta temperatura ambiente y se vertió cuidadosamente en agua. El producto crudo se extrajo repetidamente con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron sobre sulfato de magnesio y se filtraron y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El producto crudo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice.

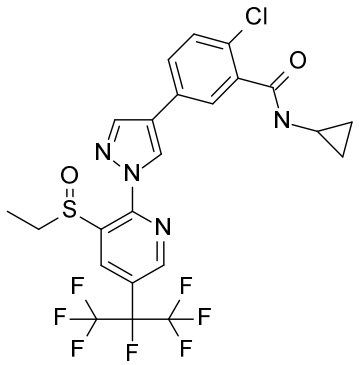
Esto da 226 mg (0,40 mmol) de 2-cloro-*N*-ciclopropil-5-{1-[3-(etilsulfanil)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}benzamida en forma de un sólido incoloro.

HPLC-MS[a)]: logP = 4.69, masa (m/z) = 567 $[M+H]^+$.

RMN de 1H (400 MHz, D6-DMSO): 9.08 (d, 1H), 8.59 (d, 1H), 8.53 (d, 1H), 8.47 (s, 1H), 8.02 (d, 1H), 7.85-7.82 (m, 2H), 7.53-7.50 (m, 1H), 3.08 (q, 2H), 2.87-2.81 (m, 1H), 1.22 (t, 3H), 0.74-0.69 (m, 2H), 0.58-0.54 (m, 2H).

Ejemplo I-T3-157:

2-Cloro-*N*-ciclopropil-5-{1-[3-(etilsulfinil)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}benzamida



100 mg (0,17 mmol) de 2-cloro-*N*-ciclopropil-5-{1-[3-(etilsulfanil)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}benzamida se disolvieron en 10,0 ml de diclorometano y se enfriaron con un baño de hielo. 43,5 mg de ácido 3-cloroperbenzoico se añadieron en porciones. La mezcla de reacción se agitó mientras se enfriaba con hielo durante 2 horas. La mezcla de reacción se mezcló con 5 ml de solución 1 N de hidróxido de sodio. Después de 5 minutos, la fase acuosa se eliminó. Después de controlar los peróxidos, la fase orgánica se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El producto crudo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice.

Esto dio 61 mg de 2-Cloro-***N***-ciclopropil-5-{1-[3-(etilsulfinil)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-4-il}benzamida en forma de un sólido incoloro.

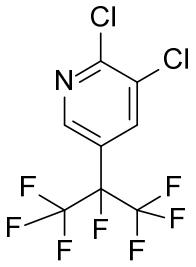
HPLC-MS[a)]: logP = 3.79, masa (m/z) = 583 $[M+H]^+$.

RMN de 1H (400 MHz, D6-DMSO): 9.36 (s, 1H), 8.96 (d, 1H), 8.63 (s, 1H), 8.58 (s, 1H), 8.53 (d, 1H), 7.91 (s, 1H), 7.89 (d, 1H), 7.53 (d, 1H), 3.45-

3.30 (m, 1H por debajo del agua), 2.95-2.88 (m ,1H), 2.86-2.81 (m, 1H), 1.08 (t, 3H), 0.74-0.69 (m, 2H), 0.60-0.50 (m, 2H).

Preparación de los compuestos de partida

2,3-Dicloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridina



Primera etapa: 3-Cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-amina

130,6 g (750 mmol) de ditionita de sodio se añadieron a una mezcla, enfriada hasta 0-5 °C, de 64,3 g (500 mmol) de 3-cloropiridin-2-amina, 222 g (750 mmol) de 1,1,1,2,3,3,3-heptafluoro-2-yodopropano y 126 g (1500 mmol) de hidrógeno-carbonato de sodio en 2000 ml de una mezcla 3:1 de acetonitrilo/agua (v/v) bajo gas de protección. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 48 horas. El acetonitrilo luego se removió en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se diluyó con 500 ml de agua. El producto crudo se extrajo repetidamente de la fase acuosa con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre sulfato de sodio, se filtraron y luego se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El producto crudo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice.

Segunda etapa: 3-Cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2(1H)-ona

5,8 g (19,5 mmol) de 3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2-amina se disolvieron en 150 ml de ácido sulfúrico (20%, w/w) y se enfrió hasta 0-5 °C. La solución se mezcló con 2,7 g (40 mmol) de nitrito de sodio en porciones. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 16 horas. El producto crudo se extrajo repetidamente de la mezcla de reacción con diclorometano (DCM). Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre sulfato de sodio, se filtraron y luego se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El producto crudo se usó en la siguiente etapa sin purificación.

Tercera etapa: 2,3-Dicloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridina

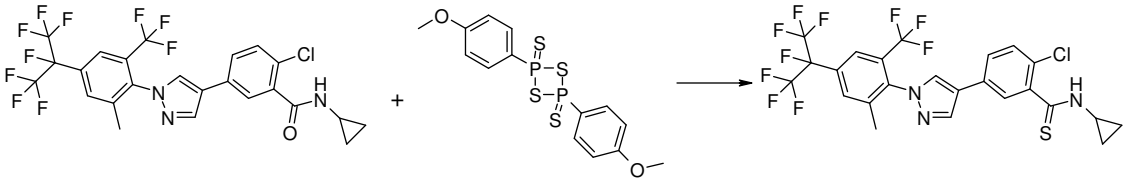
15,4 g (51,7 mmol) de 3-cloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridin-2(1H)-ona y 150 ml de cloruro de fosforilo se calentaron hasta 105 °C durante 5 horas. La mezcla de reacción se neutralizó cuidadosamente con solución de hidrógeno-carbonato de sodio. El producto crudo se extrajo repetidamente de la mezcla de reacción con DCM. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron sobre sulfato de sodio y se filtraron y luego se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El producto se proporcionó por destilación al vacío (p. e. 40 °C a 1 mbar).

Esto dio 14,8 g de 2,3-dicloro-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropan-2-il)piridina en forma de un líquido incoloro.

MS: masa (m/z) = 315 $[M]^+$.

RMN de 1H (400 MHz, d1-cloroformo): 8.48 (s, 1H), 7.95 (s, 1H).

Ejemplo I-T3-161:



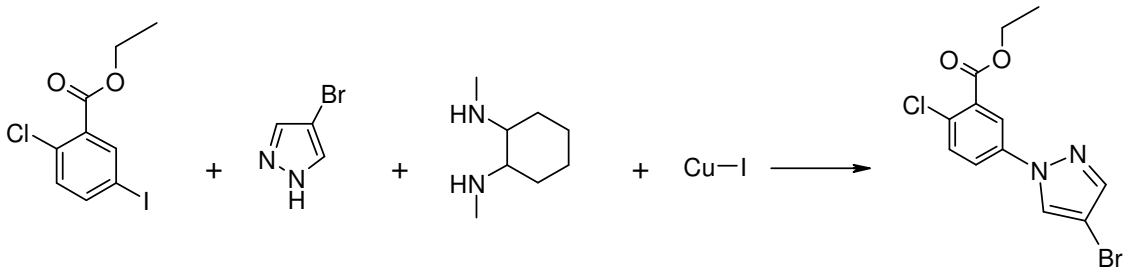
294 mg (0,5 mmol) de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[1-[2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]benzamida se cargaron inicialmente en una mezcla de 0,5 ml de triclorometano libre de etanol y 1,5 ml de 1,2-dimetoxietano y se añadieron 101 mg (0,25 mmol) de reactivo de Lawesson (2,4-disulfuro de 2,4-bis(4-metoxifenil)-1,3,2,4-ditiadifosfetano). La mezcla se calentó hasta 50 °C durante 4 horas. Después de ello, la mezcla se enfrió y el solvente se extrajo en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre acetato de etilo y solución acuosa saturada de hidrógeno-carbonato de sodio; la fase acuosa se reextrajo una vez con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo usando un cartucho con 40 g de gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 50:50 (v/v). Se obtuvieron 248 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[1-[2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]-6-(trifluorometil)fenil]pirazol-4-il]bencencarbotioamida (compuesto **I-T3-161**).

HPLC-MS[a)]: logP = 5.0, masa (m/z) = 604 [M+H]+.

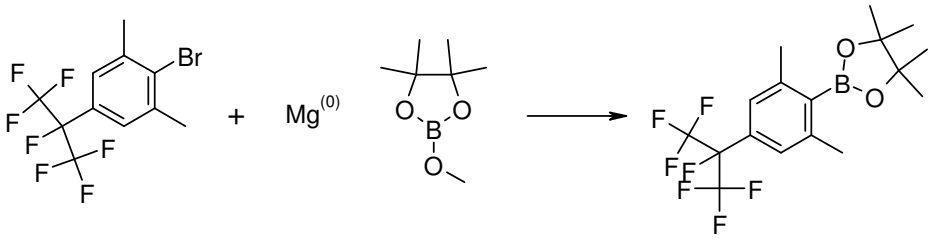
RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 8.62 (s, 1 H (amplio)), 8.14 (s, 1 H), 8.10 (s, 1H), 8.0 (s, 1 H), 7.95 (s, 1 H), 7.63 (d, J=2.2 Hz, 1 H), 7.57-7.60 (m, 1 H), 7.42 (d, J=8.4 Hz, 1 H), 3.02 (s, 3 H), 3.37-3.44 (m, 1 H), 0.92-0.95 (m, 2 H), 0.74-0.78 (m, 2 H).

Proceso de preparación I-T4

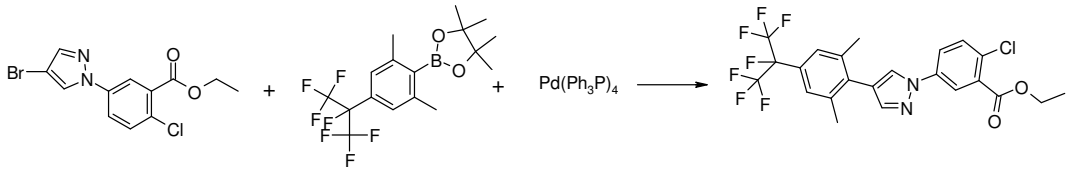
Ejemplo I-T4-1:



3,81 g (12,2 mmol) de 2-cloro-5-yodobenzoato de etilo se cargaron inicialmente en 37 ml de dimetilformamida y se añadieron 2,885 g (19,6 mmol) de 4-bromopirazol, 5.09 g (36,8 mmol) de carbonato de potasio recién molido, 0,349 g (2,4 mmol) de 1,2-bis(metilamino)ciclohexano (racémico, trans) y 0,234 g (1,22 mmol) de yoduro de cobre (I). La mezcla se desgasificó con argón y luego se calentó a reflujo durante una hora. Para la elaboración, la mezcla se enfrió, se vertió en 100 ml de agua y se extrajo dos veces con 100 ml cada vez de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron dos veces con 100 ml de agua y luego con solución saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, el residuo se cromatografió usando un cartucho de 120 g que contenía gel de sílice con un gradiente de ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 70:30 (v/v). Se obtuvieron 1,41 g de 5-(4-bromopirazol-1-il)-2-clorobenzoato de etilo.

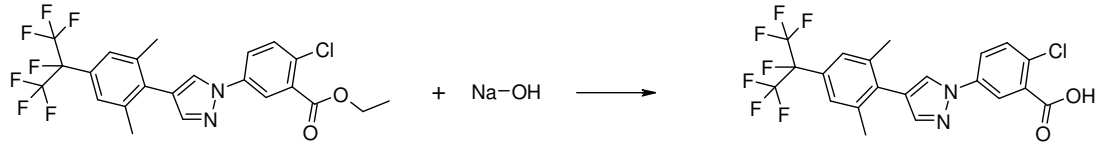


0,158 g (6,49 mg) de virutas de magnesio se cubrieron con 1,5 ml de tetrahidrofurano seco. Algunas gotas de una solución de 1,75 g (4,95 mmol) de 2-bromo-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno (preparado de acuerdo con el documento US2003/187233, p. 6) en 2,5 ml de tetrahidrofurano seco se añadieron. Para iniciar la reacción, una miga de yodo se añadió y la mezcla se calentó hasta aproximadamente 55 °C. Después de iniciada la reacción, la solución restante de 2-bromo-1,3-dimetil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno se añadió gota a gota a una temperatura de 55 °C. Después de finalizada la adición, la agitación se continuó a 55 °C durante otra hora, luego la mezcla se enfrió hasta 0 °C y una solución de 2-metoxi-4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolano en 2,5 ml de tetrahidrofurano seco se añadió gota a gota. A continuación, la mezcla se dejó llegar hasta temperatura ambiente. Para la elaboración, la mezcla se vertió en solución acuosa saturada de cloruro de amonio. Las fases se separaron, la fase acuosa se reextrajo con acetato de etilo, luego las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se destiló en un Kugelrohr a un vacío de 1 mbar y 220 °C. Se obtuvieron 1,85 g de 2-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolano.



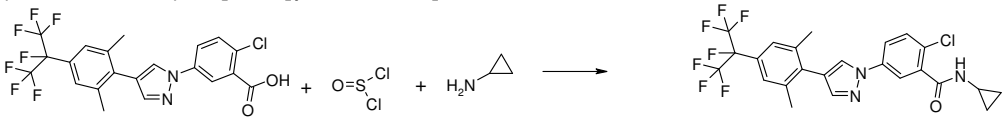
0,947 g (2,87 mmol) de 5-(4-bromopirazol-1-il)-2-clorobenzoato de etilo y 1,15 g (2,87 mmol) de 2-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolano se cargaron inicialmente en 62 ml de isopropanol y 8,7 ml (8,7 mmol) de solución desgasificada acuosa 1 molar de hidrógeno-carbonato de sodio se añadieron. La mezcla se desgasificó con argón y se añadieron 0,166 g (0,14 mmol) de tetrakis(trifenilfosfina)paladio(0) y la mezcla se calentó hasta reflujo durante la noche.

Para la elaboración, la mezcla se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida y el residuo se dividió entre agua y acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó; la fase acuosa se reextrajo con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron luego una vez con solución acuosa saturada de cloruro de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Como residuo, se obtuvieron 1,17 g de 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoato de etilo crudo.



1,76 g (3,36 mmol) de 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoato de etilo se cargaron inicialmente en 72 ml de metanol y se añadieron 4,03 ml (4,03 mmol) de solución 1 molar de hidróxido de sodio. La mezcla luego se calentó a reflujo durante 3 horas. Para la elaboración, la mezcla se concentró en un

evaporador rotativo a presión reducida y el residuo se extrajo con ácido clorhídrico diluido y se extrajo tres veces con acetato de etilo. Los extractos combinados se lavaron con solución saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron y dieron 1,36 g de ácido 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoico crudo.



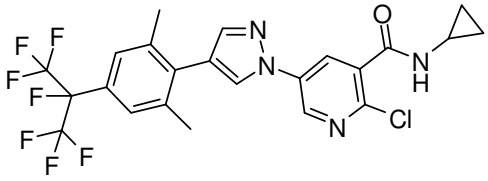
1,36 g (2,76 mmol) de ácido 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzoico crudo se disolvieron en 14 ml de tolueno seco, se añadió 1 ml (13,8 mmol) de cloruro de tionilo y luego la mezcla se calentó hasta 80 °C durante 2 horas. Después de ello, la mezcla se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida, se añadió 1 ml de tolueno seco y la mezcla se concentró otra vez. Se obtuvieron 1,4 g de cloruro de ácido crudo como residuo. 0,7 g del residuo se disolvió en 5 ml de diclorometano y se añadió gota a gota a una solución de 0,195 g (3.41 mmol) de ciclopropilamina en 2 ml de diclorometano a temperatura ambiente. La mezcla se agitó a temperatura ambiente durante otras 2 horas, luego se vertió en 20 ml de solución acuosa al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio. La fase orgánica se eliminó y se lavó con solución saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se purificó por dos corridas de cromatografía usando un cartucho con 15 g de gel de sílice con un gradiente de ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 50:50 (v/v). Se obtuvieron 91 mg (1,36 mmol) de N-ciclopropil-

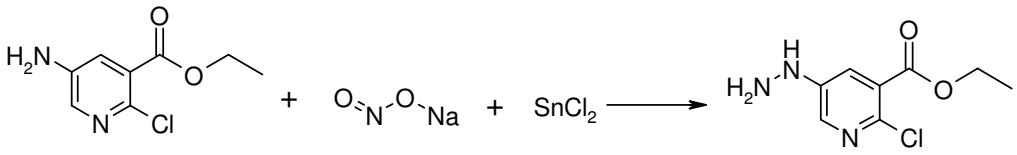
2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]benzamida (compuesto **I-T4-1**).

HPLC-MSa): logP = 4.74, masa (m/z) = 534 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d3-acetonitrilo): δ = (ppm) 8.17 (s, 1 H), 7.86 (s, 1 H), 7.84 (d, J1=2.7 Hz, 1 H), 7.69 (s, 1 H), 7.54(d, J1=8.8 Hz, 1H), 7.44 (s, 2 H), 6.97 (s (amplio), 1 H (N-H)), 2.83-2.87 (m, 1H), 2.25 (s, 6 H), 0.76-0.8 (m, 2 H), 0.58-0.62 (m, 2 H).

Ejemplo I-T4-3:

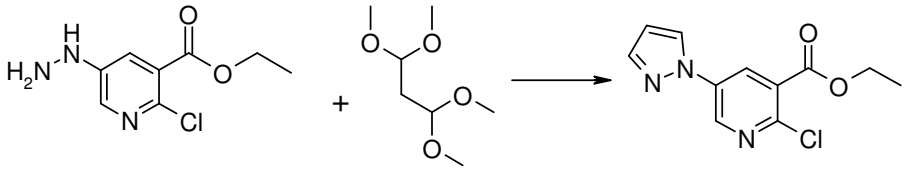




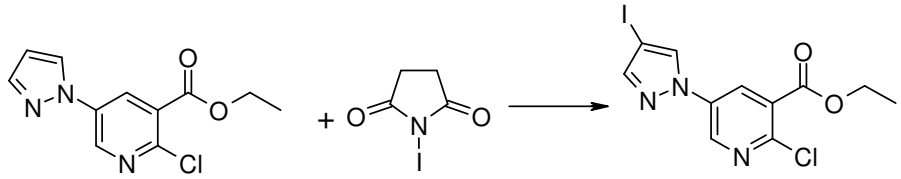
2 g (9,96 mmol) de 5-amino-2-cloronicotinato de etilo (asequible en comercios) se cargaron inicialmente en 8,6 ml de ácido clorhídrico acuoso al 33% y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 30 minutos. Después de ello, 7 ml de agua se añadieron y la mezcla se enfrió hasta 0 °C con un baño de hielo. A esta mezcla se añadió gota a gota una solución de 750 mg (10,8 mmol) de nitrito de sodio en 6,92 ml de agua en un lapso de 30 minutos. La temperatura se mantuvo a menos de +5 °C con un baño de hielo. La agitación se continuó a 0 °C durante 15 minutos.

Un segundo recipiente se cargó inicialmente con 5,77 g (25,5 mmol) de cloruro de estaño (II) dihidrato en 24 ml de ácido clorhídrico acuoso al

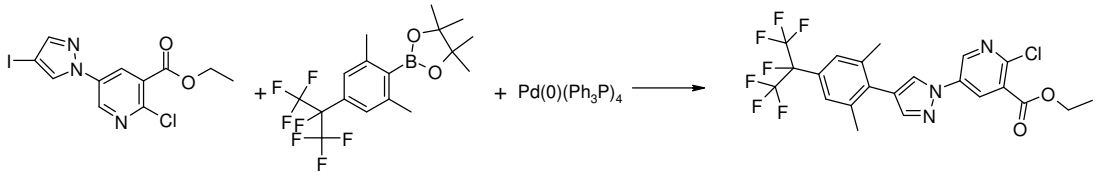
16% y la suspensión de sal de diazonio preparada con anterioridad se añadió lentamente gota a gota a 0 °C. La agitación se continuó a 0 °C durante 1 hora. Después de ello, se añadieron 50 ml de acetonitrilo y 40 ml de solución acuosa saturada de cloruro de sodio. Las fases formadas se separaron. La fase acuosa se extrajo dos veces con 50 ml cada vez de acetonitrilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo obtenido era de 10,7 g de 2-cloro-5-hidrazinonicotinato de etilo crudo.



10,7 g de 2-cloro-5-hidrazinonicotinato de etilo crudo se cargaron inicialmente en 50 ml de etanol, luego se añadieron 1,63 g (9,92 mmol) de 1,1,3,3-tetrametoxipropano y 487 mg de ácido sulfúrico al 96%. La mezcla posteriormente se calentó a reflujo durante 2 horas. La mayor parte del etanol se eliminó en un evaporador rotativo a presión reducida y el residuo se dividió entre solución acuosa saturada de hidrógeno-carbonato de sodio y acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó, se lavó con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó sobre sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se cromatografió usando un cartucho con 15 g de gel de sílice y un gradiente procediendo a partir de ciclohexano puro a 50:50 (v/v) ciclohexano/acetato de etilo. Se obtuvieron 396 mg de 2-cloro-5-(pirazol-1-il)nicotinato de etilo.

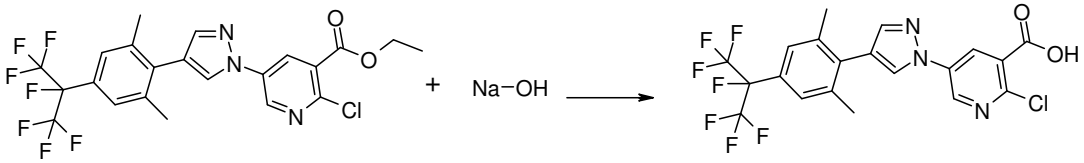


396 mg (1,57 mmol) de 2-cloro-5-(pirazol-1-il)-nicotinato de etilo se cargaron inicialmente en 10 ml de acetonitrilo y se añadieron 1,062 g (4,72 mmol) de N-yodosuccinimida. Posteriormente, la mezcla se calentó a reflujo bajo argón durante 3 horas. La mezcla se enfrió un poco y el solvente se eliminó en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre agua y acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó, se lavó primero con solución acuosa saturada de hidrógeno-sulfito de sodio, luego con solución acuosa saturada de hidrógeno-carbonato de sodio y por último con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se cromatografió usando un cartucho con 15 g de gel de sílice y un gradiente procediendo a partir de ciclohexano puro a 50:50 (v/v) ciclohexano/acetato de etilo.

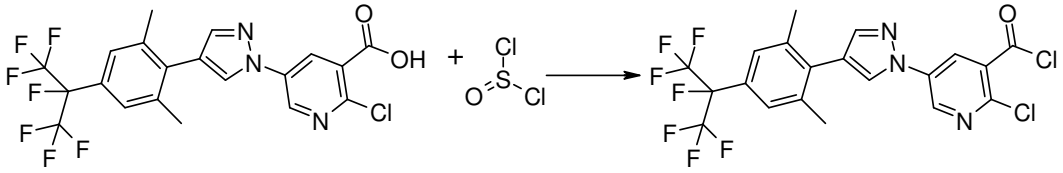


401 mg (1,06 mmol) de 2-cloro-5-(4-yodopirazol-1-il)piridin-3-carboxilato de etilo y 425 mg (1,06 mmol) de 2-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolano se cargaron inicialmente en 23 ml de isopropanol y 3,24 ml (3,24 mmol) de solución desgasificada acuosa 1 molar de hidrógeno-carbonato de sodio y 61 mg (0,05 mmol) de tetrakis(trifenilfosfina)paladio(0) se añadieron. La mezcla se desgasificó una vez más con argón y se calentó a reflujo durante la

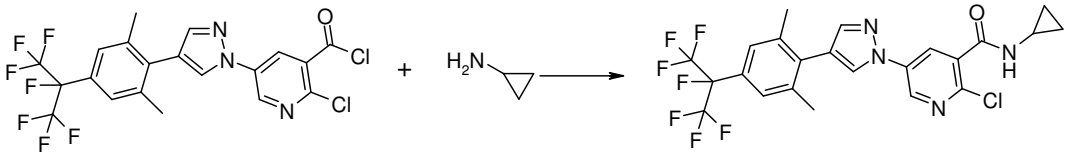
noche. Después de ello, la mezcla se enfrió y los constituyentes volátiles se extrajeron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre agua y acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó, se lavó una vez con solución acuosa saturada de cloruro de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Se obtuvieron 415 mg de 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]piridin-3-carboxilato de etilo crudo.



416 mg (0,79 mmol) de 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]piridin-3-carboxilato de etilo crudo se disolvieron en 16,9 ml de metanol y se añadieron 0,952 ml (0,95 mmol) de solución 1 M de hidróxido de sodio. La mezcla se calentó a reflujo durante 6 horas, luego se enfrió y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre acetato de etilo y ácido clorhídrico diluido. La fase acuosa se reextrajo dos veces con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Se obtuvieron 380 mg de ácido 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]piridin-3-carboxílico crudo.



380 mg (0,76 mmol) de ácido 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]piridin-3-carboxílico crudo se disolvieron en tolueno y se añadieron 456 mg (3,83 mmol) de cloruro de tionilo. La mezcla se calentó hasta 80 °C durante 2 horas y luego se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Se obtuvieron 400 mg de cloruro de 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]piridin-3-carbonil crudo.



138 mg (0,26 mmol) de cloruro de 2-cloro-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]piridin-3-carbonilo se disolvieron en 1 ml de diclorometano y se añadieron gota a gota a una solución de 38 mg de ciclopropilamina en 1 ml de diclorometano a temperatura ambiente. La mezcla se agitó a temperatura ambiente durante otras 2 horas. A continuación, la mezcla se lavó con solución al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio y luego con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo usando un cartucho con 15 g de gel de sílice con un gradiente en ciclohexano/acetato de etilo de 90:10 a 50:50 (v/v). Se obtuvieron 30 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[4-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirazol-1-il]piridin-3-carboxamida.

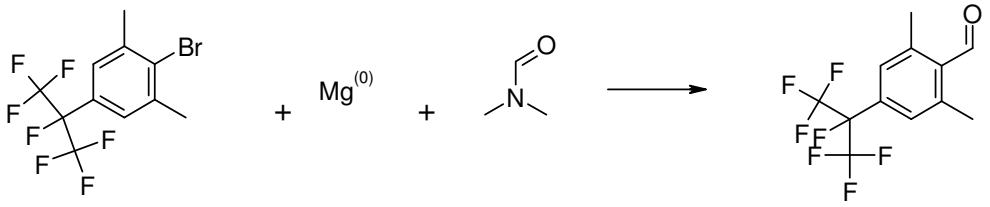
HPLC-MSa): logP = 4.42, masa (m/z) = 534 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d3-acetonitrilo): δ (ppm) = 8.92 (d, J = 2.8 Hz, 1 H), 8.22 (d, J1=2.8 Hz, 1 H), 8.20 (s, 1 H), 7.75(s, 1H), 7.44 (s, 2 H), 5.1 (s

(amplio), 1 H (N-H)), 2.84-2.88 (m, 1H), 2.25 (s, 6 H), 0.78-0.81 (m, 2 H), 0.59-0.63 (m, 2 H).

Proceso de preparación I-T22

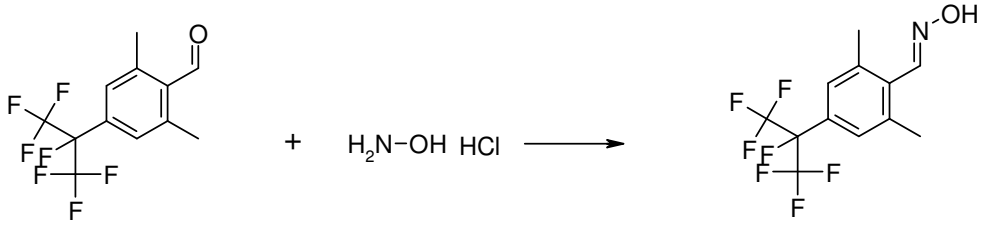
Ejemplo I-T22-1:



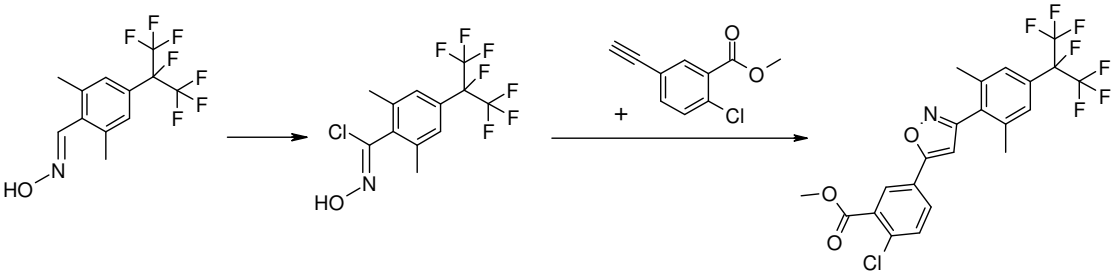
La preparación de 2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilbromobenceno se describe en US2003/187233, p. 6 [0080].

En un recipiente de tres bocas de 25 ml, 158 mg (6,5 mg de átomo) de virutas de magnesio se cubrieron con tetrahidrofurano seco (THF). A continuación, algunas gotas de una solución de 1,75 g (4,95 mmol) de 2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilbromobenceno en 2,5 ml de THF seco se añadieron. Para iniciar la reacción, una miga de yodo se añadió y la mezcla se calentó hasta aproximadamente 60 °C. Después de iniciada la reacción, el resto de la solución del 2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilbromobenceno se añadió gota a gota a aproximadamente 60 °C. Después de finalizada la adición, la agitación se continuó a 60 °C durante otra hora, luego la mezcla se enfrió hasta 0 °C y una solución de 1,09 g (14,8 mmol) de dimetilformamida en 2,5 ml de THF seco se añadió gota a gota. A continuación, la mezcla se dejó llegar hasta temperatura ambiente. Para la elaboración, exceso de solución acuosa saturada de cloruro de amonio se añadió, las fases se separaron y la fase acuosa se reextrajo con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución saturada de cloruro de sodio, se secaron con

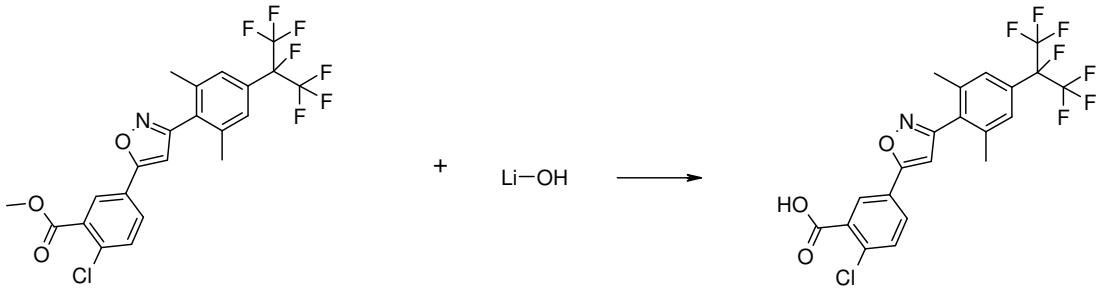
sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Como residuo, quedaron 1,3 g de 2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilbenzaldehído crudo (pureza de aproximadamente el 80%), que se usaron sin ulterior purificación.



1,3 g (aproximadamente 3,44 mmol) de 2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilbenzaldehído crudo se disolvieron en 26 ml de metanol, 361 mg (4,3 mmol) de hidrógeno-carbonato de sodio se añadieron y la mezcla se enfrió hasta 0 °C. Después de ello, se añadieron 1,2 g (17,2 mmol) de cloruro de hidroxilamonio y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Para la elaboración, la mezcla se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida y el residuo se extrajo en 100 ml de acetato de etilo. Los constituyentes no disueltos se filtraron y el filtrado se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo luego se purificó por cromatografía usando un cartucho de 40 g con contenido de sílice y un gradiente procediendo a partir de ciclohexano puro a 70:30 (v/v) de ciclohexano/acetato de etilo. Se obtuvieron 0,5 g de 2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilbenzaldehído oxima.

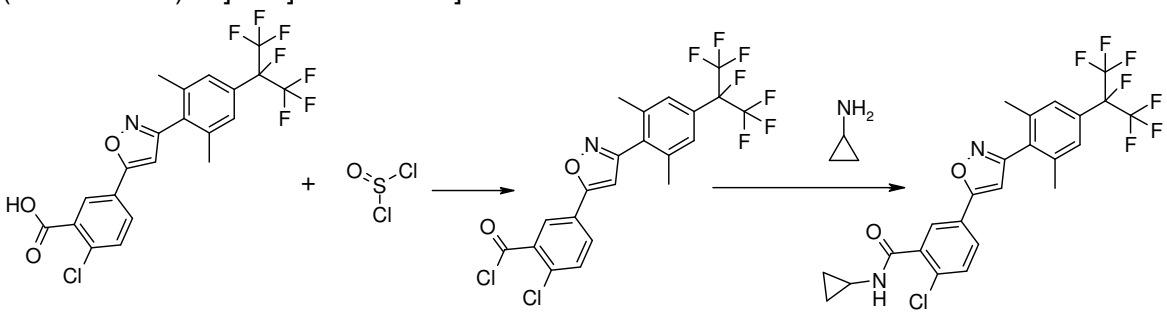


505 mg (1,59 mmol) de 2,6-dimetil-4-heptafluoroisopropilbenzaldehído oxima se cargaron inicialmente en 3,5 ml de dimetilformamida (DMF) y se añadieron 234 mg (1,75 mmol) de N-clorosuccinimida. La mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 3,5 horas. A continuación, la mezcla se enfrió hasta 0 °C y una solución de 310 mg (1,59 mmol) de 2-cloro-5-etinilbenzoato de metilo (preparado de acuerdo con el documento WO 2012/107434, p. 103) en 1,5 ml de DMF se añadió gota a gota, seguido por 355 mg (3,5 mmol) de trietilamina. La mezcla de reacción luego se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Para la elaboración, la mezcla se vertió en agua y se extrajo dos veces con diclorometano y los extractos combinados se lavaron con agua, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la purificación se llevó a cabo usando un cartucho de 40 g que contenía gel de sílice y un gradiente procediendo a partir de ciclohexano puro a 80:20 (v/v) de ciclohexano/acetato de etilo. Se obtuvieron 488 mg de 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-5-il]benzoato de metilo.



0,8 g (1,56 mmol) de 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-5-il]benzoato de metilo se cargaron inicialmente en una mezcla de 18 ml de dioxano y se añadieron 6,5 ml de agua, 86 mg (2,04 mmol) de hidróxido de litio monohidrato y la mezcla se

agitó a temperatura ambiente durante la noche. Para la elaboración, la mezcla se concentró a presión reducida y el residuo se dividió entre una mezcla de ácido clorhídrico diluido y diclorometano. La fase orgánica se eliminó; la fase acuosa se extrajo primero con diclorometano, luego con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Se obtuvieron 680 mg de ácido 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-5-il]benzoico.



680 mg (1,37 mmol) de ácido 2-cloro-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-5-il]benzoico se disolvieron en 7 ml de tolueno y se añadieron 0,5 ml (6,89 mmol) de cloruro de tionilo. La mezcla se calentó hasta 80 °C durante dos horas y luego se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Los 200 mg (0,38 mmol) del cloruro de ácido crudo así obtenido se disolvieron en 1 ml de diclorometano y se añadieron gota a gota a una solución de 56 mg (0,97 mmol) de ciclopropilamina en 0,95 ml de diclorometano a temperatura ambiente. La mezcla luego se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Para la elaboración, la mezcla se vertió en solución acuosa al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio y la fase orgánica se eliminó, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión

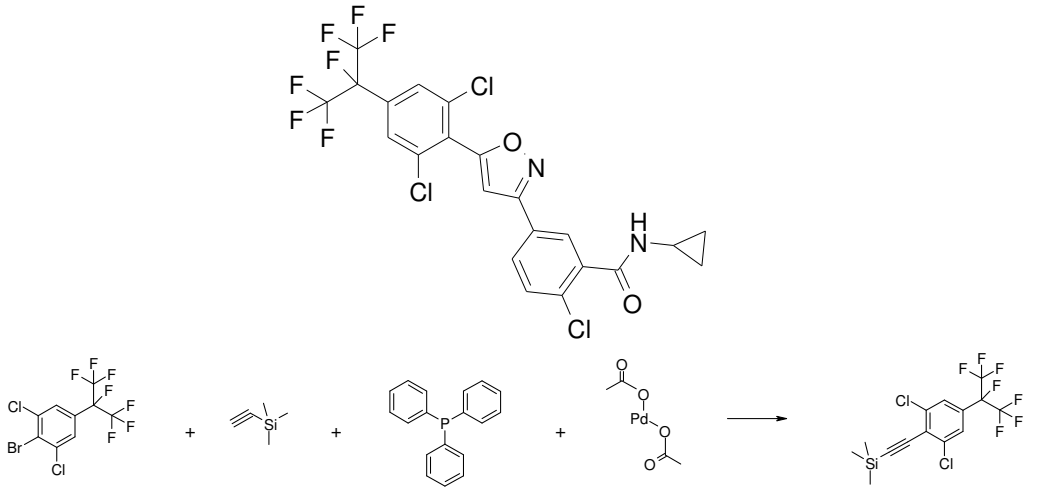
reducida. Para purificar, el residuo se cromatografió usando un cartucho con 15 g de gel de sílice y un gradiente de ciclohexano puro a 80:20 (v/v) de ciclohexano/acetato de etilo. Se obtuvieron 165 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[3-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-5-il]benzamida (compuesto **I-T22-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4.75, masa (m/z) = 535 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 7.93 (d, J=2.2 Hz, 1 H), 7.89 (dd, J1=8.4 Hz, J2=2.2 Hz, 1H), 7.6 (d, J=8.4 Hz, 1H), 7.49 (s, 2 H), 7.03 (s (amplio), 1 H (N-H)), 6.86 (s, 1 H), 2.83-2.88 (m, 1H), 0.75-0.79 (m, 2 H), 0.59-0.62 (m, 2 H).

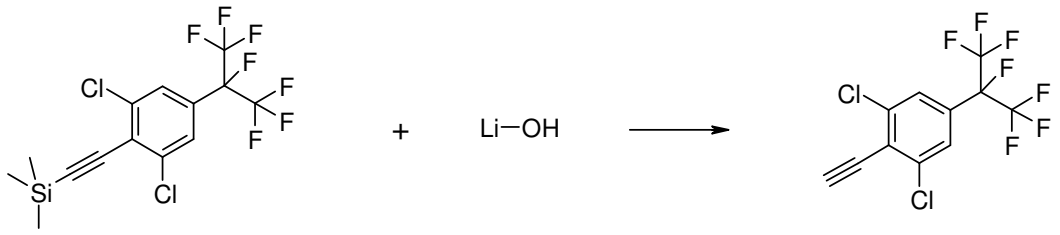
Proceso de preparación I-T23

Ejemplo I-T23-1:



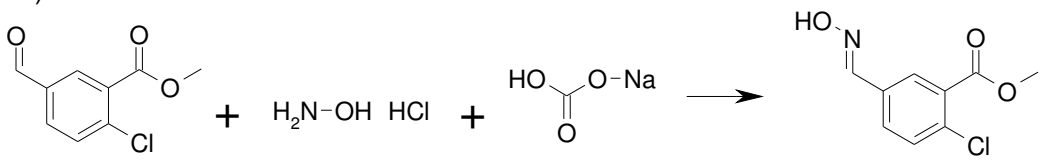
3 g (7,61 mmol) de 2-bromo-1,3-dicloro-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno (para la preparación ver el documento EP 1 253 128, página 10), 1.21 g (12,3 mmol) de etiniltrimetilsilano, 86 mg (0,38 mmol) de acetato de paladio (II) y 260 mg (1,0 mmol) de trifenilfosfina se cargaron inicialmente en 20 ml de trietilamina seca y se calentó a reflujo. Después de concentrar el volumen en un evaporador rotativo a 30 °C, el

residuo se mezcló con 20 ml de solución saturada de hidrógeno-carbonato de sodio y se extrajo tres veces con diclorometano. Los extractos combinados se lavaron con solución acuosa al 5% de NaH2PO4 y luego con solución saturada de cloruro de sodio. Después de secar la solución con sulfato de sodio y concentrar el volumen en un evaporador rotativo a 30 °C, la purificación se llevó a cabo por medio de cromatografía en gel de sílice con ciclohexano como eluyente. Rendimiento: 1,4 g de 2-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]etiniltrimetilsilano en una pureza de aproximadamente el 50% (superficie de LC-MS).

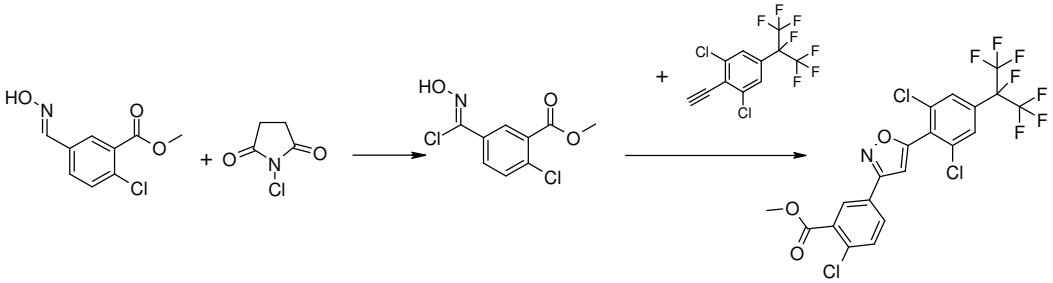


1,4 g (3,4 mmol) de 2-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]etiniltrimetilsilano se disolvieron en 7 ml de tetrahidrofurano y se añadieron una mezcla de 7 ml de metanol y 214 mg (5,1 mmol) de hidróxido de litio monohidrato a temperatura ambiente. La solución de reacción se concentró en un evaporador rotativo y el residuo se extrajo con una mezcla de diclorometano y agua. La fase orgánica se eliminó, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida y dio 880 mg de aproximadamente 50% de 1,3-dicloro-2-etinil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno.

La preparación de 4-cloro-3-carbometoxibenzaldehído ya se ha descrito en la literatura (ver, por ejemplo, el documento WO 2010/011584, p. 19-20).

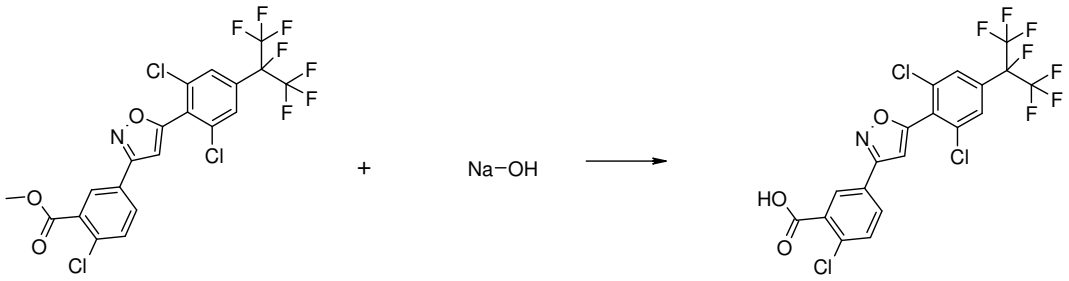


4,1 g (20,6 mmol) de 4-cloro-3-carbometoxibenzaldehído se disolvieron en 82 ml de metanol, se añadieron 1,734 mg (20,6 mmol) de hidrógeno-carbonato de sodio y la mezcla se enfrió hasta 0 °C. A continuación, se añadieron 5,738 g (82,5 mmol) de clorhidrato de hidroxilamina y la mezcla se agitó. Para la elaboración, la mezcla se concentró en un evaporador rotativo y el residuo se extrajo en 100 ml de acetato de etilo. Los sólidos se filtraron y el filtrado se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, el residuo se cromatografió con gel de sílice por medio de un gradiente en 9:1 a 7:3 (v/v) de ciclohexano/acetato de etilo y dio 2,68 g de 2-cloro-5-[(E)-hidroxiiminometil]benzoato de etilo.

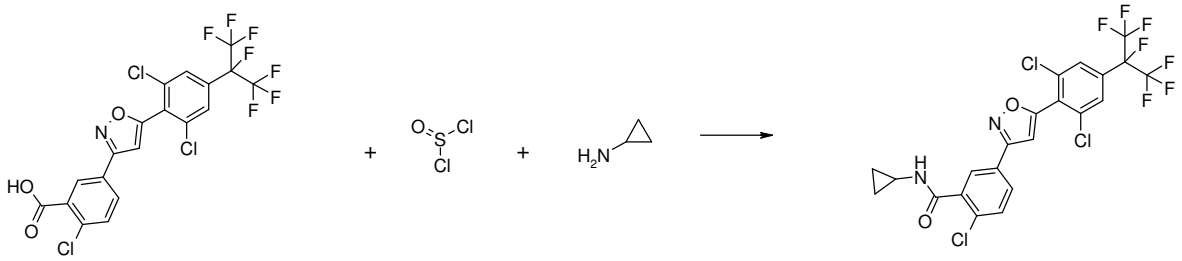


277 mg (1,29 mmol) de 2-cloro-5-[(E)-hidroxiiminometil]benzoato de etilo se cargaron inicialmente en 4,6 ml de dimetilformamida, 381 mg (2.84 mmol) de N-clorosuccinimida se añadieron y la mezcla se agitó a temperatura ambiente. La mezcla luego se enfrió hasta 0 °C con un baño de hielo y una solución de 880 mg (aproximadamente 50% de potencia,

1,29 mmol) de 1,3-dicloro-2-etinil-5-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]benceno en 1,5 ml de dimetilformamida se añadió gota a gota, seguido de 289 mg (2,85 mmol) de trietilamina. La mezcla se agitó a temperatura ambiente. Para la elaboración, la reacción se diluyó con agua y se extrajo dos veces con diclorometano. Los extractos combinados se lavaron con agua, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo. El residuo se purificó por dos corridas de cromatografía en sílice con un gradiente procediendo a partir de ciclohexano puro hasta 80:20 (v/v) de ciclohexano/acetato de etilo como eluyente y dio 410 mg de 2-cloro-5-[5-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-3-il]benzoato de metilo.



410 mg (074 mmol) de 2-cloro-5-[5-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-3-il]benzoato de metilo se cargaron inicialmente en 21 ml de metanol, se añadieron 0,74 ml (0.74 mmol) de solución 1 M de hidróxido de sodio y la mezcla se agitó a reflujo. Posteriormente, el metanol se eliminó en un evaporador rotativo. El residuo se mezcló con ácido clorhídrico diluido y se extrajo tres veces con acetato de etilo. Los extractos combinados se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Se obtuvieron 405 mg de ácido 2-cloro-5-[5-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-3-il]benzoico como residuo.

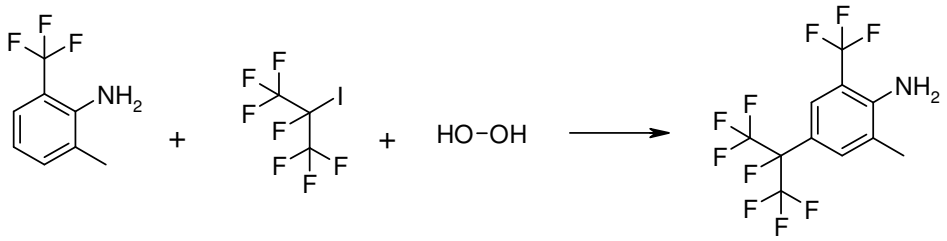


125 mg (0,23 mmol) de ácido 2-cloro-5-[5-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-3-il]benzoico se disolvieron en 1,1 ml de tolueno seco y se añadieron 0,14 g (1,16 mmol) de cloruro de tionilo. La mezcla se calentó hasta 80 °C y luego se concentró en un evaporador rotativo. El residuo se disolvió en 0,25 ml de diclorometano y se añadió gota a gota a una solución de 33 mg (0,58 mmol) de ciclopropilamina en 0,75 ml de diclorometano a 0 °C y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 2 horas. Para la elaboración, se añadió solución acuosa al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio y luego la fase orgánica se eliminó. La fase orgánica se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo. El residuo se purificó por cromatografía con gel de sílice y 70:30 (v/v) ciclohexano/acetato de etilo como eluyente. Se obtuvieron 49 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[5-[2,6-dicloro-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]isoxazol-3-il]benzamida (compuesto **I-T23-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4.96, masa (m/z) = 575 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ = 7.96 (s, 1 H), 7.94-7.96 (dd, J1=8.4 Hz, J2=2.2 Hz, 1H), 7.86 (s, 2 H), 7.6 (d, J1=7.6 Hz, J2=1.2, 1 H), 7.15 (s, 1 H), 6.9 (s (amplio), 1 H (N-H)), 3.97 (s, 3 H), 2.83-2.88 (m, 1H), 0.75-0.79 (m, 2 H), 0.58-0.62 (m, 2 H).

Proceso 1 Ejemplo 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina

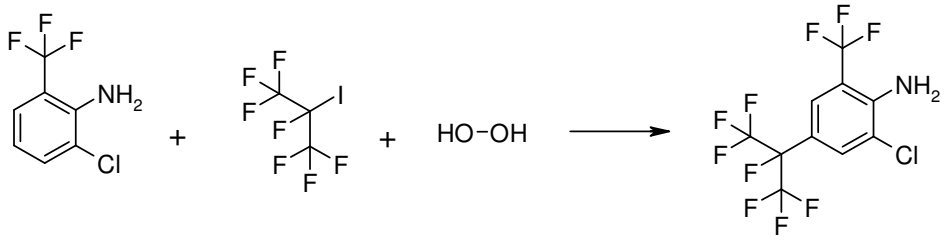


D-1a

Un recipiente de tres bocas se cargó inicialmente con 17,48 g (100 mmol) de 2-metil-6-trifluorometilanilina en 498 ml de dimetilsulfóxido y luego se añadieron 44,3 g (21,095 ml, 150 mmol) de 2-yodoheptafluoropropano, 29,9 ml (29,9 mmol) de solución 1 molar de sulfato de hierro (II) en agua y 5,43 ml (104 mmol) de ácido sulfúrico al 96%. La mezcla luego se desgasificó con argón y luego se usó una bomba de jeringa para añadir 20,4 ml de solución acuosa al 30% de peróxido de hidrógeno gota a gota en un lapso de 15 minutos. La temperatura se elevó hasta 54 °C. Hacia la finalización de la adición gota a gota, la mezcla se calentó brevemente hasta 60 °C. La mezcla se agitó durante otros 20 minutos sin calentamiento, en el curso del cual la temperatura cayó hasta 36 °C. Para la elaboración, la mezcla se vertió en solución acuosa saturada de hidrógeno-carbonato de sodio y el producto se extrajo con acetato de etilo. Los extractos combinados se lavaron primero con agua y luego con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo en dos porciones a través de una columna con 120 g de gel de sílice y un gradiente de ciclohexano

puro a 95:5 ciclohexano/acetato de etilo (v/v). Se obtuvieron 18,9 g de 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina.

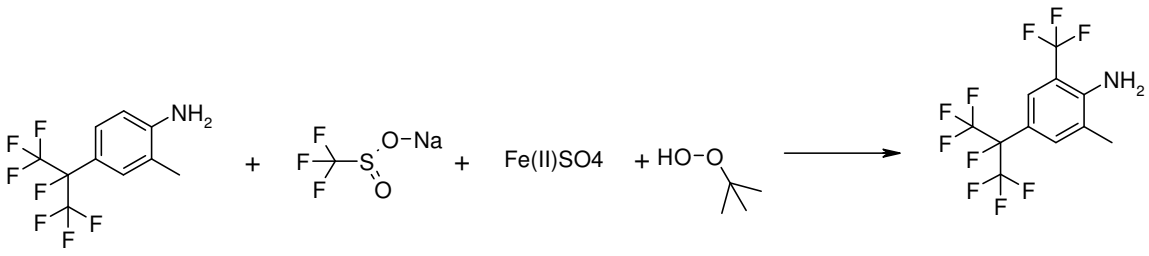
Análogamente, también se obtuvieron 2-cloro-4-heptafluoroisopropil-6-trifluorometilanilina procediendo a partir de 2-cloro-6-trifluorometilanilina y 2-yodoheptafluoropropano:



Un recipiente de tres bocas se cargó inicialmente con 30 g (0,153 mol) de 2-cloro-6-trifluorometilanilina (asequible en comercios) en 765 ml de dimetilsulfóxido (DMSO) y luego se añadieron 68,1 g (0,23 mol) de 2-yodoheptafluoropropano, 46 ml de una solución acuosa 1 molar de sulfato de hierro (II) y 15,4 g de ácido sulfúrico al 98%. La mezcla se desgasificó con argón y luego se usó una bomba de jeringa 34,8 g de solución acuosa al 30% de peróxido de hidrógeno gota a gota en un lapso de 30 minutos. En el curso de ello, la temperatura se elevó hasta 70 °C. La mezcla se agitó durante otros 20 minutos, en el curso del cual la temperatura cayó a 30 °C. La mezcla de reacción luego se vertió en solución acuosa saturada de hidrógeno-carbonato de sodio y se extrajo con acetato de etilo. Los extractos combinados se lavaron primero con agua, luego con solución acuosa saturada de bisulfito y solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo usando un cartucho con 330 g de gel de sílice y un gradiente procediendo

a partir de ciclohexano puro a 90:10 (v/v) ciclohexano/acetato de etilo. Se obtuvieron 46,1 g de 2-cloro-4-heptafluoroisopropil-6-trifluorometilanilina.

Proceso 2 Ejemplo 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina



D-1a

En un recipiente de tres bocas de 1000 ml, se añadieron 25 g (91 mmol) de 4-heptafluoroisopropil-2-metilanilina a una mezcla de 363,4 ml de agua y 181,7 ml de acetonitrilo. A continuación, se añadieron 27,3 ml (27,3 mmol) de solución acuosa 1 molar de sulfato de hierro (II) y 31,19 g (200 mmol) de trifluorometilsulfinato de sodio. La mezcla se cubrió con argón y luego se dosificaron 35,1 g (273 mmol) de una solución acuosa al 70% de hidroperóxido de ter-butilo con una bomba de jeringa en un lapso de 4,5 horas sin enfriamiento. La temperatura se elevó hasta 34 °C. Después de finalizada la adición, la agitación se continuó durante otra hora. Para la elaboración, la mezcla se vertió en 425 ml de solución acuosa saturada de hidrógeno-sulfito de sodio y se agitó durante 15 minutos. A continuación, se añadieron 425 ml de solución saturada de hidrógeno-carbonato de sodio y la mezcla se extrajo tres veces con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron primero con agua y luego con solución acuosa saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. El

producto crudo se cromatografió en dos porciones usando un cartucho con 120 g de gel de sílice y un gradiente de ciclohexano/acetato de etilo de 95:5 a 85:15 (v/v). Se obtuvieron 19,5 g de 4-heptafluoroisopropil-2-metil-6-trifluorometilanilina.

HPLC-MS[a)]: logP = 4,67

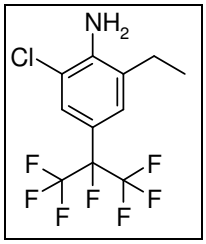
GC/MS: masa (m/z) = 343, tiempo de retención: 2,98 min, índice de Kovats: 1089

(Agilent 6890 GC, HP5979 MSD, 10m DB-1, iD=0.18mm, película =0.4µm, Iny.:250 °C, flujo const.: 1.6mm/min He, Det.:MSD:280 °C, FID: 320 °C, horno: 50 °C(1 min) - 40 °C/min - 320 °C (3.25 min))

RMN de ^{1}H (AV400, 400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 7.50 (s, 1 H), 7.48 (s, 1H), 5.03 (s, 2H, amplio), 2.23 (s, 3 H).

Preparación del material de partida 2-cloro-6-etil-4-heptafluoroisopropilanilina

El material de partida 2-cloro-6-etil-4-heptafluoroisopropilanilina de la estructura (**D-1b**) aún no se ha descrito en la literatura. Se pueden preparar por medio de procedimientos de cloración conocidos a partir de 2-etil-4-heptafluoroisopropilanilina, que se conoce de la literatura (por ejemplo, US2002/198399).



D-1b

4,9 g (16,9 mmol) de 2-etil-4-heptafluoroisopropilanilina (preparada de acuerdo con US2002/198399) se cargaron inicialmente en 100 ml de cloroformo, la mezcla se calentó hasta 45-50 °C y luego se añadieron 2,18 ml (26,7 mmol) de cloruro de sulfurilo, disuelto en 400 ml de cloroformo, lentamente gota a gota. La mezcla se agitó a 50 °C durante la noche, luego se añadió 0,34 ml (4,2 mmol) de cloruro de sulfurilo disuelto en 2 ml de cloroformo gota a gota y la mezcla se agitó a 50 °C durante a otras 3 horas. Después de ello, la mezcla se enfrió y el solvente se extrajo en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se extrajo en diclorometano, se lavó primero con hidrógeno-sulfito de sodio y luego con solución diluida de hidróxido de sodio y se secó con sulfato de sodio y el solvente se destiló en un evaporador rotativo a presión reducida. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo usando un cartucho con 120 g de gel de sílice con un gradiente procediendo a partir de ciclohexano puro a 90:10 ciclohexano/acetato de etilo (v/v). Se obtuvieron 4,25 g de 2-cloro-6-etil-4-heptafluoroisopropilanilina.

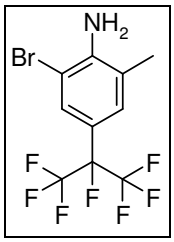
HPLC-MS[a)]: logP = 4.67, masa (m/z) = 324 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (AV400, 400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 7.84 (s, 1 H), 7.82 (s, 1H), 7.53-7.56 (s, 2H, amplio), 2.37 (q, J = 7.6 Hz, 2 H), 1.06 (t, J = 7.6 Hz, 3 H).

Preparación del material de partida 2-bromo-6-metil-4-heptafluoroisopropilanilina

El material de partida 2-bromo-6-metil-4-heptafluoroisopropilanilina de la estructura (**D-1c**) aún no se ha descrito en la literatura. Se puede preparar por medio procedimientos de bromación conocidos (por ejemplo,

EP2319830, p. 327) a partir de 2-metil-4-heptafluoroisopropilanilina, que se conoce de la literatura (por ejemplo, US2004/92762).



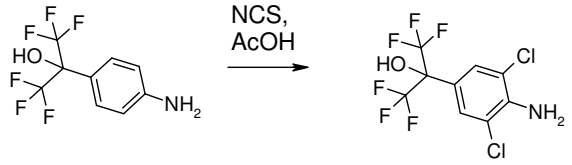
D-1c

3,4 g (12,356 mmol) de 2-metil-4-heptafluoroisopropilanilina se disolvieron en 27 ml de dimetilformamida, luego se añadieron 2,44 g (13,6 mmol) de N-bromosuccinimida y la mezcla se agitó a 60 °C durante 1 hora. La mezcla se enfrió, se mezcló con agua y se extrajo tres veces con 15 ml cada vez de n-hexano. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con agua, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron en un evaporador rotativo a presión reducida. La cromatografía usando un cartucho de 120 g que contenía gel de sílice con un gradiente comenzando con ciclohexano puro a 90:10 ciclohexano/acetato de etilo (v/v) dio 2,44 g de 2-bromo-6-etil-4-heptafluoroisopropilanilina.

HPLC-MS[a)]: logP = 4.38, masa (m/z) = 354 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (AV400, 400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ (ppm) = 7.51 (s, 1 H), 7.23 (s, 1H), 4.86 (s, 2H, amplio), 2.23 (s, 3 H).

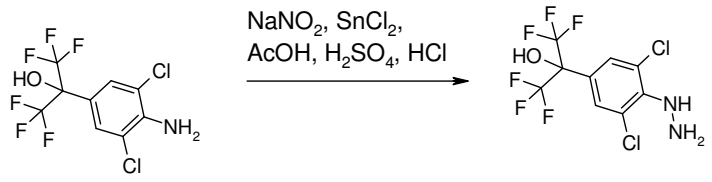
Preparación del compuesto de partida 2-(3,5-dicloro-4-hidrazinofenil)-1.1,1.3.3,3-hexafluoropropan-2-ol



A una solución de 2-(4-aminofenil)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol (2,50 g, 9,64 mmol) (preparación, por ejemplo, W. A. Sheppard, *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, *87*, 2410–2420) en ácido acético glacial (40 ml) se añadió a temperatura ambiente *N*-clorosuccinimida (2,71 g, 20,2 mmol). La mezcla se agitó a 75 °C durante 3 h y luego a temperatura ambiente durante 14 h. Posteriormente, la mezcla se añadió a agua y se extrajo con EtOAc. La fase orgánica se lavó con agua y solución acuosa saturada de $NaHCO_3$ y se secó sobre sulfato de magnesio. Después de remover el disolvente, el residuo se extrajo en MTBE y los sólidos se filtraron. El filtrado se concentró a presión reducida y el producto crudo se purificó por medio de cromatografía en columna en SiO_2 (gradiente *n*-hexano/EtOAc). Se obtuvieron 2,89 g (91%) de 2-(4-amino-3,5-diclorofenil)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol.

HPLC-MS[a)]: logP = 3.04, masa (m/z) = 328 $[M+H]^+$.

RMN de ^1H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ = 5.13 (br s, 2 H), 6.02 (br s, 1 H), 7.51 (s, 2 H).



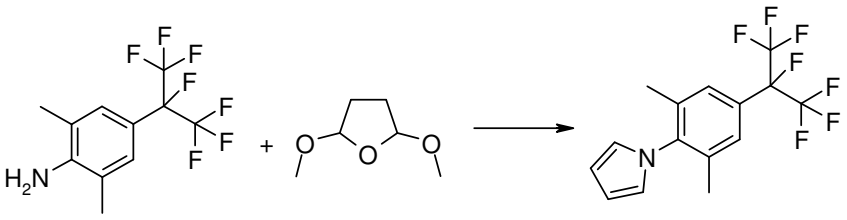
A una solución, calentada hasta 55 °C, de 2-(4-amino-3,5-dichlorfenil)-1,1,1,3,3,3-hexafluoro-propan-2-ol (1,88 g, 5,73 mmol) en 5 ml de ácido

acético glacial se añadió gota a gota una solución de nitrito de sodio (455 mg, 6,59 mmol) en 2,5 ml de ácido sulfúrico y la mezcla se agitó a esta temperatura durante otra hora. Posteriormente, la mezcla se enfrió hasta 0 °C y una solución de cloruro de estaño (II) (3,37 g, 17,7 mmol) en HCl conc. (10 ml) se añadió gota a gota. La mezcla se agitó a 0 °C durante otra hora, luego se añadió a hielo, se alcalinizó con solución de hidróxido de sodio y se extrajo con EtOAc. La fase orgánica se lavó con solución saturada de cloruro de sodio y se secó sobre sulfato de magnesio y el solvente se eliminó a presión reducida. Se obtuvieron 1,41 g (90% puro, 64% del teórico) de 2-(3,5-dicloro-4-hidrazinofenil)-1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol.

HPLC-MS[a)]: logP = 1.92, masa (m/z) = 343 $[M+H]^+$.

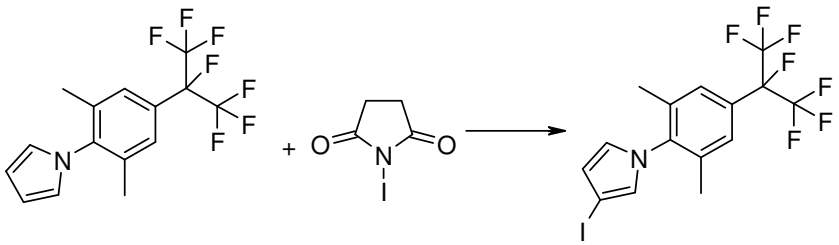
RMN de ^{1}H (600 MHz, d_3-acetonitrilo): δ = 4.14 (br s, 2 H), 5.90 (br s, 1 H), 6.50 (br s, 1 H), 7.58 (s, 2 H).

Ejemplos I-T46-1



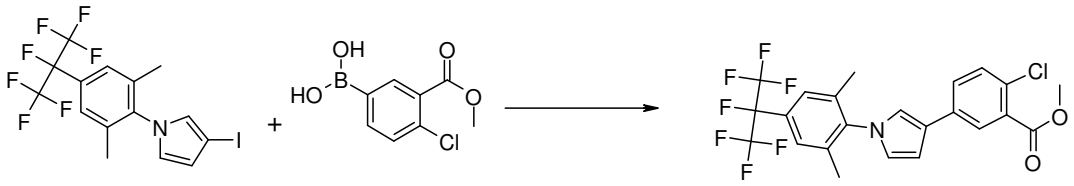
10 g (34,6 mmol) de 2,6-Dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]anilina se cargaron inicialmente en 60 ml de ácido acético glacial y se añadieron 5,02 g (38,04 mmol) de 2,6-dimetoxi-tetrahidrofurano. La solución resultante se calentó a 120 °C durante dos horas. Posteriormente, se enfrió un poco y los constituyentes volátiles se

evaporaron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se agitó con agua y los sólidos se filtraron con succión. La torta filtrante se disolvió luego en diclorometano y la solución se secó con sulfato de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Se obtuvieron 10,38 g de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol.

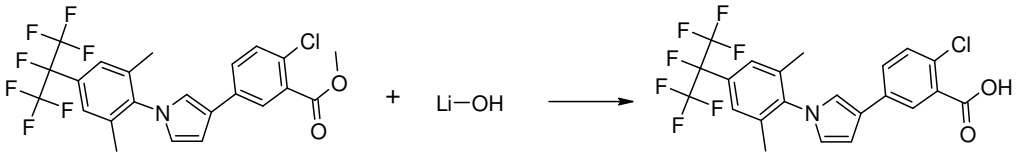


1,5 g (4,293 mmol) de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-pirrol se disolvieron en 60 ml de n-hexano y se añadieron 966 mg (4,3 mmol) de N-yodosuccinimida. Posteriormente, la mezcla se dejó llegar hasta temperatura ambiente y se agitó a temperatura ambiente durante 6 días. A continuación, se añadieron otros 242 mg (1,1 mmol) de N-yodosuccinimida y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Posteriormente, exceso de solución acuosa de hidrógeno-sulfito de sodio y se añadió un poco de acetato de etilo. La fase orgánica se eliminó y primero se lavó dos veces con solución acuosa de hidrógeno-sulfito de sodio, luego con solución saturada de cloruro de sodio, se secó con sulfato de sodio y se concentró. Para purificar, la cromatografía se llevó a cabo usando un cartucho con 120 g de gel de sílice y un gradiente procediendo a partir de ciclohexano

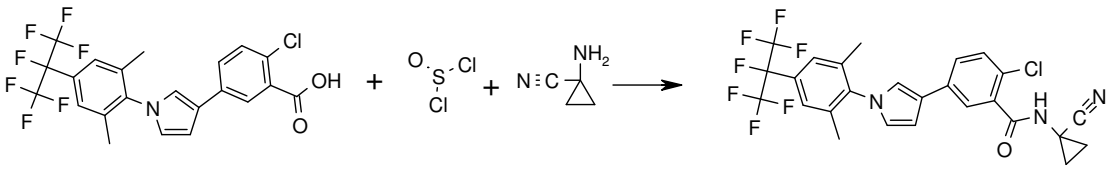
puro a 95:5 ciclohexano/acetato de etilo (v/v). Se obtuvieron 453 mg de una mezcla de 80% de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-3-yodopirrol y 16% de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-2-yodopirrol.



998 mg (1,696 mmol) de una mezcla de 80% de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-3-yodopirrol y 16% de 1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]-2-yodopirrol y 364 mg (1,7 mmol) de ácido 4-cloro-3-(metoxi-carbonil)fenilborónico se cargaron inicialmente en 10 ml de 2-propanol. Después de ello, el aire se desplazó por argón y se añadieron 5,2 ml de solución acuosa 1 molar de hidrógeno-carbonato de sodio y 98 mg (0,085 mmol) de tetrakis(trifenilfosfina)paladio (0) bajo argón. Posteriormente, la mezcla se calentó a reflujo durante 3 horas. Para la elaboración, la mezcla se enfrió un poco, luego se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se dividió entre acetato de etilo y agua. La fase orgánica se eliminó, se lavó con solución saturada de cloruro de sodio y se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida. Se obtuvieron 1,57 g de 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol-3-il]benzoato de metilo crudo.



416 mg (0,33 mmol, aproximadamente 40% puro) de 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol-3-il]benzoato de metilo crudo se cargaron inicialmente en una mezcla de 18 ml de dioxano y 6 ml de agua y se añadieron 61 mg (1,46 mmol) de hidróxido de litio hidrato. La mezcla se agitó a temperatura ambiente hasta que la disolución estuviera completa, luego se calentó a reflujo durante 2 horas. La mezcla luego se concentró en un evaporador rotativo a presión reducida y el residuo se mezcló con un poco de agua y se ajustó hasta pH 1 con ácido clorhídrico concentrado. La mezcla luego se extrajo dos veces con acetato de etilo y los extractos combinados se lavaron con solución saturada de cloruro de sodio, se secaron con sulfato de sodio y se concentraron. Como residuo, quedaban 207 mg de ácido 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol-3-il]-benzoico crudo.



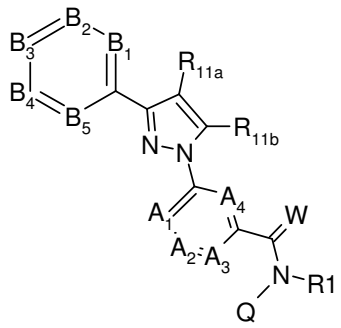
137 mg (0,11 mmol, pureza de aproximadamente el 38%) de ácido 2-cloro-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol-3-il]benzoico crudo se disolvieron en 15 ml de tolueno y se añadieron 230 mg (1,93 mmol) de cloruro de tionilo. La mezcla se calentó a reflujo

durante 3 horas. Después de ello, todos los componentes volátiles se extrajeron en un evaporador rotativo a presión reducida. El residuo se extrajo en 4 ml de diclorometano y se añadió gota a gota a una mezcla de 82 mg (0,69 mmol) de clorhidrato de 1-cianociclopropilamina y 98 mg (0,96 mmol) de trietilamina en 2 ml de diclorometano a 0 °C. Posteriormente, la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante la noche. Para la elaboración, la mezcla se lavó con solución acuosa al 5% de dihidrógeno-fosfato de sodio, luego con solución saturada de cloruro de sodio y la fase orgánica se secó con sulfato de sodio y se concentró. El residuo se cromatografió usando un cartucho con 15 g de gel de sílice y 85:15 ciclohexano/acetato de etilo (v/v). Las fracciones que contenían el producto se concentraron y se purificaron por medio de HPLC preparativa (Zorbax Eclipse Plus C_18 1.8 µm, 50x4.6mm en un gradiente en acetonitrilo/0,1% de H_3PO_4 acuoso. Se obtuvieron 13 mg de 2-cloro-N-ciclopropil-5-[1-[2,6-dimetil-4-[1,2,2,2-tetrafluoro-1-(trifluorometil)etil]fenil]pirrol-3-il]benzamida (compuesto **I-T46-1**).

HPLC-MS[a)]: logP = 4.90, masa (m/z) = 558 [M+H]+.

RMN de ^{1}H (400 MHz, d_3-acetonitrilo): δ = 7.63-7.67 (m, 2 H), 7.56 (s (amplio), 1 H (N-H)), 7.51 (s, 2H), 7.41 (d, J=8.3 Hz, 1 H), 7.16-7.17 (m, 1 H), 6.75-6.77 (m, 1 H), 6.72-6.73 (m, 1 H), 2.14 (s, 6H), 1.55-1.59 (m, 2 H), 1.32-1.39 (m, 2 H).

Tabla I-T2



I-T2

B_2 y B_4 = C-H, W = O

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R_1	R_{1a}	R_{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T2-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	ciclopropilo	4.9	534

Ej. N.º	**B_1**	**B_3**	**B_5**	**R_1**	**R_{1}** **1a**	**R_{11b}**	**A_1**	**A_2**	**A_3**	**A_4**	**Q**	**logP[a)]**	**Masa [m/z]** **a)1)**
I-T2-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(ciano)ciclopropilo	4.8	559

Ej. N.º	**B_1**	**B_3**	**B_5**	**R^{11}** **a**	**R^{11b}**	**A_1**	**A_2**	**A_3**	**A_4**	**W**	**R1**	**Q**	**logP[a]**)	**Masa [m/z]** **a)1)**
I-T3-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	534

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	577
I-T3-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	559
I-T3-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	4.7	566
I-T3-5	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(trifluorometil)ciclopropilo	4.6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetilamino)-etilo	4.1	633
I-T3-7	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.4	501

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-8	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	ciclopropilo	4.3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	ciclopropilo	4.9	552
I-T3-12	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.7	577
I-T3-13	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	518
I-T3-14	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	552

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-15	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	4.9	568
I-T3-16	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	514
I-T3-17	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	543

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-20	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.8	535
I-T3-21	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.7	560
I-T3-22	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	616
I-T3-26	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4.7	630

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-27	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	499
I-T3-28	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	ciclopropilo	3.5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.2	566
I-T3-31	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	540
I-T3-32	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	582
I-T3-33	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4.7	596
I-T3-34	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopr	4.6	615

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												opilo		
I-T3-35	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5.0	632
I-T3-37	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	4.9	622
I-T3-38	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	534
I-T3-40	C-	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.9	576

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
	C_2H_5													
I-T3-41	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	4.9	566
I-T3-42	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.8	575
I-T3-43	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	600
I-T3-44	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	548
I-T3-45	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5.0	590
I-T3-46	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopr	4.6	573

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												opilo		
I-T3-47	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	5.0	580
I-T3-48	C-F	C-CF_3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.2	442
I-T3-49	C-F	C-CF_3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.2	467
I-T3-50	C-F	C-CF_3	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.1	454
I-T3-51	C-F	C-CF_3	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.1	479
I-T3-52	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	574

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-53	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	599
I-T3-54	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	588
I-T3-55	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	613
I-T3-56	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	608
I-T3-57	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	633
I-T3-58	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	650
I-T3-59	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-	3.1	466

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												(ciano)ciclopropilo		
I-T3-60	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.2	441
I-T3-61	C-F	C-i-C_3F_7	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	542
I-T3-62	C-F	C-i-C_3F_7	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.9	567
I-T3-63	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	554
I-T3-64	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	579
I-T3-65	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopr	4.4	577

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												opilo		
I-T3-66	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	591
I-T3-67	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	ciclopropilo	4.4	552
I-T3-68	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	ciclopropilo	4.6	566
I-T3-69	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	ciclopropilo	4.3	532
I-T3-71	C-	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-	4.5	593

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
	C_2H_5											(ciano)ciclopropilo		
I-T3-72	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	568
I-T3-73	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	ciclopropilo	4.5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	ciclopropilo	4.2	518
I-T3-76	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	540

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-77	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.4	515
I-T3-78	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.2	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	498
I-T3-82	C-	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.0	540

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
	C_2H_5													
I-T3-83	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-il	4.6	530
I-T3-84	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	630
I-T3-85	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-il	4.7	620
I-T3-86	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	598
I-T3-87	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.6	515
I-T3-88	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	490
I-T3-89	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.5	481

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-90	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	456
I-T3-91	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	555
I-T3-92	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	580
I-T3-93	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ter.-butil)ciclopropilo	4.7	588
I-T3-94	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ter.-butil)ciclopropilo	4.7	602
I-T3-95	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-	3.1	500

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												(ciano)ciclopropilo		
I-T3-96	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	540
I-T3-98	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.1	475
I-T3-99	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.5	489
I-T3-100	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.4	549
I-T3-102	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopr	4.3	614

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												opilo		
I-T3-103	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	574
I-T3-104	C-C_2H_5	C-i-C_3F_8	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-i-C_3F_8	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopr	4.0	614

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												opilo		
I-T3-109	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	574
I-T3-111	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	628
I-T3-112	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.0	623
I-T3-114	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopr	4.0	634

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												opilo		
I-T3-115	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	554
I-T3-116	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.8	583
I-T3-119	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopr	3.6	594

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
												opilo		
I-T3-120	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.6	529
I-T3-121	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	ciclopropilo	4.5	536
I-T3-122	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	3.9	608
I-T3-124	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	614

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-126	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	639
I-T3-127	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	2.5	455
I-T3-128	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	2.8	469
I-T3-129	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	2.6	480
I-T3-130	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.8	603
I-T3-131	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-	C-H	O	CH_3	1-	3.9	628

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	$logP^{a)}$	Masa [m/z] a)1)
								CH_3				(ciano)ciclopropilo		
I-T3-132	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	2.9	494
I-T3-133	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.7	569
I-T3-134	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.9	588
I-T3-135	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pirrolidinil)	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	610
I-T3-136	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NHC	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	570

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
								H_3						
I-T3-137	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-ciclopropilo	C-H	O	H	ciclopropilo	3.4	596
I-T3-138	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-$CH_2CH_2OCH_3$	C-H	O	H	ciclopropilo	4.1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-	C-H	O	H	1-	4.1	566

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
								ciclopropilo				(ciano)ciclopropilo		
I-T3-140	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-ciclopropilo	C-H	O	H	ciclopropilo	4.2	541
I-T3-141	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	556
I-T3-142	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-ciclopropi	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.6	555

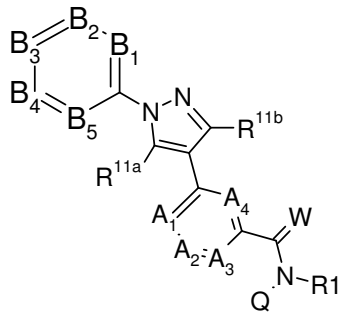
Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
								lo						
I-T3-143	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	531
I-T3-144	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.4	545
I-T3-145	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	ciclopropilo	3.8	503
I-T3-146	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-metil-pirazol-3-il	2.8	515
I-T3-147	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4.0	443
I-T3-148	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	652

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-149	C-CF_3	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.5	500
I-T3-150	C-CF_3	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	475
I-T3-151	C-Cl	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.0	566
I-T3-152	C-Cl	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.1	541
I-T3-153	C-S(O)C_2H_5	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.7	608
I-T3-154	C-$S(O_2)$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopr	3.8	624

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
	C_2H_5											opilo		
I-T3-155	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	677
I-T3-156	C-SC_2H_5	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	567
I-T3-157	C-$S(O)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.8	583
I-T3-158	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-i-C_3F_7	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.9	599

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-159	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(tiocarbamoil)-ciclopropilo	3.8	668
I-T3-160	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	653
I-T3-161	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	ciclopropilo	5.0	604
I-T3-162	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	624
I-T3-163	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	649

Tabla I-T3



I-T3

B_2 y B_4 = C-H

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-1	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	534
I-T3-2	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	577

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-3	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano) ciclopropil	4.2	559
I-T3-4	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-il	4.7	566
I-T3-5	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(trifluorometil) ciclo-propil	4.6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroetil amino)-etilo	4.1	633

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)]
I-T3-7	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.4	501
I-T3-8	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	ciclopropilo	4.3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	ciclopropilo	4.9	552

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	$logP^{a)}$	Masa [m/z] a)1)
I-T3-12	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.7	577
I-T3-13	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	518
I-T3-14	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	552
I-T3-15	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF3	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	4.9	568
I-T3-16	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	514

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-17	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	543
I-T3-20	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.8	535

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-21	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.7	560
I-T3-22	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	616

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-26	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4.7	630
I-T3-27	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	499
I-T3-28	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.2	566

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-31	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	540
I-T3-32	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	582
I-T3-33	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4.7	596
I-T3-34	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	615
I-T3-35	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5.0	632

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-37	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	4.9	622
I-T3-38	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	534
I-T3-40	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.9	576
I-T3-41	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	4.9	566
I-T3-42	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.8	575

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-43	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	600
I-T3-44	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	548
I-T3-45	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5.0	590
I-T3-46	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	573
I-T3-47	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	5.0	580

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)]
I-T3-48	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.2	442
I-T3-49	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.2	467
I-T3-50	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.1	454
I-T3-51	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.1	479
I-T3-52	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	574

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-53	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	599
I-T3-54	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	588
I-T3-55	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	613
I-T3-56	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	608
I-T3-57	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	633

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-58	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	650
I-T3-59	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.1	466
I-T3-60	C-Cl	C-H	C-CF3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.2	441
I-T3-61	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	542
I-T3-62	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.9	567

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)]
I-T3-63	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	554
I-T3-64	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	579
I-T3-65	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	577
I-T3-66	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	591
I-T3-67	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	ciclopropilo	4.4	552

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-68	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	ciclopropilo	4.8	566
I-T3-69	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	ciclopropilo	4.7	532
I-T3-71	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	593
I-T3-72	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	568

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)]
I-T3-73	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	ciclopropilo	4.5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	ciclopropilo	4.7	518
I-T3-76	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	540
I-T3-77	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.4	515

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-78	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	498
I-T3-82	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.0	540

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-83	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	4.6	530
I-T3-84	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4.7	630
I-T3-85	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	tietan-3-ilo	4.7	620
I-T3-86	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	598
I-T3-87	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.6	515
I-T3-88	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	490

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-89	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.5	481
I-T3-90	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	456
I-T3-91	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	555
I-T3-92	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	580
I-T3-93	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ter.-butil)ciclo-propilo	4.7	588

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-94	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ter.-butil)ciclo-propilo	4.7	602
I-T3-95	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.1	500
I-T3-96	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	540
I-T3-98	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.1	475

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-99	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.5	489
I-T3-100	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.4	549
I-T3-102	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	614
I-T3-103	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	574

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-104	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.0	614

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-109	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	574
I-T3-111	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	628
I-T3-112	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.0	623

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-114	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.0	634
I-T3-115	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	554
I-T3-116	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.8	583

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-119	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.6	594
I-T3-120	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.6	529
I-T3-121	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	ciclopropilo	4.5	536
I-T3-122	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	ciclopropilo	3.0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	3.9	608

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-124	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	614
I-T3-126	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	639
I-T3-127	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	2.5	455
I-T3-128	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	2.8	469

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-129	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	2.6	480
I-T3-130	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.8	603
I-T3-131	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	3.9	628
I-T3-132	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	2.9	494
I-T3-133	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.7	569

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	$logP^{a)}$	Masa [m/z] a)1)
I-T3-134	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.9	588
I-T3-135	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pirrolidinil)	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	610
I-T3-136	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-$NHCH_3$	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	570
I-T3-137	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-ciclopropilo	C-H	O	H	ciclopropilo	3.4	596

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	$logP^{a)}$	Masa [m/z] a)1)
I-T3-138	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-$CH_2CH_2OCH_3$	C-H	O	H	ciclopropilo	4.1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-ciclopropilo	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	566
I-T3-140	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-ciclopropilo	C-H	O	H	ciclopropilo	4.2	541
I-T3-141	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	556

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-142	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-ciclopropilo	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.6	555
I-T3-143	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	531
I-T3-144	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.4	545
I-T3-145	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	ciclopropilo	3.8	503
I-T3-146	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-metil-pirazol-3-ilo	2.8	515
I-T3-147	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4.0	443

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)]
I-T3-148	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	652
I-T3-149	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.5	500
I-T3-150	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	475
I-T3-151	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.0	566
I-T3-152	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.1	541

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-153	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.7	608
I-T3-154	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	624
I-T3-155	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	677
I-T3-156	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	567

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-157	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.8	583
I-T3-158	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.9	599
I-T3-159	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(tiocarbamoil)-ciclopropilo	3.8	668
I-T3-160	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.0	653

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-161	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	ciclopropilo	5.0	604
I-T3-162	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	624
I-T3-163	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	649
I-T3-164	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.1	490
I-T3-165	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.9	678

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-166	C-SCH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	578
I-T3-167	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	592
I-T3-168	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.3	485
I-T3-169	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.2	510

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-170	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.7	525
I-T3-171	C-SCH_2CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	646
I-T3-172	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.9	500
I-T3-173	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.4	585
I-T3-174	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.1	465

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)]
I-T3-175	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	646
I-T3-176	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	671
I-T3-177	C-SC_2H_5	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	516
I-T3-178	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.2	532

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-179	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.0	516
I-T3-180	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	2.8	523
I-T3-181	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	2.7	507
I-T3-182	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.0	541

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-183	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.1	557
I-T3-184	C-Cl	C-F	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	492
I-T3-185	C-Cl	C-F	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.6	517
I-T3-186	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.6	458
I-T3-187	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.3	483

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-188	C-F	C-F	C-CF_3	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.4	503
I-T3-189	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	625
I-T3-190	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	2.9	548
I-T3-191	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-SC_2H_5	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.7	651

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-192	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	625
I-T3-193	C-CHF_2	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	590
I-T3-194	C-F	C-F	C-CF_3	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(carbamoil)-ciclopropilo	2.8	521
I-T3-195	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	641

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-196	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.9	607
I-T3-197	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-ciano-ciclo-propil)metilo	4.0	628
I-T3-198	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-$S(O_2)C_2H_5$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.7	715
I-T3-199	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-ciano-ciclo-propil)metilo	1.17 min[b)]	648

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-200	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	650
I-T3-201	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.0	657
I-T3-202	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.5	605
I-T3-203	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.6	580
I-T3-204	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	3.9	580

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-205	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.5	566
I-T3-206	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.6	621
I-T3-207	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.5	591
I-T3-208	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.6	639
I-T3-209	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.8	637

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-210	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.9	612
I-T3-211	C-OC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_9	C-H	C-OC_2H_5	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.7	609
I-T3-212	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	691
I-T3-213	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	666
I-T3-214	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.3	606

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-215	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.1	631
I-T3-216	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.7	620
I-T3-217	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	4.2	621
I-T3-218	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.7	632
I-T3-219	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	5.1	638

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)]
I-T3-220	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH$_3$	ciclopropilo	3.4	587
I-T3-221	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	3.0	573
I-T3-222	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	3.0	598
I-T3-223	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH$_3$	1-(ciano)ciclopropilo	3.3	612

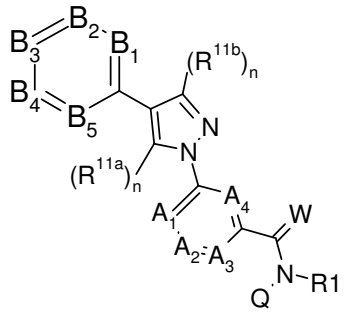
Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T3-224	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	716
I-T3-225	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	5.2	729
I-T3-226	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	740
I-T3-227	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	700
I-T3-228	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	725

Ej. N.º	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T3-229	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	5.1	714

* b) Tiempo de retención medido con:

Instrumento: sistema Waters ACQUITY SQD UPLC; Columna: Waters Acquity UPLC HSS T3 1.8 µ 50 x 1 mm; eluyente A: 1 l agua + 0.25 ml de ácido fórmico al 99%; eluyente B: 1 l acetonitrilo + 0,25 ml de ácido fórmico al 99%; gradiente: 0,0 min 90% de A → 1.2 min 5% de A → 2.0 min 5% de A; horno: 50 °C; tasa de flujo: 0.40 ml/min; detección UV: 208-400 nm.

Tabla I-T4



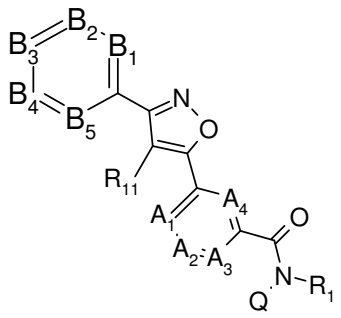
I-T4

B_2 y B_4 = C-H

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R_1	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T4-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.7	534
I-T4-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	559

I-T4-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.4	535
I-T4-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.3	560

Tabla I-T22



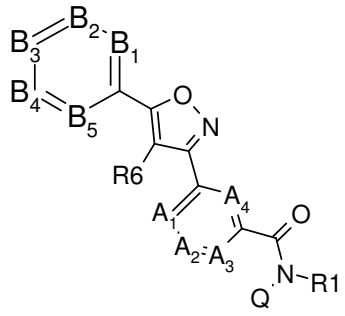
I-T22

B_2 y B_4 = C-H, W = O

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R_1	R_{11}	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Masa [m/z] a)1)
I-T22-1	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	ciclopropilo	4.8	535
I-T22-2	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(ciano)ciclopropilo	4.6	560

I-T22-3	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	CH2CF3	5	577
I-T22-4	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	615
I-T22-5	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	ciclopropilo	4.9	589
I-T22-6	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	ciclopropilo	4.5	590
I-T22-7	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(ciano)ciclopropilo	4.7	614

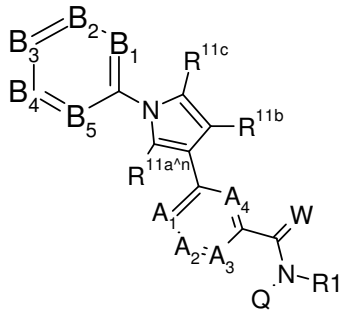
Tabla I-T23



B_2 y B_4 = C-H

Ej. N.º	**B_1**	**B_3**	**B_5**	**R^1**	**R^{11}**	**A_1**	**A_2**	**A_3**	**A_4**	**W**	**Q**	**logP[a])**	**Masa [m/z] a)1)**
I-T23-1	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	ciclopropilo	5.0	575
I-T23-2	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	1-(ciano)ciclopropilo	4.8	600

Tabla I-T46



I-T46

B_2 y B_4 = C-H

Ej. N.º	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	R^{11c}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	logP[a)]	Masa [m/z] [a)1)]
I-T46-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.9	558
I-T46-	C-	C-i-	C-	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	5.0	533

2	CH_3	C_3F_7	CH_3												
I-T46-3	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	ciclopropilo	5.0	588
I-T46-4	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	ciclopropilo	4.5	574
I-T46-5	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(ciano)ciclopropilo	4.4	599
I-T46-6	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(ciano)ciclopropilo	4.8	613

Datos de RMN de ejemplos seleccionados

[653] Los datos de RMN de ^{1}H de ejemplos seleccionados están escritos en forma de listas de picos de RMN de ^{1}H. El valor de δ en ppm y la intensidad de las señales se enumeran para cada pico de señal entre paréntesis. Los pares de valor de δ –intensidad de señal para diferentes picos de señales se enumeran con separación entre sí por punto y coma.

[654] La lista de picos de un ejemplo tiene, por ende, la forma:

δ_1 (intensidad$_1$); δ_2 (intensidad$_2$);……..; δ_i (intensidad$_i$);……; δ_n (intensidad$_n$)

[655] La intensidad de señales agudas se correlaciona con la altura de las señales en un ejemplo impreso de un espectro de RMN en cm y muestra las relaciones actuales de intensidades de señales. De señales amplias, se pueden mostrar varios picos o el medio de la señal y su intensidad relativa en comparación con la señal más intensa en el espectro. [656] Para calibración del desplazamiento químico de los espectros de RMN de ^{1}H, se han usado tetrametilsilano y/o el desplazamiento químico del disolvente, en particular en el caso de espectros medidos en DMSO. En consecuencia, el pico de tetrametilsilano se puede producir, pero no necesariamente, en listas de picos de RMN.

[657] Las listas de picos de RMN de ^{1}H son similares a impresiones convencionales de RMN de ^{1}H y, por ende, contienen usualmente todos los picos que se enumeran en la interpretación clásica de RMN.

[658] Adicionalmente, pueden mostrar como señales de disolventes de impresiones clásicas de RMN de ^{1}H, estereoisómeros de los compuestos objeto que también son objeto de la invención, y/o picos de impurezas.

[659] Para mostrar las señales de compuestos en el intervalo delta de disolventes y/o agua, los picos usuales de disolventes, por ejemplo, nuestras listas de picos de RMN de ^{1}H muestran los picos de disolventes usuales, por ejemplo, picos de DMSO en DMSO-D6 y el pico de agua que usualmente tienen en promedio una elevada intensidad.

[660] Los picos de estereoisómeros de los compuestos objeto y/o picos de impurezas tienen usualmente en promedio una menor intensidad que los picos de compuestos objeto (por ejemplo, con una pureza > 90%).

[661] Tales estereoisómeros y/o impurezas pueden ser típicos del proceso de preparación específico. Por ende, sus picos pueden ayudar a reconocer la reproducción de nuestro proceso de preparación por medio de “huellas de subproductos”.

[662] Un experto, quien calcula los picos de los compuestos objeto con métodos conocidos (MestreC, ACD-simulation, pero también con valores esperados evaluados empíricamente) puede aislar los picos de los compuestos objeto de ser necesario opcionalmente usando filtros adicionales de intensidad. Este aislamiento será similar a la recolección relevante de picos en la interpretación convencional de RMN de ^{1}H.

[663] Otros detalles de las listas de picos de RMN de ^{1}H pueden hallarse en la Base de Datos de la Descripción de Búsqueda Número 564025.

Ejemplo I-T2-1: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,297 (5,2); 8,291 (5,1); 7,846 (9,6); 7,825 (3,3); 7,818 (2,0); 7,545 (3,5); 7,525 (2,9); 7,523 (2,8); 7,443 (9,1); 6,977 (1,2); 6,544 (5,1); 6,538 (4,9); 4,085 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,440 (0,4); 3,374 (0,4); 2,862 (0,8); 2,853 (1,2); 2,844 (1,9); 2,834 (1,8); 2,826 (1,3); 2,816 (0,9); 2,240 (41,5); 2,150 (23,6); 2,086 (3,2); 1,972 (6,1); 1,965 (1,2); 1,958 (2,9); 1,953 (13,9); 1,947 (24,8); 1,941 (32,9); 1,934

(22,7); 1,928 (11,7); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (1,6); 1,204 (3,1); 1,186 (1,5); 0,790 (1,0); 0,778 (3,2); 0,773 (4,1); 0,760 (4,2); 0,755 (3,2); 0,743 (1,4); 0,614 (1,3); 0,604 (3,7); 0,597 (3,9); 0,593 (3,4); 0,588 (3,3); 0,575 (1,0); 0,000 (3,0)
Ejemplo I-T2-2: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,311 (4,9); 8,304 (5,0); 7,898 (10,0); 7,878 (3,3); 7,872 (2,0); 7,624 (2,0); 7,583 (3,2); 7,561 (2,8); 7,444 (9,7); 6,555 (4,9); 6,549 (4,9); 5,447 (0,7); 4,086 (0,5); 4,068 (1,6); 4,050 (1,6); 4,032 (0,6); 2,240 (45,7); 2,146 (80,1); 2,114 (0,7); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (7,1); 1,964 (3,1); 1,958 (8,0); 1,953 (36,5); 1,946 (65,9); 1,940 (87,5); 1,934 (62,1); 1,928 (33,1); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,591 (2,0); 1,576 (5,7); 1,569 (5,7); 1,556 (2,8); 1,516 (0,4); 1,437 (16,0); 1,410 (0,4); 1,369 (2,8); 1,356 (5,7); 1,349 (6,0); 1,334 (2,1); 1,296 (0,3); 1,269 (1,9); 1,222 (1,9); 1,204 (3,6); 1,186 (1,8); 0,000 (4,5)
Ejemplo I-T3-1: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,118 (11,7); 8,061 (12,6); 7,689 (7,9); 7,683 (8,6); 7,667 (0,7); 7,652 (4,9); 7,646 (3,5); 7,631 (5,5); 7,625 (4,3); 7,535 (16,0); 7,463 (7,8); 7,442 (6,2); 6,895 (2,5); 4,068 (0,8); 4,050 (0,8); 3,912 (0,7); 2,881 (0,5); 2,871 (1,5); 2,862 (2,1); 2,853 (3,2); 2,844 (3,2); 2,835 (2,2); 2,826 (1,5); 2,816 (0,5); 2,270 (0,5); 2,261 (0,3); 2,143 (107,9); 2,138 (145,5); 2,111 (71,2); 1,972 (5,1); 1,964 (10,3); 1,958 (27,0); 1,952 (94,0); 1,946 (160,4); 1,940 (199,1); 1,934 (136,5); 1,928 (68,3); 1,780 (0,5); 1,774 (0,9); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,437 (13,0); 1,271 (1,0); 1,222 (1,0); 1,204 (1,9); 1,186 (0,9); 0,794 (1,7); 0,782 (6,4); 0,777 (7,2); 0,764 (7,9); 0,759 (5,7); 0,747 (2,4); 0,725 (0,3); 0,610 (2,4); 0,600 (7,1); 0,592 (7,5); 0,588 (6,7); 0,584 (5,9); 0,571 (1,7); 0,146 (0,4); 0,000 (86,0); -0,008 (5,2); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-2: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,131 (12,6); 8,084 (13,3); 7,735 (7,6); 7,729 (9,9); 7,710 (5,2); 7,704 (3,5); 7,689 (5,8); 7,683 (4,6); 7,537 (16,0); 7,514 (8,9); 7,493 (7,4); 7,458 (1,9); 4,140 (1,8);

4,124 (2,1); 4,117 (5,8); 4,100 (5,9); 4,093 (6,2); 4,077 (5,9); 4,069 (2,6); 4,053 (2,1); 3,914 (0,6); 2,891 (0,7); 2,773 (0,6); 2,480 (0,7); 2,475 (1,3); 2,470 (1,8); 2,466 (1,3); 2,461 (0,7); 2,325 (0,4); 2,273 (1,9); 2,221 (979,0); 2,115 (79,7); 2,097 (1,4); 1,973 (3,4); 1,966 (10,4); 1,960 (22,6); 1,954 (102,7); 1,948 (182,7); 1,942 (241,3); 1,936 (167,3); 1,930 (87,0); 1,783 (0,7); 1,777 (1,1); 1,770 (1,5); 1,764 (1,1); 1,758 (0,6); 1,437 (15,2); 1,296 (0,5); 1,270 (1,7); 1,222 (0,7); 1,204 (1,3); 1,186 (0,6); 0,146 (0,3); 0,008 (2,7); 0,000 (69,9); -0,008 (3,3)
Ejemplo I-T3-3: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,129 (2,6); 8,075 (2,6); 7,738 (1,6); 7,732 (2,0); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,681 (1,2); 7,675 (1,1); 7,572 (0,5); 7,536 (3,2); 7,496 (1,8); 7,475 (1,5); 2,146 (33,6); 2,113 (16,5); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (5,6); 1,953 (29,5); 1,946 (53,8); 1,940 (72,5); 1,934 (50,1); 1,928 (25,8); 1,769 (0,4); 1,599 (0,8); 1,585 (1,9); 1,578 (2,0); 1,564 (1,1); 1,437 (16,0); 1,359 (1,1); 1,345 (2,0); 1,338 (2,0); 1,324 (0,8); 1,269 (0,6); 0,008 (1,9); 0,000 (51,3); -0,009 (2,0)
Ejemplo I-T3-4: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,132 (5,7); 8,077 (6,1); 7,719 (3,4); 7,714 (4,3); 7,678 (2,2); 7,673 (1,8); 7,657 (2,6); 7,652 (2,3); 7,537 (7,8); 7,515 (1,0); 7,495 (1,0); 7,486 (4,3); 7,465 (3,3); 5,338 (0,9); 5,316 (1,8); 5,296 (1,8); 5,274 (1,0); 3,544 (2,3); 3,521 (4,7); 3,499 (3,1); 3,370 (3,0); 3,349 (4,6); 3,346 (4,3); 3,325 (2,4); 2,469 (0,4); 2,274 (0,4); 2,206 (300,4); 2,154 (0,5); 2,115 (36,2); 1,973 (1,3); 1,966 (3,0); 1,960 (6,3); 1,954 (30,3); 1,948 (55,1); 1,942 (73,7); 1,935 (52,5); 1,929 (28,5); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,764 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (1,6); 1,222 (0,3); 1,204 (0,6); 0,008 (0,7); 0,000 (20,8)
Ejemplo I-T3-5: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,125 (8,3); 8,124 (8,5); 8,072 (9,3); 8,071 (9,2); 7,680 (16,0); 7,677 (5,7); 7,668 (5,3); 7,664 (3,0); 7,537 (9,4); 7,485 (4,7); 7,482 (2,1); 7,473 (1,9); 7,470 (4,3); 7,461 (2,3); 2,146 (139,0); 2,113 (53,4); 2,060 (0,5); 2,056 (0,9); 2,052 (1,3); 2,048 (0,9);

2,044 (0,4); 1,966 (5,4); 1,958 (14,4); 1,953 (16,2); 1,950 (93,5); 1,945 (166,6); 1,941 (244,5); 1,937 (162,8); 1,933 (81,9); 1,924 (1,3); 1,835 (0,5); 1,831 (0,9); 1,827 (1,4); 1,822 (0,9); 1,818 (0,5); 1,393 (2,4); 1,383 (5,5); 1,380 (5,9); 1,370 (3,2); 1,343 (0,4); 1,269 (0,6); 1,251 (1,3); 1,248 (1,4); 1,238 (4,5); 1,228 (1,0); 1,225 (1,0); 0,096 (0,4); 0,005 (3,0); 0,000 (105,8); -0,006 (3,3); -0,100 (0,4)
Ejemplo I-T3-6: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,130 (11,9); 8,129 (12,8); 8,082 (13,1); 8,081 (13,4); 7,809 (8,6); 7,805 (9,0); 7,697 (5,1); 7,693 (4,8); 7,683 (5,9); 7,679 (5,7); 7,538 (13,6); 7,508 (9,3); 7,494 (8,0); 7,304 (1,1); 7,295 (1,9); 7,286 (1,1); 7,069 (1,2); 4,045 (16,0); 4,036 (15,9); 3,973 (1,6); 3,962 (1,8); 3,957 (5,2); 3,946 (5,2); 3,941 (5,5); 3,930 (5,3); 3,926 (2,0); 3,915 (1,8); 2,220 (0,4); 2,153 (19,3); 2,115 (73,8); 2,104 (1,0); 2,052 (0,4); 2,006 (0,4); 1,966 (1,4); 1,958 (3,8); 1,953 (4,5); 1,950 (25,7); 1,945 (45,5); 1,941 (67,9); 1,937 (46,1); 1,933 (22,7); 1,827 (0,4); 1,268 (1,1); 0,005 (0,8); 0,000 (28,7); -0,006 (0,9)
Ejemplo I-T3-7: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,043 (1,2); 9,038 (1,2); 8,803 (1,3); 8,798 (1,3); 8,672 (3,2); 8,648 (0,9); 8,638 (0,9); 8,405 (3,2); 8,390 (1,1); 8,384 (1,9); 8,379 (1,0); 8,316 (0,3); 7,602 (3,5); 3,902 (9,7); 3,330 (83,7); 3,243 (0,6); 3,169 (0,4); 2,903 (0,3); 2,893 (0,5); 2,885 (0,7); 2,875 (0,7); 2,867 (0,4); 2,857 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,4); 2,512 (30,7); 2,507 (61,4); 2,503 (80,2); 2,498 (57,8); 2,494 (27,6); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0,3); 2,131 (16,0); 1,909 (0,3); 0,763 (0,4); 0,750 (1,1); 0,745 (1,6); 0,733 (1,5); 0,727 (1,3); 0,716 (0,6); 0,619 (0,6); 0,608 (1,7); 0,602 (1,4); 0,598 (1,4); 0,593 (1,2); 0,580 (0,4); 0,000 (9,2)
Ejemplo I-T3-8: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,538 (2,0); 9,102 (1,4); 9,097 (1,4); 8,827 (1,4); 8,823 (1,5); 8,695 (3,2); 8,444 (1,1); 8,439 (1,9); 8,434 (1,2); 8,424 (3,3); 7,605 (3,8); 3,902 (6,0); 3,374 (0,4); 3,330

(90,4); 3,243 (0,4); 3,169 (2,1); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,5); 2,507 (75,8); 2,503 (97,5); 2,498 (74,7); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,5); 2,132 (16,0); 1,628 (0,7); 1,614 (2,0); 1,607 (2,1); 1,594 (0,9); 1,347 (0,9); 1,334 (2,1); 1,327 (2,1); 1,313 (0,7); 0,000 (8,2)
Ejemplo I-T3-9: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,508 (2,0); 8,506 (2,0); 8,473 (1,0); 8,463 (1,0); 8,276 (2,2); 7,895 (0,5); 7,876 (1,0); 7,861 (0,5); 7,592 (4,1); 7,399 (0,5); 7,383 (1,0); 7,368 (0,7); 7,305 (1,1); 7,286 (1,7); 7,266 (0,7); 3,902 (5,7); 3,330 (72,5); 3,243 (0,4); 3,175 (0,4); 3,162 (0,3); 2,875 (0,4); 2,865 (0,5); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,5); 2,828 (0,3); 2,672 (0,5); 2,507 (63,9); 2,503 (80,2); 2,329 (0,5); 2,114 (16,0); 0,725 (0,4); 0,707 (1,8); 0,695 (1,7); 0,689 (1,5); 0,678 (0,6); 0,556 (0,6); 0,545 (1,8); 0,539 (1,8); 0,530 (1,6); 0,518 (0,5); 0,000 (6,1)
Ejemplo I-T3-10: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,369 (2,0); 8,535 (1,8); 8,532 (1,9); 8,290 (2,0); 7,968 (0,4); 7,965 (0,5); 7,949 (0,9); 7,946 (0,9); 7,931 (0,5); 7,927 (0,5); 7,595 (3,9); 7,479 (0,4); 7,475 (0,4); 7,459 (0,9); 7,443 (0,6); 7,440 (0,5); 7,352 (1,0); 7,333 (1,7); 7,314 (0,8); 3,903 (8,2); 3,372 (0,4); 3,329 (104,6); 3,243 (0,6); 3,175 (0,3); 2,675 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,541 (0,5); 2,507 (70,8); 2,502 (89,6); 2,498 (66,7); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,324 (0,4); 2,115 (16,0); 1,598 (0,8); 1,584 (2,0); 1,577 (2,1); 1,564 (0,9); 1,292 (0,9); 1,278 (2,1); 1,272 (2,2); 1,257 (0,8); 1,169 (0,3); 1,068 (0,4); 0,007 (0,4); 0,000 (7,5); -0,008 (0,4)
Ejemplo I-T3-11: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,522 (0,9); 8,512 (0,9); 8,500 (3,3); 8,211 (3,2); 7,818 (1,8); 7,799 (1,8); 7,646 (1,8); 7,621 (1,8); 7,590 (3,5); 3,902 (3,1); 3,330 (117,7); 3,304 (0,3); 2,861 (0,3); 2,851 (0,4); 2,842 (0,7); 2,832 (0,7); 2,824 (0,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,3); 2,525 (1,5); 2,511 (29,4); 2,507 (58,1); 2,502 (75,7); 2,498 (54,9); 2,493 (26,6); 2,334

(0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 2,127 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0,715 (1,7); 0,703 (1,6); 0,697 (1,3); 0,685 (0,6); 0,575 (0,6); 0,564 (1,7); 0,558 (1,5); 0,554 (1,4); 0,548 (1,3); 0,536 (0,4); 0,000 (7,9)
Ejemplo I-T3-12: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,396 (1,8); 8,522 (3,2); 8,223 (3,2); 7,906 (1,6); 7,887 (1,6); 7,712 (1,6); 7,687 (1,6); 7,593 (3,7); 3,903 (2,7); 3,332 (98,2); 2,672 (0,5); 2,542 (0,4); 2,507 (67,0); 2,503 (83,7); 2,498 (62,0); 2,334 (0,4); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,129 (16,0); 1,604 (0,8); 1,590 (2,0); 1,583 (2,1); 1,570 (0,9); 1,312 (0,9); 1,299 (2,0); 1,292 (2,0); 1,278 (0,8); 0,000 (7,1)
Ejemplo I-T3-13: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,514 (1,8); 8,510 (1,9); 8,480 (0,9); 8,470 (0,9); 8,285 (2,1); 8,226 (0,8); 8,220 (0,8); 8,207 (0,8); 8,202 (0,8); 7,767 (0,4); 7,762 (0,5); 7,755 (0,5); 7,749 (0,6); 7,746 (0,6); 7,740 (0,5); 7,734 (0,5); 7,728 (0,4); 7,595 (3,7); 7,402 (0,9); 7,380 (0,9); 7,375 (1,0); 7,354 (0,8); 3,902 (1,5); 3,444 (0,4); 3,425 (0,6); 3,405 (1,1); 3,353 (438,8); 3,292 (0,5); 3,273 (0,3); 2,864 (0,5); 2,855 (0,7); 2,846 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3); 2,678 (0,4); 2,673 (0,5); 2,669 (0,4); 2,509 (61,5); 2,504 (78,8); 2,500 (57,5); 2,335 (0,4); 2,331 (0,5); 2,327 (0,4); 2,121 (16,0); 0,746 (0,4); 0,733 (1,2); 0,728 (1,7); 0,716 (1,6); 0,710 (1,3); 0,699 (0,6); 0,602 (0,6); 0,592 (1,7); 0,585 (1,6); 0,576 (1,3); 0,564 (0,4)
Ejemplo I-T3-14: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,600 (1,8); 8,596 (1,8); 8,536 (1,1); 8,525 (1,1); 8,352 (1,9); 7,977 (1,6); 7,960 (1,6); 7,594 (3,7); 7,437 (1,7); 7,411 (1,7); 3,902 (4,8); 3,332 (129,0); 2,826 (0,4); 2,817 (0,7); 2,807 (0,7); 2,799 (0,4); 2,789 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,5); 2,667 (0,4); 2,511 (32,0); 2,507 (61,8); 2,503 (79,3); 2,498 (57,6); 2,494 (28,2); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,115 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0,715 (1,6); 0,703 (1,5); 0,697 (1,3); 0,685 (0,5); 0,567 (0,5); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,541 (1,3);

0,529 (0,4); 0,000 (6,1)
Ejemplo I-T3-15: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,711 (3,3); 8,694 (1,1); 8,684 (1,0); 8,450 (3,3); 8,369 (1,8); 8,174 (1,8); 7,971 (1,8); 7,601 (3,9); 3,903 (1,0); 3,331 (150,2); 2,910 (0,3); 2,901 (0,5); 2,892 (0,7); 2,882 (0,7); 2,874 (0,5); 2,865 (0,4); 2,672 (0,5); 2,507 (59,3); 2,503 (74,7); 2,499 (55,2); 2,334 (0,4); 2,330 (0,5); 2,133 (16,0); 0,769 (0,4); 0,755 (1,3); 0,751 (1,7); 0,738 (1,6); 0,733 (1,4); 0,721 (0,6); 0,630 (0,6); 0,620 (1,8); 0,613 (1,7); 0,604 (1,4); 0,592 (0,4)
Ejemplo I-T3-16: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,439 (0,8); 8,433 (0,9); 8,344 (3,1); 8,343 (3,2); 8,082 (3,2); 8,081 (3,3); 7,912 (1,7); 7,909 (1,7); 7,670 (0,9); 7,667 (0,9); 7,657 (1,0); 7,654 (1,0); 7,600 (3,4); 7,368 (1,3); 7,354 (1,2); 3,376 (0,5); 3,367 (1,1); 3,351 (401,9); 3,328 (0,5); 3,324 (0,5); 2,997 (3,2); 2,856 (0,4); 2,850 (0,7); 2,844 (0,7); 2,838 (0,4); 2,831 (0,3); 2,618 (0,4); 2,615 (0,6); 2,612 (0,4); 2,543 (5,5); 2,524 (1,0); 2,521 (1,3); 2,518 (1,2); 2,509 (30,4); 2,506 (67,4); 2,503 (93,3); 2,500 (68,5); 2,497 (31,5); 2,438 (7,5); 2,390 (0,4); 2,387 (0,6); 2,384 (0,4); 2,146 (16,0); 0,715 (0,4); 0,707 (1,2); 0,703 (1,6); 0,695 (1,5); 0,692 (1,3); 0,684 (0,5); 0,590 (0,6); 0,583 (1,6); 0,579 (1,4); 0,576 (1,3); 0,572 (1,3); 0,564 (0,4); 0,000 (2,6)
Ejemplo I-T3-17: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,576 (0,4); 9,437 (2,3); 8,736 (0,7); 8,625 (1,7); 8,621 (1,8); 8,472 (0,7); 8,411 (0,4); 8,375 (1,8); 8,372 (1,9); 8,316 (0,5); 8,243 (0,4); 8,030 (1,7); 8,013 (1,6); 7,993 (0,3); 7,597 (3,8); 7,547 (1,7); 7,521 (1,9); 4,036 (1,1); 3,903 (6,7); 3,630 (0,4); 3,623 (0,4); 3,614 (0,4); 3,608 (0,3); 3,597 (0,3); 3,392 (0,7); 3,332 (259,6); 3,287 (0,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,5); 3,155 (0,4); 3,145 (0,5); 3,138 (0,4); 3,127 (0,5); 3,056 (0,4); 3,022 (4,3); 2,751 (0,4); 2,690 (1,7); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,525 (3,7); 2,511 (72,5); 2,507 (143,5); 2,503 (187,7); 2,498 (136,4); 2,494 (66,3); 2,338 (0,4);

2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,8); 2,134 (3,5); 2,116 (16,0); 1,614 (0,5); 1,607 (1,1); 1,593 (1,9); 1,586 (2,0); 1,573 (0,8); 1,344 (0,5); 1,337 (0,5); 1,310 (0,9); 1,296 (1,9); 1,289 (2,1); 1,274 (3,8); 1,259 (6,5); 1,244 (6,0); 1,225 (1,2); 0,008 (0,5); 0,000 (16,5); -0,009 (0,5)
Ejemplo I-T3-18: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,576 (2,0); 8,736 (3,2); 8,472 (3,3); 8,411 (1,7); 8,316 (0,3); 8,243 (1,6); 7,994 (1,6); 7,605 (3,6); 3,903 (10,2); 3,372 (0,7); 3,333 (152,4); 3,243 (1,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,4); 2,690 (0,4); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,4); 2,542 (0,6); 2,525 (1,9); 2,512 (39,2); 2,507 (77,8); 2,503 (101,6); 2,498 (73,7); 2,494 (35,7); 2,334 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,4); 2,134 (16,0); 2,116 (0,5); 1,629 (0,7); 1,614 (1,8); 1,607 (2,0); 1,594 (0,9); 1,358 (0,9); 1,345 (1,9); 1,338 (2,0); 1,323 (0,7); 1,259 (0,5); 1,244 (0,4); 1,017 (0,6); 1,001 (0,6); 0,000 (9,1)
Ejemplo I-T3-19: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,367 (1,9); 8,537 (1,8); 8,534 (1,9); 8,300 (2,2); 8,277 (0,8); 8,271 (0,9); 8,259 (0,9); 8,253 (0,8); 7,796 (0,4); 7,791 (0,5); 7,784 (0,5); 7,778 (0,6); 7,775 (0,6); 7,769 (0,6); 7,763 (0,5); 7,757 (0,5); 7,598 (3,8); 7,457 (0,8); 7,435 (0,8); 7,430 (1,0); 7,409 (0,7); 3,903 (4,8); 3,335 (104,3); 2,672 (0,4); 2,542 (0,3); 2,507 (54,0); 2,503 (69,3); 2,499 (52,7); 2,330 (0,4); 2,122 (16,0); 1,609 (0,8); 1,595 (2,0); 1,588 (2,1); 1,575 (0,9); 1,323 (0,9); 1,309 (2,0); 1,303 (2,1); 1,288 (0,8); 0,000 (5,6)
Ejemplo I-T3-20: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,816 (2,3); 8,810 (2,3); 8,695 (3,4); 8,681 (1,1); 8,670 (1,1); 8,451 (3,4); 8,184 (2,3); 8,178 (2,2); 7,601 (3,8); 3,903 (7,0); 3,333 (173,9); 3,289 (0,4); 3,242 (0,9); 3,175 (0,6); 3,162 (0,5); 2,859 (0,4); 2,850 (0,7); 2,840 (0,7); 2,832 (0,4); 2,822 (0,3); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,542 (0,4); 2,511 (34,1); 2,507 (66,3); 2,502 (85,9); 2,498 (63,0); 2,494 (31,0); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4); 2,132 (0,7); 2,117 (16,0); 1,016 (0,4); 1,001 (0,4); 0,755 (0,5); 0,742 (1,3); 0,737 (1,7); 0,725

(1,6); 0,719 (1,4); 0,707 (0,5); 0,564 (0,6); 0,553 (1,7); 0,547 (1,6); 0,543 (1,5); 0,538 (1,4); 0,526 (0,4); 0,000 (7,1)
Ejemplo I-T3-21: RMN de ^{1}H (600,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,593 (1,8); 8,868 (2,3); 8,864 (2,3); 8,709 (3,3); 8,456 (3,4); 8,262 (2,3); 8,258 (2,2); 7,603 (3,7); 3,388 (0,4); 3,383 (0,4); 3,381 (0,5); 3,369 (0,8); 3,340 (1164,0); 2,994 (0,7); 2,617 (0,6); 2,615 (0,8); 2,612 (0,6); 2,542 (39,9); 2,523 (1,4); 2,520 (1,7); 2,517 (1,8); 2,508 (48,7); 2,505 (103,1); 2,502 (140,8); 2,499 (100,9); 2,497 (46,2); 2,389 (0,6); 2,386 (0,8); 2,383 (0,6); 2,117 (16,0); 1,636 (0,8); 1,627 (2,0); 1,622 (2,1); 1,613 (0,8); 1,288 (0,9); 1,278 (1,9); 1,274 (2,1); 1,264 (0,8); 0,005 (0,8); 0,000 (21,9); -0,006 (0,7)
Ejemplo I-T3-22: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,397 (6,5); 8,682 (5,3); 8,677 (5,1); 8,405 (7,9); 8,366 (0,3); 8,087 (16,0); 8,060 (0,3); 8,041 (0,7); 7,981 (1,7); 7,966 (2,6); 7,963 (2,7); 7,948 (1,5); 7,944 (1,4); 7,763 (0,3); 7,505 (1,2); 7,501 (1,3); 7,486 (2,7); 7,470 (1,8); 7,466 (1,6); 7,384 (0,6); 7,374 (3,1); 7,365 (1,1); 7,355 (5,1); 7,345 (0,8); 7,336 (2,3); 5,761 (0,8); 3,348 (68,6); 3,028 (1,2); 2,875 (1,0); 2,712 (0,4); 2,671 (0,3); 2,542 (99,6); 2,507 (38,4); 2,502 (50,3); 2,498 (38,2); 2,368 (0,4); 2,087 (0,3); 1,601 (2,4); 1,587 (6,3); 1,580 (6,5); 1,567 (2,8); 1,288 (3,1); 1,275 (6,2); 1,268 (6,6); 1,254 (2,5); 1,234 (0,8); 1,169 (0,9); 0,146 (0,3); 0,000 (72,5); -0,008 (4,9); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-23: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,202 (5,5); 8,187 (0,5); 8,161 (5,9); 8,146 (0,5); 7,931 (0,4); 7,900 (9,0); 7,886 (0,8); 7,739 (3,5); 7,734 (4,4); 7,720 (0,5); 7,707 (2,6); 7,701 (1,9); 7,686 (3,0); 7,680 (2,5); 7,648 (1,5); 7,507 (4,1); 7,486 (3,4); 4,360 (0,5); 4,342 (0,5); 4,086 (1,0); 4,068 (2,9); 4,050 (3,0); 4,032 (1,1); 2,162 (61,1); 2,149 (10,3); 2,120 (0,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,4); 1,972 (13,4); 1,965 (4,8); 1,959 (8,2); 1,953 (30,5); 1,947 (52,3); 1,940 (68,1); 1,934 (48,2); 1,928 (27,3); 1,769 (0,4); 1,596 (1,8); 1,581 (4,5);

1,574 (4,4); 1,561 (2,8); 1,437 (16,0); 1,422 (1,2); 1,401 (0,5); 1,371 (0,6); 1,361 (2,6); 1,353 (1,9); 1,347 (4,6); 1,341 (4,6); 1,336 (1,5); 1,326 (2,3); 1,268 (1,6); 1,222 (3,7); 1,204 (7,2); 1,186 (3,8); 0,000 (2,2)
Ejemplo I-T3-24: RMN de ^{1}H (600,1 MHz, CD3CN): δ= 8,189 (6,2); 8,144 (6,7); 7,897 (10,1); 7,690 (3,8); 7,687 (4,5); 7,652 (2,6); 7,648 (2,1); 7,638 (2,8); 7,634 (2,4); 7,471 (4,4); 7,457 (3,7); 6,891 (1,0); 5,446 (2,0); 4,077 (2,0); 4,065 (6,2); 4,053 (6,2); 4,041 (2,1); 2,864 (0,8); 2,857 (1,1); 2,852 (1,7); 2,845 (1,7); 2,839 (1,1); 2,833 (0,8); 2,129 (55,4); 2,054 (0,5); 2,050 (0,7); 2,046 (0,5); 1,971 (27,5); 1,963 (6,3); 1,955 (8,8); 1,951 (10,1); 1,947 (46,9); 1,943 (78,2); 1,939 (115,2); 1,935 (77,9); 1,931 (39,3); 1,922 (0,5); 1,828 (0,4); 1,824 (0,6); 1,820 (0,4); 1,437 (16,0); 1,270 (0,4); 1,216 (7,4); 1,204 (14,6); 1,192 (7,3); 0,786 (1,0); 0,777 (2,8); 0,774 (3,6); 0,765 (3,6); 0,762 (2,7); 0,754 (1,2); 0,606 (1,1); 0,599 (2,9); 0,598 (2,9); 0,595 (3,0); 0,591 (2,8); 0,588 (2,8); 0,580 (0,9); 0,005 (2,1); 0,000 (69,9); -0,006 (2,2)
Ejemplo I-T3-25: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,201 (9,9); 8,163 (10,8); 7,899 (16,0); 7,738 (5,9); 7,734 (7,4); 7,710 (4,2); 7,706 (3,3); 7,696 (4,6); 7,693 (4,0); 7,522 (6,8); 7,508 (5,8); 7,328 (1,4); 7,265 (0,6); 7,251 (1,5); 7,239 (1,1); 7,195 (1,4); 7,183 (1,0); 7,162 (0,5); 7,150 (0,7); 5,446 (1,0); 4,127 (1,3); 4,116 (1,5); 4,111 (4,2); 4,100 (4,3); 4,095 (4,5); 4,085 (4,3); 4,080 (1,7); 4,069 (1,4); 2,328 (5,9); 2,134 (32,5); 2,132 (53,6); 2,058 (0,4); 2,054 (0,6); 2,050 (1,0); 2,046 (0,7); 1,971 (1,2); 1,964 (7,9); 1,955 (12,2); 1,951 (13,8); 1,947 (67,1); 1,943 (113,1); 1,939 (165,4); 1,935 (111,4); 1,931 (56,0); 1,833 (0,5); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,437 (5,7); 1,269 (0,8); 1,204 (0,6); 1,192 (0,3); 0,000 (1,4)
Ejemplo I-T3-26: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,222 (8,5); 8,184 (9,2); 8,183 (8,4); 7,933 (13,8); 7,743 (5,6); 7,739 (6,7); 7,712 (3,8); 7,709 (3,0); 7,699 (4,2); 7,695 (3,6); 7,530 (6,3); 7,516 (5,4); 7,228 (0,3); 7,216

(0,4); 7,172 (1,1); 5,481 (0,5); 4,022 (0,9); 3,653 (2,8); 3,641 (6,5); 3,631 (6,6); 3,620 (2,9); 2,605 (0,6); 2,594 (1,2); 2,586 (2,0); 2,582 (0,9); 2,575 (3,7); 2,568 (2,2); 2,564 (2,1); 2,556 (3,9); 2,549 (0,9); 2,545 (2,0); 2,538 (1,3); 2,527 (0,6); 2,505 (0,6); 2,502 (1,0); 2,499 (1,4); 2,496 (1,0); 2,361 (1,2); 2,216 (233,1); 2,214 (233,8); 2,213 (216,8); 2,211 (239,7); 2,210 (216,4); 2,206 (358,9); 2,092 (0,7); 2,088 (1,2); 2,084 (1,6); 2,080 (1,2); 2,076 (0,6); 2,005 (1,3); 1,998 (14,1); 1,990 (21,9); 1,985 (26,7); 1,982 (121,7); 1,978 (205,2); 1,973 (304,1); 1,969 (210,4); 1,965 (107,9); 1,867 (0,7); 1,863 (1,2); 1,859 (1,7); 1,855 (1,2); 1,850 (0,6); 1,470 (16,0); 1,303 (0,4); 1,237 (0,6); 0,033 (1,8)
Ejemplo I-T3-27: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,439 (6,6); 8,693 (9,5); 8,441 (9,4); 8,317 (0,9); 8,274 (16,0); 7,807 (2,2); 7,802 (3,8); 7,792 (5,8); 7,786 (9,9); 7,569 (5,1); 7,553 (1,2); 7,546 (4,2); 4,020 (0,3); 3,568 (10,9); 3,328 (401,1); 2,675 (2,2); 2,671 (2,9); 2,666 (2,2); 2,506 (372,0); 2,502 (465,0); 2,497 (338,4); 2,333 (2,3); 2,328 (2,9); 2,324 (2,1); 1,989 (1,3); 1,615 (2,4); 1,601 (6,2); 1,594 (6,2); 1,581 (2,5); 1,398 (5,4); 1,287 (2,8); 1,274 (6,1); 1,267 (6,2); 1,253 (2,2); 1,235 (0,4); 1,192 (0,4); 1,175 (0,7); 1,157 (0,4); 0,146 (0,7); 0,000 (164,4); -0,008 (7,8); -0,150 (0,8)
Ejemplo I-T3-28: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,684 (0,4); 8,672 (9,5); 8,535 (3,2); 8,524 (3,2); 8,453 (0,3); 8,427 (9,5); 8,271 (16,0); 7,749 (2,3); 7,744 (3,3); 7,723 (12,2); 7,519 (4,6); 7,498 (3,9); 4,056 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,568 (7,8); 3,329 (74,2); 2,857 (0,9); 2,848 (1,3); 2,839 (1,9); 2,829 (2,0); 2,820 (1,3); 2,811 (0,9); 2,801 (0,3); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,4); 2,524 (1,5); 2,511 (34,6); 2,507 (68,9); 2,502 (89,7); 2,498 (64,3); 2,493 (30,8); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 1,989 (6,1); 1,397 (15,9); 1,193 (1,6); 1,175 (3,1); 1,157 (1,6); 0,728 (1,3); 0,716 (3,7); 0,711 (4,9); 0,698 (4,7); 0,693 (3,9); 0,681 (1,6); 0,561 (1,7); 0,551 (5,1); 0,544 (4,7); 0,535 (4,1); 0,523 (1,2); 0,008

(1,4); 0,000 (37,7); -0,008 (1,4)
Ejemplo I-T3-29: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,042 (6,2); 9,036 (6,0); 8,962 (0,4); 8,831 (6,4); 8,826 (6,3); 8,807 (9,8); 8,678 (3,3); 8,668 (3,2); 8,507 (9,6); 8,478 (0,5); 8,385 (3,9); 8,379 (6,4); 8,374 (3,5); 8,111 (16,0); 3,368 (0,3); 3,367 (0,3); 3,365 (0,4); 3,362 (0,5); 3,361 (0,6); 3,360 (0,6); 3,357 (0,7); 3,356 (0,8); 3,350 (1,8); 3,330 (278,8); 3,313 (3,5); 3,309 (2,7); 3,308 (2,6); 3,306 (2,5); 3,297 (1,0); 3,295 (1,0); 3,294 (0,9); 3,287 (0,6); 3,284 (0,5); 3,281 (0,4); 3,279 (0,4); 3,277 (0,4); 2,915 (0,4); 2,905 (1,0); 2,896 (1,5); 2,887 (2,2); 2,877 (2,3); 2,869 (1,5); 2,859 (1,1); 2,849 (0,4); 2,711 (0,4); 2,671 (0,3); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,8); 2,558 (0,9); 2,557 (1,1); 2,555 (1,4); 2,542 (109,1); 2,533 (2,6); 2,532 (2,3); 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,8); 2,525 (1,9); 2,524 (2,0); 2,523 (2,0); 2,511 (15,9); 2,507 (30,0); 2,502 (38,9); 2,498 (28,5); 2,494 (14,2); 2,368 (0,4); 2,130 (0,7); 1,234 (0,5); 0,765 (1,4); 0,752 (4,2); 0,747 (5,5); 0,735 (5,4); 0,729 (4,4); 0,717 (2,0); 0,696 (0,3); 0,618 (2,1); 0,608 (5,9); 0,602 (5,4); 0,592 (4,5); 0,580 (1,5); 0,146 (0,5); 0,022 (0,4); 0,021 (0,5); 0,020 (0,6); 0,019 (0,7); 0,017 (0,7); 0,016 (0,9); 0,008 (6,5); 0,000 (110,7); -0,009 (5,4); -0,013 (2,0); -0,014 (1,7); -0,015 (1,6); -0,016 (1,4); -0,018 (1,3); -0,019 (1,2); -0,020 (1,1); -0,021 (1,0); -0,023 (1,0); -0,024 (0,9); -0,025 (0,9); -0,026 (0,8); -0,027 (0,7); -0,029 (0,7); -0,031 (0,5); -0,034 (0,5); -0,035 (0,4); -0,036 (0,4); -0,150 (0,5)
Ejemplo I-T3-30: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,562 (6,5); 9,101 (6,1); 9,095 (6,1); 8,989 (0,4); 8,855 (6,3); 8,850 (6,4); 8,829 (9,9); 8,5253 (9,7); 8,5245 (9,7); 8,496 (0,5); 8,438 (3,7); 8,432 (6,4); 8,427 (3,6); 8,115 (16,0); 5,759 (0,5); 3,361 (0,8); 3,329 (283,9); 2,712 (0,5); 2,671 (0,4); 2,568 (0,3); 2,567 (0,4); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,7); 2,558 (0,9); 2,557 (1,0); 2,555 (1,2); 2,554 (1,5); 2,542 (137,6); 2,533 (2,7); 2,532 (2,2); 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,7); 2,525 (1,8); 2,524 (1,8);

2,523 (1,9); 2,511 (16,2); 2,507 (31,6); 2,502 (41,8); 2,498 (30,6); 2,493 (15,2); 2,368 (0,5); 1,631 (2,6); 1,617 (6,5); 1,610 (6,6); 1,597 (3,0); 1,348 (3,1); 1,334 (6,6); 1,328 (6,6); 1,313 (2,5); 1,234 (0,4); 0,146 (0,5); 0,026 (0,3); 0,025 (0,4); 0,024 (0,4); 0,022 (0,5); 0,021 (0,6); 0,020 (0,6); 0,019 (0,7); 0,016 (0,9); 0,008 (5,8); 0,000 (109,7); -0,008 (4,9); -0,014 (1,3); -0,015 (1,2); -0,016 (1,1); -0,018 (1,0); -0,019 (0,9); -0,020 (0,9); -0,023 (0,7); -0,024 (0,6); -0,025 (0,6); -0,027 (0,5); -0,029 (0,4); -0,030 (0,4); -0,031 (0,4); -0,150 (0,5)
Ejemplo I-T3-31: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 19,953 (0,4); 8,476 (0,6); 8,461 (16,0); 8,193 (0,3); 8,170 (0,6); 8,156 (14,9); 8,148 (0,5); 8,052 (0,3); 7,934 (7,1); 7,931 (7,2); 7,901 (0,6); 7,866 (5,7); 7,852 (8,0); 7,779 (4,3); 7,765 (3,1); 7,707 (9,8); 7,703 (11,5); 7,689 (0,7); 7,669 (6,5); 7,665 (5,3); 7,655 (7,3); 7,651 (6,3); 7,609 (0,4); 7,477 (11,0); 7,463 (9,5); 6,905 (2,4); 3,912 (2,1); 2,873 (0,6); 2,866 (1,9); 2,860 (2,7); 2,854 (4,1); 2,848 (4,3); 2,842 (2,7); 2,836 (2,0); 2,830 (0,7); 2,145 (513,7); 2,068 (0,6); 2,064 (0,6); 2,060 (3,3); 2,056 (5,5); 2,052 (8,1); 2,048 (5,6); 2,044 (2,9); 1,966 (31,6); 1,958 (83,8); 1,953 (98,4); 1,950 (560,5); 1,945 (964,6); 1,941 (1429,4); 1,937 (989,8); 1,933 (503,8); 1,925 (8,1); 1,843 (0,3); 1,835 (3,0); 1,831 (5,4); 1,827 (7,9); 1,823 (5,4); 1,818 (2,7); 1,340 (0,3); 1,285 (0,7); 1,269 (2,9); 1,123 (0,4); 0,882 (0,7); 0,790 (2,5); 0,782 (6,8); 0,779 (9,4); 0,770 (9,0); 0,767 (7,4); 0,759 (3,0); 0,744 (0,4); 0,732 (0,4); 0,636 (0,4); 0,609 (2,9); 0,601 (7,4); 0,598 (7,8); 0,595 (7,3); 0,592 (7,5); 0,583 (2,4); 0,097 (2,5); 0,005 (17,5); 0,000 (598,4); -0,006 (20,1); -0,100 (2,5)
Ejemplo I-T3-32: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 19,978 (0,8); 8,505 (16,0); 8,234 (0,7); 8,197 (15,1); 7,962 (7,3); 7,933 (1,0); 7,901 (6,0); 7,887 (8,2); 7,812 (4,3); 7,798 (3,2); 7,785 (9,1); 7,781 (11,3); 7,755 (6,0); 7,752 (4,8); 7,742 (6,5); 7,738 (5,8); 7,557 (10,5); 7,543 (9,3); 7,451 (1,9); 7,284 (1,2); 7,272 (0,9); 7,228 (1,1); 7,216 (0,9); 7,183 (0,6); 5,481 (0,6); 4,162 (2,0);

4,151 (2,3); 4,147 (6,6); 4,136 (6,5); 4,131 (7,2); 4,120 (6,5); 4,115 (3,0); 4,104 (2,2); 3,946 (0,8); 2,497 (1,3); 2,361 (4,7); 2,211 (114,1); 2,208 (135,0); 2,203 (158,6); 2,200 (140,9); 2,198 (164,0); 2,092 (0,8); 2,088 (1,1); 2,084 (1,6); 2,080 (1,1); 1,997 (12,7); 1,989 (19,6); 1,985 (22,3); 1,981 (108,3); 1,977 (181,4); 1,973 (268,0); 1,969 (184,4); 1,965 (94,6); 1,862 (1,0); 1,858 (1,5); 1,854 (1,1); 1,303 (1,1); 0,033 (2,1)
Ejemplo I-T3-33: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,489 (10,8); 8,221 (0,7); 8,184 (10,0); 7,966 (4,8); 7,932 (1,1); 7,902 (4,0); 7,888 (5,4); 7,813 (3,0); 7,799 (2,1); 7,759 (6,4); 7,755 (7,3); 7,725 (4,1); 7,722 (3,2); 7,712 (4,4); 7,708 (3,5); 7,533 (7,0); 7,519 (5,9); 7,111 (1,4); 3,659 (3,4); 3,648 (7,7); 3,637 (7,6); 3,626 (3,3); 2,609 (0,8); 2,598 (1,4); 2,591 (2,3); 2,579 (4,4); 2,572 (2,5); 2,568 (2,5); 2,561 (4,4); 2,549 (2,4); 2,542 (1,5); 2,531 (0,8); 2,184 (375,5); 2,182 (324,4); 2,181 (324,2); 2,177 (394,7); 2,173 (444,9); 2,092 (1,2); 2,088 (2,1); 2,084 (3,3); 2,080 (2,2); 2,076 (1,1); 1,998 (27,5); 1,990 (42,2); 1,985 (47,1); 1,981 (234,7); 1,977 (393,2); 1,973 (581,0); 1,969 (400,8); 1,965 (207,8); 1,867 (1,2); 1,863 (2,2); 1,859 (3,3); 1,855 (2,2); 1,850 (1,2); 1,471 (16,0); 1,303 (1,3); 0,033 (3,4)
Ejemplo I-T3-34: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,493 (16,0); 8,193 (15,4); 8,099 (0,4); 8,087 (6,7); 8,065 (8,0); 7,850 (4,4); 7,827 (4,3); 7,815 (7,2); 7,752 (9,3); 7,747 (11,6); 7,720 (6,3); 7,715 (4,4); 7,699 (7,2); 7,694 (5,8); 7,569 (4,2); 7,514 (10,8); 7,493 (8,8); 4,012 (0,8); 3,891 (0,5); 3,458 (0,5); 3,452 (0,5); 3,236 (1,8); 3,067 (0,5); 3,056 (0,5); 2,848 (0,4); 2,140 (115,1); 2,120 (1,0); 2,114 (1,4); 2,108 (1,6); 2,102 (1,2); 2,095 (0,6); 1,972 (1,7); 1,965 (8,4); 1,958 (21,0); 1,953 (103,8); 1,947 (185,9); 1,940 (245,9); 1,934 (166,9); 1,928 (84,5); 1,781 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,756 (0,6); 1,605 (4,6); 1,591 (11,9); 1,584 (11,8); 1,570 (6,0); 1,530 (0,8); 1,437 (6,2); 1,407 (0,7); 1,367 (6,3); 1,353 (11,8); 1,346 (12,0); 1,332 (4,7); 1,294 (0,6); 1,269 (5,1); 1,204 (0,6); 0,882 (0,6); 0,146 (1,2); 0,008 (11,5); 0,000 (282,0); -0,009 (9,7); -0,150 (1,3)

Ejemplo I-T3-35: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,496 (0,7); 8,480 (16,0); 8,182 (15,3); 8,181 (14,8); 8,087 (6,6); 8,065 (7,9); 7,848 (4,7); 7,825 (4,8); 7,812 (7,7); 7,702 (9,9); 7,697 (11,9); 7,670 (6,9); 7,664 (4,9); 7,649 (7,8); 7,643 (6,3); 7,481 (10,8); 7,460 (8,6); 6,929 (2,9); 2,887 (0,7); 2,877 (2,1); 2,868 (2,9); 2,859 (4,5); 2,849 (4,5); 2,841 (2,9); 2,831 (2,1); 2,822 (0,7); 2,467 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,153 (188,6); 2,120 (0,8); 2,114 (1,1); 2,108 (1,3); 2,102 (0,9); 2,096 (0,5); 1,972 (2,2); 1,965 (8,7); 1,959 (23,3); 1,953 (95,7); 1,947 (167,7); 1,941 (215,6); 1,934 (146,4); 1,928 (73,1); 1,781 (0,5); 1,775 (0,9); 1,769 (1,2); 1,763 (0,8); 1,757 (0,4); 1,437 (6,9); 1,269 (0,6); 1,204 (0,5); 0,800 (2,4); 0,788 (7,7); 0,783 (9,7); 0,770 (10,2); 0,765 (7,3); 0,753 (3,1); 0,731 (0,4); 0,713 (0,4); 0,656 (0,4); 0,646 (0,4); 0,617 (3,3); 0,605 (8,7); 0,599 (9,2); 0,595 (8,3); 0,590 (7,6); 0,577 (2,2); 0,522 (0,3); 0,146 (1,0); 0,000 (233,4); -0,009 (9,6); -0,150 (1,0)
Ejemplo I-T3-36: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,496 (16,0); 8,192 (15,3); 8,093 (6,4); 8,071 (7,7); 7,850 (4,3); 7,827 (4,3); 7,814 (7,1); 7,749 (9,1); 7,743 (11,5); 7,726 (6,8); 7,721 (4,1); 7,706 (7,6); 7,700 (5,6); 7,532 (10,3); 7,511 (8,3); 7,340 (2,4); 4,149 (2,3); 4,132 (2,8); 4,125 (7,1); 4,109 (7,4); 4,102 (7,4); 4,085 (7,2); 4,078 (2,6); 4,061 (2,3); 2,137 (51,6); 2,120 (0,6); 2,114 (0,9); 2,108 (1,0); 2,102 (0,7); 2,095 (0,4); 1,965 (6,7); 1,958 (18,2); 1,953 (74,7); 1,946 (129,6); 1,940 (165,9); 1,934 (111,8); 1,928 (55,4); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,437 (3,7); 1,270 (0,3); 0,146 (0,8); 0,008 (11,2); 0,000 (188,1); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)
Ejemplo I-T3-37: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,518 (0,5); 8,490 (16,0); 8,238 (0,5); 8,193 (14,9); 8,090 (6,7); 8,069 (7,7); 7,850 (4,2); 7,827 (4,0); 7,814 (6,7); 7,735 (9,2); 7,729 (11,3); 7,717 (0,4); 7,696 (6,1); 7,690 (4,5); 7,675 (7,0); 7,669 (5,9); 7,587 (0,4); 7,536 (0,3); 7,514 (0,6); 7,504 (11,0); 7,494 (0,6); 7,483 (9,1); 7,459 (1,7); 7,445 (1,6); 6,694 (0,4); 6,666 (0,3);

5,364 (0,6); 5,343 (2,4); 5,322 (4,7); 5,301 (4,6); 5,280 (2,4); 5,259 (0,7); 4,006 (0,5); 3,589 (0,4); 3,567 (0,4); 3,549 (6,1); 3,545 (3,8); 3,525 (11,4); 3,507 (4,3); 3,503 (7,9); 3,379 (8,1); 3,375 (5,1); 3,358 (11,5); 3,355 (10,8); 3,338 (3,6); 3,334 (6,2); 3,067 (0,5); 2,848 (0,5); 2,472 (0,5); 2,468 (1,0); 2,463 (1,3); 2,458 (1,0); 2,453 (0,5); 2,264 (0,3); 2,245 (0,4); 2,151 (305,9); 2,120 (1,6); 2,114 (2,3); 2,107 (2,8); 2,101 (2,0); 2,095 (1,0); 2,022 (1,9); 2,003 (0,5); 1,964 (14,6); 1,958 (33,8); 1,952 (185,3); 1,946 (333,6); 1,940 (449,3); 1,934 (307,4); 1,928 (157,3); 1,915 (1,9); 1,781 (1,0); 1,775 (1,8); 1,768 (2,5); 1,762 (1,7); 1,756 (0,8); 1,269 (2,1); 0,146 (3,1); 0,025 (0,7); 0,008 (22,9); 0,000 (696,9); -0,009 (23,3); -0,150 (3,1)
Ejemplo I-T3-38: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,238 (7,9); 8,119 (7,5); 7,748 (4,6); 7,742 (5,7); 7,729 (4,0); 7,711 (3,1); 7,706 (2,3); 7,690 (3,5); 7,685 (2,8); 7,666 (1,4); 7,644 (2,6); 7,595 (5,4); 7,574 (4,0); 7,500 (5,1); 7,479 (4,2); 4,068 (1,0); 4,050 (1,0); 4,032 (0,3); 2,800 (1,9); 2,781 (5,9); 2,762 (6,0); 2,744 (2,0); 2,139 (27,7); 2,120 (0,5); 2,113 (0,5); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 1,972 (4,6); 1,964 (2,9); 1,958 (7,5); 1,952 (33,5); 1,946 (58,9); 1,940 (77,3); 1,933 (53,2); 1,927 (27,2); 1,774 (0,4); 1,768 (0,5); 1,762 (0,3); 1,601 (2,2); 1,587 (6,0); 1,580 (6,0); 1,566 (3,0); 1,526 (0,4); 1,402 (0,3); 1,362 (3,0); 1,348 (6,0); 1,342 (6,1); 1,327 (2,3); 1,270 (1,6); 1,221 (1,2); 1,204 (2,3); 1,186 (1,1); 1,113 (7,7); 1,095 (16,0); 1,076 (7,4); 0,146 (1,1); 0,008 (13,7); 0,000 (231,5); -0,009 (10,7); -0,150 (1,1)
Ejemplo I-T3-39: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,226 (8,7); 8,120 (0,4); 8,108 (8,2); 7,726 (4,1); 7,700 (4,7); 7,694 (5,9); 7,680 (0,5); 7,663 (4,5); 7,657 (3,5); 7,642 (6,1); 7,637 (5,3); 7,593 (5,2); 7,572 (2,8); 7,467 (5,6); 7,447 (4,6); 6,927 (1,4); 3,874 (0,7); 3,051 (0,4); 2,938 (0,4); 2,875 (0,9); 2,865 (1,4); 2,857 (2,1); 2,847 (2,1); 2,838 (1,4); 2,829 (1,0); 2,819 (0,3); 2,798 (2,0); 2,780 (6,2); 2,761 (6,4); 2,742 (2,2); 2,463 (0,4); 2,160 (108,1); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9);

2,108 (1,0); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,972 (0,6); 1,964 (3,4); 1,958 (8,7); 1,952 (47,6); 1,946 (86,2); 1,940 (115,8); 1,934 (80,2); 1,928 (41,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,437 (6,6); 1,270 (1,4); 1,112 (7,8); 1,102 (1,0); 1,093 (16,0); 1,074 (7,6); 0,797 (1,2); 0,784 (3,7); 0,779 (4,7); 0,766 (4,9); 0,761 (3,7); 0,749 (1,7); 0,614 (1,6); 0,602 (4,5); 0,596 (4,5); 0,592 (4,0); 0,587 (4,0); 0,574 (1,2); 0,146 (1,3); 0,008 (10,2); 0,007 (10,2); 0,000 (266,8); -0,008 (11,5); -0,150 (1,3)
Ejemplo I-T3-40: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,241 (8,2); 8,240 (8,8); 8,117 (8,2); 7,746 (4,6); 7,741 (6,2); 7,727 (4,2); 7,718 (3,5); 7,712 (2,4); 7,697 (3,6); 7,691 (3,1); 7,664 (1,4); 7,642 (2,6); 7,597 (5,2); 7,576 (2,7); 7,516 (5,5); 7,495 (4,5); 7,352 (0,9); 4,144 (1,2); 4,128 (1,3); 4,121 (3,6); 4,104 (3,6); 4,097 (3,8); 4,081 (3,6); 4,074 (1,4); 4,057 (1,2); 2,800 (2,0); 2,781 (6,2); 2,763 (6,3); 2,744 (2,1); 2,153 (11,7); 2,149 (14,3); 1,971 (0,5); 1,964 (1,3); 1,958 (3,1); 1,952 (16,8); 1,946 (30,8); 1,940 (41,6); 1,934 (28,7); 1,927 (14,8); 1,436 (10,4); 1,268 (0,4); 1,114 (7,8); 1,095 (16,0); 1,076 (7,6); 0,146 (0,6); 0,008 (4,4); 0,000 (116,7); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)
Ejemplo I-T3-41: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,239 (7,9); 8,122 (7,5); 7,732 (8,1); 7,727 (9,3); 7,689 (3,0); 7,684 (2,4); 7,668 (4,6); 7,663 (4,2); 7,644 (2,6); 7,598 (4,8); 7,577 (2,6); 7,491 (5,3); 7,470 (4,9); 5,342 (1,2); 5,320 (2,4); 5,300 (2,4); 5,279 (1,2); 3,548 (3,0); 3,524 (6,0); 3,502 (4,1); 3,374 (4,1); 3,371 (2,6); 3,354 (6,0); 3,351 (5,6); 3,330 (3,2); 2,803 (1,9); 2,784 (5,9); 2,765 (6,0); 2,746 (2,1); 2,468 (0,8); 2,464 (0,9); 2,459 (0,7); 2,156 (336,8); 2,120 (1,6); 2,114 (2,0); 2,107 (2,3); 2,101 (1,6); 2,095 (1,0); 1,964 (10,5); 1,958 (27,4); 1,952 (132,9); 1,946 (239,9); 1,940 (318,6); 1,934 (221,8); 1,928 (114,5); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,762 (1,3); 1,756 (0,7); 1,437 (0,8); 1,269 (2,2); 1,115 (7,6); 1,096 (16,0); 1,078 (7,4); 0,146 (3,8); 0,008 (39,2); 0,000 (832,6); -0,008 (44,8); -0,150 (4,0)

Ejemplo I-T3-42: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,830 (5,8); 8,821 (4,0); 8,815 (4,0); 8,694 (1,8); 8,683 (1,8); 8,548 (5,3); 8,547 (5,5); 8,315 (0,6); 8,192 (4,1); 8,186 (3,9); 8,107 (8,4); 3,902 (16,0); 3,333 (334,0); 3,243 (1,4); 3,175 (0,9); 3,162 (0,9); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,842 (1,1); 2,833 (0,7); 2,824 (0,5); 2,680 (0,3); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,662 (0,3); 2,542 (0,6); 2,525 (2,7); 2,511 (58,6); 2,507 (116,6); 2,502 (152,6); 2,498 (110,8); 2,493 (53,8); 2,338 (0,3); 2,334 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,909 (0,5); 1,016 (0,6); 1,001 (0,6); 0,757 (0,7); 0,744 (2,0); 0,739 (2,8); 0,727 (2,6); 0,721 (2,2); 0,709 (0,9); 0,566 (0,9); 0,555 (2,6); 0,549 (2,4); 0,545 (2,3); 0,540 (2,2); 0,528 (0,7); 0,008 (0,5); 0,000 (16,2); -0,009 (0,5)
Ejemplo I-T3-43: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,603 (7,1); 8,876 (6,9); 8,870 (6,9); 8,843 (10,4); 8,833 (0,4); 8,554 (10,3); 8,315 (0,8); 8,280 (7,0); 8,274 (6,8); 8,110 (16,0); 3,903 (14,5); 3,434 (0,4); 3,333 (565,4); 3,045 (0,5); 2,869 (0,5); 2,676 (1,3); 2,671 (1,7); 2,667 (1,3); 2,662 (0,7); 2,542 (1,5); 2,524 (5,6); 2,511 (106,6); 2,507 (206,6); 2,502 (266,2); 2,498 (191,5); 2,493 (91,5); 2,338 (0,5); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,643 (2,4); 1,629 (5,7); 1,622 (6,0); 1,609 (2,6); 1,298 (2,9); 1,284 (5,7); 1,277 (6,1); 1,263 (2,3); 1,249 (0,4); 1,236 (0,4); 0,008 (0,8); 0,000 (22,4); -0,009 (0,7)
Ejemplo I-T3-44: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,115 (9,4); 8,071 (10,0); 7,690 (6,4); 7,685 (6,3); 7,668 (1,1); 7,653 (3,9); 7,632 (4,2); 7,586 (0,3); 7,549 (8,1); 7,509 (0,4); 7,463 (5,6); 7,442 (4,5); 6,896 (2,5); 4,068 (0,5); 4,051 (0,5); 2,871 (1,3); 2,862 (1,9); 2,853 (2,6); 2,844 (2,5); 2,835 (1,9); 2,826 (1,2); 2,816 (0,5); 2,452 (2,7); 2,434 (7,4); 2,415 (7,5); 2,396 (2,8); 2,251 (0,5); 2,143 (127,4); 2,113 (3,7); 2,092 (29,0); 1,971 (7,1); 1,952 (73,0); 1,946 (111,8); 1,943 (112,2); 1,940 (130,1); 1,937 (90,9); 1,934 (90,5); 1,928 (48,4); 1,774 (0,6); 1,768 (0,7); 1,437 (3,1); 1,221 (0,7); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 1,082 (8,3); 1,063 (16,0);

1,044 (7,9); 0,794 (1,7); 0,780 (6,1); 0,777 (6,2); 0,764 (6,6); 0,747 (2,1); 0,726 (0,4); 0,610 (2,4); 0,600 (6,7); 0,592 (7,0); 0,572 (1,7); 0,535 (0,4); 0,528 (0,3); 0,524 (0,3); 0,147 (1,4); 0,000 (240,4); -0,149 (1,3)
Ejemplo I-T3-45: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,126 (9,0); 8,092 (9,4); 7,735 (4,9); 7,730 (6,5); 7,710 (3,2); 7,705 (2,4); 7,689 (3,6); 7,684 (3,1); 7,549 (5,9); 7,542 (5,8); 7,513 (5,6); 7,492 (4,6); 7,422 (1,5); 4,140 (1,2); 4,123 (1,5); 4,116 (3,7); 4,100 (3,9); 4,093 (4,1); 4,076 (3,7); 4,069 (1,6); 4,052 (1,2); 3,545 (1,6); 2,464 (1,4); 2,455 (2,7); 2,436 (6,7); 2,417 (6,9); 2,398 (2,4); 2,378 (0,9); 2,253 (0,5); 2,221 (1,4); 2,176 (369,0); 2,126 (0,6); 2,120 (0,7); 2,114 (1,0); 2,108 (1,5); 2,094 (27,0); 1,953 (71,9); 1,947 (129,9); 1,941 (173,4); 1,935 (125,8); 1,928 (67,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,1); 1,763 (0,7); 1,757 (0,4); 1,436 (9,9); 1,269 (0,4); 1,102 (0,5); 1,084 (8,0); 1,065 (16,0); 1,046 (7,7); 1,025 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (393,0); -0,150 (2,0)
Ejemplo I-T3-46: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,127 (4,1); 8,085 (4,4); 7,738 (2,5); 7,732 (3,1); 7,702 (1,6); 7,697 (1,2); 7,681 (1,8); 7,676 (1,5); 7,625 (0,9); 7,551 (2,4); 7,543 (2,3); 7,495 (2,9); 7,474 (2,3); 2,453 (1,1); 2,435 (3,1); 2,416 (3,2); 2,397 (1,1); 2,158 (61,0); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,092 (12,6); 1,964 (2,0); 1,958 (4,9); 1,953 (25,4); 1,946 (45,6); 1,940 (61,1); 1,934 (42,3); 1,928 (21,8); 1,769 (0,4); 1,598 (1,2); 1,583 (3,1); 1,576 (3,1); 1,563 (1,6); 1,437 (16,0); 1,358 (1,6); 1,345 (3,1); 1,338 (3,2); 1,323 (1,3); 1,269 (1,8); 1,083 (4,2); 1,064 (8,8); 1,045 (4,0); 0,146 (0,7); 0,017 (0,4); 0,008 (5,9); 0,000 (150,8); -0,009 (6,1); -0,150 (0,7)
Ejemplo I-T3-47: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (3,6); 8,084 (3,8); 7,721 (2,0); 7,715 (2,5); 7,678 (1,2); 7,673 (1,0); 7,657 (1,4); 7,652 (1,2); 7,551 (2,1); 7,544 (2,1); 7,485 (2,4); 7,464 (2,2); 5,338 (0,6); 5,316 (1,1); 5,296 (1,1); 5,275 (0,6); 3,544 (1,4); 3,520 (2,8); 3,498 (1,8); 3,370 (1,7); 3,349

(2,6); 3,346 (2,4); 3,325 (1,4); 2,456 (0,9); 2,437 (2,6); 2,418 (2,7); 2,399 (0,9); 2,166 (9,4); 2,153 (19,8); 2,107 (0,4); 2,095 (10,7); 1,964 (1,2); 1,958 (3,1); 1,952 (15,2); 1,946 (27,1); 1,940 (36,2); 1,934 (25,2); 1,928 (13,1); 1,437 (16,0); 1,085 (3,2); 1,066 (6,7); 1,047 (3,1); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (86,8); -0,008 (4,3); -0,150 (0,5)
Ejemplo I-T3-48: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,261 (10,8); 8,206 (0,8); 8,193 (16,0); 7,692 (9,7); 7,686 (12,3); 7,675 (1,0); 7,657 (6,5); 7,652 (4,9); 7,637 (9,5); 7,630 (13,3); 7,608 (11,0); 7,475 (11,5); 7,455 (9,1); 6,940 (2,5); 3,911 (0,6); 2,882 (0,7); 2,872 (2,0); 2,863 (2,8); 2,854 (4,4); 2,845 (4,3); 2,836 (2,9); 2,827 (2,0); 2,817 (0,7); 2,467 (0,3); 2,463 (0,4); 2,163 (117,4); 2,120 (0,3); 2,114 (0,5); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (1,7); 1,965 (3,3); 1,959 (8,5); 1,953 (43,3); 1,947 (77,6); 1,941 (103,6); 1,934 (71,4); 1,928 (36,7); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,437 (2,0); 1,269 (0,7); 1,221 (0,4); 1,204 (0,7); 1,186 (0,3); 0,795 (2,4); 0,783 (7,5); 0,778 (9,7); 0,765 (10,2); 0,760 (7,3); 0,748 (3,3); 0,726 (0,4); 0,708 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,614 (3,3); 0,604 (8,6); 0,597 (9,0); 0,593 (7,8); 0,588 (7,7); 0,575 (2,3); 0,514 (0,4); 0,146 (1,3); 0,026 (0,4); 0,008 (10,5); 0,000 (259,4); -0,009 (10,3); -0,150 (1,2)
Ejemplo I-T3-49: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,277 (10,6); 8,206 (16,0); 7,740 (9,1); 7,735 (12,1); 7,709 (6,2); 7,704 (4,7); 7,688 (7,6); 7,683 (7,1); 7,669 (3,6); 7,645 (1,5); 7,631 (10,9); 7,611 (10,7); 7,574 (0,5); 7,510 (11,0); 7,500 (0,6); 7,489 (9,0); 7,475 (0,4); 7,221 (0,4); 5,448 (8,3); 4,034 (0,9); 3,914 (1,0); 3,906 (0,7); 3,897 (0,5); 2,469 (1,1); 2,464 (1,5); 2,460 (1,1); 2,243 (0,4); 2,175 (509,2); 2,120 (1,2); 2,114 (1,7); 2,108 (2,0); 2,102 (1,5); 2,096 (0,9); 1,965 (8,1); 1,959 (21,5); 1,953 (116,7); 1,947 (211,5); 1,941 (284,4); 1,934 (197,6); 1,928 (103,4); 1,781 (0,8); 1,775 (1,3); 1,769 (1,8); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,635 (0,4); 1,598 (4,6); 1,584 (12,3); 1,577 (12,3); 1,563 (6,3); 1,523 (0,8); 1,437 (0,7); 1,403 (0,8); 1,363 (6,4); 1,349 (12,1); 1,342 (12,8); 1,328 (4,9); 1,290 (0,6);

1,270 (2,7); 1,206 (1,3); 1,190 (1,2); 0,882 (0,3); 0,146 (3,5); 0,008 (26,4); 0,000 (693,0); -0,008 (31,4); -0,048 (0,4); -0,150 (3,5)
Ejemplo I-T3-50: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,131 (3,8); 8,120 (0,3); 8,108 (3,8); 7,670 (2,4); 7,664 (2,9); 7,636 (1,7); 7,630 (1,2); 7,615 (1,9); 7,609 (1,6); 7,462 (2,8); 7,441 (2,1); 7,320 (3,0); 7,300 (1,2); 6,909 (0,6); 4,085 (0,5); 4,068 (1,4); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,901 (16,0); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,843 (1,1); 2,834 (0,7); 2,825 (0,5); 2,147 (64,0); 2,114 (0,3); 2,107 (0,4); 1,972 (6,8); 1,964 (3,1); 1,958 (6,8); 1,952 (27,1); 1,946 (46,5); 1,940 (60,6); 1,934 (41,2); 1,928 (20,8); 1,768 (0,3); 1,437 (1,1); 1,221 (1,7); 1,204 (3,2); 1,186 (1,6); 0,793 (0,6); 0,781 (1,8); 0,776 (2,3); 0,763 (2,4); 0,758 (1,7); 0,746 (0,8); 0,610 (0,9); 0,599 (2,1); 0,593 (2,1); 0,589 (1,9); 0,584 (1,8); 0,571 (0,5); 0,146 (0,7); 0,008 (9,0); 0,000 (144,6); -0,009 (5,4); -0,150 (0,7)
Ejemplo I-T3-51: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,206 (0,4); 8,147 (3,5); 8,120 (3,6); 7,717 (2,2); 7,712 (2,8); 7,686 (1,6); 7,680 (1,3); 7,675 (0,4); 7,665 (2,0); 7,659 (1,9); 7,654 (0,6); 7,644 (0,5); 7,630 (0,5); 7,610 (0,3); 7,503 (0,4); 7,495 (2,6); 7,482 (0,3); 7,474 (2,1); 7,321 (2,8); 7,302 (1,1); 4,068 (0,9); 4,050 (0,9); 3,902 (16,0); 2,170 (60,8); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,972 (4,1); 1,965 (2,3); 1,959 (5,7); 1,953 (31,1); 1,947 (56,0); 1,940 (74,9); 1,934 (51,0); 1,928 (25,9); 1,775 (0,3); 1,769 (0,4); 1,595 (1,1); 1,581 (2,7); 1,574 (2,7); 1,560 (1,5); 1,437 (1,0); 1,359 (1,5); 1,346 (2,7); 1,339 (2,8); 1,324 (1,1); 1,222 (1,1); 1,204 (2,1); 1,186 (1,0); 1,140 (0,5); 1,132 (0,6); 0,928 (0,6); 0,921 (0,6); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (187,7); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)
Ejemplo I-T3-52: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,276 (6,4); 8,163 (0,3); 8,151 (6,6); 8,149 (7,0); 8,128 (3,5); 8,104 (1,6); 8,082 (1,8); 7,863 (2,9); 7,842 (2,4); 7,694 (4,0); 7,689 (5,1); 7,680 (0,5); 7,660 (3,0); 7,654 (2,2); 7,639 (3,3); 7,633 (2,8); 7,474 (4,9); 7,454 (3,9); 6,935 (1,1); 4,086 (0,7); 4,068

(2,0); 4,050 (2,1); 4,032 (0,7); 2,873 (0,8); 2,863 (1,2); 2,855 (1,8); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,165 (66,0); 2,163 (75,8); 1,972 (9,5); 1,965 (1,3); 1,959 (3,0); 1,953 (16,9); 1,947 (30,5); 1,941 (41,0); 1,935 (28,3); 1,928 (14,5); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (2,5); 1,204 (4,8); 1,186 (2,4); 0,796 (1,0); 0,784 (2,9); 0,778 (3,9); 0,766 (4,1); 0,761 (3,0); 0,748 (1,4); 0,613 (1,4); 0,602 (3,5); 0,596 (3,5); 0,592 (3,2); 0,587 (3,2); 0,574 (1,0); 0,008 (2,1); 0,000 (62,9); -0,009 (2,3)
Ejemplo I-T3-53: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,291 (3,8); 8,162 (4,2); 8,130 (2,0); 8,108 (0,9); 8,086 (1,0); 7,866 (1,8); 7,844 (1,5); 7,742 (2,5); 7,736 (3,2); 7,709 (2,0); 7,703 (1,5); 7,688 (2,7); 7,682 (2,4); 7,506 (3,0); 7,485 (2,4); 2,196 (8,5); 2,183 (24,4); 1,972 (1,1); 1,965 (0,6); 1,959 (1,4); 1,954 (7,8); 1,947 (14,2); 1,941 (19,1); 1,935 (13,1); 1,929 (6,7); 1,599 (1,3); 1,585 (3,1); 1,578 (3,1); 1,564 (1,7); 1,436 (16,0); 1,362 (1,7); 1,349 (3,0); 1,342 (3,1); 1,327 (1,3); 1,204 (0,6); 0,008 (1,6); 0,000 (44,8); -0,009 (1,6)
Ejemplo I-T3-54: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,162 (0,9); 8,153 (15,7); 8,108 (12,4); 7,996 (6,8); 7,952 (7,0); 7,683 (9,7); 7,678 (12,2); 7,666 (0,8); 7,650 (6,7); 7,644 (4,9); 7,629 (7,9); 7,624 (6,4); 7,513 (0,4); 7,469 (11,7); 7,448 (9,3); 6,931 (2,4); 5,448 (0,6); 4,235 (0,4); 4,218 (0,4); 4,086 (0,6); 4,068 (1,8); 4,057 (0,4); 4,050 (1,8); 4,032 (0,6); 2,879 (0,8); 2,870 (2,2); 2,860 (2,8); 2,852 (4,7); 2,842 (4,7); 2,834 (2,9); 2,824 (2,2); 2,814 (0,7); 2,473 (0,6); 2,468 (1,0); 2,463 (1,4); 2,459 (1,0); 2,454 (0,5); 2,276 (0,4); 2,264 (0,4); 2,245 (0,6); 2,226 (0,8); 2,159 (388,9); 2,116 (47,5); 2,108 (3,9); 2,101 (1,9); 2,095 (1,0); 2,050 (0,8); 2,035 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,0); 1,972 (9,4); 1,964 (12,6); 1,958 (30,5); 1,953 (165,9); 1,946 (298,2); 1,940 (398,5); 1,934 (272,4); 1,928 (139,0); 1,915 (1,9); 1,781 (0,9); 1,775 (1,6); 1,769 (2,3); 1,762 (1,6); 1,756 (0,8); 1,509 (0,3); 1,437 (13,5); 1,341 (0,4); 1,307 (1,0); 1,289 (1,9); 1,269 (16,0); 1,222 (2,4); 1,204 (4,5); 1,186 (2,2); 0,898 (0,7); 0,881 (2,2); 0,864 (1,0); 0,793 (2,4); 0,780 (7,3); 0,775 (9,5); 0,762

(10,1); 0,757 (6,9); 0,745 (3,2); 0,723 (0,5); 0,705 (0,5); 0,650 (0,4); 0,640 (0,5); 0,631 (0,5); 0,626 (0,6); 0,610 (3,5); 0,600 (7,9); 0,598 (7,8); 0,593 (8,2); 0,588 (7,1); 0,583 (7,2); 0,571 (2,4); 0,523 (0,3); 0,393 (0,5); 0,385 (0,5); 0,381 (0,5); 0,376 (0,5); 0,146 (3,4); 0,008 (28,7); 0,000 (825,5); -0,009 (28,8); -0,030 (0,5); -0,150 (3,4)
Ejemplo I-T3-55: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,166 (3,1); 8,165 (3,2); 8,124 (2,4); 8,000 (1,2); 7,954 (1,2); 7,732 (2,0); 7,729 (2,3); 7,697 (1,3); 7,693 (1,1); 7,683 (1,5); 7,679 (1,3); 7,499 (2,3); 7,485 (2,0); 2,180 (8,0); 2,177 (8,1); 2,175 (8,7); 2,172 (9,0); 2,169 (10,1); 2,167 (8,6); 2,163 (12,2); 2,117 (8,6); 1,973 (0,6); 1,966 (0,7); 1,958 (1,9); 1,954 (2,1); 1,950 (12,7); 1,946 (22,2); 1,942 (32,1); 1,938 (21,1); 1,934 (10,5); 1,591 (1,0); 1,581 (2,2); 1,577 (2,2); 1,568 (1,1); 1,436 (16,0); 1,354 (1,2); 1,345 (2,2); 1,341 (2,3); 1,331 (1,0); 1,204 (0,4); 0,005 (1,3); 0,000 (42,8); -0,006 (1,2)
Ejemplo I-T3-56: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,210 (7,6); 8,194 (0,9); 8,186 (15,9); 8,185 (16,0); 8,161 (0,7); 8,149 (14,1); 8,059 (7,6); 7,686 (9,6); 7,681 (12,3); 7,653 (6,8); 7,647 (5,0); 7,632 (7,9); 7,626 (6,5); 7,517 (0,3); 7,473 (11,6); 7,452 (9,1); 6,900 (2,7); 2,878 (0,7); 2,869 (2,1); 2,859 (2,9); 2,851 (4,6); 2,841 (4,6); 2,832 (2,9); 2,823 (2,2); 2,813 (0,7); 2,136 (41,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,6); 2,107 (0,8); 2,101 (0,5); 2,086 (0,4); 1,964 (15,3); 1,958 (9,2); 1,952 (49,0); 1,946 (88,5); 1,940 (118,3); 1,934 (80,8); 1,927 (41,2); 1,915 (0,5); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,270 (0,4); 0,792 (2,4); 0,780 (7,2); 0,775 (9,6); 0,762 (10,1); 0,757 (7,0); 0,745 (3,3); 0,723 (0,4); 0,705 (0,4); 0,650 (0,4); 0,640 (0,4); 0,610 (3,3); 0,600 (8,0); 0,599 (8,0); 0,593 (8,4); 0,589 (7,4); 0,584 (7,5); 0,571 (2,4); 0,520 (0,4); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (218,3); -0,009 (7,6); -0,150 (0,9)
Ejemplo I-T3-57: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,211 (2,2); 8,197 (4,2); 8,163 (3,5); 8,060 (2,1); 7,735 (2,4); 7,730 (3,0); 7,704

(1,6); 7,699 (1,1); 7,683 (1,8); 7,678 (1,5); 7,553 (1,2); 7,508 (2,8); 7,487 (2,3); 2,133 (61,2); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,964 (4,3); 1,958 (11,3); 1,952 (55,5); 1,946 (99,8); 1,940 (134,0); 1,934 (93,4); 1,927 (48,7); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,596 (1,1); 1,582 (3,0); 1,575 (3,1); 1,561 (1,6); 1,437 (16,0); 1,361 (1,6); 1,348 (3,0); 1,341 (3,1); 1,326 (1,2); 1,269 (0,3); 0,146 (1,1); 0,008 (9,0); 0,000 (233,2); -0,009 (12,0); -0,150 (1,0)
Ejemplo I-T3-58: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,212 (1,1); 8,196 (2,4); 8,168 (2,0); 8,062 (1,1); 7,732 (1,4); 7,727 (2,0); 7,710 (1,1); 7,704 (0,7); 7,689 (1,2); 7,683 (1,0); 7,523 (1,8); 7,502 (1,4); 4,139 (0,4); 4,123 (0,4); 4,116 (1,2); 4,099 (1,2); 4,092 (1,3); 4,076 (1,2); 4,068 (0,5); 4,052 (0,4); 2,154 (2,8); 2,152 (3,0); 1,958 (0,6); 1,952 (3,2); 1,946 (5,8); 1,940 (7,8); 1,934 (5,3); 1,928 (2,7); 1,436 (16,0); 0,008 (0,5); 0,000 (14,4); -0,009 (0,5)
Ejemplo I-T3-59: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, d_6-DMSO): δ= 19,976 (2,1); 9,451 (11,5); 9,045 (16,0); 8,978 (7,7); 8,792 (7,9); 8,789 (7,8); 8,502 (16,0); 8,320 (2,2); 7,918 (8,4); 7,914 (11,9); 7,904 (7,1); 7,900 (4,5); 7,890 (6,8); 7,886 (5,6); 7,573 (10,3); 7,560 (9,7); 4,034 (1,6); 4,022 (1,5); 3,338 (576,9); 2,615 (4,0); 2,524 (5,6); 2,521 (7,1); 2,518 (8,3); 2,509 (220,0); 2,506 (474,2); 2,503 (654,0); 2,500 (473,2); 2,497 (216,3); 2,387 (3,5); 1,990 (4,8); 1,615 (4,4); 1,606 (10,1); 1,602 (10,7); 1,593 (4,6); 1,398 (2,2); 1,300 (4,9); 1,291 (9,5); 1,286 (10,1); 1,277 (4,3); 1,175 (3,1); 0,096 (2,5); 0,005 (23,7); 0,000 (635,1); -0,006 (20,4); -0,100 (2,7)
Ejemplo I-T3-60: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, $CDCl_3$): δ= 8,687 (8,6); 8,685 (8,5); 8,596 (15,9); 8,577 (0,6); 8,173 (8,6); 8,168 (8,5); 8,114 (16,0); 7,901 (10,7); 7,896 (11,0); 7,567 (5,3); 7,561 (5,3); 7,555 (1,2); 7,546 (7,0); 7,540 (6,9); 7,483 (0,4); 7,426 (11,9); 7,406 (8,9); 7,264 (25,7); 6,415 (3,4); 5,301 (12,8); 2,991 (0,6); 2,982 (1,7); 2,973 (3,0); 2,964 (4,1); 2,955 (4,1); 2,946 (3,1);

2,937 (1,8); 2,928 (0,7); 1,601 (5,6); 1,378 (1,1); 1,333 (0,6); 1,327 (0,4); 1,285 (1,1); 1,255 (5,4); 0,938 (2,5); 0,921 (10,0); 0,907 (9,8); 0,903 (8,2); 0,890 (3,5); 0,880 (1,2); 0,868 (0,9); 0,862 (0,7); 0,850 (0,9); 0,836 (0,6); 0,742 (0,4); 0,733 (0,4); 0,703 (3,0); 0,689 (8,1); 0,685 (8,5); 0,680 (8,2); 0,676 (7,9); 0,662 (2,4); 0,557 (0,5); 0,551 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (19,7); -0,008 (1,0)
Ejemplo I-T3-61: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,266 (6,2); 8,208 (0,5); 8,195 (8,9); 7,692 (5,7); 7,687 (6,8); 7,678 (0,7); 7,658 (3,7); 7,652 (2,8); 7,637 (4,3); 7,632 (3,5); 7,593 (5,8); 7,572 (5,8); 7,475 (6,2); 7,454 (4,9); 6,962 (1,7); 5,449 (0,9); 4,086 (0,3); 4,068 (1,1); 4,050 (1,1); 4,032 (0,4); 2,882 (0,4); 2,873 (1,2); 2,863 (1,6); 2,855 (2,6); 2,845 (2,6); 2,837 (1,7); 2,827 (1,2); 2,817 (0,4); 2,181 (57,5); 1,972 (4,8); 1,965 (1,5); 1,959 (3,8); 1,953 (16,3); 1,947 (29,0); 1,941 (37,9); 1,935 (26,4); 1,929 (13,7); 1,436 (16,0); 1,268 (0,8); 1,221 (1,3); 1,204 (2,5); 1,186 (1,2); 0,795 (1,3); 0,783 (4,5); 0,777 (5,6); 0,765 (5,9); 0,760 (4,4); 0,747 (1,8); 0,615 (1,8); 0,605 (5,0); 0,603 (5,0); 0,598 (5,5); 0,593 (4,9); 0,588 (4,6); 0,576 (1,4); 0,000 (58,7); -0,009 (3,0)
Ejemplo I-T3-62: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,282 (5,8); 8,209 (9,7); 7,742 (5,2); 7,738 (6,1); 7,705 (3,5); 7,702 (2,9); 7,692 (4,0); 7,688 (3,5); 7,644 (0,8); 7,594 (5,2); 7,580 (5,1); 7,506 (6,4); 7,493 (5,6); 2,197 (13,4); 2,194 (14,8); 2,191 (16,6); 2,188 (16,2); 2,186 (16,6); 2,184 (16,2); 2,181 (15,5); 2,179 (16,7); 1,973 (1,0); 1,967 (1,1); 1,959 (2,7); 1,954 (3,0); 1,951 (18,5); 1,947 (31,7); 1,942 (46,4); 1,938 (30,9); 1,934 (15,5); 1,594 (2,6); 1,584 (6,6); 1,580 (6,4); 1,571 (3,2); 1,544 (0,3); 1,436 (16,0); 1,359 (3,2); 1,350 (6,2); 1,345 (6,8); 1,336 (2,7); 1,266 (0,4); 1,204 (0,5); 0,005 (1,2); 0,000 (39,8); -0,006 (1,3)
Ejemplo I-T3-63: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,666 (5,1); 8,523 (1,9); 8,512 (2,0); 8,389 (5,2); 7,850 (2,9); 7,814 (2,7); 7,736 (1,2); 7,730 (1,9); 7,710 (7,1); 7,511 (2,5); 7,490 (2,1); 3,327 (42,2); 2,856 (0,5);

2,846 (0,8); 2,838 (1,2); 2,828 (1,2); 2,819 (0,8); 2,810 (0,5); 2,671 (0,4); 2,506 (46,0); 2,502 (59,6); 2,498 (46,8); 2,438 (0,6); 2,329 (0,4); 2,203 (0,6); 2,188 (12,9); 1,398 (16,0); 0,727 (0,7); 0,714 (2,3); 0,709 (3,0); 0,697 (2,8); 0,691 (2,5); 0,680 (0,9); 0,560 (0,9); 0,549 (3,0); 0,543 (3,1); 0,534 (2,7); 0,522 (0,7); 0,000 (42,2)
Ejemplo I-T3-64: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,432 (2,1); 8,689 (2,8); 8,404 (2,9); 7,853 (1,5); 7,816 (1,5); 7,795 (0,6); 7,789 (1,2); 7,780 (1,7); 7,775 (2,6); 7,560 (1,6); 7,552 (0,4); 7,538 (1,4); 3,327 (22,2); 2,507 (17,7); 2,502 (23,3); 2,498 (17,9); 2,436 (0,3); 2,189 (6,9); 1,989 (0,4); 1,615 (0,7); 1,600 (1,8); 1,594 (1,9); 1,581 (0,8); 1,398 (16,0); 1,284 (0,8); 1,270 (1,8); 1,264 (2,0); 1,249 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (19,4)
Ejemplo I-T3-65: RMN de ^{1}H (500,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,726 (2,4); 8,559 (1,7); 8,556 (1,8); 8,306 (2,2); 7,930 (0,7); 7,914 (1,5); 7,897 (0,8); 7,588 (3,9); 7,467 (1,5); 7,450 (1,4); 3,305 (13,5); 2,508 (2,9); 2,504 (6,0); 2,501 (8,2); 2,497 (6,1); 2,494 (3,0); 2,106 (16,0); 1,645 (0,8); 1,634 (2,0); 1,628 (2,1); 1,617 (0,8); 1,239 (1,1); 1,228 (2,0); 1,222 (2,1); 1,211 (0,8); 0,000 (5,4)
Ejemplo I-T3-66: RMN de ^{1}H (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,726 (4,5); 8,587 (3,6); 8,583 (3,6); 8,305 (4,5); 7,934 (1,5); 7,913 (3,1); 7,892 (1,7); 7,597 (3,1); 7,562 (3,1); 7,468 (3,1); 7,447 (2,9); 5,753 (0,4); 3,427 (0,5); 3,307 (130,4); 3,283 (0,9); 3,236 (0,8); 2,669 (0,5); 2,504 (61,2); 2,500 (82,9); 2,496 (61,6); 2,431 (1,1); 2,412 (3,4); 2,394 (3,5); 2,375 (1,2); 2,327 (0,5); 2,322 (0,4); 2,087 (16,0); 1,987 (0,6); 1,648 (1,6); 1,634 (4,0); 1,628 (4,2); 1,614 (1,7); 1,463 (0,4); 1,240 (2,1); 1,227 (4,0); 1,220 (4,2); 1,206 (1,5); 1,174 (0,4); 1,031 (5,0); 1,012 (10,6); 0,993 (4,8); 0,146 (0,6); 0,008 (5,8); 0,000 (128,9); -0,150 (0,6)
Ejemplo I-T3-67: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,778 (1,2); 8,767 (1,2); 8,544 (1,7); 8,539 (1,8); 8,297 (2,1); 7,876 (0,8); 7,855 (1,5); 7,834 (0,8); 7,593 (3,9); 7,418 (1,5); 7,397 (1,4); 3,903 (3,9); 3,331 (120,3);

2,855 (0,5); 2,846 (0,7); 2,836 (0,7); 2,827 (0,5); 2,818 (0,3); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,6); 2,524 (2,0); 2,511 (45,1); 2,507 (87,8); 2,502 (113,1); 2,498 (83,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,120 (0,9); 2,105 (16,0); 0,752 (0,4); 0,739 (1,3); 0,734 (1,7); 0,721 (1,7); 0,716 (1,4); 0,704 (0,5); 0,522 (0,6); 0,511 (1,6); 0,505 (1,6); 0,501 (1,5); 0,496 (1,5); 0,483 (0,5); 0,000 (6,3)
Ejemplo I-T3-68: RMN de ^{1}H (500,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,752 (2,4); 8,743 (2,4); 8,561 (3,4); 8,558 (3,7); 8,289 (4,4); 7,868 (1,5); 7,851 (3,0); 7,834 (1,6); 7,597 (3,0); 7,563 (3,0); 7,411 (3,0); 7,394 (2,9); 3,304 (38,0); 2,861 (0,6); 2,854 (0,9); 2,847 (1,4); 2,839 (1,4); 2,831 (0,9); 2,824 (0,7); 2,507 (6,9); 2,504 (14,1); 2,500 (19,4); 2,497 (14,5); 2,493 (7,2); 2,426 (1,2); 2,411 (3,5); 2,396 (3,6); 2,381 (1,2); 2,101 (1,1); 2,089 (16,0); 1,029 (5,5); 1,013 (11,1); 0,998 (5,0); 0,746 (0,9); 0,736 (2,7); 0,732 (3,5); 0,722 (3,4); 0,718 (2,8); 0,708 (1,0); 0,521 (1,1); 0,512 (3,3); 0,508 (3,3); 0,505 (3,1); 0,500 (3,1); 0,490 (0,9); 0,006 (0,7); 0,000 (14,7); -0,007 (0,6)
Ejemplo I-T3-69: RMN de ^{1}H (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,352 (4,3); 8,553 (4,2); 8,286 (4,4); 7,965 (1,0); 7,946 (2,0); 7,927 (1,1); 7,601 (3,3); 7,567 (3,5); 7,478 (0,9); 7,460 (2,0); 7,444 (1,3); 7,350 (2,0); 7,331 (3,4); 7,312 (1,5); 3,342 (0,4); 3,308 (118,1); 3,290 (0,6); 2,669 (0,3); 2,504 (47,2); 2,500 (55,9); 2,496 (39,1); 2,443 (1,2); 2,425 (3,6); 2,406 (3,6); 2,387 (1,2); 2,327 (0,3); 2,097 (16,0); 1,595 (1,7); 1,581 (4,8); 1,574 (4,3); 1,561 (1,8); 1,293 (2,0); 1,279 (4,8); 1,273 (4,3); 1,258 (1,6); 1,236 (0,8); 1,041 (4,9); 1,022 (10,0); 1,003 (4,6); 0,000 (32,0); -0,008 (1,3)
Ejemplo I-T3-70: RMN de ^{1}H (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,528 (3,4); 8,524 (3,6); 8,456 (1,7); 8,445 (1,7); 8,270 (4,0); 7,896 (0,9); 7,891 (0,9); 7,877 (1,7); 7,873 (1,8); 7,858 (1,0); 7,854 (0,9); 7,598 (2,8); 7,565 (2,8); 7,403 (0,8); 7,399 (0,8); 7,384 (1,7); 7,368 (1,2); 7,364 (1,1); 7,303 (2,5); 7,284 (3,9); 7,265

(1,7); 3,309 (77,4); 2,875 (0,6); 2,866 (0,8); 2,857 (1,3); 2,847 (1,4); 2,839 (0,8); 2,829 (0,6); 2,509 (11,1); 2,505 (23,7); 2,500 (33,3); 2,496 (24,3); 2,491 (11,5); 2,442 (1,1); 2,423 (3,4); 2,404 (3,5); 2,386 (1,2); 2,096 (16,0); 1,236 (0,6); 1,040 (5,1); 1,021 (11,2); 1,002 (5,0); 0,725 (0,9); 0,712 (2,5); 0,707 (3,5); 0,695 (3,3); 0,689 (2,7); 0,677 (1,2); 0,557 (1,2); 0,546 (3,4); 0,540 (3,0); 0,536 (2,8); 0,530 (2,8); 0,518 (0,9); 0,008 (0,7); 0,000 (21,2); -0,009 (0,8)
Ejemplo I-T3-71: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,160 (3,6); 8,139 (3,7); 7,764 (2,0); 7,739 (2,0); 7,733 (2,7); 7,704 (1,3); 7,699 (1,2); 7,683 (3,4); 7,678 (2,3); 7,553 (1,2); 7,502 (2,4); 7,481 (1,9); 3,060 (0,5); 2,851 (0,5); 2,520 (0,8); 2,501 (2,5); 2,482 (2,5); 2,463 (0,9); 2,134 (30,8); 2,114 (0,4); 2,107 (0,5); 2,101 (0,4); 1,964 (2,0); 1,958 (4,9); 1,952 (28,1); 1,946 (52,7); 1,940 (72,6); 1,934 (52,6); 1,928 (28,4); 1,768 (0,4); 1,762 (0,3); 1,598 (1,0); 1,583 (2,5); 1,577 (2,7); 1,563 (1,4); 1,437 (16,0); 1,361 (1,3); 1,347 (2,7); 1,340 (2,9); 1,326 (1,1); 1,102 (3,5); 1,083 (7,4); 1,064 (3,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,1); 0,000 (97,3); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-72: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,150 (5,4); 8,130 (5,6); 7,764 (2,7); 7,689 (4,2); 7,684 (6,5); 7,655 (1,9); 7,650 (1,5); 7,634 (2,2); 7,629 (1,9); 7,469 (3,6); 7,448 (2,9); 6,939 (0,9); 2,871 (0,6); 2,862 (0,9); 2,853 (1,4); 2,843 (1,4); 2,834 (1,0); 2,825 (0,6); 2,518 (1,2); 2,499 (3,7); 2,480 (3,8); 2,462 (1,4); 2,168 (77,5); 2,114 (0,3); 2,108 (0,4); 1,965 (1,9); 1,959 (4,8); 1,953 (25,8); 1,947 (47,0); 1,941 (63,4); 1,935 (44,6); 1,929 (23,7); 1,769 (0,4); 1,437 (16,0); 1,100 (5,0); 1,081 (10,2); 1,062 (4,8); 0,794 (0,8); 0,781 (2,3); 0,776 (3,1); 0,763 (3,2); 0,758 (2,4); 0,746 (1,1); 0,611 (1,0); 0,600 (2,8); 0,594 (2,9); 0,590 (2,6); 0,585 (2,6); 0,572 (0,8); 0,146 (0,3); 0,008 (2,6); 0,000 (69,9); -0,008 (4,3); -0,149 (0,3)
Ejemplo I-T3-73: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,77 (0,0325); 8,76 (0,0329); 8,67 (0,0447); 8,40 (0,0688); 8,07 (0,1396); 7,89 (0,0039); 7,88 (0,0202); 7,87 (0,0405); 7,43 (0,0406); 7,42 (0,0383); 3,78 (0,0029); 3,59 (0,0071); 3,30 (1,0000); 3,17 (0,0044); 3,16 (0,0042); 2,85 (0,0123); 2,84 (0,0187); 2,83 (0,0088); 2,64 (0,0025); 2,50 (0,4120); 2,37 (0,0016); 1,24 (0,0054); 0,73 (0,0482); 0,72 (0,0467); 0,71 (0,0149); 0,52 (0,0154); 0,50 (0,0420); 0,49 (0,0128); 0,12 (0,0012); 0,00 (0,2886); -0,12 (0,0012)
Ejemplo I-T3-74: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,381 (5,5); 8,653 (5,5); 8,317 (0,7); 8,293 (5,6); 7,988 (1,2); 7,984 (1,3); 7,969 (2,4); 7,965 (2,4); 7,950 (1,4); 7,946 (1,3); 7,747 (4,4); 7,734 (1,5); 7,713 (7,2); 7,706 (4,3); 7,683 (0,7); 7,493 (1,1); 7,489 (1,2); 7,474 (2,5); 7,458 (1,6); 7,454 (1,5); 7,362 (3,0); 7,343 (5,1); 7,324 (2,2); 3,903 (11,7); 3,333 (264,8); 3,267 (0,3); 3,174 (0,6); 3,162 (0,6); 2,802 (1,7); 2,783 (5,4); 2,765 (5,5); 2,746 (1,8); 2,676 (1,4); 2,672 (1,9); 2,667 (1,4); 2,542 (1,1); 2,525 (5,6); 2,511 (121,2); 2,507 (238,9); 2,503 (309,3); 2,498 (228,5); 2,494 (115,5); 2,334 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,603 (2,2); 1,589 (5,6); 1,582 (6,0); 1,569 (2,6); 1,298 (2,8); 1,285 (5,7); 1,278 (6,1); 1,264 (2,3); 1,237 (0,5); 1,060 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,2); 0,008 (0,6); 0,000 (17,6); -0,008 (0,7)
Ejemplo I-T3-75: RMN de ^{1}H (400,2 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,621 (4,9); 8,618 (5,3); 8,463 (2,4); 8,452 (2,4); 8,277 (5,0); 8,274 (5,4); 7,913 (1,3); 7,909 (1,4); 7,894 (2,4); 7,890 (2,5); 7,875 (1,4); 7,871 (1,3); 7,742 (4,3); 7,730 (1,5); 7,709 (7,2); 7,702 (4,2); 7,679 (0,7); 7,416 (1,1); 7,412 (1,2); 7,397 (2,4); 7,381 (1,7); 7,377 (1,6); 7,313 (3,4); 7,294 (5,4); 7,275 (2,3); 3,333 (0,6); 3,324 (0,5); 3,307 (125,1); 3,285 (0,5); 2,879 (0,8); 2,870 (1,2); 2,861 (1,9); 2,851 (1,9); 2,842 (1,2); 2,833 (0,9); 2,822 (0,4); 2,798 (1,7); 2,780 (5,3); 2,761 (5,5); 2,742 (1,8); 2,509 (17,8); 2,505 (38,4); 2,500 (54,1); 2,496 (39,8); 2,491 (19,1); 2,327 (0,3); 1,235 (0,5); 1,061 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,1); 0,729 (1,2); 0,716 (3,4); 0,711 (4,8); 0,699 (4,5); 0,693 (3,7); 0,682 (1,6); 0,562 (1,6); 0,552 (4,7); 0,546 (4,2); 0,542 (4,0); 0,536

(3,9); 0,524 (1,2); 0,008 (1,4); 0,000 (45,5); -0,009 (1,9)
Ejemplo I-T3-76: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,531 (3,2); 9,102 (3,2); 9,096 (3,3); 8,822 (3,2); 8,817 (3,3); 8,727 (5,1); 8,442 (1,9); 8,436 (3,4); 8,428 (5,4); 7,617 (2,1); 7,582 (2,1); 5,759 (16,0); 3,568 (2,8); 3,437 (0,3); 3,424 (0,4); 3,326 (355,3); 3,303 (1,2); 2,711 (0,5); 2,675 (0,6); 2,670 (0,7); 2,667 (0,5); 2,557 (0,4); 2,554 (0,7); 2,552 (0,9); 2,551 (1,1); 2,541 (159,1); 2,530 (1,2); 2,528 (1,0); 2,527 (1,0); 2,524 (1,3); 2,510 (33,8); 2,506 (67,9); 2,502 (90,5); 2,497 (63,3); 2,493 (29,5); 2,458 (0,9); 2,440 (2,5); 2,421 (2,5); 2,402 (0,9); 2,368 (0,6); 2,333 (0,6); 2,329 (0,7); 2,324 (0,6); 2,111 (12,0); 2,086 (1,1); 1,629 (1,2); 1,615 (2,9); 1,608 (3,2); 1,595 (1,5); 1,346 (1,4); 1,332 (2,9); 1,325 (3,2); 1,311 (1,1); 1,072 (0,6); 1,055 (1,3); 1,048 (4,1); 1,037 (0,9); 1,029 (8,8); 1,010 (3,8); 0,008 (2,0); 0,000 (66,6); -0,008 (2,4); -0,014 (0,4)
Ejemplo I-T3-77: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,043 (4,2); 9,038 (4,3); 8,798 (4,2); 8,793 (4,4); 8,705 (6,6); 8,645 (1,9); 8,635 (2,0); 8,409 (6,8); 8,389 (2,6); 8,384 (4,6); 8,379 (2,6); 7,613 (2,8); 7,580 (2,9); 5,759 (4,7); 3,327 (158,6); 2,902 (0,6); 2,892 (1,0); 2,884 (1,5); 2,874 (1,5); 2,866 (1,0); 2,856 (0,7); 2,671 (0,4); 2,541 (65,9); 2,511 (20,9); 2,506 (42,9); 2,502 (59,0); 2,498 (43,4); 2,493 (22,4); 2,458 (2,1); 2,438 (3,5); 2,419 (3,4); 2,401 (1,3); 2,367 (0,3); 2,329 (0,4); 2,110 (16,0); 2,086 (1,2); 1,989 (0,4); 1,072 (0,4); 1,055 (1,0); 1,048 (5,3); 1,029 (11,6); 1,010 (5,3); 0,763 (0,9); 0,750 (2,3); 0,745 (3,4); 0,733 (3,3); 0,727 (2,8); 0,716 (1,4); 0,617 (1,2); 0,607 (3,5); 0,600 (3,1); 0,591 (2,8); 0,579 (1,0); 0,008 (1,3); 0,000 (40,7); -0,008 (2,2)
Ejemplo I-T3-78: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,542 (5,5); 9,127 (5,7); 9,122 (5,9); 8,857 (8,8); 8,834 (5,6); 8,829 (5,9); 8,472 (3,3); 8,467 (5,7); 8,461 (3,2); 8,434 (8,9); 7,757 (4,0); 7,724 (7,7); 7,699 (0,6); 5,759 (5,9); 4,020 (0,4); 3,611 (0,6); 3,568 (1,5); 3,426 (0,9); 3,326 (364,4); 3,303 (1,4);

3,235 (1,3); 2,821 (1,6); 2,802 (5,1); 2,783 (5,1); 2,765 (1,7); 2,711 (0,6); 2,670 (0,9); 2,666 (0,7); 2,541 (164,7); 2,510 (48,8); 2,506 (100,5); 2,502 (137,3); 2,497 (98,8); 2,493 (47,9); 2,367 (0,6); 2,329 (0,8); 1,989 (1,5); 1,633 (2,1); 1,619 (5,2); 1,612 (5,6); 1,599 (2,4); 1,350 (2,6); 1,337 (5,3); 1,330 (5,5); 1,316 (2,0); 1,234 (0,4); 1,192 (0,4); 1,174 (0,8); 1,156 (0,5); 1,146 (0,5); 1,069 (7,2); 1,050 (16,0); 1,032 (7,1); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (90,5); -0,008 (3,5)
Ejemplo I-T3-79: RMN de ^{1}H (500,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,064 (5,0); 9,059 (5,1); 8,821 (8,9); 8,811 (5,2); 8,807 (5,3); 8,630 (2,5); 8,622 (2,5); 8,413 (3,8); 8,408 (13,3); 7,748 (4,3); 7,738 (1,8); 7,721 (6,6); 7,712 (3,8); 7,695 (0,9); 5,752 (1,0); 3,305 (76,3); 3,281 (0,4); 2,910 (0,4); 2,902 (0,9); 2,895 (1,3); 2,888 (2,0); 2,880 (2,0); 2,873 (1,3); 2,865 (1,0); 2,858 (0,4); 2,813 (1,7); 2,798 (5,5); 2,783 (5,6); 2,768 (1,9); 2,508 (13,7); 2,504 (28,5); 2,501 (39,3); 2,497 (29,3); 2,494 (14,5); 1,908 (2,7); 1,236 (0,5); 1,068 (7,4); 1,053 (16,0); 1,038 (7,3); 0,761 (1,2); 0,751 (3,5); 0,747 (4,8); 0,737 (4,6); 0,733 (3,8); 0,723 (1,6); 0,620 (1,6); 0,612 (4,7); 0,607 (4,4); 0,604 (4,2); 0,599 (4,0); 0,589 (1,2); 0,006 (1,3); 0,000 (30,6); -0,007 (1,4)
Ejemplo I-T3-80: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (2,6); 8,082 (2,8); 7,736 (1,6); 7,731 (2,1); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,680 (1,2); 7,675 (1,1); 7,608 (0,4); 7,562 (1,4); 7,549 (1,4); 7,494 (1,9); 7,473 (1,5); 2,448 (0,6); 2,429 (1,9); 2,410 (2,0); 2,391 (0,7); 2,164 (9,8); 2,155 (20,2); 2,088 (7,6); 1,965 (1,0); 1,959 (2,5); 1,953 (13,9); 1,946 (25,4); 1,940 (34,2); 1,934 (24,1); 1,928 (12,6); 1,598 (0,8); 1,583 (2,0); 1,577 (2,0); 1,563 (1,1); 1,437 (16,0); 1,358 (1,0); 1,345 (2,0); 1,338 (2,1); 1,323 (0,8); 1,268 (0,7); 1,092 (2,7); 1,073 (5,7); 1,054 (2,6); 0,008 (1,1); 0,000 (34,6); -0,009 (1,5)
Ejemplo I-T3-81: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,115 (7,2); 8,067 (7,4); 7,688 (4,4); 7,683 (5,6); 7,667 (0,5); 7,652 (3,0); 7,646

(2,4); 7,631 (3,5); 7,625 (3,0); 7,560 (4,1); 7,546 (4,1); 7,462 (5,2); 7,441 (4,2); 6,903 (1,2); 2,880 (0,3); 2,871 (0,9); 2,861 (1,3); 2,853 (2,1); 2,843 (2,1); 2,835 (1,3); 2,825 (1,0); 2,815 (0,4); 2,447 (1,8); 2,428 (5,5); 2,409 (5,7); 2,390 (1,9); 2,141 (55,3); 2,120 (1,0); 2,113 (0,9); 2,107 (1,0); 2,101 (0,9); 2,086 (21,5); 1,964 (4,2); 1,958 (10,5); 1,952 (54,5); 1,946 (98,5); 1,940 (132,1); 1,934 (92,1); 1,927 (48,4); 1,774 (0,5); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,437 (1,3); 1,270 (1,0); 1,090 (7,7); 1,071 (16,0); 1,052 (7,4); 0,794 (1,1); 0,781 (3,3); 0,776 (4,4); 0,763 (4,7); 0,758 (3,4); 0,746 (1,6); 0,610 (1,5); 0,598 (3,8); 0,592 (4,0); 0,588 (3,6); 0,583 (3,6); 0,571 (1,1); 0,146 (1,8); 0,031 (0,4); 0,030 (0,4); 0,0272 (0,4); 0,0265 (0,4); 0,026 (0,4); 0,022 (0,6); 0,008 (16,0); 0,000 (381,4); -0,009 (18,6); -0,150 (1,8)
Ejemplo I-T3-82: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,127 (7,5); 8,085 (7,7); 7,734 (4,3); 7,729 (5,7); 7,708 (3,2); 7,703 (2,2); 7,688 (3,6); 7,682 (2,9); 7,561 (3,9); 7,548 (3,8); 7,512 (5,3); 7,491 (4,4); 7,365 (0,9); 4,141 (1,1); 4,124 (1,2); 4,117 (3,5); 4,100 (3,5); 4,093 (3,7); 4,077 (3,5); 4,070 (1,3); 4,053 (1,2); 2,462 (0,4); 2,457 (0,4); 2,450 (1,8); 2,431 (5,5); 2,412 (5,7); 2,393 (1,9); 2,150 (76,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,8); 2,101 (0,8); 2,090 (21,3); 1,964 (3,5); 1,958 (8,4); 1,952 (45,7); 1,946 (82,9); 1,940 (111,8); 1,934 (77,5); 1,927 (40,4); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437 (1,0); 1,269 (1,0); 1,093 (7,7); 1,074 (16,0); 1,055 (7,4); 0,146 (1,4); 0,008 (11,1); 0,000 (291,0); -0,009 (12,7); -0,150 (1,4)
Ejemplo I-T3-83: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,128 (7,9); 8,079 (8,4); 7,719 (4,9); 7,713 (6,1); 7,677 (3,1); 7,671 (2,5); 7,656 (3,5); 7,650 (3,1); 7,562 (4,8); 7,548 (4,7); 7,484 (5,6); 7,463 (5,1); 7,436 (1,2); 5,447 (1,2); 5,337 (1,3); 5,316 (2,5); 5,295 (2,5); 5,274 (1,3); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,543 (3,2); 3,540 (2,1); 3,520 (6,4); 3,498 (4,2); 3,370 (4,2); 3,367 (2,8); 3,350 (6,2); 3,346 (5,9); 3,326 (3,3); 2,462 (0,3); 2,451 (2,0); 2,432 (6,0); 2,413 (6,2); 2,394 (2,1); 2,150

(115,6); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,107 (0,9); 2,091 (23,5); 1,972 (1,9); 1,964 (3,0); 1,958 (7,9); 1,952 (39,4); 1,946 (71,5); 1,940 (96,0); 1,934 (68,4); 1,928 (36,7); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437 (2,7); 1,268 (1,0); 1,221 (0,4); 1,204 (0,8); 1,186 (0,4); 1,094 (7,8); 1,075 (16,0); 1,056 (7,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,8); 0,000 (220,9); -0,150 (1,1)
Ejemplo I-T3-84: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,162 (9,4); 8,125 (7,5); 7,997 (4,3); 7,952 (4,4); 7,729 (4,8); 7,724 (6,8); 7,707 (3,5); 7,701 (2,3); 7,686 (3,9); 7,680 (3,2); 7,519 (6,1); 7,498 (4,9); 7,348 (1,3); 4,140 (1,3); 4,123 (1,4); 4,116 (3,9); 4,100 (3,9); 4,092 (4,2); 4,076 (3,9); 4,069 (1,7); 4,052 (1,4); 2,146 (92,5); 2,120 (27,2); 2,108 (1,6); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,971 (0,9); 1,964 (3,5); 1,958 (9,1); 1,952 (47,9); 1,946 (87,4); 1,940 (118,0); 1,934 (83,5); 1,928 (44,7); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,6); 0,146 (0,9); 0,008 (6,8); 0,000 (179,6); -0,008 (10,9); -0,150 (0,9)
Ejemplo I-T3-85: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,163 (5,2); 8,118 (4,2); 7,998 (2,5); 7,953 (2,5); 7,716 (3,0); 7,710 (3,7); 7,675 (1,9); 7,669 (1,5); 7,654 (2,2); 7,648 (1,9); 7,490 (3,5); 7,469 (2,8); 7,418 (0,8); 7,400 (0,8); 5,335 (0,8); 5,314 (1,6); 5,293 (1,6); 5,272 (0,8); 3,542 (2,0); 3,538 (1,3); 3,518 (4,0); 3,496 (2,6); 3,370 (2,6); 3,367 (1,7); 3,349 (3,8); 3,346 (3,6); 3,326 (2,0); 2,133 (15,0); 2,120 (15,4); 2,101 (0,5); 1,971 (1,1); 1,964 (1,7); 1,958 (4,3); 1,952 (19,7); 1,946 (35,3); 1,940 (47,2); 1,934 (33,6); 1,927 (18,1); 1,437 (16,0); 1,204 (0,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (78,7); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-86: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,252 (0,3); 8,146 (2,7); 8,110 (0,4); 8,102 (2,9); 7,899 (1,3); 7,708 (1,4); 7,690 (1,7); 7,685 (2,2); 7,655 (1,2); 7,649 (0,9); 7,634 (1,5); 7,628 (1,4); 7,468 (2,2); 7,447 (1,8); 6,891 (0,5); 2,871 (0,4); 2,862 (0,5); 2,853 (0,8); 2,843 (0,8); 2,835 (0,5); 2,825 (0,4); 2,415 (1,0); 2,171 (8,3); 2,132 (10,6); 1,971 (0,5); 1,964 (1,1); 1,958 (2,6);

1,952 (13,9); 1,946 (25,2); 1,940 (34,0); 1,933 (23,7); 1,927 (12,5); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,794 (0,4); 0,781 (1,3); 0,776 (1,7); 0,764 (1,8); 0,758 (1,3); 0,746 (0,6); 0,611 (0,6); 0,599 (1,5); 0,593 (1,6); 0,589 (1,4); 0,584 (1,4); 0,571 (0,5); 0,008 (2,3); 0,000 (63,9); -0,009 (3,1)
Ejemplo I-T3-87: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,171 (11,0); 8,170 (11,0); 8,122 (12,2); 8,120 (11,4); 7,729 (6,8); 7,724 (8,7); 7,697 (4,9); 7,691 (3,7); 7,676 (5,6); 7,670 (4,6); 7,606 (16,0); 7,604 (15,8); 7,551 (3,2); 7,500 (8,3); 7,479 (6,7); 5,446 (0,7); 4,085 (0,6); 4,068 (2,0); 4,050 (2,0); 4,032 (0,7); 3,240 (0,6); 2,132 (42,8); 2,119 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,9); 2,101 (0,6); 2,095 (0,3); 1,971 (9,0); 1,964 (4,0); 1,958 (10,1); 1,952 (56,8); 1,946 (103,2); 1,940 (138,6); 1,933 (95,2); 1,927 (49,0); 1,914 (0,7); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,595 (3,6); 1,581 (8,5); 1,574 (8,5); 1,560 (4,6); 1,520 (0,5); 1,437 (11,1); 1,400 (0,6); 1,360 (4,7); 1,346 (8,6); 1,340 (8,8); 1,325 (3,6); 1,317 (0,8); 1,287 (0,4); 1,269 (1,4); 1,221 (2,5); 1,204 (4,7); 1,186 (2,3); 0,146 (1,8); 0,008 (14,1); 0,000 (400,9); -0,009 (15,1); -0,150 (1,8)
Ejemplo I-T3-88: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,160 (10,6); 8,111 (11,3); 7,681 (6,2); 7,675 (7,9); 7,647 (3,9); 7,642 (3,1); 7,627 (4,5); 7,621 (4,0); 7,605 (16,0); 7,467 (7,2); 7,447 (5,7); 6,936 (2,0); 5,448 (0,4); 4,067 (0,5); 4,049 (0,5); 2,879 (0,4); 2,869 (1,3); 2,860 (2,0); 2,851 (2,8); 2,842 (2,9); 2,833 (2,0); 2,824 (1,4); 2,814 (0,5); 2,467 (1,2); 2,462 (1,7); 2,458 (1,3); 2,253 (0,6); 2,226 (0,4); 2,158 (239,6); 2,120 (1,0); 2,113 (1,3); 2,107 (1,6); 2,101 (1,2); 2,095 (0,7); 1,971 (3,4); 1,964 (8,0); 1,958 (20,3); 1,952 (98,7); 1,946 (178,8); 1,940 (240,6); 1,934 (170,9); 1,928 (91,2); 1,781 (0,5); 1,774 (1,0); 1,768 (1,3); 1,762 (1,0); 1,756 (0,5); 1,437 (3,0); 1,269 (0,9); 1,221 (0,5); 1,203 (1,0); 1,185 (0,5); 0,792 (1,7); 0,779 (4,8); 0,774 (6,6); 0,761 (6,5); 0,756 (5,1); 0,744 (2,2); 0,610 (2,2); 0,599 (6,0); 0,592 (6,3); 0,583 (5,4); 0,571 (1,6); 0,146 (3,3); 0,007 (29,1); 0,000 (640,2); -0,150

(3,3)
Ejemplo I-T3-89: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,437 (11,1); 8,788 (15,9); 8,367 (16,0); 8,317 (0,8); 7,986 (0,4); 7,903 (6,6); 7,897 (6,7); 7,824 (9,1); 7,810 (13,0); 7,805 (11,4); 7,802 (13,2); 7,797 (8,0); 7,791 (3,7); 7,614 (3,7); 7,610 (3,5); 7,591 (2,9); 7,588 (2,9); 7,560 (9,0); 7,551 (1,7); 7,546 (1,5); 7,537 (7,7); 3,903 (8,5); 3,332 (418,5); 3,174 (0,7); 3,162 (0,6); 2,676 (2,0); 2,671 (2,7); 2,667 (2,1); 2,541 (1,6); 2,507 (359,7); 2,502 (464,1); 2,498 (346,7); 2,333 (2,1); 2,329 (2,9); 2,325 (2,2); 1,618 (3,7); 1,604 (9,3); 1,597 (9,9); 1,584 (4,2); 1,543 (0,4); 1,327 (0,4); 1,287 (4,3); 1,274 (9,4); 1,267 (9,9); 1,253 (3,8); 1,234 (1,5); 1,215 (0,5); 1,181 (0,4); 1,177 (0,4); 0,861 (0,4); 0,853 (0,4); 0,843 (0,4); 0,834 (0,4); 0,824 (0,4); 0,813 (0,3); 0,008 (0,9); 0,000 (24,6); -0,008 (1,1)
Ejemplo I-T3-90: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,565 (0,4); 8,349 (0,6); 8,333 (14,0); 8,123 (0,6); 8,109 (13,1); 8,096 (0,6); 7,904 (0,4); 7,881 (0,4); 7,712 (8,7); 7,689 (16,0); 7,683 (10,7); 7,672 (1,0); 7,654 (5,5); 7,648 (4,2); 7,633 (6,1); 7,627 (5,3); 7,617 (5,0); 7,611 (5,5); 7,475 (0,5); 7,467 (9,7); 7,454 (0,7); 7,446 (9,4); 7,438 (3,3); 7,422 (2,4); 7,419 (2,6); 7,416 (2,5); 6,891 (2,1); 5,446 (0,4); 3,899 (0,6); 2,881 (0,6); 2,872 (1,7); 2,862 (2,4); 2,854 (3,8); 2,844 (3,9); 2,835 (2,5); 2,826 (1,8); 2,816 (0,6); 2,132 (62,2); 2,113 (1,1); 2,107 (1,3); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,996 (0,3); 1,971 (0,9); 1,964 (5,7); 1,958 (14,2); 1,952 (81,0); 1,946 (147,9); 1,940 (200,1); 1,933 (139,4); 1,927 (72,6); 1,780 (0,5); 1,774 (0,8); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,268 (2,3); 0,881 (0,3); 0,796 (2,0); 0,783 (5,8); 0,778 (7,9); 0,765 (8,2); 0,760 (6,0); 0,748 (2,8); 0,726 (0,4); 0,709 (0,4); 0,653 (0,3); 0,643 (0,3); 0,613 (2,8); 0,601 (6,7); 0,595 (7,1); 0,591 (6,3); 0,586 (6,3); 0,574 (2,0); 0,146 (2,4); 0,008 (17,6); 0,000 (508,1); -0,009 (24,9); -0,150 (2,4)
Ejemplo I-T3-91: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,837 (3,4); 8,831 (3,6); 8,747 (6,3); 8,532 (1,9); 8,521 (2,0); 8,474 (6,2); 8,100

(9,7); 7,954 (3,3); 7,949 (3,5); 4,109 (0,4); 4,095 (0,4); 3,904 (16,0); 3,335 (287,0); 3,267 (0,5); 3,243 (0,4); 3,174 (2,4); 3,162 (2,5); 2,877 (0,6); 2,868 (0,9); 2,859 (1,3); 2,849 (1,3); 2,840 (0,9); 2,831 (0,6); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,507 (156,9); 2,502 (206,2); 2,498 (158,4); 2,334 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 1,258 (0,4); 1,002 (1,3); 0,986 (1,2); 0,740 (0,8); 0,727 (2,3); 0,722 (3,1); 0,710 (2,9); 0,704 (2,4); 0,693 (1,0); 0,568 (1,0); 0,558 (3,1); 0,552 (2,9); 0,548 (2,7); 0,542 (2,5); 0,530 (0,7); 0,000 (1,8)
Ejemplo I-T3-92: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,415 (4,9); 8,892 (4,2); 8,886 (4,4); 8,765 (7,6); 8,488 (7,3); 8,104 (11,7); 8,044 (4,2); 8,039 (4,3); 3,904 (16,0); 3,593 (0,4); 3,336 (427,9); 3,173 (1,6); 3,163 (1,6); 2,676 (1,4); 2,672 (1,7); 2,667 (1,3); 2,518 (32,9); 2,511 (114,6); 2,507 (211,5); 2,503 (266,6); 2,498 (196,7); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,613 (1,8); 1,599 (4,5); 1,592 (4,8); 1,579 (2,0); 1,315 (2,1); 1,301 (4,6); 1,295 (4,7); 1,280 (1,7); 1,235 (0,3); 0,000 (2,1)
Ejemplo I-T3-93: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,187 (3,1); 8,146 (3,3); 7,899 (4,8); 7,653 (1,3); 7,648 (2,7); 7,639 (0,5); 7,624 (1,5); 7,618 (1,0); 7,462 (1,9); 7,441 (1,5); 7,115 (0,7); 5,449 (1,2); 4,068 (0,5); 4,050 (0,5); 2,174 (33,4); 1,972 (2,4); 1,965 (0,8); 1,959 (1,9); 1,953 (10,3); 1,947 (18,6); 1,941 (24,9); 1,934 (16,9); 1,928 (8,7); 1,448 (9,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,5); 1,221 (0,6); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 0,837 (0,7); 0,824 (2,1); 0,820 (2,2); 0,808 (0,9); 0,673 (1,1); 0,661 (2,4); 0,656 (2,5); 0,644 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (10,3); -0,009 (0,3)
Ejemplo I-T3-94: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,149 (5,3); 8,106 (4,3); 7,996 (2,3); 7,951 (2,4); 7,645 (2,3); 7,639 (5,5); 7,632 (0,8); 7,618 (2,7); 7,612 (1,8); 7,457 (3,0); 7,436 (2,4); 7,098 (1,2); 2,468 (0,4); 2,464 (0,5); 2,459 (0,4); 2,165 (184,2); 2,116 (15,3); 2,102 (0,5); 1,972 (1,1); 1,965 (3,0); 1,959 (7,6); 1,953 (41,5); 1,947 (74,8); 1,940 (100,0); 1,934 (68,4); 1,928 (35,0);

1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,447 (16,0); 1,437 (3,0); 1,270 (2,2); 1,204 (0,3); 0,835 (1,1); 0,822 (3,7); 0,818 (3,8); 0,807 (1,5); 0,673 (1,8); 0,662 (4,3); 0,656 (4,3); 0,644 (1,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,1); -0,009 (1,4)
Ejemplo I-T3-95: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,596 (2,3); 8,893 (2,0); 8,887 (2,0); 8,791 (3,3); 8,545 (3,3); 8,315 (0,5); 8,300 (2,2); 8,294 (2,3); 8,283 (5,7); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,322 (38,3); 2,671 (0,6); 2,502 (83,6); 2,328 (0,6); 1,989 (1,8); 1,643 (0,8); 1,628 (2,2); 1,621 (2,3); 1,609 (0,9); 1,398 (16,0); 1,298 (1,0); 1,285 (2,2); 1,278 (2,3); 1,264 (0,8); 1,193 (0,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 0,146 (0,4); 0,000 (75,9); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-96: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,838 (2,0); 8,833 (2,0); 8,618 (3,2); 8,513 (1,0); 8,502 (1,0); 8,377 (3,3); 7,954 (1,9); 7,949 (1,9); 7,596 (3,6); 4,104 (0,3); 3,903 (10,1); 3,409 (0,5); 3,350 (346,6); 3,302 (0,5); 3,175 (1,8); 3,162 (1,8); 2,865 (0,4); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,4); 2,677 (0,4); 2,672 (0,6); 2,668 (0,4); 2,526 (1,8); 2,512 (37,4); 2,508 (74,7); 2,503 (97,3); 2,499 (71,2); 2,494 (35,6); 2,489 (12,6); 2,335 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,5); 2,117 (16,0); 1,003 (0,6); 0,987 (0,6); 0,739 (0,5); 0,726 (1,2); 0,721 (1,7); 0,709 (1,6); 0,703 (1,3); 0,692 (0,6); 0,568 (0,6); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,542 (1,4); 0,529 (0,4); 0,000 (0,7)
Ejemplo I-T3-97: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,395 (2,2); 8,892 (2,0); 8,886 (2,0); 8,640 (3,3); 8,391 (3,4); 8,040 (1,9); 8,035 (1,9); 7,599 (3,7); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,904 (10,2); 3,333 (130,8); 3,174 (2,4); 3,161 (2,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,5); 2,541 (0,4); 2,525 (1,8); 2,511 (39,6); 2,507 (81,0); 2,502 (95,3); 2,498 (69,0); 2,493 (34,2); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 2,118 (16,0); 1,613 (0,8); 1,599 (1,9); 1,592 (2,1); 1,579 (0,9); 1,311 (0,9); 1,297 (2,0); 1,291 (2,1); 1,276 (0,8); 1,002 (0,5); 0,987 (0,5); 0,000 (1,2)
Ejemplo I-T3-98: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,839 (6,0); 8,833 (6,2); 8,791 (0,5); 8,781 (9,8); 8,692 (3,1); 8,681 (3,2); 8,549 (0,5); 8,540 (9,8); 8,282 (16,0); 8,217 (6,2); 8,210 (6,1); 5,756 (1,1); 3,326 (37,2); 2,871 (0,8); 2,861 (1,2); 2,852 (1,8); 2,842 (1,9); 2,833 (1,2); 2,824 (0,9); 2,814 (0,3); 2,671 (0,4); 2,525 (0,9); 2,511 (20,9); 2,507 (43,3); 2,502 (58,6); 2,498 (44,1); 2,494 (22,5); 2,329 (0,4); 1,989 (0,4); 1,397 (0,4); 0,757 (1,2); 0,744 (3,4); 0,739 (4,7); 0,726 (4,5); 0,721 (3,8); 0,709 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,2); 0,548 (4,1); 0,542 (3,9); 0,530 (1,2); 0,146 (0,5); 0,008 (3,4); 0,000 (97,0); -0,008 (4,2); -0,150 (0,5)
Ejemplo I-T3-99: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,851 (0,6); 8,845 (0,8); 8,840 (3,5); 8,834 (3,6); 8,770 (6,0); 8,525 (5,8); 8,337 (3,6); 8,331 (3,5); 8,283 (11,0); 8,226 (0,6); 8,220 (0,6); 3,328 (25,7); 3,030 (16,0); 2,798 (0,7); 2,790 (0,8); 2,781 (1,3); 2,771 (0,9); 2,758 (2,9); 2,543 (55,4); 2,525 (0,6); 2,508 (28,1); 2,503 (37,2); 2,499 (27,6); 0,814 (0,3); 0,773 (0,4); 0,604 (0,5); 0,585 (2,1); 0,576 (2,8); 0,566 (1,0); 0,543 (1,2); 0,532 (2,2); 0,514 (2,0); 0,501 (0,4); 0,495 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (28,2); -0,008 (1,0)
Ejemplo I-T3-100: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,826 (5,3); 8,817 (2,9); 8,811 (2,8); 8,531 (4,2); 8,320 (2,7); 8,314 (2,7); 8,206 (0,4); 8,200 (0,4); 8,111 (7,7); 3,904 (16,0); 3,395 (0,6); 3,337 (288,8); 3,257 (0,4); 3,243 (0,4); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,029 (12,3); 2,795 (0,5); 2,788 (0,6); 2,778 (1,0); 2,768 (0,8); 2,757 (2,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,668 (0,8); 2,512 (73,1); 2,507 (138,1); 2,503 (175,3); 2,499 (129,8); 2,334 (0,7); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 1,002 (1,0); 0,987 (1,0); 0,833 (0,4); 0,815 (0,3); 0,603 (0,4); 0,584 (1,7); 0,574 (2,2); 0,565 (0,8); 0,542 (0,9); 0,531 (1,7); 0,513 (1,5); 0,000 (1,8)
Ejemplo I-T3-101: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,828 (0,4); 8,823 (0,4); 8,815 (2,1); 8,809 (2,2); 8,690 (3,8); 8,442 (0,7); 8,435 (3,3); 8,293 (2,2); 8,287 (2,1); 8,190 (0,4); 8,184 (0,3); 7,603 (4,3); 3,904 (8,8); 3,339

(233,4); 3,175 (0,6); 3,162 (0,6); 3,027 (9,9); 2,795 (0,4); 2,787 (0,5); 2,778 (0,8); 2,768 (0,6); 2,756 (1,8); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,512 (51,7); 2,507 (99,0); 2,503 (126,8); 2,498 (93,4); 2,494 (47,1); 2,334 (0,6); 2,330 (0,8); 2,325 (0,6); 2,130 (16,0); 2,122 (3,6); 1,002 (0,4); 0,987 (0,4); 0,583 (1,3); 0,574 (1,7); 0,565 (0,6); 0,543 (0,7); 0,531 (1,3); 0,514 (1,1); 0,000 (0,9)
Ejemplo I-T3-102: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,908 (0,7); 8,879 (2,4); 8,874 (2,4); 8,833 (4,2); 8,820 (1,2); 8,538 (3,8); 8,496 (1,0); 8,431 (0,7); 8,427 (0,7); 8,288 (2,4); 8,283 (2,4); 8,111 (9,5); 3,904 (16,0); 3,591 (0,4); 3,341 (514,4); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,136 (2,9); 2,914 (11,4); 2,676 (1,1); 2,672 (1,5); 2,668 (1,1); 2,507 (189,0); 2,503 (242,9); 2,499 (186,3); 2,334 (1,1); 2,330 (1,5); 2,326 (1,1); 1,713 (2,7); 1,489 (2,0); 0,000 (2,0)
Ejemplo I-T3-103: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,907 (0,4); 8,878 (1,3); 8,872 (1,3); 8,702 (2,2); 8,685 (0,6); 8,443 (2,1); 8,406 (0,9); 8,270 (1,3); 8,264 (1,3); 7,604 (4,3); 3,904 (12,6); 3,395 (0,4); 3,338 (210,6); 3,270 (0,4); 3,256 (0,3); 3,175 (0,8); 3,162 (0,9); 3,133 (1,6); 2,915 (6,3); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,668 (0,6); 2,525 (2,1); 2,507 (102,9); 2,503 (131,5); 2,498 (97,6); 2,334 (0,7); 2,330 (0,9); 2,325 (0,6); 2,122 (16,0); 1,718 (1,3); 1,713 (1,4); 1,484 (1,0); 1,002 (0,8); 0,987 (0,8); 0,000 (1,9)
Ejemplo I-T3-104: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,865 (9,2); 8,857 (0,5); 8,845 (6,3); 8,839 (6,4); 8,694 (3,1); 8,683 (3,1); 8,470 (0,5); 8,459 (9,4); 8,229 (6,5); 8,223 (6,4); 7,751 (4,6); 7,728 (0,3); 7,710 (11,3); 4,457 (0,4); 4,403 (0,4); 4,392 (0,4); 4,121 (0,3); 4,108 (1,0); 4,095 (1,0); 4,082 (0,4); 3,904 (15,4); 3,395 (0,4); 3,334 (355,6); 3,243 (0,4); 3,175 (4,8); 3,161 (4,8); 2,883 (0,3); 2,873 (0,9); 2,864 (1,2); 2,855 (1,9); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,816 (0,5); 2,807 (1,7); 2,788 (5,3); 2,769 (5,4); 2,751 (1,8); 2,680 (0,6); 2,676 (1,1); 2,671 (1,4); 2,667 (1,1); 2,542 (1,0); 2,525 (4,5); 2,511 (90,6); 2,507 (178,4); 2,502 (231,0);

2,498 (168,2); 2,494 (82,9); 2,334 (1,0); 2,329 (1,4); 2,325 (1,0); 1,056 (7,2); 1,038 (16,0); 1,019 (7,1); 1,002 (1,6); 0,987 (1,5); 0,759 (1,2); 0,746 (3,5); 0,741 (4,8); 0,729 (4,5); 0,723 (3,7); 0,711 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,3); 0,547 (4,0); 0,542 (3,9); 0,529 (1,2); 0,000 (3,5)
Ejemplo I-T3-105: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,606 (5,9); 8,899 (6,1); 8,893 (6,2); 8,882 (8,7); 8,466 (9,0); 8,308 (6,0); 8,302 (5,8); 7,753 (4,6); 7,730 (0,3); 7,712 (11,2); 3,904 (12,3); 3,332 (328,2); 3,175 (1,4); 3,161 (1,4); 3,047 (0,5); 2,866 (0,5); 2,807 (1,7); 2,789 (5,3); 2,770 (5,4); 2,751 (1,8); 2,676 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,8); 2,511 (97,8); 2,507 (190,1); 2,502 (244,3); 2,498 (178,1); 2,493 (87,7); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,650 (2,1); 1,636 (5,3); 1,629 (5,6); 1,616 (2,3); 1,295 (2,5); 1,281 (5,3); 1,275 (5,7); 1,260 (2,1); 1,055 (7,3); 1,037 (16,0); 1,018 (7,1); 0,000 (3,2)
Ejemplo I-T3-106: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,824 (4,0); 8,818 (4,1); 8,781 (4,7); 8,694 (1,9); 8,683 (1,9); 8,515 (6,0); 8,223 (2,4); 8,196 (4,1); 8,190 (4,0); 7,937 (2,5); 4,456 (0,3); 4,402 (0,4); 4,391 (0,4); 4,107 (0,7); 4,094 (0,8); 3,904 (16,0); 3,332 (223,1); 3,243 (0,4); 3,174 (4,3); 3,161 (4,4); 2,868 (0,5); 2,859 (0,8); 2,850 (1,2); 2,840 (1,2); 2,831 (0,8); 2,822 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (0,7); 2,525 (3,7); 2,511 (78,4); 2,507 (154,9); 2,502 (201,4); 2,498 (148,3); 2,493 (74,4); 2,334 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,147 (13,7); 1,002 (1,6); 0,987 (1,6); 0,755 (0,8); 0,742 (2,2); 0,737 (3,1); 0,725 (2,9); 0,719 (2,4); 0,708 (1,0); 0,563 (1,0); 0,552 (2,9); 0,546 (2,7); 0,542 (2,6); 0,536 (2,5); 0,524 (0,8); 0,000 (2,7)
Ejemplo I-T3-107: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,833 (0,5); 8,826 (0,6); 8,819 (2,8); 8,813 (2,8); 8,770 (3,5); 8,503 (0,9); 8,495 (4,3); 8,312 (2,8); 8,306 (2,6); 8,223 (2,0); 8,207 (0,5); 8,201 (0,4); 7,939 (2,1); 3,904 (16,0); 3,332 (177,8); 3,175 (1,5); 3,162 (1,6); 3,027 (12,7); 2,794 (0,5); 2,787 (0,6);

2,778 (1,0); 2,767 (0,8); 2,760 (2,8); 2,751 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (67,3); 2,507 (128,5); 2,503 (163,4); 2,498 (118,9); 2,494 (59,0); 2,334 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,158 (9,9); 1,002 (1,1); 0,987 (1,1); 0,830 (0,3); 0,813 (0,3); 0,606 (0,4); 0,586 (1,6); 0,577 (2,2); 0,568 (0,8); 0,545 (1,0); 0,534 (1,7); 0,516 (1,5); 0,000 (2,1)
Ejemplo I-T3-108: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,604 (5,0); 8,878 (4,1); 8,872 (4,2); 8,793 (5,7); 8,519 (7,0); 8,277 (4,3); 8,271 (4,2); 8,225 (3,2); 7,938 (3,2); 4,458 (0,3); 4,404 (0,4); 4,393 (0,4); 4,123 (0,4); 4,110 (1,1); 4,097 (1,1); 4,083 (0,4); 3,904 (16,0); 3,433 (0,4); 3,337 (510,1); 3,270 (0,6); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (4,2); 3,162 (4,3); 3,043 (0,4); 2,872 (0,4); 2,672 (1,4); 2,506 (184,9); 2,503 (232,7); 2,499 (181,4); 2,329 (1,4); 2,148 (15,6); 1,643 (1,6); 1,629 (4,1); 1,622 (4,4); 1,609 (1,8); 1,293 (1,8); 1,280 (4,1); 1,273 (4,3); 1,259 (1,6); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,000 (0,9)
Ejemplo I-T3-109: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,821 (4,5); 8,815 (4,5); 8,727 (6,7); 8,683 (2,3); 8,672 (2,3); 8,456 (6,9); 8,191 (4,6); 8,185 (4,4); 7,611 (3,0); 7,577 (3,0); 4,112 (0,4); 4,099 (0,5); 3,904 (16,0); 3,433 (0,3); 3,422 (0,4); 3,341 (478,8); 3,283 (0,5); 3,272 (0,4); 3,269 (0,4); 3,257 (0,4); 3,243 (0,3); 3,175 (2,2); 3,162 (2,3); 2,868 (0,6); 2,858 (0,9); 2,850 (1,4); 2,840 (1,4); 2,831 (0,9); 2,821 (0,7); 2,676 (0,9); 2,672 (1,2); 2,667 (0,9); 2,542 (0,7); 2,525 (3,9); 2,511 (83,9); 2,507 (159,5); 2,503 (202,9); 2,498 (149,6); 2,443 (1,3); 2,424 (3,5); 2,405 (3,5); 2,387 (1,2); 2,334 (0,9); 2,330 (1,2); 2,325 (0,9); 2,096 (16,0); 1,169 (1,4); 1,035 (5,1); 1,016 (10,9); 1,002 (2,2); 0,997 (5,0); 0,987 (1,4); 0,755 (0,9); 0,742 (2,7); 0,737 (3,5); 0,725 (3,4); 0,719 (2,8); 0,708 (1,1); 0,563 (1,1); 0,553 (3,4); 0,547 (3,3); 0,543 (3,1); 0,537 (3,0); 0,525 (0,9); 0,000 (2,0)
Ejemplo I-T3-110: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,594 (4,6); 8,875 (3,8); 8,869 (3,9); 8,742 (6,3); 8,462 (6,5); 8,272 (3,9); 8,266

(3,9); 7,613 (3,3); 7,578 (3,3); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,904 (12,4); 3,405 (0,3); 3,334 (307,0); 3,269 (0,5); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (2,2); 3,161 (2,3); 3,043 (0,4); 2,871 (0,4); 2,671 (1,3); 2,502 (210,6); 2,445 (1,6); 2,426 (3,6); 2,407 (3,7); 2,388 (1,4); 2,329 (1,3); 2,097 (16,0); 1,645 (1,5); 1,630 (4,1); 1,624 (4,4); 1,610 (1,8); 1,291 (1,8); 1,277 (4,2); 1,271 (4,6); 1,256 (1,7); 1,235 (0,5); 1,169 (1,0); 1,036 (4,8); 1,018 (10,0); 0,999 (5,0); 0,987 (1,2); 0,000 (2,4)
Ejemplo I-T3-111: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,917 (0,5); 8,913 (0,5); 8,882 (1,9); 8,876 (1,9); 8,782 (2,6); 8,753 (0,7); 8,503 (3,1); 8,461 (0,8); 8,419 (0,5); 8,414 (0,5); 8,284 (1,9); 8,279 (1,8); 8,223 (2,2); 7,938 (2,3); 3,904 (16,0); 3,334 (271,2); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,131 (2,1); 2,919 (9,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,525 (3,1); 2,511 (66,1); 2,507 (129,1); 2,503 (166,9); 2,498 (121,9); 2,494 (60,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 2,149 (11,9); 1,718 (1,7); 1,712 (1,9); 1,487 (1,3); 0,000 (2,6)
Ejemplo I-T3-112: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,843 (5,5); 8,825 (4,0); 8,819 (4,0); 8,701 (2,1); 8,690 (2,0); 8,561 (6,3); 8,513 (3,0); 8,198 (3,9); 8,192 (3,8); 8,094 (2,9); 4,109 (0,4); 4,096 (0,5); 3,904 (16,0); 3,333 (218,4); 3,267 (0,4); 3,174 (2,5); 3,162 (2,6); 2,870 (0,6); 2,860 (0,9); 2,851 (1,3); 2,841 (1,3); 2,833 (0,9); 2,823 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,524 (3,8); 2,507 (149,9); 2,502 (194,0); 2,498 (144,0); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,756 (0,8); 0,743 (2,5); 0,738 (3,3); 0,726 (3,1); 0,720 (2,6); 0,709 (1,0); 0,564 (1,0); 0,553 (3,2); 0,547 (3,1); 0,544 (2,9); 0,538 (2,8); 0,526 (0,8); 0,000 (2,3)
Ejemplo I-T3-113: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,831 (3,5); 8,818 (2,5); 8,812 (2,5); 8,547 (0,8); 8,540 (3,7); 8,512 (1,9); 8,325 (2,4); 8,319 (2,4); 8,213 (0,4); 8,207 (0,4); 8,096 (1,8); 3,904 (16,0); 3,381 (0,4); 3,332 (195,5); 3,175 (1,3); 3,161 (1,4); 3,028 (11,1); 2,794 (0,5); 2,787 (0,5); 2,777

(0,9); 2,767 (0,7); 2,760 (2,4); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,525 (2,8); 2,511 (58,6); 2,507 (114,3); 2,502 (147,1); 2,498 (107,3); 2,494 (52,8); 2,334 (0,6); 2,329 (0,9); 2,325 (0,6); 1,002 (1,0); 0,987 (0,9); 0,585 (1,4); 0,577 (1,9); 0,568 (0,7); 0,545 (0,8); 0,534 (1,4); 0,516 (1,3); 0,000 (2,0)
Ejemplo I-T3-114: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,607 (2,4); 8,880 (2,4); 8,874 (2,4); 8,854 (3,1); 8,566 (3,7); 8,515 (1,6); 8,282 (2,4); 8,276 (2,4); 8,095 (1,6); 4,108 (0,4); 4,095 (0,4); 3,904 (16,0); 3,334 (175,5); 3,175 (2,1); 3,161 (2,1); 3,044 (0,5); 2,872 (0,5); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,541 (0,5); 2,525 (2,4); 2,511 (50,8); 2,507 (99,8); 2,502 (129,1); 2,498 (94,9); 2,494 (47,4); 2,334 (0,6); 2,329 (0,7); 2,325 (0,6); 1,643 (0,8); 1,629 (2,0); 1,622 (2,2); 1,608 (0,9); 1,298 (1,0); 1,284 (2,0); 1,278 (2,2); 1,263 (0,8); 1,002 (0,9); 0,987 (0,8); 0,000 (1,0)
Ejemplo I-T3-115: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,898 (1,1); 8,630 (1,1); 8,376 (0,7); 7,972 (0,4); 7,595 (4,0); 3,903 (4,3); 3,328 (177,7); 2,876 (1,2); 2,675 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (0,9); 2,506 (159,0); 2,502 (205,8); 2,498 (157,5); 2,385 (2,8); 2,333 (1,0); 2,329 (1,3); 2,324 (1,0); 2,122 (16,0); 1,686 (0,6); 1,487 (0,8); 0,000 (1,2)
Ejemplo I-T3-116: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,911 (1,0); 8,880 (3,4); 8,874 (3,4); 8,842 (5,1); 8,810 (1,3); 8,548 (5,6); 8,512 (4,5); 8,423 (0,9); 8,292 (3,4); 8,286 (3,4); 8,093 (4,3); 3,904 (4,9); 3,327 (229,2); 3,133 (3,9); 2,918 (16,0); 2,675 (1,2); 2,671 (1,6); 2,667 (1,3); 2,541 (1,5); 2,506 (202,4); 2,502 (261,5); 2,498 (200,6); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,2); 1,711 (3,8); 1,488 (2,6); -0,001 (1,3)
Ejemplo I-T3-117: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,837 (3,9); 8,832 (3,9); 8,696 (5,5); 8,528 (2,3); 8,517 (2,3); 8,440 (6,7); 8,213 (3,3); 7,955 (3,9); 7,949 (3,9); 7,929 (3,4); 3,904 (3,8); 3,328 (223,0); 2,875 (0,7);

2,865 (1,0); 2,857 (1,5); 2,847 (1,5); 2,838 (1,1); 2,828 (0,7); 2,671 (1,5); 2,502 (230,7); 2,329 (1,4); 2,145 (16,0); 0,738 (0,9); 0,720 (3,6); 0,708 (3,4); 0,702 (3,0); 0,691 (1,1); 0,566 (1,2); 0,555 (3,7); 0,549 (3,6); 0,540 (3,2); 0,527 (0,9); 0,000 (1,2)
Ejemplo I-T3-118: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,825 (3,2); 8,820 (3,1); 8,700 (5,9); 8,438 (7,3); 8,213 (3,4); 8,037 (3,0); 8,031 (3,0); 7,930 (3,5); 7,908 (0,5); 3,904 (11,1); 3,330 (239,1); 3,022 (14,7); 2,779 (0,4); 2,764 (0,9); 2,753 (1,3); 2,743 (1,0); 2,737 (1,0); 2,723 (2,0); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,542 (1,0); 2,524 (4,1); 2,511 (78,7); 2,507 (153,6); 2,502 (199,9); 2,498 (148,4); 2,392 (13,3); 2,364 (1,8); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,154 (16,0); 0,817 (0,5); 0,802 (0,5); 0,755 (0,6); 0,484 (4,8); 0,466 (2,5); 0,000 (1,4)
Ejemplo I-T3-119: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,408 (4,7); 8,892 (3,9); 8,886 (3,9); 8,716 (5,6); 8,452 (7,3); 8,217 (2,9); 8,041 (3,8); 8,035 (3,8); 7,932 (3,0); 3,904 (9,3); 3,330 (168,1); 3,175 (1,1); 3,162 (1,1); 2,676 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,8); 2,541 (0,9); 2,511 (82,5); 2,507 (129,7); 2,502 (165,2); 2,498 (122,9); 2,333 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,147 (16,0); 1,612 (1,5); 1,598 (4,0); 1,591 (4,3); 1,578 (1,8); 1,312 (1,8); 1,299 (4,1); 1,292 (4,2); 1,278 (1,5); 0,000 (1,1)
Ejemplo I-T3-120: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,826 (1,6); 8,821 (1,6); 8,621 (4,1); 8,375 (3,7); 8,025 (1,5); 8,020 (1,6); 7,593 (4,8); 3,903 (7,6); 3,331 (235,6); 3,022 (7,6); 2,756 (0,7); 2,743 (0,5); 2,720 (1,0); 2,671 (1,1); 2,541 (0,9); 2,507 (130,2); 2,502 (168,8); 2,498 (127,0); 2,386 (6,8); 2,359 (0,9); 2,329 (1,0); 2,129 (16,0); 0,482 (2,7); 0,465 (1,4); 0,000 (1,0)
Ejemplo I-T3-121: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,836 (16,0); 8,460 (13,4); 8,441 (12,5); 7,871 (1,5); 7,554 (14,8); 2,909 (0,5); 2,899 (1,4); 2,890 (2,1); 2,881 (3,1); 2,871 (3,2); 2,862 (2,1); 2,853 (1,6); 2,843 (0,5); 2,469 (0,5); 2,464 (0,6); 2,460 (0,5); 2,287 (0,5); 2,263 (0,4); 2,245 (0,8); 2,226 (0,6);

2,164 (134,4); 2,128 (74,2); 2,108 (1,2); 2,102 (0,8); 2,096 (0,5); 1,976 (0,8); 1,965 (34,9); 1,959 (10,4); 1,953 (53,7); 1,947 (97,8); 1,941 (132,8); 1,935 (92,8); 1,928 (48,6); 1,829 (0,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,5); 1,540 (0,4); 1,470 (0,3); 1,429 (0,3); 1,320 (1,0); 1,269 (9,8); 1,135 (0,4); 0,897 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,834 (1,8); 0,821 (4,8); 0,816 (6,9); 0,803 (6,8); 0,798 (5,3); 0,786 (2,4); 0,764 (0,4); 0,746 (0,4); 0,721 (0,4); 0,710 (0,4); 0,681 (2,4); 0,669 (6,3); 0,663 (6,5); 0,659 (5,7); 0,653 (5,3); 0,641 (1,6); 0,000 (1,3)
Ejemplo I-T3-122: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,795 (7,1); 8,792 (7,1); 8,712 (16,0); 8,398 (7,3); 8,393 (7,2); 8,249 (14,8); 8,230 (0,4); 8,035 (5,4); 8,031 (10,0); 8,027 (5,8); 7,832 (3,6); 7,830 (4,9); 7,826 (3,7); 7,821 (2,0); 7,814 (5,0); 7,810 (5,4); 7,716 (5,3); 7,700 (3,9); 7,697 (5,2); 7,585 (0,4); 7,519 (5,8); 7,500 (9,9); 7,480 (4,3); 7,146 (1,9); 4,086 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,3); 4,033 (0,5); 2,907 (0,6); 2,897 (1,9); 2,888 (2,8); 2,879 (4,2); 2,869 (4,1); 2,861 (2,8); 2,851 (2,0); 2,842 (0,7); 2,468 (0,7); 2,463 (0,9); 2,459 (0,7); 2,266 (0,3); 2,250 (0,4); 2,144 (668,5); 2,120 (3,2); 2,114 (4,0); 2,108 (5,1); 2,101 (3,3); 2,095 (1,7); 2,016 (0,5); 2,014 (0,5); 1,972 (7,8); 1,964 (22,3); 1,958 (55,1); 1,952 (312,9); 1,946 (568,6); 1,940 (766,2); 1,934 (526,3); 1,928 (270,3); 1,787 (0,4); 1,781 (1,7); 1,775 (3,2); 1,769 (4,4); 1,762 (3,0); 1,756 (1,5); 1,437 (5,8); 1,356 (0,3); 1,338 (0,6); 1,319 (0,4); 1,285 (0,5); 1,270 (2,2); 1,222 (1,6); 1,204 (3,0); 1,186 (1,6); 1,089 (0,9); 0,881 (0,4); 0,793 (2,2); 0,781 (6,2); 0,775 (8,7); 0,763 (8,9); 0,757 (6,5); 0,746 (3,2); 0,724 (0,5); 0,707 (0,5); 0,687 (0,5); 0,677 (0,4); 0,647 (3,3); 0,637 (8,3); 0,630 (8,0); 0,626 (7,0); 0,620 (6,8); 0,608 (2,2); 0,008 (1,7); 0,000 (60,4); -0,009 (2,1)
Ejemplo I-T3-123: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,894 (2,1); 8,708 (1,4); 8,439 (1,2); 8,213 (2,9); 7,984 (0,8); 7,930 (3,0); 3,904 (15,2); 3,331 (445,1); 3,174 (0,5); 3,161 (0,5); 3,121 (0,5); 2,877 (2,5); 2,675 (1,3); 2,671 (1,8); 2,667 (1,4); 2,542 (1,7); 2,506 (224,4); 2,502 (292,1); 2,498 (219,8);

2,389 (5,1); 2,333 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 2,148 (16,0); 1,687 (1,2); 1,492 (1,5); 1,416 (0,6); 1,249 (0,4); 1,235 (0,4); 0,000 (1,8)
Ejemplo I-T3-124: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,836 (5,2); 8,831 (5,2); 8,756 (7,5); 8,544 (2,8); 8,534 (2,9); 8,502 (4,3); 8,488 (8,8); 8,087 (4,0); 7,952 (5,0); 7,946 (5,0); 4,467 (0,8); 4,454 (2,0); 4,440 (0,8); 4,113 (0,5); 4,100 (0,5); 3,904 (16,0); 3,507 (0,4); 3,482 (0,5); 3,468 (0,5); 3,456 (0,5); 3,395 (5,7); 3,388 (4,9); 3,381 (6,3); 3,340 (838,4); 3,174 (2,4); 3,161 (2,3); 2,886 (0,3); 2,876 (0,9); 2,867 (1,2); 2,858 (1,9); 2,848 (1,9); 2,840 (1,3); 2,830 (0,9); 2,820 (0,4); 2,676 (1,6); 2,672 (2,1); 2,667 (1,7); 2,507 (264,8); 2,503 (344,8); 2,498 (274,4); 2,334 (1,5); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 1,273 (0,4); 1,258 (0,8); 1,242 (0,8); 0,873 (0,4); 0,739 (1,2); 0,726 (3,4); 0,721 (4,6); 0,709 (4,3); 0,703 (3,7); 0,692 (1,5); 0,567 (1,5); 0,556 (4,6); 0,550 (4,3); 0,546 (4,1); 0,540 (3,8); 0,528 (1,1); 0,008 (2,2); 0,000 (60,2); -0,008 (2,5)
Ejemplo I-T3-125: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,41 (0,0144); 8,89 (0,0123); 8,83 (0,0014); 8,77 (0,0184); 8,49 (0,0301); 8,23 (0,0012); 8,09 (0,0103); 8,03 (0,0119); 3,31 (1,0000); 2,54 (0,6709); 2,50 (0,2387); 1,59 (0,0138); 1,30 (0,0136); 0,15 (0,0007); 0,00 (0,1822); -0,16 (0,0004)
Ejemplo I-T3-126: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,406 (0,9); 8,069 (2,0); 7,667 (0,4); 7,646 (1,1); 7,621 (0,6); 7,616 (0,6); 7,538 (0,8); 7,533 (0,7); 6,479 (0,9); 3,322 (20,1); 2,524 (0,4); 2,519 (0,7); 2,511 (11,8); 2,506 (24,6); 2,502 (33,4); 2,497 (24,8); 2,493 (12,4); 1,989 (0,8); 1,608 (0,4); 1,594 (0,8); 1,587 (0,9); 1,574 (0,4); 1,398 (16,0); 1,291 (0,4); 1,278 (0,7); 1,271 (0,8); 1,257 (0,3); 1,175 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (18,6); -0,009 (0,7)
Ejemplo I-T3-127: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,850 (5,1); 8,845 (5,4); 8,692 (9,2); 8,530 (3,1); 8,520 (3,2); 8,464 (9,2); 8,273 (16,0); 7,973 (5,1); 7,967 (5,3); 4,105 (0,5); 4,091 (0,5); 3,903 (5,0); 3,329 (87,9);

3,175 (1,9); 3,162 (1,8); 2,877 (0,8); 2,868 (1,2); 2,859 (1,9); 2,849 (1,9); 2,840 (1,3); 2,831 (0,9); 2,820 (0,3); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,507 (79,2); 2,502 (111,9); 2,463 (0,7); 2,334 (0,5); 2,329 (0,6); 0,740 (1,1); 0,727 (3,5); 0,722 (4,8); 0,710 (4,4); 0,704 (4,0); 0,693 (1,5); 0,571 (1,5); 0,561 (4,6); 0,555 (4,7); 0,551 (4,6); 0,545 (4,2); 0,533 (1,1); 0,000 (0,4)
Ejemplo I-T3-128: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,840 (3,6); 8,835 (3,5); 8,698 (8,9); 8,465 (8,7); 8,272 (15,4); 8,058 (3,3); 8,053 (3,4); 7,922 (0,5); 3,903 (5,1); 3,328 (66,8); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,026 (16,0); 2,891 (0,3); 2,784 (0,4); 2,767 (0,9); 2,756 (1,4); 2,746 (1,0); 2,721 (1,9); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,7); 2,511 (37,1); 2,507 (71,3); 2,503 (93,3); 2,498 (71,7); 2,395 (14,5); 2,369 (1,9); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 0,819 (0,5); 0,803 (0,5); 0,758 (0,6); 0,481 (5,4); 0,463 (2,8); 0,000 (0,4)
Ejemplo I-T3-129: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,412 (6,2); 8,906 (4,7); 8,900 (5,0); 8,710 (9,0); 8,478 (8,5); 8,276 (16,0); 8,063 (4,7); 8,058 (4,9); 3,903 (5,3); 3,434 (0,4); 3,334 (71,6); 3,169 (3,4); 2,672 (0,8); 2,520 (27,6); 2,507 (94,6); 2,503 (122,2); 2,499 (100,6); 2,329 (0,7); 1,612 (1,9); 1,598 (5,2); 1,591 (5,7); 1,578 (2,3); 1,317 (2,3); 1,304 (5,3); 1,297 (5,6); 1,283 (1,9); 0,000 (0,4)
Ejemplo I-T3-130: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,821 (3,6); 8,815 (3,5); 8,760 (6,9); 8,499 (4,1); 8,484 (8,5); 8,085 (3,9); 8,046 (3,3); 8,040 (3,3); 7,911 (0,5); 3,904 (10,2); 3,327 (87,7); 3,176 (0,7); 3,163 (0,7); 3,025 (16,0); 2,779 (0,4); 2,768 (0,8); 2,762 (0,9); 2,753 (1,5); 2,742 (1,1); 2,736 (1,1); 2,724 (2,2); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (2,4); 2,512 (41,2); 2,507 (81,2); 2,503 (106,8); 2,498 (80,2); 2,494 (41,1); 2,398 (14,3); 2,369 (1,8); 2,334 (0,5); 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 0,820 (0,5); 0,803 (0,5); 0,757 (0,6); 0,485 (4,9); 0,467 (2,7); 0,000 (0,5)

Ejemplo I-T3-131: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,891 (3,3); 8,768 (2,3); 8,499 (5,4); 8,485 (2,0); 8,085 (4,9); 7,990 (1,3); 3,903 (16,0); 3,327 (119,4); 3,175 (0,8); 3,162 (0,9); 3,122 (0,7); 2,879 (3,8); 2,676 (0,7); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,542 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (61,8); 2,507 (121,8); 2,503 (160,9); 2,498 (122,6); 2,494 (64,2); 2,396 (8,3); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 1,686 (1,8); 1,497 (2,2); 1,420 (0,8); 0,000 (0,7)
Ejemplo I-T3-132: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,907 (3,3); 8,699 (3,2); 8,461 (1,9); 8,269 (16,0); 8,002 (1,1); 4,088 (0,5); 4,075 (0,5); 3,311 (245,5); 3,269 (0,3); 3,175 (2,1); 3,162 (2,1); 3,123 (0,6); 2,875 (3,1); 2,710 (0,5); 2,674 (0,4); 2,670 (0,5); 2,540 (120,2); 2,505 (48,9); 2,501 (64,0); 2,497 (45,6); 2,464 (0,3); 2,396 (8,6); 2,367 (0,8); 2,328 (0,5); 2,323 (0,4); 1,686 (1,6); 1,495 (2,0); 1,431 (0,8); 1,423 (0,8); 0,146 (0,4); 0,008 (3,2); 0,000 (89,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-133: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,822 (3,7); 8,817 (3,4); 8,750 (9,7); 8,470 (9,1); 8,094 (15,1); 8,040 (3,3); 8,035 (3,3); 7,903 (0,4); 3,311 (86,3); 3,287 (0,3); 3,026 (16,0); 2,781 (0,4); 2,765 (1,0); 2,754 (1,5); 2,743 (1,1); 2,738 (1,1); 2,721 (1,6); 2,711 (0,7); 2,555 (0,4); 2,554 (0,5); 2,553 (0,6); 2,552 (0,7); 2,550 (0,8); 2,549 (1,0); 2,540 (89,5); 2,529 (0,7); 2,528 (0,6); 2,527 (0,6); 2,525 (0,6); 2,524 (0,6); 2,523 (0,6); 2,522 (0,6); 2,510 (12,1); 2,505 (23,8); 2,501 (31,3); 2,497 (21,3); 2,492 (9,9); 2,395 (14,5); 2,371 (1,7); 0,819 (0,4); 0,804 (0,5); 0,755 (0,6); 0,482 (5,8); 0,464 (3,0); 0,013 (0,3); 0,011 (0,4); 0,008 (2,1); 0,007 (1,4); 0,000 (61,4); -0,006 (1,7); -0,009 (2,2); -0,013 (0,4); -0,014 (0,3)
Ejemplo I-T3-134: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,823 (4,4); 8,427 (4,3); 8,403 (0,4); 8,263 (1,3); 8,242 (1,6); 8,112 (2,9); 8,071 (2,1); 8,050 (1,8); 7,818 (2,7); 7,813 (2,7); 7,760 (1,6); 7,755 (1,5); 7,747 (1,0); 7,739 (1,8); 7,734 (1,5); 7,724 (0,9); 7,560 (1,0); 7,553 (2,6); 7,540 (1,0); 7,532 (2,1); 3,327

(28,9); 3,321 (6,8); 3,015 (11,5); 2,766 (0,4); 2,756 (0,8); 2,748 (1,0); 2,740 (1,3); 2,730 (1,2); 2,716 (2,7); 2,676 (0,4); 2,673 (0,4); 2,507 (45,7); 2,503 (53,0); 2,499 (41,0); 2,330 (0,4); 2,076 (16,0); 2,068 (2,0); 1,170 (0,4); 0,820 (0,4); 0,812 (0,4); 0,804 (0,4); 0,757 (0,5); 0,748 (0,5); 0,559 (2,6); 0,551 (2,5); 0,503 (0,4); 0,472 (2,1); 0,455 (2,2); 0,000 (51,7); -0,009 (7,9)
Ejemplo I-T3-135: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,547 (0,5); 8,505 (10,0); 8,454 (9,8); 8,448 (8,1); 8,442 (4,1); 8,281 (10,0); 8,068 (16,0); 7,686 (6,9); 7,680 (6,8); 3,568 (0,4); 3,410 (4,1); 3,394 (11,2); 3,378 (4,3); 3,309 (165,8); 3,286 (0,7); 2,832 (0,3); 2,822 (0,9); 2,812 (1,3); 2,804 (2,0); 2,794 (2,0); 2,785 (1,3); 2,776 (0,9); 2,765 (0,4); 2,710 (0,9); 2,674 (0,5); 2,669 (0,6); 2,665 (0,5); 2,560 (0,6); 2,540 (226,8); 2,523 (1,6); 2,509 (31,4); 2,505 (60,7); 2,500 (78,7); 2,496 (53,0); 2,492 (24,2); 2,366 (0,8); 2,332 (0,4); 2,327 (0,6); 2,323 (0,4); 1,887 (4,2); 1,871 (11,1); 1,854 (3,9); 1,235 (0,4); 0,704 (1,4); 0,691 (3,7); 0,686 (5,2); 0,674 (4,8); 0,668 (4,0); 0,657 (1,7); 0,547 (1,8); 0,536 (5,3); 0,530 (4,6); 0,526 (4,3); 0,520 (4,2); 0,508 (1,3); 0,146 (0,5); 0,008 (4,2); 0,000 (120,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,5)
Ejemplo I-T3-136: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,510 (2,6); 8,502 (7,1); 8,497 (6,4); 8,441 (8,5); 8,259 (8,4); 8,129 (2,2); 8,117 (2,5); 8,106 (1,0); 8,088 (5,7); 8,080 (16,0); 4,467 (1,4); 4,453 (4,0); 4,439 (1,5); 4,111 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (15,8); 3,804 (0,4); 3,483 (0,4); 3,470 (0,5); 3,455 (0,4); 3,395 (8,9); 3,388 (7,6); 3,381 (9,5); 3,338 (810,3); 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,953 (0,4); 2,932 (11,5); 2,920 (11,5); 2,847 (0,4); 2,837 (0,9); 2,828 (1,3); 2,819 (1,9); 2,810 (1,9); 2,801 (1,3); 2,792 (0,9); 2,783 (0,4); 2,671 (2,2); 2,616 (0,3); 2,506 (280,8); 2,502 (354,5); 2,498 (275,8); 2,329 (2,2); 1,234 (0,6); 0,873 (0,6); 0,854 (0,5); 0,742 (1,0); 0,724 (4,4); 0,711 (4,1); 0,706 (3,6); 0,694 (1,4); 0,587 (1,5); 0,576 (4,6); 0,570 (4,4); 0,561 (3,8); 0,548 (1,1); 0,000 (48,0)

Ejemplo I-T3-137: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,543 (6,9); 8,537 (7,0); 8,455 (8,0); 8,364 (2,9); 8,356 (3,0); 8,268 (8,1); 8,118 (4,5); 8,113 (4,5); 8,083 (13,0); 4,467 (0,5); 4,453 (1,5); 4,439 (0,6); 4,112 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (16,0); 3,483 (0,3); 3,469 (0,4); 3,433 (0,5); 3,407 (0,8); 3,395 (4,1); 3,388 (3,4); 3,381 (4,6); 3,338 (731,2); 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,955 (0,8); 2,852 (0,8); 2,844 (1,2); 2,835 (1,8); 2,826 (2,0); 2,818 (2,0); 2,809 (2,0); 2,800 (2,0); 2,791 (1,8); 2,782 (1,2); 2,772 (0,8); 2,676 (1,4); 2,672 (1,9); 2,667 (1,5); 2,507 (235,5); 2,502 (302,0); 2,498 (229,6); 2,333 (1,4); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,237 (0,4); 0,873 (0,4); 0,854 (0,3); 0,765 (1,1); 0,753 (3,5); 0,748 (4,4); 0,736 (5,1); 0,731 (4,0); 0,718 (5,1); 0,706 (3,9); 0,700 (3,5); 0,689 (1,4); 0,582 (1,4); 0,571 (4,3); 0,565 (4,0); 0,556 (3,5); 0,544 (1,0); 0,466 (1,3); 0,455 (4,0); 0,450 (4,1); 0,445 (4,0); 0,440 (3,9); 0,428 (1,1); 0,000 (39,5)
Ejemplo I-T3-138: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,524 (1,8); 8,515 (1,9); 8,487 (3,8); 8,482 (3,9); 8,443 (6,4); 8,432 (1,1); 8,419 (1,9); 8,405 (1,0); 8,274 (0,4); 8,262 (6,3); 8,120 (4,0); 8,114 (3,6); 8,081 (10,3); 4,453 (0,7); 3,904 (16,0); 3,606 (1,0); 3,592 (3,0); 3,579 (3,7); 3,566 (1,8); 3,523 (3,7); 3,511 (4,9); 3,498 (1,9); 3,473 (0,5); 3,449 (0,3); 3,395 (2,5); 3,387 (2,3); 3,381 (2,9); 3,338 (556,7); 3,299 (28,1); 3,286 (1,6); 3,262 (0,8); 3,256 (0,7); 3,174 (0,9); 3,161 (0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,9); 2,822 (1,3); 2,812 (1,4); 2,804 (0,9); 2,795 (0,6); 2,676 (1,4); 2,672 (2,0); 2,667 (1,4); 2,507 (219,1); 2,503 (282,2); 2,498 (210,9); 2,334 (1,2); 2,329 (1,7); 2,325 (1,3); 1,235 (0,5); 0,747 (0,8); 0,734 (2,3); 0,729 (3,2); 0,717 (2,9); 0,711 (2,6); 0,700 (1,0); 0,589 (1,1); 0,579 (3,3); 0,573 (3,0); 0,569 (3,0); 0,563 (2,7); 0,551 (0,9); 0,008 (1,7); 0,000 (45,2); -0,008 (1,8)
Ejemplo I-T3-139: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,474 (2,4); 8,837 (1,9); 8,831 (2,1); 8,602 (3,2); 8,355 (3,4); 7,970 (2,0); 7,965 (2,2); 7,596 (4,3); 4,467 (0,4); 4,453 (1,0); 4,440 (0,4); 3,904 (6,3); 3,423 (0,3); 3,395

(2,3); 3,387 (2,3); 3,381 (2,8); 3,340 (340,7); 3,174 (0,4); 3,161 (0,4); 3,063 (0,6); 2,880 (0,6); 2,672 (0,9); 2,668 (0,7); 2,507 (107,5); 2,503 (142,8); 2,498 (119,4); 2,329 (1,2); 2,325 (1,2); 2,312 (0,8); 2,299 (0,6); 2,292 (0,5); 2,110 (16,0); 1,615 (0,8); 1,601 (2,0); 1,594 (2,3); 1,581 (1,0); 1,324 (0,9); 1,310 (2,1); 1,304 (2,3); 1,289 (0,8); 1,257 (0,4); 1,243 (0,4); 1,168 (0,4); 0,993 (2,1); 0,982 (3,3); 0,962 (1,9); 0,000 (10,4)
Ejemplo I-T3-140: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,785 (2,0); 8,780 (1,9); 8,595 (1,3); 8,584 (4,5); 8,345 (3,4); 7,890 (2,0); 7,885 (1,9); 7,594 (4,2); 4,455 (0,3); 3,904 (3,2); 3,408 (0,5); 3,394 (1,3); 3,382 (1,7); 3,342 (322,7); 3,174 (0,4); 3,162 (0,4); 2,892 (0,5); 2,883 (0,7); 2,873 (0,7); 2,865 (0,5); 2,855 (0,4); 2,672 (0,7); 2,503 (110,1); 2,352 (0,4); 2,345 (0,5); 2,334 (1,3); 2,314 (0,5); 2,111 (16,0); 0,973 (1,9); 0,961 (1,8); 0,951 (1,9); 0,931 (1,6); 0,740 (0,4); 0,723 (1,7); 0,710 (1,7); 0,705 (1,4); 0,694 (0,6); 0,582 (0,6); 0,571 (1,8); 0,564 (1,8); 0,555 (1,5); 0,543 (0,4); 0,000 (8,3)
Ejemplo I-T3-141: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,093 (2,2); 8,668 (2,1); 8,662 (2,2); 8,577 (3,2); 8,327 (3,3); 8,314 (2,3); 8,308 (2,2); 7,593 (3,8); 3,969 (10,4); 3,904 (3,5); 3,409 (0,5); 3,343 (332,3); 3,285 (0,3); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,668 (0,6); 2,525 (2,4); 2,512 (45,6); 2,507 (89,1); 2,503 (116,0); 2,498 (87,1); 2,334 (0,5); 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 2,121 (16,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,0); 1,581 (2,2); 1,567 (0,9); 1,305 (1,0); 1,292 (2,1); 1,285 (2,2); 1,271 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (11,6); -0,008 (0,5)
Ejemplo I-T3-142: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,767 (2,0); 8,582 (3,2); 8,343 (3,2); 7,948 (2,0); 7,851 (0,3); 7,591 (5,1); 4,454 (0,8); 3,904 (4,5); 3,381 (3,9); 3,341 (346,8); 3,218 (0,4); 3,175 (0,5); 3,162 (0,4); 3,043 (7,9); 2,791 (1,0); 2,781 (0,9); 2,766 (1,5); 2,672 (1,0); 2,503 (159,1); 2,330 (1,0); 2,122 (16,0); 1,926 (0,6); 1,915 (0,9); 1,901 (0,7); 1,882 (0,4); 0,992 (1,5);

0,961 (2,3); 0,943 (2,0); 0,824 (0,4); 0,809 (0,4); 0,764 (0,5); 0,540 (2,1); 0,482 (1,7); 0,467 (1,6); 0,000 (14,1)
Ejemplo I-T3-143: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,608 (2,1); 8,602 (2,1); 8,556 (3,2); 8,308 (3,3); 8,266 (1,0); 8,256 (1,0); 8,227 (2,2); 8,221 (2,1); 7,590 (3,9); 3,948 (10,3); 3,904 (3,5); 3,395 (0,9); 3,343 (295,8); 3,175 (0,3); 2,873 (0,3); 2,863 (0,5); 2,855 (0,7); 2,845 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,668 (0,5); 2,507 (88,5); 2,503 (112,5); 2,498 (84,8); 2,334 (0,5); 2,329 (0,7); 2,325 (0,5); 2,120 (16,0); 0,740 (0,4); 0,727 (1,3); 0,722 (1,8); 0,709 (1,6); 0,704 (1,4); 0,692 (0,6); 0,580 (0,6); 0,570 (1,8); 0,564 (1,7); 0,554 (1,4); 0,542 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (14,6)
Ejemplo I-T3-144: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,563 (2,0); 8,558 (2,0); 8,526 (3,6); 8,302 (3,3); 8,005 (1,9); 7,999 (2,0); 7,590 (4,6); 4,468 (0,3); 4,454 (0,8); 4,440 (0,3); 3,915 (9,8); 3,904 (7,4); 3,425 (0,4); 3,395 (2,6); 3,388 (2,3); 3,381 (3,0); 3,341 (345,9); 3,282 (0,4); 2,981 (8,7); 2,748 (0,5); 2,738 (0,8); 2,724 (0,6); 2,711 (0,3); 2,700 (0,9); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,668 (0,8); 2,507 (111,1); 2,503 (144,6); 2,499 (113,9); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,127 (16,0); 0,466 (3,1); 0,449 (1,7); 0,000 (11,6)
Ejemplo I-T3-145: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,848 (0,6); 8,841 (0,8); 8,835 (4,1); 8,829 (4,2); 8,781 (6,9); 8,537 (7,1); 8,316 (0,4); 8,283 (13,4); 8,274 (4,6); 8,257 (0,6); 8,251 (0,5); 3,424 (0,3); 3,409 (0,3); 3,398 (0,4); 3,387 (0,3); 3,371 (0,4); 3,324 (185,3); 2,776 (0,4); 2,764 (0,8); 2,759 (0,9); 2,750 (1,6); 2,739 (1,0); 2,733 (0,9); 2,722 (0,5); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,5); 2,506 (173,0); 2,502 (225,3); 2,497 (167,2); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,398 (16,0); 1,238 (4,1); 1,220 (8,5); 1,202 (3,9); 1,120 (0,5); 1,102 (1,0); 1,085 (0,5); 0,951 (0,4); 0,935 (0,5); 0,577 (2,8); 0,549 (2,5); 0,532 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,2); 0,000 (188,0); -0,008 (8,4); -0,150 (0,9)

Ejemplo I-T3-146: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 10,752 (3,5); 8,900 (3,6); 8,894 (3,7); 8,806 (5,3); 8,571 (5,2); 8,570 (5,2); 8,393 (3,7); 8,387 (3,6); 8,284 (8,3); 8,283 (8,3); 8,028 (4,8); 7,502 (4,8); 7,501 (5,0); 5,756 (5,9); 4,056 (0,5); 4,038 (1,6); 4,020 (1,6); 4,002 (0,5); 3,837 (16,0); 3,324 (33,1); 2,671 (0,4); 2,524 (1,0); 2,520 (1,4); 2,511 (20,1); 2,507 (41,3); 2,502 (54,9); 2,497 (40,1); 2,493 (19,7); 2,329 (0,4); 1,989 (6,9); 1,193 (1,9); 1,175 (3,8); 1,157 (1,9); 0,008 (1,9); 0,000 (58,8); -0,009 (2,2)
Ejemplo I-T3-147: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,999 (3,5); 8,993 (3,6); 8,778 (6,5); 8,499 (6,5); 8,384 (3,5); 8,378 (3,5); 8,279 (10,7); 5,757 (1,1); 4,384 (1,6); 4,366 (5,0); 4,348 (5,1); 4,331 (1,7); 3,894 (0,5); 3,324 (128,6); 2,714 (16,0); 2,675 (0,9); 2,671 (1,3); 2,666 (1,0); 2,524 (3,3); 2,511 (69,0); 2,506 (138,7); 2,502 (184,5); 2,498 (139,2); 2,333 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 1,989 (0,7); 1,377 (5,4); 1,360 (11,3); 1,342 (5,4); 1,234 (0,5); 1,175 (0,4); 0,146 (0,9); 0,008 (6,9); 0,000 (189,8); -0,150 (0,9)
Ejemplo I-T3-148: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,344 (1,0); 8,180 (2,1); 8,179 (2,0); 8,138 (1,8); 8,094 (1,0); 7,688 (1,2); 7,683 (1,6); 7,655 (0,9); 7,650 (0,6); 7,634 (1,0); 7,629 (0,8); 7,474 (1,5); 7,454 (1,2); 6,895 (0,4); 6,892 (0,4); 2,860 (0,4); 2,851 (0,6); 2,842 (0,6); 2,833 (0,4); 2,132 (17,4); 2,107 (0,3); 1,964 (1,5); 1,958 (3,8); 1,952 (20,1); 1,946 (36,2); 1,940 (48,4); 1,933 (33,3); 1,927 (17,3); 1,437 (16,0); 0,781 (1,0); 0,776 (1,2); 0,763 (1,3); 0,758 (0,9); 0,746 (0,4); 0,611 (0,4); 0,601 (1,1); 0,594 (1,2); 0,590 (1,0); 0,584 (1,0); 0,000 (2,5)
Ejemplo I-T3-149: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 18,228 (0,3); 18,070 (0,4); 11,873 (0,3); 9,464 (0,4); 9,435 (13,6); 9,407 (0,4); 9,265 (9,2); 9,168 (16,0); 8,869 (9,9); 8,544 (15,8); 8,514 (0,4); 8,316 (1,1); 8,148 (0,4); 8,012 (0,4); 7,945 (12,0); 7,931 (6,4); 7,910 (6,2); 7,905 (5,4); 7,850 (0,4); 7,843 (0,4); 7,839 (0,4); 7,702 (0,4); 7,639 (0,4); 7,582 (9,8); 7,561 (9,0); 7,543 (0,4);

3,637 (0,4); 3,591 (0,4); 3,572 (0,4); 3,547 (0,4); 3,535 (0,6); 3,512 (0,5); 3,469 (0,6); 3,434 (0,9); 3,392 (2,8); 3,344 (1316,4); 3,339 (765,9); 3,331 (992,7); 3,218 (1,0); 3,211 (0,9); 3,178 (0,5); 3,121 (0,3); 3,058 (0,3); 2,731 (0,4); 2,671 (5,7); 2,638 (0,4); 2,584 (0,4); 2,506 (689,3); 2,502 (847,8); 2,417 (1,1); 2,381 (0,8); 2,333 (4,7); 2,328 (5,7); 2,288 (0,4); 2,283 (0,4); 1,658 (0,3); 1,620 (4,0); 1,606 (11,5); 1,599 (12,3); 1,586 (5,4); 1,546 (0,6); 1,489 (0,4); 1,370 (0,3); 1,350 (0,7); 1,310 (5,0); 1,296 (11,9); 1,290 (12,3); 1,275 (4,4); 1,237 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (404,8); -0,150 (2,2); -3,146 (0,3)
Ejemplo I-T3-150: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,265 (5,5); 9,179 (0,4); 9,144 (12,1); 9,086 (0,6); 8,868 (5,9); 8,863 (6,0); 8,554 (0,6); 8,536 (16,0); 8,525 (4,5); 8,504 (0,7); 8,316 (0,8); 8,292 (0,4); 7,872 (14,1); 7,866 (7,0); 7,855 (6,0); 7,850 (3,3); 7,569 (0,3); 7,534 (7,4); 7,527 (1,7); 7,518 (1,6); 7,511 (6,7); 3,568 (0,6); 3,468 (0,4); 3,455 (0,4); 3,444 (0,5); 3,341 (576,1); 3,339 (590,5); 3,331 (552,2); 2,875 (0,5); 2,864 (1,2); 2,855 (1,6); 2,846 (2,6); 2,836 (2,6); 2,828 (1,7); 2,818 (1,3); 2,807 (0,5); 2,676 (2,6); 2,672 (3,7); 2,667 (2,8); 2,662 (1,4); 2,580 (0,4); 2,525 (9,0); 2,520 (13,1); 2,511 (197,7); 2,507 (411,4); 2,502 (559,2); 2,498 (423,2); 2,493 (212,6); 2,458 (0,5); 2,334 (2,7); 2,329 (3,7); 2,325 (2,7); 0,736 (1,7); 0,724 (4,5); 0,718 (6,6); 0,706 (6,1); 0,700 (5,1); 0,689 (2,3); 0,650 (0,3); 0,608 (0,4); 0,578 (2,2); 0,568 (6,4); 0,562 (5,7); 0,558 (5,5); 0,552 (5,2); 0,540 (1,7); 0,146 (1,7); 0,030 (0,4); 0,024 (0,4); 0,017 (0,6); 0,008 (12,6); 0,000 (401,4); -0,009 (15,0); -0,150 (1,7)
Ejemplo I-T3-151: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,444 (12,0); 9,048 (16,0); 8,890 (7,0); 8,886 (7,3); 8,610 (8,1); 8,605 (7,8); 8,506 (15,9); 8,495 (0,3); 8,317 (4,4); 7,899 (6,5); 7,894 (13,4); 7,885 (2,6); 7,870 (6,7); 7,865 (4,8); 7,579 (9,1); 7,559 (8,2); 3,410 (0,4); 3,383 (0,7); 3,364 (1,2); 3,327 (1576,2); 3,293 (1,2); 2,694 (0,5); 2,676 (8,0); 2,671 (11,2); 2,667 (8,3); 2,643 (0,4);

2,630 (0,4); 2,623 (0,5); 2,599 (0,7); 2,524 (28,8); 2,520 (43,4); 2,511 (594,8); 2,507 (1217,9); 2,502 (1623,1); 2,498 (1195,4); 2,493 (589,7); 2,419 (0,6); 2,338 (3,7); 2,333 (7,9); 2,329 (11,1); 2,324 (8,1); 2,320 (4,0); 1,620 (3,9); 1,606 (9,5); 1,599 (10,3); 1,586 (4,4); 1,546 (0,4); 1,342 (0,4); 1,303 (4,6); 1,289 (9,5); 1,282 (10,2); 1,268 (3,8); 1,234 (0,6); 1,148 (0,9); 0,146 (8,7); 0,049 (0,4); 0,039 (0,7); 0,008 (63,6); 0,000 (1893,8); -0,009 (67,7); -0,035 (1,3); -0,045 (0,8); -0,088 (0,3); -0,150 (8,7)
Ejemplo I-T3-152: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,046 (0,6); 9,022 (16,0); 8,893 (8,5); 8,608 (9,0); 8,604 (8,5); 8,543 (6,0); 8,532 (6,0); 8,515 (0,9); 8,496 (15,9); 8,453 (0,3); 8,317 (2,0); 7,901 (0,4); 7,896 (0,4); 7,828 (8,6); 7,823 (11,4); 7,818 (11,0); 7,812 (8,2); 7,682 (0,3); 7,532 (8,5); 7,521 (2,4); 7,510 (7,5); 3,508 (0,4); 3,327 (1034,9); 3,230 (0,5); 3,210 (0,4); 2,874 (0,7); 2,864 (1,6); 2,854 (2,4); 2,846 (3,5); 2,836 (3,5); 2,827 (2,5); 2,817 (1,7); 2,807 (0,8); 2,671 (8,3); 2,622 (0,7); 2,608 (0,8); 2,506 (980,0); 2,502 (1179,0); 2,329 (8,1); 2,297 (0,4); 2,281 (0,3); 1,236 (0,7); 1,149 (0,6); 0,735 (2,2); 0,717 (8,7); 0,705 (8,5); 0,699 (7,0); 0,688 (2,9); 0,666 (0,5); 0,648 (0,4); 0,615 (0,3); 0,603 (0,4); 0,574 (3,0); 0,563 (9,1); 0,556 (9,0); 0,548 (7,5); 0,535 (2,1); 0,525 (0,5); 0,488 (0,3); 0,146 (5,2); 0,000 (1050,7); -0,150 (5,5)
Ejemplo I-T3-153: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,441 (7,1); 9,380 (9,1); 8,960 (4,8); 8,954 (5,0); 8,641 (9,2); 8,581 (3,9); 8,577 (3,9); 8,317 (0,9); 8,166 (1,1); 8,002 (5,1); 7,997 (6,5); 7,969 (3,3); 7,963 (2,5); 7,948 (3,5); 7,942 (3,0); 7,589 (6,2); 7,568 (5,7); 3,430 (0,6); 3,411 (1,9); 3,393 (2,3); 3,378 (2,6); 3,359 (2,8); 3,328 (240,7); 2,950 (0,6); 2,932 (2,1); 2,913 (2,4); 2,898 (2,1); 2,880 (1,9); 2,862 (0,5); 2,676 (1,9); 2,671 (2,7); 2,667 (2,0); 2,542 (1,0); 2,525 (6,6); 2,520 (10,2); 2,511 (145,4); 2,507 (298,6); 2,502 (396,9); 2,498 (292,6); 2,493 (144,6); 2,334 (1,9); 2,329 (2,6); 2,325 (1,9); 2,320 (1,0); 2,075 (0,6); 1,908 (0,5);

1,627 (2,3); 1,613 (5,6); 1,606 (6,0); 1,593 (2,7); 1,314 (2,6); 1,301 (5,6); 1,294 (5,9); 1,279 (2,3); 1,106 (7,4); 1,088 (16,0); 1,069 (7,2); 0,146 (2,3); 0,008 (17,1); 0,000 (509,3); -0,009 (19,8); -0,031 (0,4); -0,034 (0,4); -0,150 (2,3)
Ejemplo I-T3-154: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,448 (6,4); 9,231 (4,3); 9,226 (4,3); 9,186 (8,2); 8,634 (4,2); 8,629 (4,2); 8,596 (8,2); 8,317 (3,6); 7,954 (4,3); 7,949 (6,0); 7,934 (3,1); 7,929 (2,0); 7,913 (3,2); 7,908 (2,5); 7,595 (5,2); 7,574 (4,7); 4,152 (1,7); 4,133 (5,6); 4,115 (5,6); 4,096 (1,8); 3,459 (0,4); 3,445 (0,3); 3,436 (0,3); 3,328 (1346,5); 2,694 (0,4); 2,676 (6,7); 2,671 (9,0); 2,667 (6,9); 2,629 (0,5); 2,620 (0,5); 2,524 (24,4); 2,506 (1009,7); 2,502 (1305,6); 2,498 (988,2); 2,405 (0,6); 2,389 (0,6); 2,333 (6,4); 2,329 (8,7); 2,325 (6,5); 1,623 (2,1); 1,608 (5,2); 1,602 (5,6); 1,589 (2,4); 1,575 (0,5); 1,326 (6,4); 1,308 (16,0); 1,289 (11,7); 1,274 (2,1); 1,258 (0,6); 1,247 (0,5); 1,236 (0,7); 1,158 (0,5); 1,147 (0,4); 1,068 (0,8); 0,146 (6,9); 0,008 (62,7); 0,000 (1428,7); -0,059 (0,5); -0,080 (0,4); -0,101 (0,4); -0,150 (7,0)
Ejemplo I-T3-155: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,345 (0,9); 8,192 (1,8); 8,153 (1,5); 8,094 (0,9); 7,738 (1,0); 7,732 (1,3); 7,706 (0,6); 7,700 (0,5); 7,685 (0,7); 7,680 (0,6); 7,563 (0,4); 7,507 (1,1); 7,486 (0,9); 2,144 (6,2); 2,114 (0,5); 2,108 (0,4); 1,972 (1,1); 1,964 (1,1); 1,958 (2,8); 1,952 (14,4); 1,946 (26,2); 1,940 (35,3); 1,934 (25,1); 1,928 (13,6); 1,596 (0,5); 1,582 (1,3); 1,575 (1,3); 1,561 (0,7); 1,437 (16,0); 1,362 (0,6); 1,349 (1,3); 1,342 (1,4); 1,327 (0,5); 1,204 (0,5); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (147,1); -0,008 (10,2); -0,150 (0,7)
Ejemplo I-T3-156: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,077 (8,4); 9,076 (8,4); 8,593 (4,1); 8,589 (4,2); 8,540 (3,1); 8,529 (3,2); 8,471 (8,5); 8,469 (8,4); 8,317 (0,7); 8,019 (4,1); 8,015 (4,0); 7,848 (1,5); 7,843 (5,5); 7,839 (7,4); 7,834 (5,9); 7,826 (4,6); 7,820 (2,2); 7,526 (5,7); 7,517 (1,0); 7,513 (0,9); 7,504 (5,1); 3,328 (238,4); 3,109 (1,9); 3,091 (6,4); 3,072 (6,5); 3,054 (2,0); 2,874 (0,4);

2,864 (0,9); 2,854 (1,2); 2,846 (1,9); 2,836 (2,0); 2,827 (1,2); 2,818 (1,0); 2,808 (0,4); 2,676 (1,5); 2,671 (2,2); 2,667 (1,6); 2,662 (0,8); 2,525 (5,6); 2,520 (8,4); 2,511 (110,7); 2,507 (227,2); 2,502 (302,7); 2,498 (222,3); 2,493 (109,6); 2,338 (0,6); 2,334 (1,4); 2,329 (1,9); 2,324 (1,4); 2,320 (0,7); 1,398 (1,0); 1,235 (8,0); 1,217 (16,0); 1,198 (7,0); 0,736 (1,2); 0,723 (3,4); 0,718 (4,9); 0,706 (4,5); 0,700 (3,8); 0,688 (1,6); 0,577 (1,6); 0,566 (4,8); 0,560 (4,3); 0,556 (4,1); 0,550 (3,9); 0,538 (1,2); 0,146 (0,6); 0,008 (4,5); 0,000 (140,4); -0,009 (5,1); -0,150 (0,6)
Ejemplo I-T3-157: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,389 (0,4); 9,355 (9,8); 8,964 (5,4); 8,959 (5,4); 8,642 (0,5); 8,627 (9,7); 8,577 (4,7); 8,540 (3,8); 8,529 (3,8); 8,317 (1,2); 7,913 (12,3); 7,893 (4,1); 7,887 (2,8); 7,541 (4,9); 7,520 (4,4); 4,038 (0,9); 4,020 (0,8); 4,002 (0,4); 3,454 (0,4); 3,425 (0,9); 3,406 (2,4); 3,387 (2,9); 3,372 (3,7); 3,353 (5,7); 3,329 (694,0); 2,952 (0,7); 2,934 (2,2); 2,915 (2,5); 2,900 (2,2); 2,882 (2,0); 2,864 (1,6); 2,855 (1,6); 2,846 (2,3); 2,836 (2,3); 2,827 (1,6); 2,818 (1,1); 2,807 (0,5); 2,676 (3,2); 2,671 (4,1); 2,667 (3,2); 2,507 (462,3); 2,502 (589,8); 2,498 (442,8); 2,333 (2,8); 2,329 (3,8); 2,325 (2,8); 1,989 (3,4); 1,398 (1,9); 1,234 (0,7); 1,193 (1,0); 1,175 (1,8); 1,157 (0,9); 1,099 (7,6); 1,081 (16,0); 1,063 (7,3); 0,741 (1,3); 0,728 (4,0); 0,723 (5,4); 0,711 (5,1); 0,705 (4,3); 0,694 (1,7); 0,583 (1,8); 0,573 (5,5); 0,566 (5,3); 0,557 (4,5); 0,545 (1,3); 0,146 (0,3); 0,008 (3,2); 0,000 (63,6)
Ejemplo I-T3-158: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,234 (1,6); 9,229 (1,6); 9,165 (3,1); 8,632 (1,6); 8,627 (1,6); 8,584 (3,2); 8,547 (1,2); 8,536 (1,2); 7,875 (4,5); 7,871 (1,9); 7,857 (1,5); 7,852 (0,9); 7,548 (1,5); 7,543 (0,7); 7,529 (0,6); 7,525 (1,4); 4,151 (0,7); 4,132 (2,2); 4,114 (2,2); 4,095 (0,7); 3,329 (71,4); 2,867 (0,3); 2,857 (0,4); 2,849 (0,7); 2,839 (0,7); 2,830 (0,5); 2,821 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,4); 2,525 (1,6); 2,511 (33,5); 2,507 (66,9); 2,502 (87,7); 2,498 (64,8); 2,494 (32,5); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,398 (16,0);

1,324 (2,6); 1,306 (5,7); 1,287 (2,6); 1,236 (0,3); 0,738 (0,4); 0,725 (1,3); 0,720 (1,8); 0,708 (1,6); 0,702 (1,4); 0,691 (0,6); 0,580 (0,6); 0,569 (1,8); 0,563 (1,6); 0,554 (1,4); 0,541 (0,4); 0,008 (0,4); 0,000 (10,6); -0,008 (0,4)
Ejemplo I-T3-159: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,812 (2,8); 9,173 (7,1); 8,904 (2,9); 8,880 (0,5); 8,874 (0,4); 8,852 (1,7); 8,845 (2,6); 8,822 (6,9); 8,816 (7,2); 8,765 (9,2); 8,566 (0,7); 8,554 (1,9); 8,512 (5,8); 8,484 (11,2); 8,455 (6,7); 8,449 (6,6); 8,318 (0,7); 8,263 (1,1); 8,257 (1,1); 8,237 (0,4); 8,093 (5,7); 3,903 (16,0); 3,680 (2,8); 3,593 (0,6); 3,582 (0,9); 3,570 (0,7); 3,388 (0,9); 3,333 (306,9); 3,276 (1,0); 3,267 (1,3); 3,168 (13,0); 3,044 (0,4); 2,980 (0,9); 2,891 (2,0); 2,732 (1,7); 2,676 (1,9); 2,672 (2,6); 2,667 (1,9); 2,542 (0,9); 2,525 (6,2); 2,511 (158,8); 2,507 (322,0); 2,503 (423,2); 2,498 (311,3); 2,494 (156,1); 2,334 (2,0); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,083 (0,4); 2,065 (0,3); 1,877 (2,4); 1,867 (5,7); 1,857 (6,2); 1,848 (2,6); 1,718 (0,4); 1,709 (0,4); 1,435 (0,4); 1,355 (0,6); 1,298 (0,6); 1,284 (0,5); 1,276 (0,6); 1,259 (3,3); 1,249 (6,9); 1,239 (9,7); 1,236 (9,6); 1,001 (0,6); 0,991 (0,5); 0,986 (0,5); 0,871 (0,5); 0,862 (0,6); 0,854 (1,3); 0,843 (0,5); 0,837 (0,7); 0,827 (0,3); 0,008 (0,7); 0,000 (25,7); -0,008 (1,0)
Ejemplo I-T3-160: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,728 (0,3); 8,722 (0,5); 8,704 (9,5); 8,698 (9,6); 8,524 (0,3); 8,353 (7,7); 8,234 (15,1); 8,219 (12,8); 8,100 (7,8); 8,052 (10,3); 8,046 (10,1); 7,603 (0,4); 7,592 (0,6); 7,560 (0,5); 7,537 (0,5); 7,495 (0,5); 7,490 (0,5); 7,342 (0,5); 7,067 (2,6); 5,449 (0,7); 4,054 (1,4); 3,893 (0,3); 3,441 (0,7); 3,375 (0,6); 3,241 (1,1); 3,154 (3,0); 3,070 (0,6); 2,886 (0,9); 2,876 (1,9); 2,867 (2,7); 2,858 (3,9); 2,849 (3,9); 2,840 (2,7); 2,831 (1,9); 2,821 (0,7); 2,600 (0,3); 2,590 (0,4); 2,531 (0,4); 2,470 (3,6); 2,465 (5,0); 2,460 (3,7); 2,432 (0,3); 2,425 (0,4); 2,394 (0,4); 2,368 (0,5); 2,359 (0,5); 2,329 (0,6); 2,316 (0,6); 2,289 (0,8); 2,261 (1,3); 2,257 (1,3); 2,255 (1,3); 2,243 (1,9); 2,178 (1072,5); 2,127 (0,9); 2,121 (1,9); 2,114 (3,1); 2,108 (4,0); 2,102 (2,8); 2,096 (1,6); 2,087 (0,7); 2,057

(0,4); 2,036 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,2); 1,965 (20,6); 1,959 (52,5); 1,953 (270,7); 1,947 (487,5); 1,941 (651,6); 1,935 (450,7); 1,929 (234,0); 1,782 (1,4); 1,775 (2,7); 1,769 (3,6); 1,763 (2,5); 1,757 (1,3); 1,711 (2,4); 1,384 (0,4); 1,380 (0,8); 1,269 (16,0); 0,897 (0,7); 0,881 (1,8); 0,864 (0,9); 0,808 (2,2); 0,795 (6,8); 0,790 (8,9); 0,778 (9,1); 0,772 (6,9); 0,760 (3,0); 0,738 (0,4); 0,721 (0,4); 0,661 (0,4); 0,651 (0,4); 0,621 (3,0); 0,609 (8,1); 0,603 (8,3); 0,599 (7,4); 0,594 (7,1); 0,581 (2,1); 0,543 (0,5); 0,390 (0,4); 0,385 (0,5); 0,146 (8,5); 0,085 (0,4); 0,078 (0,5); 0,065 (0,5); 0,008 (68,5); 0,000 (1708,3); -0,009 (75,1); -0,049 (0,5); -0,058 (0,4); -0,150 (8,4)
Ejemplo I-T3-161: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,626 (2,2); 8,153 (1,1); 8,140 (16,0); 8,100 (13,1); 7,994 (7,6); 7,949 (7,7); 7,629 (9,3); 7,624 (11,5); 7,596 (6,2); 7,591 (4,8); 7,585 (2,3); 7,575 (7,4); 7,570 (6,0); 7,488 (0,5); 7,467 (0,4); 7,436 (11,0); 7,415 (8,4); 4,085 (1,8); 4,068 (5,5); 4,050 (5,6); 4,032 (1,9); 3,435 (0,7); 3,425 (1,5); 3,416 (1,9); 3,407 (3,0); 3,394 (2,9); 3,383 (1,8); 3,376 (1,3); 3,365 (0,6); 3,033 (0,5); 2,905 (0,4); 2,683 (0,6); 2,665 (0,6); 2,467 (0,8); 2,143 (2313,8); 2,117 (49,9); 2,108 (11,0); 2,101 (6,8); 2,095 (3,7); 1,972 (32,2); 1,964 (49,2); 1,958 (118,9); 1,953 (611,9); 1,946 (1099,9); 1,940 (1474,5); 1,934 (1019,6); 1,928 (525,2); 1,781 (2,8); 1,775 (5,7); 1,769 (7,9); 1,762 (5,4); 1,756 (2,4); 1,437 (7,6); 1,270 (1,1); 1,222 (6,5); 1,204 (13,0); 1,186 (6,4); 0,951 (2,0); 0,939 (6,4); 0,934 (8,6); 0,921 (8,9); 0,915 (6,5); 0,902 (2,8); 0,881 (0,8); 0,863 (0,6); 0,821 (0,5); 0,811 (0,4); 0,782 (2,8); 0,770 (7,8); 0,764 (8,1); 0,760 (6,9); 0,754 (6,8); 0,741 (1,9); 0,192 (0,4); 0,146 (19,2); 0,087 (1,0); 0,063 (1,5); 0,008 (155,4); 0,000 (3971,4); -0,009 (173,7); -0,068 (0,4); -0,150 (18,8)
Ejemplo I-T3-162: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,194 (6,9); 8,179 (6,7); 7,972 (3,4); 7,759 (3,0); 7,688 (3,5); 7,682 (4,6); 7,655 (2,4); 7,650 (1,8); 7,635 (2,7); 7,629 (2,4); 7,477 (4,3); 7,456 (3,4); 6,951 (1,1); 2,872 (0,7); 2,862 (1,1); 2,854 (1,6); 2,844 (1,6); 2,835 (1,1); 2,826 (0,8); 2,471 (0,3); 2,466

(0,5); 2,461 (0,3); 2,180 (199,2); 2,134 (0,5); 2,115 (0,5); 2,109 (0,6); 2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (6,7); 1,953 (37,6); 1,947 (69,0); 1,941 (93,6); 1,935 (65,6); 1,929 (34,4); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,795 (0,9); 0,782 (2,6); 0,777 (3,6); 0,765 (3,7); 0,759 (2,8); 0,747 (1,2); 0,612 (1,2); 0,601 (3,3); 0,595 (3,4); 0,591 (3,1); 0,586 (3,0); 0,573 (0,9); 0,146 (1,5); 0,008 (10,7); 0,000 (294,5); -0,150 (1,5)
Ejemplo I-T3-163: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,205 (4,0); 8,190 (4,1); 7,973 (2,2); 7,760 (2,0); 7,736 (2,0); 7,731 (2,6); 7,704 (1,2); 7,700 (1,0); 7,684 (1,4); 7,679 (1,2); 7,600 (0,8); 7,509 (2,3); 7,488 (1,9); 2,161 (116,4); 2,121 (0,5); 2,114 (0,5); 2,108 (0,6); 2,102 (0,4); 1,963 (2,5); 1,952 (29,4); 1,946 (52,9); 1,941 (70,8); 1,934 (50,0); 1,928 (26,6); 1,769 (0,4); 1,598 (1,0); 1,583 (2,9); 1,576 (2,8); 1,563 (1,3); 1,436 (16,0); 1,362 (1,3); 1,348 (2,9); 1,341 (3,0); 1,327 (1,0); 1,269 (0,5); 0,145 (1,2); 0,000 (226,5); -0,150 (1,2)
Ejemplo I-T3-164: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,460 (5,0); 8,854 (7,4); 8,671 (4,0); 8,651 (4,0); 8,535 (7,4); 7,846 (1,3); 7,840 (3,0); 7,833 (4,3); 7,827 (5,4); 7,824 (4,4); 7,818 (1,5); 7,594 (4,1); 7,584 (0,8); 7,582 (0,8); 7,572 (3,6); 4,056 (1,2); 4,038 (3,7); 4,020 (3,7); 4,002 (1,3); 3,934 (1,6); 3,329 (39,1); 2,671 (0,4); 2,525 (1,1); 2,507 (42,6); 2,502 (56,3); 2,498 (42,6); 2,329 (0,4); 1,989 (16,0); 1,619 (1,7); 1,605 (4,3); 1,598 (4,6); 1,585 (1,9); 1,397 (5,6); 1,295 (2,0); 1,281 (4,2); 1,275 (4,5); 1,260 (1,6); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,1); 1,069 (10,8); 0,008 (1,8); 0,000 (48,4); -0,008 (2,3)
Ejemplo I-T3-165: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,748 (1,7); 8,742 (1,8); 8,353 (1,5); 8,243 (2,8); 8,228 (2,4); 8,116 (1,9); 8,110 (2,1); 8,101 (1,5); 7,706 (0,5); 3,236 (0,9); 3,070 (0,4); 2,883 (0,4); 2,284 (0,3); 2,154 (118,3); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9); 2,108 (0,9); 2,102 (0,7); 2,095 (0,4); 1,972 (0,7); 1,965 (3,4); 1,958 (8,8); 1,953 (47,0); 1,946 (85,3); 1,940 (114,8); 1,934 (80,1); 1,928

(41,8); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7); 1,763 (0,5); 1,612 (0,8); 1,597 (2,0); 1,591 (2,0); 1,577 (1,0); 1,437 (16,0); 1,370 (1,0); 1,356 (2,0); 1,349 (2,1); 1,334 (0,8); 1,269 (0,9); 0,146 (1,9); 0,008 (15,7); 0,000 (390,9); -0,009 (19,9); -0,150 (2,0)
Ejemplo I-T3-166: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,440 (11,8); 9,127 (15,9); 8,569 (7,7); 8,491 (16,0); 8,318 (2,5); 7,965 (7,6); 7,961 (7,7); 7,926 (7,5); 7,921 (12,0); 7,912 (6,7); 7,906 (3,4); 7,891 (6,2); 7,885 (4,8); 7,573 (10,1); 7,553 (9,2); 3,459 (0,4); 3,399 (0,7); 3,365 (1,8); 3,331 (1516,7); 3,298 (1,6); 2,701 (0,4); 2,694 (0,3); 2,676 (6,5); 2,671 (9,1); 2,667 (6,9); 2,638 (0,4); 2,576 (1,1); 2,529 (53,9); 2,520 (35,9); 2,511 (509,9); 2,507 (1041,8); 2,502 (1375,8); 2,498 (1016,8); 2,417 (0,5); 2,351 (0,6); 2,334 (6,6); 2,329 (9,1); 2,325 (6,8); 2,302 (0,3); 1,621 (3,9); 1,607 (9,8); 1,600 (10,6); 1,587 (4,4); 1,547 (0,4); 1,348 (0,4); 1,307 (4,5); 1,294 (9,7); 1,287 (10,6); 1,273 (3,7); 1,237 (0,4); 0,146 (3,4); 0,024 (0,3); 0,008 (24,7); 0,000 (766,8); -0,008 (29,5); -0,032 (0,8); -0,150 (3,5)
Ejemplo I-T3-167: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,440 (6,2); 9,103 (8,3); 9,094 (0,8); 8,587 (4,2); 8,479 (8,5); 8,317 (1,1); 8,021 (4,5); 7,917 (3,9); 7,911 (6,2); 7,903 (3,6); 7,898 (1,8); 7,882 (3,2); 7,877 (2,5); 7,597 (0,4); 7,574 (5,4); 7,554 (4,7); 3,329 (494,7); 3,110 (1,9); 3,092 (6,3); 3,074 (6,4); 3,056 (2,0); 2,871 (0,3); 2,676 (3,0); 2,671 (4,2); 2,667 (3,1); 2,524 (9,6); 2,507 (478,6); 2,502 (637,0); 2,498 (477,3); 2,408 (0,8); 2,333 (2,9); 2,329 (4,1); 2,325 (3,1); 1,621 (2,0); 1,607 (5,2); 1,600 (5,6); 1,587 (2,3); 1,306 (2,4); 1,293 (5,3); 1,286 (5,7); 1,272 (2,1); 1,261 (0,6); 1,235 (7,6); 1,217 (16,0); 1,199 (7,1); 0,146 (1,6); 0,008 (11,5); 0,000 (362,6); -0,008 (14,5); -0,026 (0,6); -0,150 (1,6)
Ejemplo I-T3-168: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,917 (4,0); 8,676 (2,2); 8,612 (2,2); 8,554 (1,4); 8,543 (1,4); 8,439 (4,1); 7,783 (0,8); 7,777 (1,6); 7,770 (2,3); 7,764 (3,0); 7,539 (2,1); 7,527 (0,4); 7,517 (1,8); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,936 (2,3); 3,333 (40,9); 2,864 (0,4); 2,854 (0,6); 2,846 (0,8);

2,836 (0,8); 2,827 (0,6); 2,818 (0,4); 2,507 (26,6); 2,503 (34,6); 2,498 (26,4); 1,989 (1,7); 1,296 (0,7); 1,193 (0,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 1,069 (16,0); 0,733 (0,5); 0,720 (1,6); 0,716 (2,1); 0,703 (2,0); 0,698 (1,8); 0,686 (0,7); 0,566 (0,7); 0,555 (2,1); 0,549 (2,0); 0,540 (1,8); 0,527 (0,6); 0,000 (11,0)
Ejemplo I-T3-169: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,461 (11,1); 9,416 (0,4); 8,936 (15,7); 8,681 (8,8); 8,616 (8,7); 8,450 (16,0); 7,833 (11,0); 7,827 (9,7); 7,820 (7,2); 7,652 (0,3); 7,589 (8,1); 7,578 (1,9); 7,567 (7,0); 7,556 (0,5); 4,038 (0,8); 4,020 (0,8); 3,937 (0,6); 3,333 (133,2); 2,672 (0,7); 2,503 (110,4); 2,330 (0,7); 1,989 (3,2); 1,622 (3,6); 1,607 (9,7); 1,601 (10,5); 1,587 (4,3); 1,563 (0,4); 1,556 (0,4); 1,547 (0,5); 1,334 (0,4); 1,314 (0,5); 1,300 (4,8); 1,294 (5,2); 1,281 (9,9); 1,274 (10,4); 1,259 (3,7); 1,235 (0,6); 1,193 (0,9); 1,175 (1,7); 1,157 (0,9); 1,069 (3,7); 0,000 (35,7)
Ejemplo I-T3-170: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,441 (1,5); 9,436 (2,4); 8,694 (1,7); 8,619 (3,2); 8,443 (1,7); 8,398 (3,2); 8,274 (2,8); 7,960 (1,6); 7,956 (1,6); 7,810 (0,9); 7,804 (2,1); 7,797 (2,3); 7,792 (2,9); 7,787 (3,1); 7,782 (0,9); 7,742 (1,6); 7,739 (1,6); 7,569 (1,0); 7,557 (2,1); 7,546 (1,3); 7,535 (1,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,332 (35,6); 3,116 (0,7); 3,097 (2,3); 3,079 (2,4); 3,061 (0,7); 2,525 (0,5); 2,512 (10,5); 2,507 (21,4); 2,503 (28,1); 2,498 (20,5); 2,494 (9,9); 1,990 (16,0); 1,615 (1,1); 1,601 (2,8); 1,594 (2,9); 1,581 (1,3); 1,289 (1,3); 1,276 (2,8); 1,269 (3,0); 1,255 (1,1); 1,208 (2,7); 1,193 (5,6); 1,190 (6,2); 1,175 (9,2); 1,157 (4,2); 0,000 (3,5)
Ejemplo I-T3-171: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,443 (12,6); 9,162 (16,0); 8,676 (8,2); 8,530 (16,0); 8,412 (7,8); 8,317 (4,0); 7,937 (8,0); 7,932 (12,0); 7,921 (6,8); 7,915 (3,8); 7,900 (6,4); 7,895 (5,0); 7,716 (0,4); 7,584 (10,3); 7,563 (9,1); 4,358 (2,5); 4,332 (7,5); 4,306 (7,8); 4,280 (2,7); 4,104 (0,5); 4,079 (0,4); 3,496 (0,5); 3,480 (0,4); 3,466 (0,5); 3,452 (0,4); 3,396 (0,8);

3,329 (1554,1); 3,287 (1,0); 2,676 (8,0); 2,671 (11,1); 2,667 (8,6); 2,645 (0,6); 2,525 (28,7); 2,511 (614,7); 2,507 (1266,3); 2,502 (1687,1); 2,498 (1264,4); 2,389 (0,6); 2,380 (0,6); 2,333 (7,8); 2,329 (11,0); 2,325 (8,3); 2,256 (0,4); 2,075 (1,4); 1,623 (4,0); 1,608 (10,0); 1,601 (10,8); 1,588 (4,6); 1,548 (0,5); 1,347 (0,4); 1,306 (4,7); 1,293 (10,0); 1,286 (10,8); 1,272 (3,9); 1,234 (0,7); 0,146 (0,5); 0,017 (0,4); 0,008 (3,6); 0,000 (115,1); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)
Ejemplo I-T3-172: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,613 (0,3); 8,596 (8,4); 8,529 (2,9); 8,518 (3,0); 8,492 (0,7); 8,381 (8,5); 8,333 (0,6); 7,956 (4,4); 7,953 (4,4); 7,749 (2,3); 7,743 (4,8); 7,739 (5,0); 7,725 (13,2); 7,507 (4,3); 7,488 (2,3); 7,485 (3,1); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (51,5); 3,112 (1,9); 3,094 (6,1); 3,076 (6,1); 3,057 (2,0); 3,048 (0,4); 3,029 (0,9); 3,011 (0,9); 2,856 (0,8); 2,847 (1,1); 2,838 (1,8); 2,828 (1,8); 2,819 (1,1); 2,809 (0,9); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,524 (1,3); 2,511 (30,4); 2,507 (60,9); 2,502 (79,7); 2,498 (58,7); 2,494 (29,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,324 (0,4); 1,989 (16,0); 1,235 (0,4); 1,207 (6,8); 1,192 (7,1); 1,189 (14,7); 1,175 (10,4); 1,170 (7,2); 1,157 (4,7); 1,068 (0,4); 0,727 (1,1); 0,714 (3,3); 0,709 (4,6); 0,697 (4,3); 0,691 (3,7); 0,680 (1,5); 0,563 (1,5); 0,552 (4,6); 0,546 (4,3); 0,536 (3,8); 0,524 (1,1); 0,008 (2,2); 0,000 (61,3); -0,008 (2,4)
Ejemplo I-T3-173: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,653 (6,0); 8,567 (3,1); 8,561 (3,2); 8,401 (5,7); 8,091 (10,1); 8,013 (3,1); 8,007 (3,2); 7,957 (0,4); 6,579 (0,7); 5,409 (0,3); 3,923 (16,0); 3,592 (0,3); 3,367 (923,7); 2,985 (14,3); 2,767 (0,4); 2,740 (1,3); 2,725 (0,9); 2,704 (1,4); 2,674 (0,9); 2,509 (96,0); 2,505 (123,6); 2,501 (91,6); 2,332 (0,8); 2,074 (1,6); 1,271 (0,8); 1,169 (5,1); 0,467 (4,6); 0,450 (2,4); 0,008 (1,4); 0,000 (28,9)
Ejemplo I-T3-174: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,835 (7,5); 8,672 (3,0); 8,669 (4,0); 8,650 (3,9); 8,649 (3,9); 8,645 (2,9); 8,556

(2,5); 8,545 (2,5); 8,525 (7,6); 7,787 (1,7); 7,781 (2,9); 7,766 (4,0); 7,763 (11,3); 7,546 (3,2); 7,542 (1,7); 7,527 (1,5); 7,524 (2,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (59,6); 2,865 (0,7); 2,856 (0,9); 2,847 (1,4); 2,836 (1,5); 2,828 (0,9); 2,818 (0,7); 2,671 (0,4); 2,525 (1,0); 2,520 (1,6); 2,511 (21,0); 2,507 (42,8); 2,502 (56,7); 2,498 (41,2); 2,493 (19,8); 2,329 (0,4); 1,989 (16,0); 1,193 (4,3); 1,175 (8,7); 1,157 (4,2); 0,733 (1,0); 0,720 (2,7); 0,715 (3,8); 0,703 (3,5); 0,697 (2,9); 0,686 (1,3); 0,566 (1,3); 0,555 (3,7); 0,549 (3,3); 0,545 (3,1); 0,540 (3,0); 0,527 (0,9); 0,008 (1,4); 0,000 (40,4); -0,009 (1,3)
Ejemplo I-T3-175: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,146 (3,1); 8,082 (4,8); 7,714 (1,6); 7,697 (2,0); 7,692 (2,5); 7,663 (1,3); 7,658 (1,0); 7,642 (1,5); 7,637 (1,3); 7,472 (2,3); 7,451 (1,8); 6,931 (0,6); 2,873 (0,4); 2,864 (0,6); 2,855 (0,9); 2,845 (0,9); 2,837 (0,6); 2,827 (0,4); 2,165 (79,0); 2,115 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,965 (1,5); 1,959 (4,0); 1,953 (28,1); 1,947 (52,6); 1,941 (72,5); 1,935 (50,5); 1,929 (26,2); 1,769 (0,4); 1,437 (16,0); 0,796 (0,5); 0,783 (1,5); 0,778 (2,0); 0,765 (2,0); 0,760 (1,5); 0,748 (0,7); 0,613 (0,6); 0,601 (1,7); 0,595 (1,8); 0,591 (1,6); 0,586 (1,6); 0,574 (0,5); 0,000 (0,6)
Ejemplo I-T3-176: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 19,983 (0,4); 8,920 (0,7); 8,270 (0,3); 8,158 (11,0); 8,124 (0,4); 8,095 (11,8); 8,083 (6,1); 8,035 (0,7); 7,746 (6,2); 7,741 (7,8); 7,713 (9,2); 7,692 (4,8); 7,686 (4,4); 7,669 (3,3); 7,590 (0,6); 7,505 (6,9); 7,484 (5,7); 3,901 (3,1); 2,470 (2,5); 2,466 (3,4); 2,461 (2,6); 2,417 (1,0); 2,179 (1701,9); 2,153 (39,9); 2,121 (2,8); 2,115 (3,6); 2,109 (4,3); 2,103 (3,2); 2,096 (1,9); 2,034 (0,5); 1,965 (12,0); 1,954 (216,5); 1,947 (401,4); 1,941 (546,5); 1,935 (384,1); 1,929 (201,2); 1,782 (1,6); 1,776 (2,6); 1,770 (3,4); 1,764 (2,5); 1,599 (3,1); 1,584 (8,5); 1,577 (8,4); 1,564 (4,1); 1,524 (0,7); 1,437 (16,0); 1,401 (0,7); 1,362 (3,9); 1,349 (8,6); 1,342 (8,8); 1,327 (3,1); 1,268 (2,7); 0,882 (0,4); 0,000 (4,2)

Ejemplo I-T3-177: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,462 (7,5); 8,855 (1,9); 8,790 (8,8); 8,673 (1,1); 8,653 (1,1); 8,536 (1,9); 8,483 (8,9); 8,391 (4,5); 8,388 (4,6); 8,105 (4,5); 8,102 (4,5); 7,846 (0,5); 7,840 (1,0); 7,833 (2,8); 7,827 (5,2); 7,820 (5,9); 7,814 (7,0); 7,810 (5,4); 7,804 (1,9); 7,595 (1,3); 7,586 (5,5); 7,573 (1,8); 7,564 (4,6); 4,055 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,331 (91,4); 3,168 (2,0); 3,150 (6,5); 3,131 (6,6); 3,113 (2,0); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (1,8); 2,511 (39,2); 2,507 (78,6); 2,502 (103,0); 2,498 (76,1); 2,494 (38,1); 2,334 (0,5); 2,329 (0,7); 2,325 (0,5); 1,989 (6,1); 1,619 (2,5); 1,604 (6,3); 1,598 (6,8); 1,585 (2,8); 1,397 (5,9); 1,293 (2,9); 1,279 (6,3); 1,273 (6,7); 1,258 (2,4); 1,203 (7,5); 1,193 (2,5); 1,184 (16,0); 1,175 (4,1); 1,166 (7,2); 1,157 (2,0); 1,069 (0,5); 0,008 (2,2); 0,000 (62,2); -0,008 (2,5)
Ejemplo I-T3-178: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,730 (5,4); 8,726 (5,4); 8,701 (10,4); 8,556 (3,7); 8,545 (3,7); 8,483 (0,5); 8,463 (10,3); 8,318 (0,6); 8,268 (5,5); 8,264 (5,4); 7,760 (2,4); 7,754 (3,8); 7,736 (14,8); 7,524 (4,5); 7,505 (2,3); 7,502 (3,8); 4,055 (1,2); 4,037 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,460 (1,7); 3,442 (5,0); 3,424 (5,0); 3,405 (1,7); 3,329 (124,3); 2,868 (0,4); 2,858 (1,0); 2,848 (1,4); 2,840 (2,2); 2,830 (2,2); 2,821 (1,4); 2,811 (1,0); 2,802 (0,4); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,2); 2,541 (6,3); 2,506 (175,4); 2,502 (223,8); 2,498 (167,1); 2,333 (1,1); 2,329 (1,4); 2,324 (1,1); 1,989 (15,7); 1,235 (0,4); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (5,1); 1,150 (7,5); 1,132 (16,0); 1,113 (7,2); 0,728 (1,4); 0,715 (4,2); 0,710 (5,5); 0,698 (5,2); 0,692 (4,4); 0,681 (1,7); 0,561 (1,8); 0,551 (5,6); 0,545 (5,4); 0,535 (4,6); 0,523 (1,3); 0,146 (0,4); 0,000 (94,7); -0,008 (4,3); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-179: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,862 (9,5); 8,701 (0,4); 8,548 (3,2); 8,537 (3,2); 8,504 (0,4); 8,487 (10,0); 8,482 (5,1); 8,477 (4,7); 8,463 (0,4); 8,317 (1,4); 8,095 (4,8); 8,091 (4,8); 7,769 (2,1); 7,764 (3,9); 7,753 (5,3); 7,748 (11,5); 7,736 (0,7); 7,540 (5,3); 7,533 (1,3); 7,524 (1,3);

7,517 (4,5); 4,055 (1,0); 4,037 (3,2); 4,020 (3,2); 4,002 (1,1); 3,507 (0,3); 3,443 (0,4); 3,424 (0,4); 3,396 (0,5); 3,373 (0,8); 3,332 (779,0); 3,293 (0,7); 3,061 (0,5); 3,042 (1,8); 3,024 (2,1); 3,008 (2,2); 2,995 (0,5); 2,990 (2,0); 2,971 (0,6); 2,870 (0,4); 2,860 (0,9); 2,850 (1,3); 2,842 (2,0); 2,831 (2,1); 2,822 (1,3); 2,813 (1,0); 2,803 (0,4); 2,680 (1,3); 2,676 (2,7); 2,671 (3,7); 2,667 (2,8); 2,584 (1,0); 2,565 (2,6); 2,547 (3,3); 2,542 (5,6); 2,525 (10,0); 2,520 (15,4); 2,511 (205,0); 2,507 (417,5); 2,502 (550,6); 2,498 (403,5); 2,493 (198,2); 2,333 (2,6); 2,329 (3,6); 2,325 (2,7); 1,989 (13,8); 1,298 (0,3); 1,259 (0,5); 1,235 (0,9); 1,193 (3,9); 1,175 (7,6); 1,157 (3,8); 1,132 (0,6); 1,047 (7,2); 1,029 (16,0); 1,010 (6,9); 0,733 (1,3); 0,720 (3,5); 0,715 (5,2); 0,703 (4,7); 0,697 (4,1); 0,685 (1,7); 0,563 (1,7); 0,552 (5,0); 0,546 (4,7); 0,542 (4,4); 0,536 (4,2); 0,524 (1,3); 0,146 (1,1); 0,008 (8,8); 0,000 (281,7); -0,009 (10,6); -0,150 (1,1)
Ejemplo I-T3-180: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,105 (5,5); 9,100 (4,5); 8,889 (0,7); 8,871 (9,2); 8,581 (4,6); 8,570 (6,0); 8,564 (6,8); 8,559 (5,5); 8,545 (9,1); 8,317 (0,9); 7,817 (0,3); 7,812 (0,3); 7,774 (3,3); 7,768 (4,2); 7,755 (7,5); 7,751 (13,2); 7,553 (4,7); 7,548 (2,1); 7,535 (2,4); 7,530 (3,5); 4,055 (0,8); 4,037 (2,1); 4,020 (2,1); 4,002 (0,7); 3,559 (2,3); 3,541 (6,5); 3,523 (6,4); 3,504 (2,1); 3,334 (39,2); 3,328 (131,0); 2,866 (1,3); 2,856 (1,8); 2,847 (2,5); 2,837 (2,3); 2,829 (1,5); 2,819 (1,0); 2,809 (0,4); 2,676 (2,3); 2,671 (2,5); 2,667 (1,8); 2,621 (0,4); 2,507 (343,0); 2,502 (380,1); 2,498 (256,9); 2,333 (2,1); 2,329 (2,4); 2,324 (1,6); 1,995 (2,3); 1,989 (8,7); 1,298 (0,4); 1,258 (0,6); 1,249 (0,7); 1,236 (1,2); 1,193 (3,8); 1,181 (8,8); 1,175 (7,3); 1,163 (16,0); 1,157 (4,7); 1,144 (6,8); 1,114 (0,6); 0,731 (1,9); 0,719 (5,2); 0,714 (5,7); 0,702 (5,8); 0,696 (4,2); 0,684 (1,6); 0,593 (0,3); 0,563 (2,7); 0,553 (6,7); 0,547 (6,1); 0,538 (4,5); 0,525 (1,3); 0,006 (15,8); 0,000 (61,8); -0,008 (2,7)
Ejemplo I-T3-181: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,108 (0,4); 9,087 (10,3); 8,892 (5,1); 8,888 (5,2); 8,613 (0,4); 8,591 (10,7); 8,579

(3,8); 8,568 (3,7); 8,407 (5,3); 8,403 (5,3); 7,787 (2,0); 7,781 (4,5); 7,775 (6,6); 7,769 (7,7); 7,765 (6,0); 7,759 (2,3); 7,575 (6,0); 7,564 (1,5); 7,552 (5,0); 4,056 (1,1); 4,038 (3,4); 4,020 (3,4); 4,002 (1,2); 3,330 (39,4); 3,101 (0,5); 3,083 (1,8); 3,065 (2,2); 3,049 (2,3); 3,031 (2,1); 3,012 (0,6); 2,879 (0,4); 2,869 (1,0); 2,860 (1,4); 2,851 (2,1); 2,841 (2,1); 2,833 (1,4); 2,823 (1,0); 2,813 (0,4); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,601 (0,7); 2,583 (2,1); 2,564 (2,5); 2,549 (2,3); 2,530 (2,5); 2,525 (2,1); 2,507 (69,4); 2,503 (90,4); 2,498 (68,1); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (14,7); 1,193 (3,9); 1,175 (7,7); 1,158 (3,8); 1,081 (0,4); 1,067 (7,5); 1,048 (16,0); 1,030 (7,2); 0,738 (1,3); 0,725 (4,0); 0,720 (5,5); 0,708 (5,1); 0,702 (4,4); 0,691 (1,8); 0,566 (1,8); 0,555 (5,4); 0,549 (5,2); 0,539 (4,6); 0,527 (1,3); 0,008 (0,6); 0,000 (16,1)
Ejemplo I-T3-182: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,454 (7,2); 8,884 (10,2); 8,500 (10,2); 8,482 (4,9); 8,478 (5,0); 8,317 (0,4); 8,098 (5,0); 8,093 (5,0); 7,829 (1,5); 7,823 (5,9); 7,821 (7,8); 7,815 (6,3); 7,807 (4,8); 7,801 (2,4); 7,588 (5,9); 7,579 (1,0); 7,574 (1,0); 7,566 (5,1); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,329 (62,1); 3,069 (0,5); 3,051 (1,8); 3,032 (2,1); 3,017 (2,3); 2,998 (2,1); 2,980 (0,6); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,594 (0,6); 2,575 (2,1); 2,557 (2,5); 2,541 (2,4); 2,523 (3,8); 2,520 (3,9); 2,511 (46,1); 2,507 (93,1); 2,503 (122,1); 2,498 (89,1); 2,494 (44,0); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,325 (0,6); 1,989 (15,8); 1,622 (2,4); 1,607 (5,9); 1,601 (6,4); 1,588 (2,7); 1,290 (2,8); 1,276 (5,9); 1,270 (6,4); 1,255 (2,4); 1,235 (0,5); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (4,1); 1,134 (0,3); 1,051 (7,3); 1,033 (16,0); 1,014 (7,1); 0,008 (0,8); 0,000 (23,6); -0,008 (0,9)
Ejemplo I-T3-183: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,464 (4,6); 8,733 (3,3); 8,729 (3,6); 8,723 (6,9); 8,477 (6,6); 8,270 (3,3); 8,266 (3,3); 7,820 (1,3); 7,814 (3,0); 7,808 (4,3); 7,803 (4,8); 7,798 (3,7); 7,792 (1,4); 7,573 (4,0); 7,562 (0,9); 7,551 (3,4); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,465 (0,9); 3,447 (2,9); 3,429 (3,0); 3,410 (1,0); 3,329 (48,5); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6);

2,667 (0,5); 2,525 (1,6); 2,511 (35,4); 2,507 (71,4); 2,502 (93,1); 2,498 (68,1); 2,494 (33,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (16,0); 1,614 (1,6); 1,600 (3,9); 1,593 (4,1); 1,580 (1,7); 1,290 (1,9); 1,277 (4,0); 1,270 (4,3); 1,256 (1,6); 1,235 (0,5); 1,193 (4,4); 1,175 (8,8); 1,157 (4,9); 1,152 (5,1); 1,134 (10,7); 1,115 (4,8); 0,008 (0,6); 0,000 (19,6); -0,009 (0,7)
Ejemplo I-T3-184: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,222 (1,1); 8,212 (14,6); 8,193 (0,9); 8,163 (0,7); 8,151 (14,2); 8,150 (13,6); 7,984 (5,6); 7,968 (5,6); 7,937 (0,6); 7,860 (0,5); 7,837 (0,5); 7,699 (8,7); 7,694 (11,4); 7,666 (5,9); 7,660 (4,9); 7,645 (6,7); 7,639 (6,1); 7,588 (0,8); 7,523 (0,3); 7,480 (10,7); 7,459 (8,5); 6,928 (2,6); 5,448 (5,4); 2,881 (0,7); 2,871 (1,9); 2,862 (2,7); 2,853 (4,3); 2,844 (4,3); 2,835 (2,8); 2,825 (2,1); 2,816 (0,7); 2,474 (0,9); 2,469 (1,8); 2,464 (2,4); 2,460 (1,9); 2,455 (1,0); 2,293 (0,4); 2,270 (0,7); 2,266 (0,7); 2,246 (1,0); 2,227 (1,0); 2,160 (875,2); 2,121 (3,1); 2,114 (4,2); 2,108 (5,3); 2,102 (3,8); 2,096 (2,1); 2,036 (0,6); 2,018 (0,8); 1,998 (0,9); 1,965 (19,7); 1,959 (49,7); 1,953 (311,9); 1,947 (575,9); 1,941 (786,4); 1,935 (548,9); 1,929 (287,9); 1,883 (0,6); 1,782 (1,8); 1,775 (3,4); 1,769 (4,7); 1,763 (3,2); 1,757 (1,8); 1,525 (0,4); 1,385 (0,3); 1,372 (0,5); 1,359 (0,4); 1,340 (1,4); 1,335 (0,8); 1,285 (2,9); 1,270 (16,0); 1,204 (0,3); 0,918 (0,4); 0,899 (0,9); 0,882 (2,1); 0,864 (1,1); 0,832 (0,4); 0,795 (2,4); 0,783 (7,1); 0,777 (9,7); 0,765 (9,8); 0,760 (7,5); 0,747 (3,3); 0,726 (0,5); 0,708 (0,5); 0,652 (0,5); 0,643 (0,5); 0,627 (0,4); 0,613 (3,3); 0,601 (8,2); 0,595 (8,8); 0,591 (7,8); 0,586 (7,8); 0,573 (2,3); 0,536 (0,3); 0,520 (0,4); 0,478 (0,3); 0,392 (0,4); 0,387 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (20,9); -0,009 (1,0)
Ejemplo I-T3-185: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 17,517 (0,4); 15,219 (0,3); 14,973 (0,3); 13,920 (0,3); 8,404 (0,4); 8,394 (0,4); 8,224 (16,0); 8,208 (0,8); 8,165 (12,9); 7,986 (5,2); 7,970 (5,1); 7,938 (1,2); 7,864 (0,5); 7,840 (0,4); 7,747 (7,8); 7,741 (10,5); 7,715 (5,2); 7,710 (4,3); 7,694 (6,0);

7,689 (5,7); 7,654 (3,5); 7,624 (1,2); 7,601 (2,1); 7,594 (1,3); 7,590 (2,0); 7,564 (1,9); 7,541 (1,1); 7,513 (9,5); 7,492 (7,5); 7,292 (0,7); 7,282 (0,4); 7,270 (0,7); 7,201 (0,4); 7,176 (1,6); 7,168 (0,4); 7,151 (0,4); 7,064 (0,5); 7,045 (0,4); 6,914 (0,4); 6,892 (0,4); 6,881 (0,8); 6,859 (0,6); 6,178 (0,3); 6,160 (0,4); 6,111 (0,4); 6,099 (0,4); 6,067 (0,4); 6,042 (0,4); 6,038 (0,4); 6,017 (0,4); 5,640 (0,4); 5,594 (0,3); 5,540 (0,3); 5,516 (0,4); 5,485 (0,4); 5,427 (0,3); 5,373 (0,3); 4,507 (0,6); 4,491 (0,6); 4,068 (1,3); 4,050 (1,1); 4,032 (0,5); 3,789 (0,5); 3,776 (1,0); 3,758 (2,9); 3,656 (0,4); 3,149 (0,4); 3,128 (0,4); 2,720 (13,7); 2,656 (0,5); 2,492 (0,9); 2,475 (2,8); 2,470 (6,1); 2,465 (9,0); 2,461 (6,7); 2,456 (3,4); 2,285 (0,4); 2,264 (0,7); 2,247 (1,5); 2,237 (1,1); 2,171 (2483,4); 2,121 (7,1); 2,114 (9,5); 2,108 (11,9); 2,102 (8,8); 2,096 (5,2); 2,075 (1,8); 2,032 (0,9); 2,020 (0,7); 2,011 (0,6); 1,972 (8,4); 1,965 (39,5); 1,959 (102,1); 1,953 (642,3); 1,947 (1199,8); 1,941 (1645,9); 1,935 (1167,9); 1,929 (619,1); 1,818 (1,3); 1,782 (4,2); 1,775 (7,5); 1,769 (10,3); 1,763 (7,4); 1,757 (4,5); 1,722 (0,9); 1,708 (0,9); 1,696 (0,9); 1,688 (0,9); 1,674 (0,7); 1,638 (0,8); 1,597 (4,8); 1,583 (11,6); 1,576 (12,0); 1,562 (6,3); 1,543 (0,8); 1,522 (1,2); 1,501 (0,6); 1,472 (0,6); 1,437 (9,0); 1,402 (1,2); 1,361 (6,2); 1,348 (11,9); 1,341 (12,8); 1,327 (7,6); 1,311 (3,5); 1,269 (8,7); 1,222 (1,9); 1,204 (3,2); 1,186 (1,7); 1,164 (0,6); 1,154 (0,6); 1,145 (0,5); 1,131 (0,6); 1,109 (0,6); 1,095 (0,6); 1,091 (0,6); 1,047 (0,5); 1,040 (0,4); 1,031 (0,4); 1,009 (0,4); 0,987 (0,4); 0,976 (0,4); 0,952 (0,4); 0,945 (0,5); 0,897 (0,8); 0,881 (1,6); 0,855 (1,3); 0,838 (0,9); 0,824 (0,5); 0,806 (0,5); 0,797 (0,4); 0,776 (0,4); 0,766 (0,5); 0,739 (0,4); 0,636 (0,3); 0,526 (0,3); 0,147 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (80,2); -0,020 (0,5); -0,121 (0,3); -0,149 (0,4); -0,213 (0,4); -2,478 (0,3); -3,017 (0,3)
Ejemplo I-T3-186: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,202 (8,0); 8,190 (8,4); 7,927 (0,7); 7,858 (4,8); 7,731 (2,7); 7,708 (2,9); 7,690 (4,8); 7,685 (6,1); 7,657 (2,8); 7,652 (2,5); 7,637 (3,4); 7,632 (3,2); 7,590 (0,8); 7,477 (5,0); 7,456 (4,0); 6,984 (0,3); 6,951 (1,9); 6,041 (0,3); 5,521 (0,4); 5,491 (0,4); 5,466

(0,3); 3,874 (0,9); 3,056 (0,3); 2,890 (4,6); 2,872 (1,0); 2,863 (1,5); 2,853 (2,1); 2,844 (2,2); 2,835 (1,7); 2,825 (1,1); 2,799 (0,4); 2,772 (4,2); 2,711 (0,4); 2,684 (0,4); 2,671 (0,4); 2,662 (0,4); 2,619 (0,4); 2,601 (1,1); 2,583 (0,4); 2,543 (0,5); 2,522 (0,5); 2,505 (0,6); 2,466 (6,3); 2,351 (0,9); 2,310 (1,3); 2,298 (1,3); 2,179 (2377,2); 2,121 (5,6); 2,115 (6,3); 2,108 (7,1); 2,102 (5,6); 2,043 (0,8); 2,018 (1,0); 1,953 (344,9); 1,947 (623,4); 1,941 (840,7); 1,935 (641,3); 1,929 (374,2); 1,827 (0,6); 1,781 (2,1); 1,776 (3,6); 1,770 (4,8); 1,763 (3,6); 1,758 (2,2); 1,437 (16,0); 1,311 (0,4); 1,283 (0,5); 1,268 (0,9); 0,794 (1,2); 0,777 (5,1); 0,764 (5,1); 0,747 (1,8); 0,738 (0,4); 0,612 (1,5); 0,600 (4,9); 0,594 (5,3); 0,586 (4,9); 0,573 (1,5); 0,000 (28,5)
Ejemplo I-T3-187: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 19,987 (0,6); 8,214 (12,6); 8,200 (13,9); 7,859 (6,8); 7,738 (9,0); 7,733 (14,7); 7,707 (9,2); 7,701 (5,6); 7,686 (6,6); 7,680 (5,9); 7,610 (3,2); 7,587 (1,7); 7,510 (9,9); 7,489 (8,2); 7,448 (0,5); 2,469 (1,8); 2,464 (2,6); 2,459 (2,0); 2,157 (1156,2); 2,120 (5,2); 2,114 (6,3); 2,108 (7,5); 2,102 (5,6); 2,096 (3,3); 1,965 (26,5); 1,959 (71,5); 1,953 (401,8); 1,947 (750,3); 1,941 (1019,6); 1,935 (723,9); 1,928 (383,2); 1,781 (2,7); 1,775 (4,6); 1,769 (6,2); 1,763 (4,5); 1,757 (2,6); 1,634 (0,6); 1,597 (4,4); 1,583 (11,2); 1,576 (11,2); 1,563 (6,0); 1,523 (1,0); 1,437 (16,0); 1,401 (1,1); 1,361 (6,0); 1,347 (11,3); 1,341 (12,0); 1,326 (4,9); 1,270 (8,5); 0,882 (2,0); 0,857 (2,2); 0,000 (34,6)
Ejemplo I-T3-188: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,340 (9,9); 8,272 (16,0); 8,192 (0,3); 7,761 (9,7); 7,755 (12,3); 7,742 (0,4); 7,737 (0,3); 7,727 (6,7); 7,721 (5,0); 7,706 (7,8); 7,700 (6,5); 7,569 (4,5); 7,524 (11,5); 7,503 (9,3); 5,447 (0,8); 2,576 (0,8); 2,572 (0,8); 2,250 (0,4); 2,139 (89,4); 2,120 (0,7); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,3); 1,965 (3,2); 1,959 (8,4); 1,953 (52,4); 1,947 (96,8); 1,940 (132,2); 1,934 (91,5); 1,928 (47,5); 1,781 (0,3); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,604 (5,0); 1,590 (12,7); 1,583 (12,8); 1,569 (6,7);

1,529 (0,9); 1,406 (0,8); 1,366 (6,8); 1,352 (12,5); 1,346 (13,2); 1,331 (5,3); 1,309 (0,5); 1,293 (0,9); 1,285 (1,5); 1,269 (7,2); 0,898 (0,3); 0,881 (0,9); 0,864 (0,4); 0,000 (3,9)
Ejemplo I-T3-189: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,726 (0,3); 8,720 (0,4); 8,701 (10,1); 8,694 (10,3); 8,265 (0,8); 8,253 (16,0); 8,246 (15,9); 8,062 (0,6); 8,051 (11,3); 8,045 (11,1); 7,978 (7,4); 7,766 (6,5); 7,051 (2,2); 5,449 (0,6); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,024 (0,4); 2,888 (0,6); 2,878 (1,7); 2,869 (2,5); 2,860 (3,8); 2,851 (3,8); 2,842 (2,5); 2,833 (1,8); 2,823 (0,6); 2,729 (0,6); 2,473 (0,5); 2,468 (0,9); 2,464 (1,2); 2,459 (0,9); 2,454 (0,5); 2,166 (234,9); 2,121 (0,8); 2,114 (1,2); 2,108 (1,5); 2,102 (1,1); 2,096 (0,6); 2,087 (0,5); 2,035 (0,4); 2,017 (0,7); 1,998 (0,6); 1,972 (2,6); 1,965 (5,7); 1,959 (13,8); 1,953 (85,4); 1,947 (157,6); 1,941 (215,5); 1,935 (150,1); 1,928 (78,1); 1,782 (0,5); 1,775 (0,9); 1,769 (1,3); 1,763 (0,9); 1,757 (0,5); 1,437 (3,4); 1,308 (0,3); 1,268 (8,7); 1,222 (0,6); 1,204 (1,0); 1,186 (0,5); 0,898 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,810 (2,1); 0,797 (6,2); 0,792 (8,4); 0,779 (8,6); 0,774 (6,4); 0,762 (2,8); 0,740 (0,4); 0,722 (0,4); 0,662 (0,3); 0,652 (0,4); 0,622 (2,8); 0,610 (7,3); 0,604 (7,7); 0,600 (6,9); 0,595 (6,8); 0,582 (2,1); 0,543 (0,4); 0,391 (0,3); 0,386 (0,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,3); -0,009 (1,6)
Ejemplo I-T3-190: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,487 (7,1); 9,105 (5,1); 9,102 (5,1); 8,887 (9,5); 8,557 (11,6); 8,317 (0,4); 7,826 (4,4); 7,820 (6,3); 7,815 (6,9); 7,810 (5,3); 7,602 (5,1); 7,591 (1,5); 7,580 (4,2); 4,055 (1,3); 4,038 (3,8); 4,020 (3,8); 4,002 (1,3); 3,560 (1,9); 3,542 (6,2); 3,523 (6,3); 3,505 (2,1); 3,328 (157,1); 2,671 (1,6); 2,506 (190,5); 2,502 (243,8); 2,329 (1,7); 1,989 (16,0); 1,617 (2,3); 1,602 (6,1); 1,596 (6,6); 1,583 (2,7); 1,296 (2,7); 1,282 (6,2); 1,276 (6,6); 1,261 (2,3); 1,193 (4,5); 1,181 (7,3); 1,175 (10,1); 1,163 (14,9); 1,158 (7,2); 1,145 (6,8); 0,000 (25,1)
Ejemplo I-T3-191: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,426 (3,3); 8,594 (4,6); 8,359 (4,8); 8,317 (0,5); 7,785 (4,0); 7,779 (2,8); 7,770 (2,1); 7,765 (1,1); 7,545 (2,7); 7,537 (0,6); 7,530 (0,5); 7,522 (2,3); 7,351 (6,5); 3,331 (366,6); 3,015 (2,0); 2,997 (6,6); 2,979 (6,7); 2,960 (2,1); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,524 (4,4); 2,511 (86,9); 2,507 (177,3); 2,502 (236,3); 2,498 (176,3); 2,493 (90,0); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,2); 1,611 (1,1); 1,597 (2,7); 1,590 (2,9); 1,577 (1,2); 1,398 (15,1); 1,285 (1,3); 1,271 (2,7); 1,264 (2,9); 1,250 (1,1); 1,195 (7,5); 1,177 (16,0); 1,158 (7,3); 0,146 (1,7); 0,008 (13,5); 0,000 (371,8); -0,008 (16,5); -0,150 (1,7)
Ejemplo I-T3-192: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,435 (6,5); 8,687 (9,2); 8,408 (9,3); 8,317 (1,5); 7,796 (4,7); 7,787 (4,3); 7,780 (6,0); 7,775 (6,7); 7,770 (5,2); 7,764 (2,0); 7,559 (5,8); 7,548 (5,4); 7,537 (5,3); 3,330 (735,7); 3,123 (0,7); 3,082 (1,9); 3,063 (6,4); 3,045 (6,6); 3,027 (2,0); 2,838 (0,6); 2,676 (2,8); 2,671 (4,1); 2,667 (3,1); 2,525 (10,0); 2,520 (15,7); 2,511 (220,9); 2,507 (459,4); 2,502 (612,6); 2,498 (450,6); 2,493 (223,7); 2,333 (2,9); 2,329 (4,0); 2,324 (3,0); 1,614 (2,1); 1,600 (5,3); 1,593 (5,7); 1,580 (2,4); 1,284 (2,5); 1,271 (5,3); 1,264 (5,7); 1,250 (2,1); 1,205 (7,5); 1,187 (16,0); 1,168 (7,5); 0,146 (1,8); 0,008 (13,1); 0,000 (404,0); -0,009 (15,5); -0,150 (1,8)
Ejemplo I-T3-193: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,458 (0,3); 8,777 (8,3); 8,542 (3,2); 8,531 (3,0); 8,504 (0,3); 8,462 (8,6); 8,337 (3,7); 8,317 (1,8); 7,962 (3,6); 7,750 (2,0); 7,745 (3,2); 7,738 (1,0); 7,726 (12,9); 7,717 (1,1); 7,710 (1,7); 7,692 (1,1); 7,659 (1,1); 7,653 (0,9); 7,569 (1,2); 7,548 (1,0); 7,529 (3,7); 7,526 (2,4); 7,510 (2,0); 7,507 (3,2); 7,484 (1,3); 7,465 (0,8); 7,420 (0,5); 7,402 (0,6); 7,058 (1,6); 6,924 (3,7); 6,789 (1,9); 4,055 (1,2); 4,037 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,328 (98,6); 3,305 (0,8); 2,858 (0,9); 2,849 (1,2); 2,840 (1,9); 2,830 (1,9); 2,821 (1,3); 2,812 (0,9); 2,801 (0,4); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,662 (0,6); 2,524 (3,6); 2,511 (83,9); 2,507 (175,0); 2,502 (233,7); 2,498 (171,2); 2,493

(84,1); 2,338 (0,5); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,989 (16,0); 1,234 (0,8); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,2); 0,729 (1,2); 0,716 (3,5); 0,711 (4,9); 0,699 (4,5); 0,693 (4,0); 0,682 (1,6); 0,568 (0,4); 0,559 (1,8); 0,549 (5,1); 0,543 (4,5); 0,534 (3,7); 0,522 (1,2); 0,146 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (83,8); -0,009 (3,2); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-194: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,349 (9,1); 8,304 (0,4); 8,286 (14,8); 8,241 (0,3); 7,801 (9,7); 7,795 (11,3); 7,718 (6,0); 7,712 (5,6); 7,697 (7,3); 7,692 (6,9); 7,665 (0,5); 7,647 (0,7); 7,643 (0,7); 7,635 (0,5); 7,617 (0,6); 7,614 (0,7); 7,584 (1,1); 7,541 (0,6); 7,522 (11,4); 7,501 (9,2); 7,484 (0,5); 7,453 (4,1); 7,422 (0,4); 7,236 (0,4); 7,215 (0,3); 6,837 (0,5); 6,673 (0,4); 6,617 (1,3); 6,575 (0,4); 5,973 (0,3); 5,954 (0,3); 5,896 (1,4); 5,447 (5,8); 3,817 (0,8); 3,769 (0,4); 3,550 (1,0); 3,545 (0,9); 2,579 (0,4); 2,575 (0,5); 2,269 (0,4); 2,253 (0,5); 2,140 (512,8); 2,120 (7,2); 2,114 (6,9); 2,108 (7,9); 2,102 (5,5); 2,095 (3,1); 1,965 (25,3); 1,959 (63,5); 1,953 (411,4); 1,947 (768,8); 1,940 (1065,1); 1,934 (761,0); 1,928 (406,5); 1,849 (1,2); 1,799 (0,7); 1,781 (2,8); 1,775 (4,8); 1,769 (6,7); 1,763 (4,7); 1,756 (2,7); 1,728 (0,5); 1,714 (0,5); 1,699 (0,5); 1,677 (0,4); 1,666 (0,5); 1,649 (0,4); 1,628 (0,4); 1,580 (0,4); 1,570 (0,4); 1,556 (0,4); 1,515 (0,6); 1,477 (5,4); 1,466 (14,4); 1,457 (16,0); 1,447 (6,5); 1,407 (0,7); 1,398 (0,5); 1,386 (0,8); 1,366 (0,5); 1,340 (6,0); 1,305 (1,0); 1,285 (8,1); 1,270 (5,0); 1,247 (0,7); 1,230 (0,5); 1,217 (0,6); 1,199 (0,5); 1,190 (0,6); 1,185 (0,7); 1,145 (6,1); 1,135 (15,7); 1,126 (14,8); 1,115 (5,4); 1,076 (0,6); 1,063 (0,4); 0,994 (0,4); 0,976 (0,8); 0,958 (0,5); 0,951 (0,4); 0,930 (0,4); 0,923 (0,4); 0,882 (1,1); 0,856 (0,9); 0,842 (0,7); 0,783 (0,4); 0,771 (0,4); 0,764 (0,5); 0,735 (0,4); 0,597 (0,3); 0,564 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (32,8)
Ejemplo I-T3-195: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,457 (8,1); 8,920 (11,3); 8,511 (11,3); 8,325 (5,6); 8,319 (6,1); 8,030 (5,3); 7,802 (8,5); 7,797 (7,4); 7,789 (5,4); 7,784 (3,0); 7,591 (6,0); 7,582 (1,3); 7,569 (5,0); 4,037 (0,6); 4,019 (0,6); 3,329 (278,3); 3,090 (0,5); 3,071 (1,9); 3,053 (2,4); 3,037 (2,5);

3,019 (2,1); 3,000 (0,7); 2,675 (3,1); 2,671 (4,3); 2,667 (3,5); 2,597 (0,4); 2,506 (494,1); 2,502 (653,4); 2,498 (511,0); 2,470 (6,8); 2,452 (3,7); 2,434 (2,4); 2,416 (1,0); 2,333 (3,0); 2,329 (4,1); 2,325 (3,3); 1,989 (2,4); 1,621 (2,6); 1,607 (6,7); 1,600 (7,6); 1,587 (3,1); 1,397 (1,3); 1,335 (0,4); 1,327 (0,3); 1,297 (0,8); 1,286 (3,2); 1,273 (7,0); 1,266 (7,6); 1,252 (3,2); 1,235 (5,1); 1,193 (0,7); 1,175 (1,3); 1,157 (0,7); 1,107 (0,4); 0,982 (7,4); 0,964 (16,0); 0,945 (7,3); 0,854 (0,5); 0,835 (0,3); 0,000 (20,8)
Ejemplo I-T3-196: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,223 (0,5); 8,218 (0,5); 8,045 (0,3); 8,041 (0,3); 2,621 (0,7); 2,150 (4,8); 1,948 (1,3); 1,944 (2,2); 1,940 (3,2); 1,936 (2,2); 1,932 (1,1); 1,135 (16,0); 0,000 (0,9)
Ejemplo I-T3-197: RMN de ^{1}H (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,765 (7,5); 8,761 (7,5); 8,2493 (9,5); 8,2486 (9,9); 8,230 (8,0); 8,115 (8,0); 8,111 (8,0); 8,038 (4,4); 7,992 (4,5); 7,394 (1,5); 3,844 (16,0); 3,552 (11,2); 3,542 (11,1); 3,312 (0,7); 3,303 (0,7); 2,172 (78,0); 2,155 (28,3); 2,088 (0,6); 2,084 (0,8); 2,080 (0,6); 1,998 (2,0); 1,989 (5,4); 1,985 (7,5); 1,982 (52,9); 1,977 (98,7); 1,973 (145,4); 1,969 (98,4); 1,965 (48,4); 1,956 (0,7); 1,863 (0,5); 1,859 (0,8); 1,854 (0,6); 1,312 (2,7); 1,303 (8,1); 1,299 (8,0); 1,291 (3,5); 1,266 (0,4); 1,192 (0,4); 1,166 (3,5); 1,158 (7,9); 1,154 (7,9); 1,146 (2,6)
Ejemplo I-T3-198: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,484 (3,8); 9,467 (0,6); 8,776 (0,9); 8,753 (5,3); 8,574 (0,6); 8,561 (8,6); 8,509 (5,3); 8,491 (0,8); 8,317 (1,8); 8,178 (0,4); 7,782 (7,1); 7,778 (3,2); 7,765 (2,2); 7,759 (1,3); 7,579 (2,8); 7,557 (2,4); 4,049 (0,4); 3,497 (0,3); 3,479 (0,7); 3,461 (0,7); 3,413 (1,0); 3,395 (1,5); 3,377 (1,6); 3,329 (582,9); 3,287 (1,0); 2,676 (4,0); 2,671 (5,5); 2,667 (4,1); 2,524 (14,3); 2,507 (629,0); 2,502 (826,7); 2,498 (606,0); 2,333 (3,8); 2,329 (5,2); 2,324 (3,9); 1,614 (1,3); 1,600 (3,4); 1,593 (3,7); 1,580 (1,5); 1,289 (1,5); 1,276 (3,3); 1,269 (3,6); 1,255 (1,3); 1,237 (0,4); 1,150 (0,4); 1,126 (0,7); 1,108 (8,3); 1,089 (16,0); 1,071 (7,0); 0,008 (0,5); 0,000 (18,9); -0,008 (0,7)

Ejemplo I-T3-199: RMN de ^{1}H (400,1 MHz, d_6-DMSO): d= 8,86 (0,0328); 8,85 (0,0664); 8,56 (0,0471);8,51 (0,0250);8,18 (0,0290);8,17 (0,0298);8,09 (0,0245);3,47 (0,0401);3,45 (0,0407);3,31 (0,7767);2,54 (0,3233);2,50 (0,3250);2,50 (0,4400);2,50 (0,3578);1,25 (0,0306);1,25 (0,0369);1,15 (0,0210);1,14 (0,0347);1,13 (0,0321);0,00 (1,0000)
Ejemplo I-T3-200: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,745 (8,9); 8,739 (8,9); 8,566 (1,6); 8,560 (1,6); 8,264 (13,9); 8,256 (14,3); 8,244 (0,7); 8,115 (9,6); 8,109 (9,4); 8,056 (1,8); 8,050 (1,7); 7,998 (0,4); 7,983 (7,2); 7,980 (7,2); 7,767 (6,3); 7,690 (2,3); 7,666 (0,6); 7,587 (0,3); 5,448 (3,1); 3,724 (0,8); 3,071 (0,5); 2,882 (0,5); 2,626 (0,7); 2,603 (0,5); 2,468 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,152 (189,2); 2,120 (1,4); 2,114 (1,8); 2,108 (2,1); 2,102 (1,5); 2,096 (0,8); 1,965 (8,9); 1,959 (23,8); 1,953 (126,4); 1,947 (227,5); 1,941 (305,0); 1,935 (212,6); 1,928 (110,8); 1,868 (0,3); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,615 (3,9); 1,600 (10,0); 1,593 (10,8); 1,580 (6,7); 1,571 (2,5); 1,557 (1,3); 1,540 (0,7); 1,410 (0,6); 1,386 (0,4); 1,370 (5,3); 1,356 (10,0); 1,350 (10,4); 1,335 (5,3); 1,325 (2,3); 1,310 (1,1); 1,297 (0,5); 1,285 (0,7); 1,270 (2,4); 1,202 (0,6); 1,134 (16,0); 0,882 (0,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,0); -0,008 (0,8)
Ejemplo I-T3-201: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,467 (2,2); 8,775 (3,1); 8,578 (1,5); 8,573 (1,5); 8,490 (3,1); 8,177 (1,4); 7,800 (0,6); 7,795 (1,2); 7,787 (1,8); 7,782 (2,4); 7,778 (1,9); 7,578 (1,7); 7,555 (1,5); 3,498 (0,6); 3,479 (1,9); 3,461 (1,9); 3,443 (0,6); 3,330 (198,5); 2,676 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,7); 2,524 (2,5); 2,507 (107,2); 2,502 (141,8); 2,498 (106,1); 2,333 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,989 (0,4); 1,614 (0,7); 1,600 (1,8); 1,593 (1,9); 1,580 (0,8); 1,398 (16,0); 1,287 (0,8); 1,274 (1,8); 1,267 (2,0); 1,253 (0,7); 1,235 (0,3); 1,126 (2,1); 1,108 (4,7); 1,089 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (188,9); -0,008 (8,7); -0,150 (0,9)

Ejemplo I-T3-202: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,428 (4,8); 8,626 (0,4); 8,603 (6,6); 8,357 (6,9); 8,316 (0,6); 7,790 (1,3); 7,785 (2,8); 7,777 (4,1); 7,772 (5,1); 7,768 (4,0); 7,562 (3,3); 7,548 (3,9); 7,537 (0,8); 7,525 (3,2); 7,428 (3,2); 3,343 (390,5); 2,991 (1,5); 2,973 (4,8); 2,955 (5,1); 2,937 (1,8); 2,676 (1,0); 2,672 (1,3); 2,668 (1,0); 2,507 (163,2); 2,503 (208,0); 2,499 (152,2); 2,334 (1,0); 2,330 (1,3); 2,325 (0,9); 2,188 (1,0); 2,100 (16,0); 2,075 (0,5); 1,613 (1,6); 1,598 (4,1); 1,592 (4,5); 1,579 (2,0); 1,284 (2,0); 1,270 (4,3); 1,263 (4,5); 1,249 (1,6); 1,232 (0,4); 1,214 (0,7); 1,192 (5,5); 1,173 (11,4); 1,155 (5,2); 0,146 (0,5); 0,008 (4,9); 0,000 (117,1); -0,008 (4,9); -0,150 (0,5)
Ejemplo I-T3-203: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,601 (0,6); 8,581 (6,8); 8,520 (2,4); 8,509 (2,4); 8,343 (7,1); 8,137 (0,8); 7,732 (1,5); 7,726 (2,4); 7,707 (9,8); 7,561 (3,2); 7,499 (2,9); 7,477 (2,5); 7,427 (3,2); 3,329 (31,4); 2,989 (1,5); 2,971 (5,0); 2,952 (5,1); 2,940 (0,7); 2,934 (1,6); 2,922 (0,4); 2,854 (0,6); 2,844 (0,9); 2,836 (1,4); 2,826 (1,4); 2,818 (1,0); 2,808 (0,7); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,524 (1,7); 2,511 (39,4); 2,507 (80,4); 2,502 (106,1); 2,498 (78,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,187 (1,2); 2,116 (0,8); 2,101 (16,0); 2,075 (1,0); 1,909 (0,5); 1,230 (0,4); 1,212 (0,9); 1,190 (5,7); 1,172 (11,9); 1,154 (5,4); 0,726 (0,9); 0,713 (2,6); 0,708 (3,6); 0,696 (3,5); 0,690 (3,0); 0,679 (1,3); 0,560 (1,2); 0,550 (3,7); 0,544 (3,5); 0,534 (3,0); 0,522 (0,9); 0,008 (2,2); 0,000 (67,6); -0,008 (2,8)
Ejemplo I-T3-204: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,968 (6,3); 8,871 (0,8); 8,864 (4,0); 8,858 (3,7); 8,617 (5,8); 8,558 (2,8); 8,554 (2,9); 8,469 (3,0); 8,464 (2,8); 8,379 (3,8); 8,373 (3,6); 8,318 (1,3); 8,261 (0,5); 8,255 (0,6); 4,155 (1,4); 3,332 (210,2); 3,309 (0,8); 3,036 (16,0); 3,014 (1,0); 2,886 (0,9); 2,809 (0,3); 2,798 (0,7); 2,791 (0,8); 2,782 (1,3); 2,772 (1,0); 2,762 (3,0); 2,727 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,541 (0,4); 2,525 (2,7); 2,511 (61,5); 2,507

(127,7); 2,503 (170,1); 2,498 (126,6); 2,494 (64,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 2,075 (2,2); 1,169 (0,5); 0,836 (0,3); 0,817 (0,4); 0,775 (0,4); 0,608 (0,4); 0,587 (2,1); 0,579 (2,6); 0,570 (1,1); 0,562 (0,6); 0,544 (1,0); 0,532 (2,1); 0,515 (2,1); 0,496 (0,5); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (95,4); -0,008 (4,6); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-205: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,991 (0,5); 8,972 (14,8); 8,876 (0,4); 8,861 (9,9); 8,855 (10,1); 8,716 (4,8); 8,706 (5,3); 8,672 (0,4); 8,661 (0,4); 8,642 (0,8); 8,631 (14,8); 8,562 (7,0); 8,557 (7,2); 8,471 (7,3); 8,467 (6,8); 8,318 (8,7); 8,264 (0,7); 8,258 (0,8); 8,247 (9,6); 8,240 (9,4); 7,948 (0,4); 7,942 (0,4); 7,795 (0,4); 4,156 (4,3); 3,329 (163,2); 3,306 (4,7); 2,887 (0,6); 2,877 (1,4); 2,867 (2,0); 2,859 (3,0); 2,849 (3,2); 2,840 (2,2); 2,830 (1,7); 2,821 (0,8); 2,676 (1,6); 2,671 (2,1); 2,667 (1,6); 2,525 (5,4); 2,507 (239,7); 2,502 (316,6); 2,498 (235,7); 2,333 (1,4); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 2,076 (16,0); 0,760 (1,9); 0,747 (5,6); 0,743 (7,6); 0,730 (7,4); 0,725 (6,3); 0,713 (2,8); 0,570 (2,3); 0,559 (7,1); 0,553 (7,0); 0,550 (6,7); 0,544 (6,4); 0,532 (2,3); 0,495 (0,4); 0,146 (0,8); 0,008 (5,8); 0,000 (177,1); -0,008 (8,0); -0,150 (0,8)
Ejemplo I-T3-206: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,449 (4,9); 8,859 (6,6); 8,459 (6,7); 8,318 (4,2); 8,038 (3,0); 7,936 (3,0); 7,803 (3,4); 7,799 (4,7); 7,793 (4,8); 7,787 (3,7); 7,781 (1,6); 7,581 (4,2); 7,570 (0,9); 7,558 (3,6); 3,733 (0,3); 3,690 (0,4); 3,329 (896,7); 3,282 (0,7); 2,981 (1,3); 2,963 (1,5); 2,947 (1,5); 2,929 (1,4); 2,910 (0,5); 2,676 (7,6); 2,671 (10,3); 2,667 (7,7); 2,525 (28,4); 2,511 (589,6); 2,507 (1188,5); 2,502 (1555,2); 2,498 (1146,1); 2,493 (578,6); 2,389 (1,6); 2,370 (1,8); 2,354 (1,8); 2,333 (8,0); 2,329 (10,4); 2,324 (7,7); 2,296 (16,0); 1,909 (0,6); 1,621 (1,6); 1,607 (4,0); 1,600 (4,3); 1,587 (2,0); 1,282 (2,1); 1,269 (3,9); 1,262 (4,2); 1,248 (1,6); 1,147 (0,8); 0,945 (4,8); 0,927 (10,5); 0,908 (4,6); 0,146 (3,6); 0,008 (30,4); 0,000 (880,4); -0,008 (42,5); -0,150 (3,7)
Ejemplo I-T3-207: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,624 (6,5); 9,586 (0,7); 8,984 (9,3); 8,916 (5,7); 8,910 (5,5); 8,728 (0,7); 8,636 (9,3); 8,571 (1,5); 8,560 (4,6); 8,473 (4,6); 8,469 (4,3); 8,330 (6,1); 8,324 (6,0); 7,943 (0,4); 7,798 (0,4); 7,793 (0,4); 4,156 (3,5); 3,332 (174,7); 3,051 (0,6); 2,875 (0,6); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,507 (117,6); 2,503 (153,3); 2,499 (115,3); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 2,076 (16,0); 1,648 (2,1); 1,634 (5,4); 1,627 (6,2); 1,614 (2,5); 1,304 (2,4); 1,291 (5,2); 1,284 (5,7); 1,269 (2,1); 1,262 (0,8); 1,254 (0,7); 1,240 (0,3); 0,146 (0,4); 0,008 (2,8); 0,000 (78,1); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-208: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,696 (3,0); 8,690 (3,1); 8,249 (4,2); 8,240 (4,6); 8,003 (3,2); 7,997 (3,1); 7,982 (2,3); 7,978 (2,3); 7,946 (0,5); 7,940 (0,5); 7,766 (2,1); 3,068 (16,0); 2,800 (2,7); 2,783 (0,6); 2,776 (0,6); 2,767 (1,1); 2,756 (0,7); 2,748 (0,6); 2,465 (0,4); 2,170 (94,3); 2,115 (0,5); 2,109 (0,6); 2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (7,1); 1,954 (39,1); 1,947 (71,0); 1,941 (94,9); 1,935 (64,8); 1,929 (33,1); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 0,855 (0,3); 0,789 (0,4); 0,579 (1,4); 0,535 (1,7); 0,525 (1,1); 0,518 (1,6); 0,000 (0,5)
Ejemplo I-T3-209: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,461 (4,8); 8,713 (6,6); 8,448 (6,8); 8,317 (1,4); 8,281 (3,0); 8,094 (3,1); 7,800 (1,3); 7,794 (2,8); 7,787 (4,1); 7,782 (5,1); 7,778 (4,1); 7,569 (3,8); 7,557 (0,8); 7,546 (3,2); 3,393 (0,4); 3,331 (347,0); 2,676 (2,0); 2,672 (2,7); 2,667 (2,1); 2,524 (7,4); 2,507 (323,5); 2,503 (427,2); 2,498 (324,8); 2,426 (0,4); 2,334 (1,9); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,197 (0,8); 2,160 (16,0); 1,614 (1,5); 1,600 (4,0); 1,593 (4,4); 1,580 (1,8); 1,284 (1,8); 1,270 (4,0); 1,264 (4,4); 1,249 (1,5); 1,147 (0,6); 1,079 (4,6); 1,061 (10,1); 1,042 (4,5); 0,146 (0,9); 0,008 (6,6); 0,000 (197,0); -0,150 (1,0)
Ejemplo I-T3-210: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,835 (0,4); 8,692 (6,8); 8,552 (2,5); 8,540 (2,5); 8,513 (0,5); 8,435 (7,0); 8,318 (0,5); 8,278 (3,0); 8,094 (3,0); 7,873 (0,4); 7,742 (1,5); 7,736 (2,5); 7,718 (10,2);

7,520 (3,0); 7,502 (1,5); 7,498 (2,5); 3,357 (1,0); 3,329 (76,1); 3,304 (1,0); 2,857 (0,6); 2,847 (0,9); 2,839 (1,4); 2,829 (1,4); 2,820 (0,9); 2,811 (0,7); 2,676 (0,8); 2,671 (1,1); 2,667 (0,9); 2,524 (3,0); 2,511 (66,6); 2,507 (135,2); 2,502 (178,3); 2,498 (130,4); 2,493 (64,6); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,324 (0,9); 2,193 (1,1); 2,159 (16,0); 2,075 (0,6); 1,153 (0,3); 1,135 (0,7); 1,078 (4,8); 1,060 (10,5); 1,041 (4,6); 0,727 (0,9); 0,714 (2,6); 0,709 (3,6); 0,697 (3,5); 0,691 (3,0); 0,680 (1,3); 0,559 (1,2); 0,548 (3,6); 0,542 (3,3); 0,539 (3,1); 0,533 (3,0); 0,521 (0,9); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (92,3); -0,008 (3,7); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T3-211: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,641 (0,5); 8,541 (0,8); 8,530 (3,2); 8,524 (3,1); 8,504 (5,0); 8,495 (0,7); 8,385 (0,5); 8,318 (1,5); 8,288 (5,2); 8,280 (0,8); 7,971 (3,1); 7,965 (3,0); 7,943 (0,5); 7,803 (0,8); 7,532 (2,9); 7,375 (2,7); 7,322 (0,3); 7,209 (0,3); 4,421 (0,8); 4,404 (2,1); 4,386 (2,3); 4,369 (1,0); 4,240 (1,1); 4,224 (3,6); 4,206 (3,6); 4,189 (1,2); 4,179 (0,5); 4,162 (0,4); 3,741 (0,4); 3,727 (0,4); 3,328 (176,8); 3,027 (0,8); 2,985 (16,0); 2,886 (0,8); 2,775 (0,5); 2,762 (1,0); 2,748 (1,4); 2,734 (1,2); 2,717 (2,0); 2,676 (2,7); 2,671 (3,8); 2,667 (2,8); 2,524 (10,0); 2,510 (212,4); 2,507 (426,0); 2,502 (559,5); 2,498 (412,6); 2,456 (0,7); 2,333 (2,6); 2,329 (3,5); 2,324 (2,7); 2,075 (1,5); 1,361 (0,8); 1,344 (1,7); 1,329 (5,1); 1,312 (10,0); 1,294 (5,0); 1,282 (0,6); 1,229 (0,6); 1,213 (4,5); 1,196 (8,4); 1,178 (4,2); 1,160 (0,4); 1,147 (0,4); 0,788 (0,3); 0,779 (0,4); 0,704 (0,4); 0,469 (4,1); 0,454 (2,9); 0,146 (1,0); 0,008 (7,5); 0,000 (219,5); -0,008 (9,3); -0,150 (1,0)
Ejemplo I-T3-212: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 9,450 (2,0); 8,714 (2,7); 8,433 (2,7); 8,220 (1,3); 8,083 (1,3); 7,802 (0,5); 7,796 (1,2); 7,790 (1,7); 7,785 (1,8); 7,780 (1,4); 7,774 (0,6); 7,567 (1,5); 7,556 (0,4); 7,545 (1,3); 3,329 (62,0); 2,675 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,506 (78,1); 2,502 (103,1); 2,498 (77,2); 2,329 (0,7); 1,615 (0,6); 1,601 (1,6); 1,594 (1,7); 1,581 (0,7); 1,398 (16,0); 1,287 (0,7); 1,274 (1,6); 1,267 (1,7); 1,253 (0,6); 0,008 (1,3); 0,000 (41,2); -

0,008 (1,8)
Ejemplo I-T3-213: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, d_6-DMSO): δ= 8,692 (2,3); 8,542 (0,8); 8,531 (0,8); 8,417 (2,3); 8,220 (1,0); 8,216 (1,1); 8,079 (1,1); 8,075 (1,0); 7,742 (0,5); 7,737 (0,8); 7,717 (3,3); 7,517 (1,0); 7,496 (0,9); 3,348 (0,4); 3,330 (73,9); 2,839 (0,5); 2,829 (0,5); 2,676 (0,3); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,2); 2,520 (1,9); 2,511 (26,1); 2,507 (54,6); 2,502 (72,8); 2,498 (52,8); 2,493 (25,6); 2,333 (0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 1,398 (16,0); 0,716 (0,8); 0,710 (1,2); 0,698 (1,1); 0,692 (0,9); 0,681 (0,4); 0,562 (0,4); 0,552 (1,2); 0,545 (1,1); 0,536 (0,9); 0,008 (1,1); 0,000 (33,4); -0,009 (1,1)
Ejemplo I-T3-214: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 20,020 (0,4); 8,203 (15,1); 8,187 (0,8); 8,173 (15,3); 7,865 (8,4); 7,716 (8,3); 7,711 (10,7); 7,683 (5,4); 7,677 (4,2); 7,662 (6,4); 7,656 (5,5); 7,608 (8,3); 7,528 (0,3); 7,504 (10,0); 7,484 (7,9); 7,016 (4,8); 6,931 (3,0); 6,835 (9,8); 6,653 (5,0); 2,910 (0,6); 2,901 (1,7); 2,891 (2,6); 2,883 (3,9); 2,873 (4,0); 2,865 (2,6); 2,855 (1,8); 2,846 (0,6); 2,174 (590,6); 2,150 (3,3); 2,144 (3,9); 2,138 (4,9); 2,132 (3,3); 2,125 (2,0); 1,995 (20,3); 1,988 (51,7); 1,983 (284,0); 1,977 (520,7); 1,970 (703,8); 1,964 (488,9); 1,958 (254,0); 1,811 (1,6); 1,805 (2,8); 1,799 (4,0); 1,793 (2,8); 1,786 (1,4); 1,467 (16,0); 1,299 (0,7); 0,824 (2,1); 0,811 (6,5); 0,807 (8,8); 0,794 (8,9); 0,789 (6,8); 0,777 (2,9); 0,755 (0,4); 0,737 (0,4); 0,670 (0,4); 0,641 (2,8); 0,629 (8,1); 0,623 (8,3); 0,614 (7,3); 0,602 (2,1); 0,030 (2,9)
Ejemplo I-T3-215: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,215 (15,4); 8,189 (16,0); 7,866 (9,4); 7,763 (8,8); 7,758 (11,3); 7,732 (5,7); 7,726 (4,7); 7,711 (6,6); 7,705 (5,9); 7,672 (4,3); 7,609 (9,4); 7,536 (9,6); 7,515 (7,8); 7,022 (4,7); 6,840 (9,6); 6,659 (4,7); 4,096 (0,8); 4,079 (0,8); 2,495 (1,5); 2,491 (1,3); 2,206 (651,9); 2,150 (2,6); 2,144 (2,8); 2,138 (3,0); 2,131 (2,4); 2,001 (6,5); 1,994 (14,1); 1,983 (141,8); 1,976 (255,1); 1,970 (340,8); 1,964 (252,4); 1,958 (142,1);

1,811 (1,0); 1,805 (1,6); 1,799 (2,1); 1,793 (1,6); 1,787 (1,0); 1,664 (0,3); 1,626 (4,3); 1,611 (12,2); 1,605 (12,9); 1,591 (6,2); 1,551 (0,7); 1,466 (4,4); 1,431 (0,8); 1,390 (5,7); 1,376 (12,2); 1,370 (13,2); 1,355 (4,7); 1,318 (0,5); 1,297 (1,2); 1,251 (1,0); 1,233 (1,9); 1,215 (1,0); 0,029 (1,1)
Ejemplo I-T3-216: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,197 (4,6); 8,169 (4,8); 7,865 (3,0); 7,669 (1,3); 7,664 (1,9); 7,644 (6,9); 7,609 (3,0); 7,584 (0,6); 7,579 (0,6); 7,516 (2,2); 7,495 (1,7); 7,023 (1,3); 7,016 (0,4); 6,841 (2,7); 6,835 (0,7); 6,660 (1,3); 3,086 (16,0); 2,794 (3,5); 2,778 (0,8); 2,769 (1,2); 2,759 (0,9); 2,751 (0,7); 2,741 (0,3); 2,184 (18,2); 2,175 (42,1); 2,144 (0,3); 2,138 (0,4); 2,002 (1,1); 1,994 (1,5); 1,988 (3,9); 1,983 (19,8); 1,976 (36,2); 1,970 (48,7); 1,964 (34,4); 1,958 (18,2); 1,466 (8,2); 1,233 (0,5); 0,869 (0,5); 0,852 (0,5); 0,806 (0,6); 0,795 (0,5); 0,598 (1,8); 0,512 (1,7); 0,504 (1,6); 0,495 (1,8)
Ejemplo I-T3-217: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,724 (2,9); 8,717 (3,2); 8,247 (7,4); 8,240 (1,1); 8,028 (3,1); 8,022 (3,1); 7,971 (0,5); 7,965 (0,5); 7,869 (2,3); 7,615 (2,4); 7,034 (1,5); 6,852 (2,9); 6,846 (0,6); 6,671 (1,5); 3,097 (16,0); 2,828 (2,6); 2,812 (0,6); 2,805 (0,6); 2,797 (1,1); 2,786 (0,7); 2,778 (0,6); 2,179 (56,3); 2,150 (0,4); 2,144 (0,5); 2,138 (0,6); 2,131 (0,4); 1,994 (4,3); 1,988 (6,2); 1,982 (37,6); 1,976 (69,1); 1,970 (93,5); 1,964 (64,7); 1,958 (33,4); 1,805 (0,4); 1,799 (0,6); 1,792 (0,4); 0,817 (0,4); 0,608 (1,4); 0,573 (1,0); 0,565 (1,7); 0,556 (1,1); 0,548 (1,5)
Ejemplo I-T3-218: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 20,011 (0,4); 8,773 (8,6); 8,766 (9,0); 8,741 (1,2); 8,735 (1,2); 8,265 (14,9); 8,261 (16,0); 8,253 (3,2); 8,250 (2,9); 8,143 (9,4); 8,137 (9,5); 8,009 (1,3); 8,002 (1,3); 7,870 (7,3); 7,689 (3,7); 7,614 (8,2); 7,029 (4,5); 6,847 (9,1); 6,666 (4,5); 5,477 (0,5); 3,753 (3,4); 3,653 (0,4); 3,636 (0,6); 3,628 (0,6); 3,611 (0,4); 3,327 (0,4); 3,315 (0,8); 3,304 (0,7); 3,098 (0,7); 3,087 (0,6); 2,911 (0,4); 2,168 (284,6); 2,150 (2,8); 2,144

(3,6); 2,138 (4,5); 2,131 (3,1); 2,125 (1,7); 1,994 (21,0); 1,988 (48,8); 1,982 (280,0); 1,976 (513,9); 1,970 (694,8); 1,964 (480,4); 1,958 (247,2); 1,811 (1,5); 1,805 (2,9); 1,799 (4,1); 1,792 (2,9); 1,786 (1,4); 1,644 (3,6); 1,629 (9,1); 1,623 (9,3); 1,609 (4,8); 1,568 (0,6); 1,440 (0,5); 1,399 (4,9); 1,386 (9,0); 1,379 (9,4); 1,364 (3,7); 1,327 (0,4); 1,299 (0,5); 1,164 (0,7); 0,029 (2,4)
Ejemplo I-T3-219: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,186 (4,3); 8,170 (4,3); 7,971 (2,5); 7,758 (2,2); 7,641 (1,2); 7,636 (1,8); 7,616 (6,7); 7,558 (0,6); 7,552 (0,5); 7,490 (2,0); 7,488 (1,7); 7,483 (0,7); 7,470 (1,3); 7,468 (1,5); 7,462 (0,6); 3,057 (16,0); 2,765 (3,5); 2,755 (0,7); 2,747 (0,7); 2,738 (1,1); 2,728 (0,7); 2,720 (0,6); 2,139 (32,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,4); 1,965 (2,1); 1,959 (5,3); 1,953 (31,9); 1,947 (58,9); 1,941 (79,9); 1,934 (55,2); 1,928 (28,6); 1,775 (0,3); 1,769 (0,5); 1,437 (6,1); 0,840 (0,4); 0,822 (0,4); 0,777 (0,5); 0,766 (0,4); 0,568 (1,4); 0,482 (1,4); 0,474 (1,3); 0,464 (1,5)
Ejemplo I-T3-220: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,695 (3,0); 8,689 (3,2); 8,219 (7,0); 8,000 (3,0); 7,994 (3,0); 7,937 (8,6); 7,897 (0,6); 5,449 (12,1); 3,067 (16,0); 2,891 (0,7); 2,869 (0,3); 2,798 (2,8); 2,785 (0,6); 2,778 (0,7); 2,769 (1,2); 2,758 (0,8); 2,750 (0,7); 2,741 (0,4); 2,474 (0,3); 2,469 (0,5); 2,464 (0,4); 2,189 (56,5); 2,121 (0,4); 2,115 (0,4); 2,109 (0,5); 2,103 (0,4); 2,087 (3,4); 1,965 (1,9); 1,959 (4,3); 1,954 (23,2); 1,947 (42,6); 1,941 (57,3); 1,935 (40,0); 1,929 (20,9); 1,770 (0,3); 1,316 (1,1); 1,300 (0,9); 1,285 (0,3); 1,269 (1,0); 0,853 (0,4); 0,834 (0,4); 0,787 (0,4); 0,776 (0,4); 0,578 (1,6); 0,535 (1,9); 0,525 (1,3); 0,518 (1,7); 0,146 (0,6); 0,008 (4,9); 0,000 (131,9); -0,008 (6,9); -0,150 (0,6)
Ejemplo I-T3-221: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,693 (6,2); 8,687 (6,2); 8,234 (0,7); 8,225 (9,9); 8,212 (10,1); 8,053 (0,4); 8,042 (6,8); 8,036 (6,6); 7,932 (16,0); 7,011 (1,9); 5,447 (15,9); 2,886 (0,5); 2,876 (1,3); 2,867 (1,8); 2,858 (2,8); 2,848 (2,8); 2,840 (1,8); 2,830 (1,3); 2,821 (0,4); 2,149

(16,6); 2,121 (1,4); 2,114 (1,2); 2,108 (1,2); 2,102 (0,9); 2,096 (0,6); 1,965 (6,2); 1,959 (9,3); 1,953 (46,1); 1,947 (83,1); 1,941 (110,8); 1,934 (76,5); 1,928 (39,4); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7); 1,763 (0,4); 1,269 (1,0); 1,259 (0,5); 0,809 (1,5); 0,796 (4,5); 0,791 (5,9); 0,778 (6,1); 0,773 (4,5); 0,761 (2,0); 0,620 (2,0); 0,608 (5,1); 0,603 (5,5); 0,599 (4,9); 0,593 (4,7); 0,581 (1,4); 0,146 (1,3); 0,008 (11,5); 0,000 (286,0); -0,009 (12,3); -0,150 (1,3)
Ejemplo I-T3-222: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,742 (7,6); 8,736 (7,9); 8,237 (11,7); 8,230 (10,9); 8,112 (8,3); 8,106 (8,3); 7,935 (16,0); 7,717 (1,6); 6,777 (0,5); 5,448 (3,1); 2,170 (68,6); 2,121 (0,4); 2,115 (0,6); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,965 (4,0); 1,959 (7,7); 1,953 (42,0); 1,947 (76,9); 1,941 (104,1); 1,935 (72,7); 1,929 (37,9); 1,776 (0,5); 1,769 (0,6); 1,763 (0,5); 1,697 (0,5); 1,612 (3,1); 1,598 (7,6); 1,591 (7,8); 1,577 (4,2); 1,537 (0,5); 1,523 (1,3); 1,505 (1,2); 1,408 (0,5); 1,368 (4,3); 1,355 (7,7); 1,348 (8,0); 1,333 (3,2); 1,277 (0,4); 1,269 (0,9); 1,259 (1,1); 1,193 (0,9); 1,187 (0,6); 1,183 (0,4); 1,177 (1,0); 1,171 (0,6); 1,166 (0,4); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (259,4); -0,009 (11,5); -0,150 (1,1)
Ejemplo I-T3-223: RMN de ^{1}H (600,1 MHz, CD3CN): δ= 8,772 (0,8); 8,732 (3,1); 8,728 (3,0); 8,222 (7,7); 8,215 (5,8); 8,200 (0,8); 8,021 (3,2); 8,017 (3,1); 7,943 (13,2); 6,642 (0,5); 4,077 (1,3); 4,065 (3,9); 4,053 (3,9); 4,042 (1,3); 3,752 (0,8); 3,165 (3,1); 3,069 (0,4); 2,934 (16,0); 2,880 (0,4); 2,245 (0,5); 2,240 (0,6); 2,222 (0,8); 2,146 (25,4); 2,078 (1,0); 2,059 (0,8); 2,055 (1,1); 2,050 (1,3); 2,046 (1,0); 2,042 (0,7); 1,972 (17,2); 1,964 (2,0); 1,956 (5,4); 1,952 (7,4); 1,948 (55,6); 1,944 (100,9); 1,940 (146,1); 1,936 (99,1); 1,931 (49,9); 1,833 (0,4); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,816 (0,4); 1,664 (3,8); 1,661 (4,0); 1,505 (0,4); 1,473 (3,0); 1,443 (0,6); 1,425 (0,6); 1,422 (0,6); 1,409 (0,8); 1,406 (0,8); 1,390 (2,1); 1,388 (1,6); 1,372 (1,4); 1,363 (0,5); 1,358 (0,7); 1,341 (1,7); 1,316 (0,9); 1,303 (0,9); 1,285 (3,5); 1,277 (3,9); 1,271 (6,9); 1,221 (1,2); 1,216 (6,4); 1,214 (5,7); 1,204

(9,5); 1,201 (2,5); 1,192 (4,8); 1,180 (0,6); 1,175 (0,3); 0,948 (0,4); 0,893 (0,9); 0,882 (1,8); 0,870 (1,5); 0,863 (0,9); 0,860 (0,9); 0,856 (0,9); 0,846 (0,9); 0,000 (7,9)
Ejemplo I-T3-224: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,271 (7,9); 8,267 (7,8); 8,184 (15,8); 8,183 (15,9); 8,152 (0,7); 8,141 (16,0); 7,791 (6,9); 7,693 (9,4); 7,688 (12,0); 7,678 (0,8); 7,662 (6,6); 7,656 (4,7); 7,641 (7,7); 7,635 (6,2); 7,591 (0,7); 7,479 (11,5); 7,458 (9,1); 6,959 (2,7); 4,086 (0,9); 4,068 (2,7); 4,050 (2,8); 4,032 (0,9); 2,986 (0,4); 2,883 (0,8); 2,873 (2,2); 2,864 (3,0); 2,855 (4,6); 2,846 (4,6); 2,837 (2,9); 2,828 (2,2); 2,818 (0,9); 2,567 (0,7); 2,536 (0,3); 2,503 (0,4); 2,477 (1,2); 2,472 (1,9); 2,467 (2,6); 2,462 (1,9); 2,458 (1,1); 2,411 (0,5); 2,398 (0,5); 2,373 (0,6); 2,310 (0,9); 2,281 (1,2); 2,187 (1104,6); 2,121 (0,9); 2,115 (2,0); 2,109 (2,7); 2,103 (1,9); 2,096 (0,9); 1,993 (0,6); 1,973 (14,2); 1,966 (15,1); 1,960 (36,7); 1,954 (209,3); 1,948 (380,7); 1,941 (511,0); 1,935 (347,0); 1,929 (175,8); 1,916 (1,4); 1,782 (1,0); 1,776 (1,9); 1,770 (2,8); 1,764 (1,8); 1,757 (0,8); 1,437 (14,7); 1,340 (0,4); 1,285 (0,8); 1,270 (2,8); 1,222 (3,4); 1,204 (6,6); 1,186 (3,2); 0,882 (0,5); 0,857 (0,5); 0,841 (0,4); 0,796 (2,4); 0,784 (7,0); 0,779 (9,4); 0,766 (9,7); 0,761 (6,9); 0,749 (3,1); 0,727 (0,5); 0,709 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,614 (3,2); 0,602 (7,9); 0,597 (8,2); 0,593 (7,3); 0,587 (7,3); 0,575 (2,2); 0,526 (0,3); 0,146 (7,1); 0,138 (0,4); 0,079 (0,4); 0,069 (0,4); 0,066 (0,3); 0,058 (0,5); 0,054 (0,5); 0,049 (0,5); 0,045 (0,6); 0,037 (0,8); 0,023 (2,0); 0,008 (59,7); 0,000 (1582,5); -0,009 (57,5); -0,033 (0,5); -0,036 (0,5); -0,150 (7,0)
Ejemplo I-T3-225: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,269 (2,4); 8,266 (2,4); 8,170 (4,4); 8,126 (4,2); 7,787 (2,2); 7,644 (1,2); 7,639 (1,7); 7,624 (1,0); 7,618 (5,4); 7,613 (1,7); 7,561 (0,6); 7,556 (0,5); 7,490 (2,1); 7,489 (2,0); 7,482 (0,7); 7,470 (1,6); 7,468 (1,6); 7,462 (0,6); 3,058 (14,9); 3,006 (0,4); 2,778 (0,6); 2,771 (3,2); 2,761 (0,6); 2,753 (0,7); 2,744 (1,1); 2,734 (0,7); 2,726 (0,8); 2,127 (33,1); 2,113 (0,8); 2,106 (0,7); 2,100 (0,5); 1,971 (0,8); 1,963 (2,6); 1,957

(6,7); 1,951 (37,7); 1,945 (68,8); 1,939 (92,9); 1,933 (64,3); 1,927 (33,3); 1,774 (0,4); 1,767 (0,5); 1,761 (0,4); 1,437 (16,0); 1,270 (0,8); 1,204 (0,4); 0,841 (0,5); 0,823 (0,4); 0,780 (0,5); 0,769 (0,4); 0,581 (1,4); 0,575 (1,4); 0,487 (1,5); 0,479 (1,3); 0,470 (1,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (262,4); -0,009 (11,4); -0,150 (1,2)
Ejemplo I-T3-226: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,269 (7,2); 8,266 (7,5); 8,191 (16,0); 8,147 (15,3); 8,056 (0,9); 7,789 (6,5); 7,741 (8,2); 7,735 (10,5); 7,708 (5,2); 7,703 (4,0); 7,687 (6,0); 7,682 (5,1); 7,582 (0,8); 7,554 (4,5); 7,509 (10,0); 7,488 (8,2); 4,084 (0,6); 4,067 (1,9); 4,049 (1,9); 4,032 (0,6); 3,063 (0,7); 3,040 (5,6); 2,902 (4,9); 2,854 (0,6); 2,568 (0,4); 2,126 (170,0); 2,112 (2,8); 2,106 (2,7); 2,100 (1,9); 2,093 (1,0); 2,035 (0,4); 1,970 (10,0); 1,962 (11,5); 1,956 (26,7); 1,951 (152,2); 1,944 (278,1); 1,938 (376,5); 1,932 (259,9); 1,926 (134,2); 1,913 (1,4); 1,779 (0,8); 1,773 (1,5); 1,767 (2,1); 1,761 (1,4); 1,754 (0,7); 1,597 (4,0); 1,583 (10,7); 1,576 (10,4); 1,563 (5,3); 1,523 (0,7); 1,436 (8,2); 1,404 (0,7); 1,364 (5,4); 1,350 (10,4); 1,344 (11,2); 1,329 (4,1); 1,318 (0,3); 1,292 (0,5); 1,269 (2,7); 1,221 (2,2); 1,203 (4,2); 1,185 (2,1); 0,881 (0,4); 0,858 (0,3); 0,145 (5,2); 0,031 (0,9); 0,0071 (35,1); 0,0066 (35,1); -0,001 (985,7); -0,009 (44,0); -0,026 (0,9); -0,040 (0,4); -0,151 (5,1)
Ejemplo I-T3-227: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,511 (7,8); 8,508 (7,8); 8,174 (16,0); 8,118 (13,4); 8,099 (7,8); 7,694 (9,8); 7,688 (12,4); 7,662 (6,6); 7,656 (5,0); 7,641 (7,7); 7,635 (6,4); 7,499 (0,3); 7,476 (11,6); 7,455 (9,2); 6,938 (2,9); 3,062 (0,6); 2,880 (0,7); 2,870 (2,1); 2,861 (3,0); 2,852 (4,7); 2,843 (4,7); 2,834 (3,0); 2,825 (2,2); 2,815 (0,7); 2,543 (0,4); 2,468 (0,4); 2,463 (0,6); 2,459 (0,4); 2,163 (162,8); 2,120 (1,0); 2,114 (1,0); 2,108 (1,1); 2,102 (0,9); 2,087 (20,5); 1,972 (1,6); 1,965 (5,0); 1,959 (13,4); 1,953 (69,2); 1,947 (125,1); 1,941 (166,4); 1,935 (115,7); 1,928 (59,8); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,757 (0,3); 1,285 (0,4); 1,269 (1,7); 1,204 (0,6); 1,186 (0,3); 1,179 (0,8); 0,794 (2,5);

0,781 (7,3); 0,776 (9,8); 0,763 (10,2); 0,758 (7,4); 0,746 (3,4); 0,724 (0,4); 0,707 (0,4); 0,652 (0,4); 0,642 (0,4); 0,612 (3,3); 0,601 (8,5); 0,595 (8,9); 0,591 (8,1); 0,586 (7,9); 0,573 (2,5); 0,536 (0,4); 0,528 (0,3); 0,146 (2,7); 0,029 (0,4); 0,008 (25,1); 0,000 (580,3); -0,009 (29,4); -0,028 (0,7); -0,150 (2,7)
Ejemplo I-T3-228: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,508 (2,3); 8,184 (4,7); 8,130 (3,9); 8,099 (2,3); 7,741 (2,6); 7,735 (3,4); 7,711 (1,8); 7,705 (1,3); 7,690 (2,1); 7,684 (1,7); 7,644 (1,3); 7,509 (3,2); 7,488 (2,6); 2,545 (0,6); 2,468 (0,5); 2,463 (0,7); 2,459 (0,5); 2,159 (239,3); 2,119 (0,6); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,971 (1,0); 1,964 (3,7); 1,958 (9,3); 1,952 (53,0); 1,946 (96,2); 1,940 (130,0); 1,933 (90,1); 1,927 (46,8); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,595 (1,3); 1,581 (3,4); 1,574 (3,5); 1,560 (1,8); 1,437 (16,0); 1,363 (1,8); 1,349 (3,4); 1,343 (3,5); 1,328 (1,4); 1,270 (0,7); 1,204 (0,4); 0,146 (1,3); 0,008 (10,5); 0,000 (282,8); -0,009 (11,9); -0,150 (1,3)
Ejemplo I-T3-229: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,507 (1,6); 8,161 (3,4); 8,104 (3,1); 7,644 (0,8); 7,639 (1,1); 7,619 (3,9); 7,562 (0,4); 7,557 (0,4); 7,488 (1,4); 7,481 (0,5); 7,466 (1,1); 7,460 (0,4); 3,056 (10,5); 2,855 (0,4); 2,771 (2,3); 2,763 (0,5); 2,755 (0,5); 2,745 (0,8); 2,736 (0,5); 2,728 (0,4); 2,544 (0,4); 2,131 (16,7); 1,971 (0,5); 1,963 (1,1); 1,957 (2,7); 1,951 (15,4); 1,945 (28,4); 1,939 (38,5); 1,933 (26,5); 1,927 (13,7); 1,437 (16,0); 0,779 (0,4); 0,576 (1,0); 0,488 (1,0); 0,480 (0,9); 0,471 (1,0); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (85,2); -0,009 (3,4); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T4-1: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,170 (4,8); 7,860 (5,7); 7,840 (2,0); 7,833 (1,3); 7,687 (4,2); 7,561 (1,9); 7,539 (1,6); 7,436 (5,5); 6,972 (0,9); 2,871 (0,5); 2,862 (0,8); 2,853 (1,1); 2,843 (1,1); 2,835 (0,8); 2,825 (0,5); 2,251 (24,5); 2,140 (6,0); 1,971 (0,5); 1,964 (0,6); 1,958 (1,4); 1,952 (6,2); 1,946 (11,2); 1,940 (15,0); 1,934 (10,9); 1,928 (5,9); 1,436 (16,0); 0,796

(0,6); 0,784 (1,9); 0,779 (2,5); 0,766 (2,6); 0,761 (2,0); 0,749 (0,9); 0,619 (0,8); 0,608 (2,3); 0,601 (2,5); 0,592 (2,1); 0,580 (0,6); 0,000 (15,7)
Ejemplo I-T4-2: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,184 (6,7); 8,183 (6,5); 7,920 (2,5); 7,915 (8,6); 7,894 (3,0); 7,887 (1,9); 7,699 (6,2); 7,680 (1,6); 7,602 (3,0); 7,600 (2,8); 7,582 (2,4); 7,580 (2,6); 7,438 (7,8); 2,463 (0,3); 2,253 (39,2); 2,151 (134,8); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,4); 1,972 (1,2); 1,965 (4,2); 1,959 (10,5); 1,953 (54,2); 1,947 (98,7); 1,940 (132,9); 1,934 (93,2); 1,928 (48,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,599 (1,8); 1,585 (4,6); 1,578 (4,7); 1,564 (2,4); 1,437 (16,0); 1,415 (0,4); 1,375 (2,4); 1,361 (4,7); 1,354 (4,9); 1,340 (1,8); 1,269 (1,5); 1,204 (0,4); 0,146 (0,7); 0,008 (5,3); 0,000 (150,3); -0,008 (7,3); -0,149 (0,7)
Ejemplo I-T4-3: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,929 (2,4); 8,922 (2,4); 8,231 (2,7); 8,224 (2,6); 8,205 (4,3); 7,754 (3,8); 7,444 (5,0); 7,072 (0,7); 2,881 (0,4); 2,872 (0,7); 2,863 (1,0); 2,853 (1,0); 2,845 (0,7); 2,835 (0,4); 2,252 (22,9); 2,140 (16,7); 1,964 (1,1); 1,952 (13,4); 1,946 (23,9); 1,940 (31,3); 1,934 (21,8); 1,928 (11,3); 1,436 (16,0); 0,814 (0,5); 0,800 (1,8); 0,796 (2,2); 0,783 (2,3); 0,778 (1,7); 0,766 (0,7); 0,633 (0,7); 0,622 (2,1); 0,616 (2,2); 0,612 (2,0); 0,607 (1,8); 0,594 (0,5); 0,146 (0,6); 0,000 (113,1); -0,150 (0,6)
Ejemplo I-T4-4: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,974 (3,9); 8,967 (3,9); 8,300 (4,1); 8,294 (4,0); 8,216 (6,7); 7,764 (6,3); 7,753 (0,6); 7,735 (1,8); 7,446 (7,8); 4,067 (0,9); 4,050 (0,9); 3,076 (1,0); 2,898 (1,0); 2,254 (38,8); 2,144 (39,1); 2,114 (0,6); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 2,095 (0,4); 2,086 (0,4); 2,063 (0,4); 1,972 (4,1); 1,964 (2,3); 1,958 (6,0); 1,952 (30,2); 1,946 (53,9); 1,940 (71,6); 1,934 (48,9); 1,928 (25,1); 1,768 (0,4); 1,617 (1,7); 1,602 (4,5); 1,595 (4,4); 1,581 (2,2); 1,437 (16,0); 1,388 (2,3); 1,375 (4,5); 1,368 (4,5); 1,353 (1,7); 1,269 (0,9); 1,221 (1,0); 1,204 (2,0); 1,186 (1,0); 0,146 (1,1); 0,008 (8,7); 0,000 (211,3); -

0,009 (8,7); -0,150 (1,1)
Ejemplo I-T22-1: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,934 (2,4); 7,928 (3,4); 7,908 (1,9); 7,902 (1,3); 7,887 (2,0); 7,882 (1,6); 7,615 (3,0); 7,594 (2,6); 7,486 (5,3); 7,037 (0,7); 6,864 (0,4); 6,858 (6,5); 2,877 (0,5); 2,867 (0,8); 2,858 (1,2); 2,849 (1,2); 2,840 (0,8); 2,831 (0,6); 2,258 (25,0); 2,168 (12,6); 1,965 (0,4); 1,959 (1,0); 1,953 (5,8); 1,947 (10,6); 1,941 (14,3); 1,935 (10,0); 1,928 (5,3); 1,436 (16,0); 0,800 (0,6); 0,788 (1,8); 0,783 (2,5); 0,770 (2,6); 0,765 (1,9); 0,753 (0,9); 0,624 (0,9); 0,613 (2,2); 0,606 (2,3); 0,602 (2,0); 0,597 (2,0); 0,585 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (20,3); -0,009 (0,9)
Ejemplo I-T22-2: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,992 (6,1); 7,986 (8,0); 7,960 (4,3); 7,954 (3,3); 7,939 (4,6); 7,933 (4,0); 7,709 (2,2); 7,654 (7,3); 7,633 (6,4); 7,487 (13,6); 6,877 (16,0); 5,448 (2,4); 2,418 (0,4); 2,260 (66,3); 2,153 (49,7); 2,120 (0,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,098 (0,5); 2,086 (1,9); 1,972 (0,6); 1,964 (1,9); 1,958 (4,9); 1,953 (28,0); 1,946 (51,5); 1,940 (70,2); 1,934 (49,9); 1,928 (27,0); 1,775 (0,3); 1,769 (0,4); 1,603 (3,1); 1,588 (8,0); 1,581 (8,3); 1,568 (4,3); 1,528 (0,5); 1,436 (0,9); 1,419 (0,5); 1,379 (4,2); 1,365 (8,0); 1,359 (8,7); 1,344 (3,3); 1,268 (0,4); 0,146 (0,5); 0,008 (3,8); 0,000 (117,9); -0,008 (7,0); -0,150 (0,6)
Ejemplo I-T22-3: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,982 (3,5); 7,977 (5,3); 7,966 (3,0); 7,960 (1,9); 7,945 (2,9); 7,939 (2,5); 7,669 (4,3); 7,648 (3,7); 7,487 (9,9); 6,883 (8,4); 4,152 (1,0); 4,136 (1,1); 4,129 (3,0); 4,112 (3,1); 4,105 (3,3); 4,089 (3,1); 4,082 (1,4); 4,065 (1,1); 2,262 (40,4); 2,156 (20,4); 2,101 (0,4); 1,972 (0,5); 1,964 (1,0); 1,958 (2,4); 1,953 (12,4); 1,946 (23,1); 1,940 (31,5); 1,934 (23,1); 1,928 (12,8); 1,436 (16,0); 0,008 (2,0); 0,000 (53,5)
Ejemplo I-T22-4: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,983 (1,2); 8,977 (1,3); 8,360 (1,3); 8,355 (1,3); 7,953 (1,3); 7,944 (1,4); 7,036

(2,1); 2,306 (6,0); 2,160 (8,1); 1,953 (4,2); 1,947 (7,8); 1,941 (10,6); 1,935 (7,9); 1,929 (4,3); 1,619 (0,6); 1,604 (1,6); 1,597 (1,6); 1,584 (0,8); 1,437 (16,0); 1,390 (0,8); 1,376 (1,6); 1,369 (1,7); 1,354 (0,6)
Ejemplo I-T22-5: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,942 (4,2); 7,936 (5,2); 7,918 (1,6); 7,912 (1,1); 7,897 (1,6); 7,892 (1,3); 7,619 (2,4); 7,598 (2,1); 7,045 (0,8); 6,922 (4,2); 2,874 (0,4); 2,865 (0,7); 2,856 (1,0); 2,847 (1,0); 2,838 (0,7); 2,828 (0,4); 2,305 (10,8); 2,183 (27,7); 1,960 (0,8); 1,954 (3,8); 1,948 (6,9); 1,942 (9,3); 1,936 (6,5); 1,930 (3,4); 1,436 (16,0); 0,799 (0,5); 0,786 (1,7); 0,781 (2,2); 0,769 (2,2); 0,764 (1,7); 0,751 (0,7); 0,624 (0,7); 0,613 (2,1); 0,607 (2,1); 0,603 (2,0); 0,597 (1,8); 0,585 (0,5); 0,000 (23,8)
Ejemplo I-T22-6: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,939 (1,4); 8,933 (1,4); 8,292 (1,5); 8,286 (1,4); 7,952 (1,1); 7,942 (1,1); 7,150 (0,3); 7,022 (2,3); 2,874 (0,4); 2,865 (0,5); 2,855 (0,5); 2,847 (0,4); 2,305 (5,7); 2,187 (7,7); 1,973 (0,7); 1,960 (0,4); 1,954 (2,8); 1,948 (5,1); 1,942 (7,0); 1,936 (4,8); 1,930 (2,5); 1,436 (16,0); 1,204 (0,3); 0,803 (0,9); 0,798 (1,1); 0,785 (1,2); 0,780 (0,9); 0,767 (0,4); 0,636 (0,4); 0,624 (1,0); 0,619 (1,1); 0,615 (0,9); 0,609 (0,9); 0,000 (5,3)
Ejemplo I-T22-7: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,999 (1,6); 7,994 (2,1); 7,970 (1,1); 7,965 (0,8); 7,949 (2,6); 7,944 (2,6); 7,937 (1,8); 7,659 (2,2); 7,638 (1,6); 6,939 (3,3); 2,306 (8,4); 2,155 (9,0); 1,972 (0,6); 1,965 (0,3); 1,953 (5,6); 1,947 (10,3); 1,941 (14,0); 1,935 (9,7); 1,929 (5,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,1); 1,581 (2,1); 1,567 (1,1); 1,436 (16,0); 1,380 (1,1); 1,366 (2,1); 1,360 (2,2); 1,345 (0,8)
Ejemplo I-T23-1: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,961 (5,3); 7,958 (2,0); 7,942 (1,7); 7,937 (1,0); 7,864 (5,1); 7,609 (1,6); 7,606 (1,0); 7,590 (1,0); 7,587 (1,4); 7,148 (5,1); 6,968 (0,5); 2,876 (0,4); 2,867 (0,6); 2,858 (0,9); 2,849 (0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,4); 2,134 (6,5); 1,964 (1,6); 1,958 (2,5); 1,952

(11,3); 1,946 (20,0); 1,940 (26,1); 1,934 (17,8); 1,928 (9,0); 1,437 (16,0); 0,800 (0,5); 0,787 (1,5); 0,782 (1,9); 0,770 (2,0); 0,764 (1,4); 0,752 (0,7); 0,624 (0,7); 0,614 (1,6); 0,606 (1,7); 0,602 (1,5); 0,597 (1,5); 0,584 (0,5); 0,000 (0,7)
Ejemplo I-T23-2: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,014 (3,3); 8,010 (1,3); 7,997 (1,1); 7,991 (0,6); 7,866 (3,6); 7,648 (1,5); 7,642 (0,8); 7,630 (0,6); 7,625 (1,2); 7,162 (3,0); 5,447 (16,0); 2,140 (12,0); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (4,0); 1,952 (17,2); 1,946 (30,2); 1,940 (39,3); 1,934 (26,8); 1,928 (13,7); 1,600 (0,6); 1,586 (1,7); 1,579 (1,7); 1,565 (0,9); 1,437 (0,9); 1,380 (0,9); 1,367 (1,6); 1,360 (1,7); 1,345 (0,7); 0,000 (0,9)
Ejemplo I-T46-1: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,669 (6,3); 7,664 (9,6); 7,654 (5,5); 7,648 (2,9); 7,633 (5,5); 7,627 (4,3); 7,582 (3,1); 7,509 (16,0); 7,426 (8,2); 7,405 (6,8); 7,166 (4,7); 7,161 (8,3); 7,156 (5,0); 6,767 (3,7); 6,760 (7,3); 6,754 (5,5); 6,735 (5,6); 6,730 (6,3); 6,723 (3,8); 2,468 (0,7); 2,463 (1,0); 2,459 (0,7); 2,298 (0,5); 2,161 (388,0); 2,139 (78,8); 2,121 (1,2); 2,114 (1,5); 2,108 (1,7); 2,102 (1,2); 2,096 (0,7); 1,993 (0,7); 1,977 (0,9); 1,965 (8,8); 1,959 (16,3); 1,953 (98,1); 1,947 (179,6); 1,941 (243,9); 1,935 (167,4); 1,928 (86,0); 1,856 (0,9); 1,842 (0,6); 1,782 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,757 (0,5); 1,585 (3,5); 1,570 (9,4); 1,563 (9,3); 1,550 (4,6); 1,510 (0,5); 1,394 (0,5); 1,354 (4,7); 1,340 (9,4); 1,333 (9,8); 1,319 (3,5); 0,146 (0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (87,8); -0,008 (3,4); -0,150 (0,4)
Ejemplo I-T46-2: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 7,682 (3,3); 7,677 (6,3); 7,676 (6,2); 7,673 (6,2); 7,668 (4,7); 7,665 (5,9); 7,653 (5,1); 7,647 (7,8); 7,628 (1,3); 7,623 (1,7); 7,606 (1,1); 7,600 (0,7); 7,585 (1,1); 7,579 (1,0); 7,518 (4,3); 7,517 (4,5); 7,507 (3,5); 7,496 (6,1); 7,478 (6,1); 7,475 (3,5); 7,459 (3,7); 7,422 (2,5); 7,419 (1,8); 7,409 (1,0); 7,403 (2,8); 7,394 (1,8); 7,385 (1,0); 7,373 (1,2); 7,153 (0,9); 7,148 (1,6); 7,143 (1,1); 6,961 (0,8); 6,900 (0,5); 6,760 (0,8); 6,753

(1,5); 6,747 (1,1); 6,724 (1,1); 6,720 (1,3); 6,717 (1,2); 6,713 (0,9); 3,855 (0,7); 3,051 (1,3); 2,881 (0,4); 2,871 (1,1); 2,862 (1,6); 2,853 (2,4); 2,843 (3,0); 2,834 (1,8); 2,826 (1,3); 2,816 (0,6); 2,476 (0,8); 2,472 (1,3); 2,467 (1,8); 2,462 (1,4); 2,427 (0,5); 2,391 (0,4); 2,383 (0,3); 2,359 (0,4); 2,327 (0,5); 2,182 (852,2); 2,138 (15,6); 2,121 (1,5); 2,115 (2,2); 2,109 (2,8); 2,102 (2,4); 2,096 (1,2); 1,992 (0,9); 1,966 (9,9); 1,959 (26,3); 1,954 (166,7); 1,947 (309,9); 1,941 (423,2); 1,935 (291,5); 1,929 (148,5); 1,782 (0,9); 1,776 (1,7); 1,770 (2,4); 1,764 (1,7); 1,757 (0,9); 1,437 (16,0); 1,270 (1,6); 0,790 (1,1); 0,778 (3,3); 0,773 (4,8); 0,766 (2,0); 0,760 (4,8); 0,755 (4,0); 0,743 (1,7); 0,736 (0,5); 0,614 (1,5); 0,602 (4,2); 0,593 (4,9); 0,587 (4,7); 0,575 (1,8); 0,000 (1,7)
Ejemplo I-T46-3: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,649 (2,9); 8,643 (3,2); 7,935 (2,9); 7,929 (2,9); 7,873 (7,9); 7,322 (1,5); 7,318 (2,7); 7,313 (1,9); 6,923 (1,5); 6,917 (2,0); 6,916 (2,3); 6,910 (1,9); 6,802 (1,7); 6,798 (2,2); 6,795 (2,0); 6,790 (1,9); 3,058 (16,0); 2,790 (2,7); 2,783 (0,4); 2,772 (0,6); 2,765 (0,6); 2,757 (1,2); 2,745 (0,7); 2,738 (0,6); 2,170 (18,1); 1,966 (1,0); 1,960 (2,0); 1,954 (11,8); 1,948 (21,8); 1,941 (29,7); 1,935 (20,7); 1,929 (10,7); 1,269 (0,6); 0,844 (0,3); 0,826 (0,4); 0,783 (0,4); 0,573 (1,4); 0,528 (1,7); 0,518 (1,1); 0,511 (1,6); 0,000 (7,0); -0,008 (0,3)
Ejemplo I-T46-4: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,649 (6,8); 8,643 (7,0); 7,990 (0,3); 7,976 (7,4); 7,970 (7,3); 7,871 (16,0); 7,320 (4,1); 7,315 (6,6); 7,310 (4,1); 6,976 (1,8); 6,920 (3,8); 6,914 (4,9); 6,912 (5,2); 6,907 (4,0); 6,805 (4,5); 6,801 (4,8); 6,798 (4,5); 6,794 (3,8); 5,448 (0,6); 2,876 (0,4); 2,867 (1,2); 2,857 (1,7); 2,849 (2,7); 2,839 (2,8); 2,831 (1,8); 2,821 (1,3); 2,811 (0,4); 2,143 (54,7); 2,114 (0,4); 2,108 (0,4); 1,965 (2,0); 1,959 (5,3); 1,953 (26,5); 1,947 (48,2); 1,941 (64,2); 1,934 (44,7); 1,928 (23,1); 1,769 (0,4); 1,269 (0,9); 1,200 (0,4); 0,799 (1,4); 0,786 (4,5); 0,781 (5,9); 0,769 (6,1); 0,763 (4,5); 0,751 (1,9); 0,614 (1,9); 0,602

(5,1); 0,597 (5,6); 0,593 (5,0); 0,587 (4,8); 0,575 (1,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,3)
Ejemplo I-T46-5: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,693 (7,0); 8,687 (7,3); 8,034 (7,5); 8,028 (7,5); 7,873 (16,0); 7,693 (1,3); 7,335 (3,9); 7,330 (6,8); 7,325 (4,4); 6,927 (3,7); 6,922 (4,7); 6,920 (5,0); 6,914 (4,3); 6,816 (4,3); 6,812 (4,8); 6,808 (4,4); 6,804 (3,9); 5,449 (14,1); 2,173 (58,5); 2,115 (0,4); 2,109 (0,5); 2,103 (0,4); 1,966 (2,9); 1,960 (5,1); 1,954 (29,3); 1,948 (53,8); 1,941 (72,9); 1,935 (50,8); 1,929 (26,4); 1,776 (0,3); 1,770 (0,4); 1,764 (0,3); 1,602 (2,9); 1,588 (7,3); 1,581 (7,4); 1,567 (3,9); 1,551 (0,4); 1,523 (0,7); 1,505 (0,6); 1,405 (0,5); 1,365 (4,1); 1,351 (7,2); 1,345 (7,6); 1,330 (3,0); 1,269 (0,9); 1,259 (0,5); 1,200 (0,6); 1,193 (0,4); 1,187 (0,4); 1,177 (0,5); 1,171 (0,4); 0,008 (0,4); 0,000 (13,0)
Ejemplo I-T46-6: RMN de ^{1}H (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,729 (1,0); 8,692 (3,0); 8,687 (3,0); 8,145 (1,0); 7,954 (3,0); 7,949 (3,0); 7,871 (14,1); 7,325 (3,5); 7,071 (0,6); 6,926 (2,7); 6,920 (3,2); 6,914 (2,1); 6,808 (2,6); 6,803 (2,8); 6,643 (1,1); 6,496 (1,1); 3,751 (1,8); 3,659 (0,8); 3,649 (0,9); 3,643 (2,1); 3,624 (1,8); 3,159 (4,2); 3,076 (1,9); 3,062 (0,3); 2,927 (16,0); 2,905 (0,3); 2,887 (0,3); 2,874 (0,3); 2,240 (1,1); 2,176 (137,5); 2,121 (0,6); 2,115 (0,7); 2,109 (0,7); 2,103 (0,6); 2,097 (0,4); 1,966 (2,5); 1,960 (6,5); 1,954 (35,6); 1,948 (65,4); 1,942 (88,3); 1,935 (62,6); 1,929 (33,5); 1,819 (1,0); 1,811 (1,1); 1,803 (2,6); 1,794 (1,2); 1,786 (1,1); 1,776 (0,6); 1,770 (0,8); 1,764 (0,6); 1,758 (0,4); 1,698 (0,4); 1,653 (4,1); 1,599 (0,4); 1,586 (0,3); 1,548 (0,4); 1,541 (0,4); 1,523 (0,9); 1,505 (1,0); 1,468 (3,4); 1,453 (1,6); 1,415 (1,4); 1,405 (1,4); 1,389 (9,5); 1,358 (1,0); 1,340 (1,1); 1,315 (1,4); 1,303 (3,2); 1,285 (4,6); 1,270 (11,8); 1,221 (12,0); 1,214 (12,0); 1,200 (3,3); 1,193 (1,3); 1,190 (1,5); 1,177 (1,0); 1,172 (1,1); 1,161 (0,7); 1,121 (0,6); 1,107 (0,6); 1,093 (0,9); 1,057 (0,7); 0,974 (0,4); 0,957 (0,5); 0,947 (0,6); 0,934 (0,5); 0,923 (0,7); 0,898 (1,3); 0,882 (3,1); 0,876 (2,5); 0,858 (2,8); 0,840 (1,7); 0,815 (0,6); 0,000 (3,4)

[1)] La masa indicada es el pico del patrón de isótopos del ion $[M+H]^+$ de mayor intensidad; si se detectó el ion $[M-H]^-$, la masa indicada es identificada con [2].

[2] La masa indicada es el pico del patrón de isótopos del ion $[M-H]^-$ de mayor intensidad.

[a)] Nota con respecto a la determinación de los valores logP y la detección de la masa: Los valores logP fueron determinados de acuerdo con la Directiva de la EEC 79/831 Anexo V.A8 por HPLC (cromatografía líquida de alto rendimiento) en una columna de fase inversa (C_18) sistema Agilent 1100 LC; 50*4.6 Zorbax Eclipse Plus C_18 1,8 micrones; eluyente A: acetonitrilo (0,1% ácido fórmico); eluyente B: agua (0,09% ácido fórmico); gradiente lineal de 10% acetonitrilo a 95% acetonitrilo en 4,25 min, luego 95% acetonitrilo durante otros 1,25 min; temperatura del horno 55 °C; caudal: 2.0 ml/min. La detección de la masa se efectúa por medio de un sistema Agilent MSD.

Ejemplos biológicos

Rhipicephalus sanguineus - ensayos de contacto in vitro con garrapatas marrones adultas del perro

Para el recubrimiento de los tubos de ensayo, se disuelven primero 9 mg de ingrediente activo en 1 ml de acetona p.a. y luego se diluyen a la concentración deseada con acetona p.a. 250 µl de la solución se distribuyen en forma homogénea sobre las paredes interiores y la base de un tubo de ensayo de 25 ml dando vuelta y agitando en un agitador orbital (rotación de agitación a 30 rpm durante 2 hs). Con una solución de ingrediente activo de 900 ppm y superficie interna de 44,7 cm^2, dada una

distribución homogénea, se logra una dosis basada en el área de 5 µg/cm².

Después de haber evaporado el disolvente, los tubos son poblados con 5-10 garrapatas adultas del perro (*Rhipicephalus sanguineus*), se sellan con una tapa de plástico perforada y se incuban en una posición horizontal en la oscuridad a temperatura ambiente y humedad ambiente. Después de 48 hs, se determina la eficacia. Para tal fin, las garrapatas son tiradas al piso del tubo e incubadas en una placa caliente a 45-50 °C durante no más de 5 min. Las garrapatas que permanecen inmóviles en el piso o se mueven de tal manera no coordinada que son incapaces de evitar en forma deliberada el calor ascendiendo se considera que están muertas o moribundas.

Una sustancia muestra buena eficacia contra *Rhipicephalus sanguineus* si se logra al menos 80% de eficacia en este ensayo a una tasa de aplicación de 5 µg/cm². Una eficacia de 100% significa que todas las garrapatas estaban muertas o moribundas. 0% de eficacia significa que ninguna de las garrapatas había sufrido daño.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 5 µg/cm²: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-42, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-2, I-T22-1, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 5 µg/cm²: I-T3-38, I-T3-43, I-T3-80, I-T3-88, I-T3-92, I-T3-143

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 1 µg/cm²: I-T3-108, I-T3-114, I-T3-141

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 1 µg/cm²: I-T3-94, I-T3-123

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 0.2 µg/cm²: I-T3-105

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 0.2 µg/cm²: I-T3-64

Ctenocephalides felis – ensayos de contacto in vitro con pulgas adultas de gatos

Para el recubrimiento de los tubos de ensayo, se disuelven primero 9 mg de ingrediente activo en 1 ml de acetona p.a. y luego se diluyen a la concentración deseada con acetona p.a. 250 µl de la solución se distribuyen en forma homogénea sobre las paredes interiores y la base de un tubo de ensayo de 25 ml dando vuelta y agitando en un agitador orbital (rotación de agitación a 30 rpm durante 2 hs). Con una solución de ingrediente activo de 900 ppm y un área de superficie interna de 44,7 cm², dada una distribución homogénea, se logra una dosis basada en el área de 5 µg/cm².

Después de haber evaporado el disolvente, los tubos son poblados con 5-10 pulgas adultas de gatos (*Ctenocephalides felis*), se sellan con una tapa de plástico perforada y se incuban en una posición horizontal a temperatura ambiente y humedad ambiente. Después de 48 hs, se determina la eficacia. Para tal fin, los tubos de ensayo se dejan en posición vertical y las pulgas son tiradas a la base del tubo. Las pulgas que permanecen inmóviles en la base o se mueven de una manera no coordinada se considera que están muertas o moribundas.

Una sustancia muestra buena eficacia contra *Ctenocephalides felis* si se logró al menos 80% de eficacia en este ensayo a una tasa de aplicación de 5 µg/cm². 100% de eficacia significa que todas las pulgas estaban muertas o moribundas. 0% de eficacia significa que ninguna pulga había sido dañada.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 5 µg/cm² (= 500 g/ha): I-T3-1, I-T3-3, I-T3-7, I-T3-9, I-T3-17, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-

175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T3-199, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Ensayo de Amblyomma hebaraeum

Solvente: dimetilsulfóxido

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 10 mg de ingrediente activo se mezclan con 0,5 ml de dimetilsulfóxido y el concentrado se diluye con agua a la concentración deseada.

Ninfas de garrapatas (*Amblyomma hebraeum*) son colocadas en vasos con pico de plástico perforados y se sumergieron en la concentración deseada durante un minuto. Las garrapatas se transfieren a un papel de filtro en un disco de Petri y se almacenan en un gabinete de clima controlado.

Después de 42 días, se determina la mortalidad en %. 100% significa que todas las garrapatas murieron; 0% significa que ninguna garrapata murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-114, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-131, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-162, I-T3-163, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T4-3, I-T4-4

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 95% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-101

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-102, I-T3-103

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 85% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-105

[685] En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-53, I-T3-61, I-T3-111, I-T3-123

Boophilus microplus – ensayo de inyección

Solvente: dimetilsulfóxido

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 10 mg de ingrediente activo se mezclan con 0,5 ml de solvente y el concentrado es diluido con solvente a la concentración deseada.

1 µl de la solución de ingrediente activo es inyectada en el abdomen de 5 garrapatas hembras adultas de ganado vacuno llenas de sangre *(Boophilus microplus)*. Los animales son transferidos a discos y mantenidos en un ambiente de clima controlado.

La eficacia es evaluada después de 7 días por la postura de huevos fértiles. Los huevos que no son visiblemente fértiles son almacenados en un gabinete de clima controlado hasta que las larvas eclosionan después de aproximadamente 42 días. Una eficacia de 100% significa que ninguna

de las garrapatas ha puesto huevos fértiles; 0% significa que todos los huevos son fértiles.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 20 µg/animal: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-11, I-T3-12, I-T3-13, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-60, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-126, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-142, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-23-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-89, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 20 µg/animal: I-T3-75

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 20 µg/animal: I-T3-121

Boophilus microplus - ensayo de inmersión

Animales del ensayo: garrapatas del ganado vacuno (*Boophilus microplus)* cepa Parkhurst, resistente a SP

Solvente: dimetilsulfóxido

10 mg de ingrediente activo se disuelven en 0,5 ml de dimetilsulfóxido. Para el propósito de producir una formulación adecuada, la solución de ingrediente activo se diluye con agua a la concentración deseada en cada caso.

Esta formulación de ingrediente activo es pipeteada en tubos. 8-10 garrapatas hembras adultas llenas de sangre de ganado vacuno (*Boophilus microplus*) son transferidas a otro tubo con agujeros. El tubo es sumergido en la formulación de ingrediente activo y se mojaron completamente todas las garrapatas. Después que se agotó el líquido, las garrapatas son transferidas a discos de filtro en discos de plástico y almacenadas en un ambiente de clima controlado.

La eficacia es evaluada después de 7 días por la postura de huevos fértiles. Los huevos que no son visiblemente fértiles son almacenados en un gabinete de clima controlado hasta que las larvas eclosionan después de aproximadamente 42 días. Una eficacia de 100% significa que ninguna

de las garrapatas puso huevos fértiles; 0% significa que todos los huevos eran fértiles.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-39, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-48, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 98% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-111

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-99

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-27, I-T3-80

Ctenocephalides felis - ensayo oral

Solvente: dimetilsulfóxido

Para el propósito de producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 10 mg de ingrediente activo se mezclan con 0,5 ml de

dimetilsulfóxido. La dilución con sangre citrada de ganado vacuno da la concentración deseada.

Aproximadamente 20 pulgas adultas no alimentadas de gatos (*Ctenocephalides felis*) son colocadas en una cámara que es cerrada en la parte superior y la parte inferior con gasa. Un cilindro de metal cuyo extremo inferior está cerrado con parafilm es colocado sobre la cámara. El cilindro contiene la preparación de sangre/ingrediente activo, que puede ser embebida por las pulgas a través de la membrana de parafilm.

Después de 2 días, se determina la mortalidad en %. 100% significa que todas las pulgas murieron; 0% significa que ninguna pulga murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-135, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139,

I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 95% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-11, I-T3-17, I-T3-19, I-T3-41, I-T3-45, I-T3-70, I-T3-79, I-T3-82, I-T3-83, I-T22-6

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-15, I-T3-37, I-T3-60, I-T3-126, I-T3-144

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-13, I-T3-16, I-T3-36

Ensayo de Lucilia cuprina

Solvente: dimetilsulfóxido

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 10 mg de ingrediente activo se mezclan con 0,5 ml de dimetilsulfóxido y el concentrado es diluido con agua a la concentración deseada.

Aproximadamente 20 larvas L1 de la mosca miásica de la oveja australiana (*Lucilia cuprina*) son transferidas a un recipiente de ensayo que contiene carne de caballo picada y la preparación de ingrediente activo de la concentración deseada.

Después de 2 días, se determina la mortalidad en %. 100% significa que todas las larvas murieron; 0% significa que ninguna de las larvas murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 95% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-69

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-41, I-T3-60, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-127, I-T3-146

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-12, I-T3-75, I-T3-79, I-T3-121, I-T3-137

Ensayo de la Musca domestica

Solvente: dimetilsulfóxido

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 10 mg de ingrediente activo se mezclan con 0,5 ml de dimetilsulfóxido y el concentrado es diluido con agua a la concentración deseada.

Los recipientes que contienen una esponja tratada con una solución de azúcar y la formulación de ingrediente activo de la concentración deseada son pobladas con 10 moscas comunes adultas *(Musca domestica)*.

Después de 2 días, se determinó la mortalidad en %. 100% significa que todas las moscas murieron; 0% significa que ninguna mosca murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-29, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-77, I-T3-80, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-89, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162,

I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-2, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 95% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-51

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-30, I-T3-67, I-T3-76, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-139, I-T3-145, I-T22-6

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 100 ppm: I-T3-7, I-T3-66, I-T3-68, I-T3-79, I-T3-88, I-T3-105, I-T3-121, I-T3-129

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 20 ppm: I-T3-28

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 80% a una tasa de aplicación de 4 ppm: I-T3-35

Ensayo de Meloidogyne incognita

Solvente: 125,0 partes en peso de acetona

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 1 parte en peso de ingrediente activo se mezcla con la cantidad indicada de solvente y el concentrado es diluido con agua a la concentración deseada.

Se llenan recipientes con arena, solución de ingrediente activo, una suspensión de huevos/larvas del nematodo formador de agallas

(*Meloidogyne incognita*) y semillas de lechuga. Las semillas de lechuga germinan y se desarrollan las plantas. Las agallas se desarrollan en las raíces.

Después de 14 días, se determina la eficacia nematocida en % por la formación de agallas. 100% significa que no se hallaron agallas; 0% significa que el número de agallas en las plantas tratadas corresponde al control no tratado.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 20 ppm: I-T3-27, I-T3-28, I-T3-184, I-T3-185

Myzus persicae – ensayo de rociado

Solvente: 78 partes en peso de acetona y 1.5 partes en peso de dimetilformamida

Emulsionante: alquilarilpoliglicoléter

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 1 parte en peso de ingrediente activo se disuelve usando las partes en peso de solvente especificadas y se completa con agua que contiene una concentración de emulsionante de 1000 ppm hasta que se alcanza la concentración deseada. Para producir otras concentraciones de prueba, la preparación se diluye con agua que contiene emulsionante.

Discos de hojas de col china (*Brassica pekinensis*) infestadas con todas las etapas del áfido verde del durazno (*Myzus persicae*) son rociadas con una formulación de ingrediente activo de la concentración deseada.

Después de 6 días, se determinó la eficacia en %. 100% significa que todos los áfidos murieron; 0% significa que ninguno de los áfidos murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-20, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-110, I-T3-122, I-T3-185, I-T3-187

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 500 g/ha: I-T3-8, I-T3-21, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-42, I-T3-91, I-T3-97, I-T3-103, I-T3-105, I-T3-109, I-T3-114, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-186

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-27, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-77, I-T3-88, I-T3-99, I-T3-101, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-118, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-162, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-179, I-T3-184, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-5, I-T22-7

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-53, I-T3-64, I-T3-72, I-T3-76, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-85, I-T3-87, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-145, I-T3-160, I-T3-164, I-T3-163, I-T4-3

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 20 g/ha: I-T3-182, I-T4-2

Phaedon cochleariae – ensayo de rociado

Solvente: 78,0 partes en peso de acetona y 1,5 partes en peso de dimetilformamida

Emulsionante: alquilarilpoliglicoléter

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 1 parte en peso de ingrediente activo se disuelve usando las partes en peso de solvente especificadas y se completa con agua que contiene una concentración de emulsionante de 1000 ppm hasta que se alcanza la concentración deseada. Para producir otras concentraciones de ensayo, la preparación se diluye con agua que contiene emulsionante.

Discos de col china (*Brassica pekinensis*) son rociados con una formulación de ingrediente activo de la concentración deseada y, después de secar, son poblados con larvas de escarabajo de la mostaza (*Phaedon cochleariae*).

Después de 7 días, se determinó la eficacia en %. 100% significa que todas las larvas de escarabajo murieron; 0% significa que ninguna larva de escarabajo murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-

108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T3-188, I-T23-1, I-T23-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-153, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-T3-170, I-T3-171, I-T3-172, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-195, I-T3-197, I-T3-198, I-T3-220, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 83% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T3-138

Spodoptera frugiperda – ensayo de rociado

Solvente: 78,0 partes en peso de acetona y 1,5 partes en peso de dimetilformamida

Emulsionante: alquilarilpoliglicoléter

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 1 parte en peso de ingrediente activo se disuelve usando las partes en peso de solvente especificadas y se completa con agua que contiene una concentración de emulsionante de 1000 ppm hasta que se alcanza la concentración deseada. Para producir otras concentraciones de prueba, la preparación se diluye con agua que contiene emulsionante.

Discos de hojas de maíz (*Zea mays*) son rociadas con una formulación de ingrediente activo de la concentración deseada y, después de secar, son poblados con oruga militar tardía (*Spodoptera frugiperda*).

Después de 7 días, se determina la eficacia en %. 100% significa que todas las orugas murieron; 0% significa que ninguna oruga murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 83% a una tasa de aplicación de 500 g/ha: I-T3-101

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-198, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 83% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T3-35, I-T3-50, I-T3-169, I-T3-177

Tetranychus urticae – ensayo de rociado, resistente a OP

Solvente: 78,0 partes en peso de acetona y 1,5 partes en peso de dimetilformamida

Emulsionante: alquilarilpoliglicoléter

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, 1 parte en peso de ingrediente activo se disuelve usando las partes en peso de solvente especificadas y se completa con agua que contiene una concentración de emulsionante de 1000 ppm hasta que se alcanza la concentración deseada. Para producir otras concentraciones de prueba, la preparación se diluye con agua que contiene emulsionante.

Discos de hojas de poroto (*Phaseolus vulgaris*) infestados con todas las etapas de la araña roja de los invernaderos (*Tetranychus urticae*) son rociados con una formulación de ingrediente activo de la concentración deseada.

Después de 6 días, se determina la eficacia en %. 100% significa que todas las arañas rojas murieron; 0% significa que ninguna de las arañas rojas murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 500 g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-69, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 500 g/ha: I-T3-25, I-T3-65, I-T3-70, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-102, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-41, I-T3-51, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-

T3-95, I-T3-99, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-139, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90% a una tasa de aplicación de 100 g/ha: I-T3-50, I-T3-52, I-T3-71, I-T3-74, I-T3-111, I-T3-123, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-172, I-T3-195, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 100% a una tasa de aplicación de 20 g/ha: I-T3-49

Ensayo de Anopheles (tratamiento de superficie ANPHGB)

Solvente: acetona + 2000 ppm de éster metílico de aceite de colza (RME)

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, el ingrediente activo se disuelve en el solvente (2 mg/ml). La formulación de ingrediente activo es pipeteada sobre un azulejo esmaltado y, después que se secó, se colocan sobre el azulejo tratado mosquitos adultos de la especie Anopheles gambiae cepa RSPH (homocigota kdr). El tiempo de exposición es de 30 minutos.

24 horas después del contacto con la superficie tratada, se determina la mortalidad en %. 100% significa que todos los mosquitos murieron; 0% significa que ninguno de los mosquitos murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90-100% a una tasa de aplicación de 100 mg/m^2: I-T3-20, I-T3-24, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-112, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90-100% a una tasa de aplicación de 20 mg/m^2: I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-106, I-T3-112, I-T3-116, I-T3-130; I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-2

Ensayo de Anopheles (tratamiento de superficie ANPHFU)

Solvente: acetona + 2000 ppm de éster metílico del aceite de colza (RME)

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, el ingrediente activo se disuelve en el solvente (2 mg/ml). La formulación de ingrediente activo es pipeteda sobre un azulejo esmaltado y, después que se secó, se colocan sobre el azulejo tratado mosquitos adultos de la especie Anopheles funestus cepa FUMOZ-R (Hunt et al., Med Vet Entomol. 2005 Sep; 19(3):271-5). El tiempo de exposición es de 30 minutos.

24 horas después del contacto con la superficie tratada, se determina la mortalidad en %. 100% significa que todos los mosquitos murieron; 0% significa que ninguno de los mosquitos murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90-100% a una tasa de aplicación de 100 mg/m^2: I-T3-24, I-T3-25, I-T3-38, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-58, I-T3-63, I-T3-86, I-T3-92, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-123, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90-100% a una tasa de aplicación de 20 mg/m^2: I-T3-3, I-T3-24, I-T3-25, I-3-26, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-116, I-T3-123, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

Ensayo de Aedes (tratamiento de superficie AEDSAE)

Solvente: acetona + 2000 ppm de éster metílico del aceite de colza (RME)

Para producir una formulación de ingrediente activo apropiada, el ingrediente activo se disuelve en el solvente (2 mg/ml). La formulación de ingrediente activo es pipeteada sobre un azulejo esmaltado y, después que se secó, se colocaron sobre el azulejo tratado mosquitos adultos de la especie Aedes aegypti cepa MONHEIM. El tiempo de exposición es de 30 minutos.

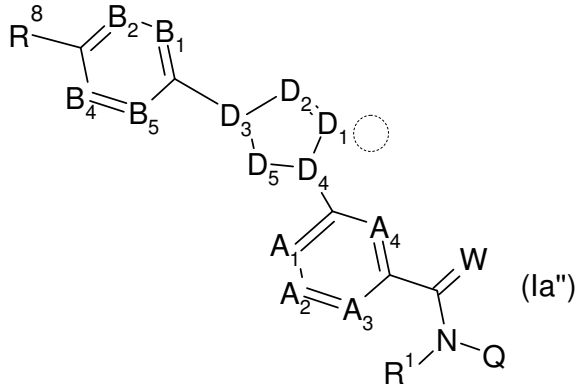
24 horas después del contacto con la superficie tratada, se determina la mortalidad en %. 100% significa que todos los mosquitos murieron; 0% significa que ninguno de los mosquitos murió.

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90-100% a una tasa de aplicación de 100 mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

En este ensayo, por ejemplo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación muestran una eficacia del 90-100% a una tasa de aplicación de 20 mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T-93, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

REIVINDICACIONES

1. Compuestos de la fórmula (Ia")



(Ia")

donde

D_1 es C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N y O;

D_2 es C-R^{11} o un heteroátomo seleccionado de N y O;

D_3 es C o N;

D_4 es C o N;

D_5 es C-R^{11} o N;

donde como máximo uno (1) o dos restos seleccionados de D_1, D_2, D_3, D_4 y D_5 son un heteroátomo;

es un sistema aromático; y

R^1 es H, en cada caso alquenilo C_2-C_6, alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_7, alquil C_1-C_6-carbonilo, alcoxi C_1-C_6-carbonilo, aril-alquilo (C_1-C_3) o heteroaril-alquilo (C_1-C_3);

los siguientes restos son los siguientes:

A_1 es CR^2 o N,

A_2 es CR^3 o N,

A_3 es CR^4 o N,

A_4 es CR^5 o N,

B_1 es CR^6 o N,

B_2 es CR^7 o N,

B_4 es CR^9 o N, y

B_5 es CR^{10} o N,

pero no más de tres de los restos A_1 a A_4 son N y no más de tres de los restos B_1 a B_5 son simultáneamente N;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 y R^{10} son cada uno, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino, *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino o *N*-alcoxi C_1-C_3-alquil C_1-C_4-amino o 1-pirrolidinilo;

si ninguno de los restos A_2 y A_3 es N, R^3 y R^4, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 5 ó 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de N y/o 0 ó 1 átomo de O y/o 0 ó 1 átomo de S o

si ninguno de los restos A_1 y A_2 es N, R^2 y R^3, junto con el átomo de carbono al que están unidos, pueden formar un anillo de 6 miembros que contiene 0, 1 ó 2 átomos de N;

R^8 es halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, *N*-alquil C_1-C_6-amino o *N,N*-di-alquil C_1-C_6-amino;

R^{11} es, de modo independiente, H, halógeno, ciano, nitro, amino o en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, alquil C_1-C_6-oxi, alquil C_1-C_6-carbonilo, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo, con preferencia, H;

W es O o S;

Q es H, formilo, hidroxilo, amino o en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C_1-C_6, alquenilo C_2-C_6, alquinilo C_2-C_6, cicloalquilo C_3-C_6, heterocicloalquilo C_1-C_5, alcoxi C_1-C_4, alquil C_1-C_6-cicloalquilo C_3-C_6, cicloalquil C_3-C_6-alquilo C_1-C_6, arilo C_6-,C_{10}-C_{14}, heteroarilo C_1-C_5, C_6-,C_{10}-,C_{14}-aril-alquilo (C_1-C_3), heteroaril C_1-C_5-alquilo (C_1-C_3), *N*-alquil C_1-C_4-amino, *N*-alquil C_1-C_4-carbonilamino o *N,N*-di-alquil C_1-C_4-amino; o

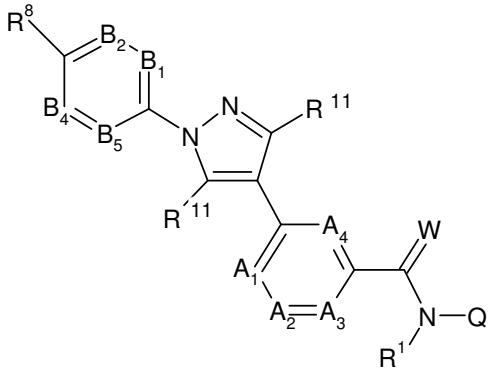
es un carbociclo de 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido; o

es un anillo heterocíclico de 4, 5 ó 6 miembros insaturado opcionalmente poli-V-sustituido, donde

V es, de modo independiente, halógeno, ciano, nitro, en cada caso opcionalmente sustituido alquilo C1-C6, alquenilo C_1-C_4, alquinilo C_1-C_4, cicloalquilo C_3-C_6, alcoxi C_1-C_6, *N*-alcoxi C_1-C_6-imino-alquilo C_1-C_3, alquil C_1-C_6-sulfanilo, alquil C_1-C_6-sulfinilo, alquil C_1-C_6-sulfonilo o *N,N*-di-(alquil C_1-C_6)amino;

así como sus sales, N-óxidos y formas tautoméricas de los compuestos de la fórmula (Ia").

2. Compuestos de acuerdo con la reivindicación 1, en donde los compuestos de la fórmula (Ia") son compuestos de la fórmula (I-T3)

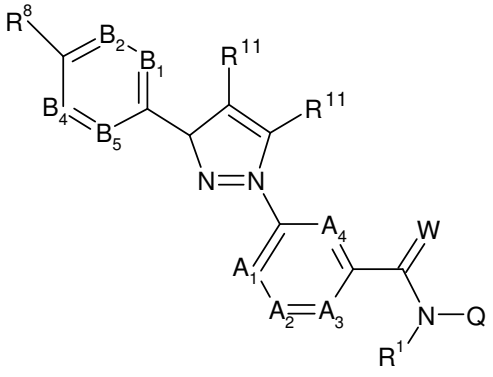


(I-T3)

en donde

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se define en la reivindicación 1, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

3. Compuestos de acuerdo con la reivindicación 1, en donde los compuestos de la fórmula (Ia'') son compuestos de la fórmula (I-T2)

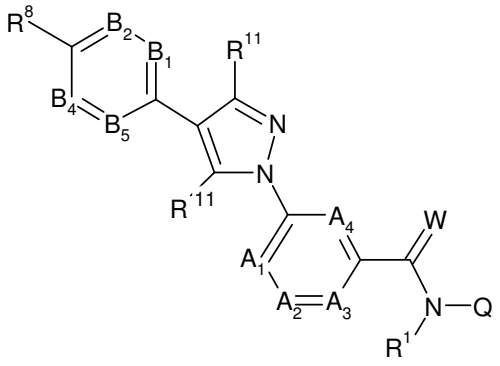


(I-T2)

donde

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se define en la reivindicación 1, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

4. Compuestos de acuerdo con la reivindicación 1, en donde los compuestos de la fórmula (Ia'') son compuestos de la fórmula (I-T4)

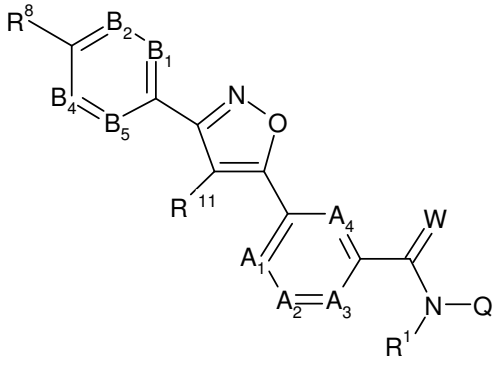


(I-T4)

donde

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se define en la reivindicación 1, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

5. Compuestos de acuerdo con la reivindicación 1, en donde los compuestos de la fórmula (Ia'') son compuestos de la fórmula (I-T22)



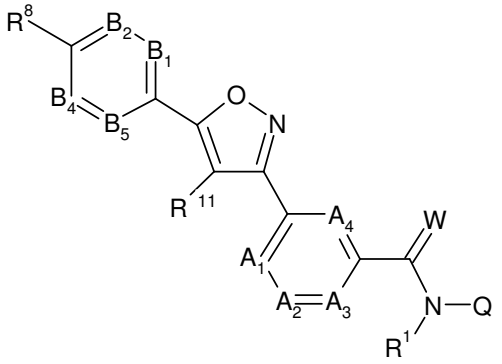
(T-22)

donde

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se define en la reivindicación 1, donde como máximo un resto

seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

6. Compuestos de acuerdo con la reivindicación 1, en donde los compuestos de la fórmula (Ia'') son compuestos de la fórmula (I-T23)

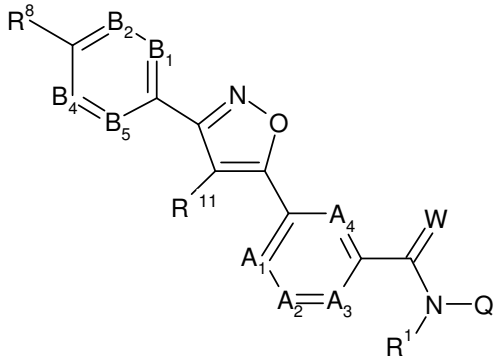


(I-T23)

donde

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se define en la reivindicación 1, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

7. Compuestos de acuerdo con la reivindicación 1, en donde los compuestos de la fórmula (Ia'') son compuestos de la fórmula (I-T46)



(I-T46)

donde

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q y W son cada uno como se define en la reivindicación 1, donde como máximo un resto seleccionado de A_1, A_2, A_3, A_4 es N y como máximo un resto seleccionado de B_1, B_2, B_3, B_4 y B_5 es N.

8. Compuestos de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7, en la que R^{11} es, de modo independiente, H y W es O.

9. Compuestos de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8, en la que R^{11} es, de modo independiente, H y W es O y B_3 es C-R^8, R^8 es alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno o alcoxi C_1-C_3 sustituido con halógeno.

10. Compuesto de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 9, en donde los restos A_1 a A_4 y B_1 a B_5 son los siguientes:

    A_1 es C-H,

    A_2 es CR^3 o N,

    A_3 es CR^4,

    A_4 es C-H,

    B_1 es CR^6 o N,

    B_2 es C-H,

    B_3 es CR^8,

    B_4 es C-H y

    B_5 es CR^{10} o N.

11. Compuestos de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 10, en la que R^1 es H.

12. Compuestos de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 11, en donde Q es alquilo C_1-C_3, ciclopropilo, 1-(ciano)ciclopropilo, 1-

(alquil C_1-C_3 perfluorado)ciclopropilo, 1-(alquil C_1-C_4)ciclopropilo, 1-(tiocarbamoil)ciclopropilo, alquilo C_1-C_3 sustituido con halógeno, tietan-3-ilo, N-metilpirazol-3-ilo o 2-oxo-2(2,2,2-trifluoroetilamino)etilo.

13. Compuestos de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12, en la que R^8 es alcoxi C_1-C_4 sustituido con flúor o alquilo C_1-C_4 sustituido con flúor.
14. Agente insecticida, caracterizado por un contenido de al menos un compuesto de la fórmula (I) de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 13 y un extensor y/o una sustancia tensioactiva.

From the INTERNATIONAL BUREAU

PCT

NOTIFICATION OF THE RECORDING OF A CHANGE

(PCT Rule 92*bis*.1 and Administrative Instructions, Section 422)

To:

BIP PATENTS
c/o Bayer Intellectual Property GmbH
Alfred-Nobel-Str. 10
40789 Monheim am Rhein
ALLEMAGNE

Date of mailing *(day/month/year)*
18 April 2016 (18.04.2016)

Applicant's or agent's file reference
BCS13-3092WO

IMPORTANT NOTIFICATION

International application No.
PCT/EP2014/073795

International filing date *(day/month/year)*
05 November 2014 (05.11.2014)

1. The following indications appeared on record concerning:

☐ the applicant ☒ the inventor ☐ the agent ☐ the common representative

Name and Address
HAHN, Julia Johanna
Benrather Schloßallee 17a
40597 Düsseldorf
Germany

State of Nationality | State of Residence

Telephone No.

Facsimile No.

E-mail address

2. The International Bureau hereby notifies the applicant that the following change has been recorded concerning:

☐ the person ☐ the name ☒ the address ☐ the nationality ☐ the residence

Name and Address
HAHN, Julia Johanna
Einsteinstr. 38
40598 Düsseldorf
Germany

State of Nationality | State of Residence

Telephone No.

Facsimile No.

E-mail address
☐ Notifications by e-mail authorized

3. Further observations, if necessary:

4. A copy of this notification has been sent to:

☒ the receiving Office
☒ the International Searching Authority
☐ the Authority(ies) specified for supplementary search
☐ the International Preliminary Examining Authority
☒ the designated Offices concerned
☐ the elected Offices concerned
☐ other:

The International Bureau of WIPO
34, chemin des Colombettes
1211 Geneva 20, Switzerland

Facsimile No. +41 22 338 89 70

Authorized officer
Wimmer Peter
e-mail pt06.pct@wipo.int
Telephone No. +41 22 338 74 06

From the INTERNATIONAL BUREAU

PCT

NOTIFICATION OF THE RECORDING OF A CHANGE

(PCT Rule 92*bis*.1 and Administrative Instructions, Section 422)

To:

BIP PATENTS
c/o Bayer Intellectual Property GmbH
Alfred-Nobel-Str. 10
40789 Monheim am Rhein
ALLEMAGNE

Date of mailing *(day/month/year)*
18 April 2016 (18.04.2016)

Applicant's or agent's file reference
BCS13-3092WO

IMPORTANT NOTIFICATION

International application No.
PCT/EP2014/073795

International filing date *(day/month/year)*
05 November 2014 (05.11.2014)

1. The following indications appeared on record concerning:

☐ the applicant ☒ the inventor ☐ the agent ☐ the common representative

Name and Address
BÖHNKE, Niels
Angerstr. 20
40593 Düsseldorf
Germany

State of Nationality | State of Residence

Telephone No.

Facsimile No.

E-mail address

2. The International Bureau hereby notifies the applicant that the following change has been recorded concerning:

☐ the person ☐ the name ☒ the address ☐ the nationality ☐ the residence

Name and Address
BÖHNKE, Niels
Sächsische Str. 41
10713 Berlin
Germany

State of Nationality | State of Residence

Telephone No.

Facsimile No.

E-mail address
☐ Notifications by e-mail authorized

3. Further observations, if necessary:

4. A copy of this notification has been sent to:

☒ the receiving Office
☒ the International Searching Authority
☐ the Authority(ies) specified for supplementary search
☐ the International Preliminary Examining Authority
☒ the designated Offices concerned
☐ the elected Offices concerned
☐ other:

The International Bureau of WIPO
34, chemin des Colombettes
1211 Geneva 20, Switzerland

Facsimile No. +41 22 338 89 70

Authorized officer
Wimmer Peter
e-mail pt06.pct@wipo.int
Telephone No. +41 22 338 74 06

From the INTERNATIONAL BUREAU

PCT

NOTIFICATION OF THE RECORDING OF A CHANGE

(PCT Rule 92*bis*.1 and Administrative Instructions, Section 422)

To:

BIP PATENTS
c/o Bayer Intellectual Property GmbH
Alfred-Nobel-Str. 10
40789 Monheim am Rhein
ALLEMAGNE

Date of mailing *(day/month/year)*
18 April 2016 (18.04.2016)

Applicant's or agent's file reference
BCS13-3092WO

IMPORTANT NOTIFICATION

International application No.
PCT/EP2014/073795

International filing date *(day/month/year)*
05 November 2014 (05.11.2014)

1. The following indications appeared on record concerning:

☒ the applicant ☐ the inventor ☐ the agent ☐ the common representative

Name and Address
BAYER CROPSCIENCE AG
Alfred-Nobel-Str. 50
40789 Monheim
Germany

State of Nationality: DE
State of Residence: DE
Telephone No.:
Facsimile No.:
E-mail address:

2. The International Bureau hereby notifies the applicant that the following change has been recorded concerning:

☐ the person ☒ the name ☒ the address ☐ the nationality ☐ the residence

Name and Address
BAYER CROPSCIENCE AKTIENGESELLSCHAFT
Alfred-Nobel-Str. 50
40789 Monheim am Rhein
Germany

State of Nationality: DE
State of Residence: DE
Telephone No.:
Facsimile No.:
E-mail address:
☐ Notifications by e-mail authorized

3. Further observations, if necessary:

4. A copy of this notification has been sent to:

☒ the receiving Office
☒ the International Searching Authority
☐ the Authority(ies) specified for supplementary search
☐ the International Preliminary Examining Authority
☒ the designated Offices concerned
☐ the elected Offices concerned
☐ other:

The International Bureau of WIPO
34, chemin des Colombettes
1211 Geneva 20, Switzerland

Facsimile No. +41 22 338 89 70

Authorized officer
Wimmer Peter
e-mail pt06.pct@wipo.int
Telephone No. +41 22 338 74 06

LISTA DE INVENTORES

PCT/EP2014/073795

Werner HALLENBACH
Lichtenberger Str. 68,
40789 Monheim
Alemania
Nacionalidad alemana

Hans-Georg SCHWARZ
Auf dem Beerenkamp 82b,
46282 Dorsten
Alemania
Nacionalidad alemana

Kerstin ILG
Neusser Wall 32
50670 Köln
Alemania
Nacionalidad alemana

Ulrich GÖRGENS
Fester Str. 37,
40882 Ratingen
Alemania
Nacionalidad alemana

Johannes KÖBBERLING
Azalienstr. 30
41466 Neuss
Alemania
Nacionalidad alemana

Andreas TURBERG
Sinterstr. 86
42781 Haan
Alemania
Nacionalidad alemana

Niels BÖHNKE
Sächsische Str. 41,
10713 Berlin
Alemania
Nacionalidad alemana

Michael MAUE
Brunnenstr. 18a
40764 Langenfeld
Alemania
Nacionalidad alemana

Robert VELTEN
Heerstr. 17,
40764 Langenfeld
Alemania
Nacionalidad alemana

Tobias HARSCHNECK
Am Botanischen Garten 11,
40225 Düsseldorf
Alemania
Nacionalidad alemana

Julia Johanna HAHN
Einsteinstr. 38
40598 Düsseldorf
Alemania
Nacionalidad alemana

Sebastian HORSTMANN
Ober dem Hof 11
51381 Leverkusen
Alemania
Nacionalidad alemana

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2014/073795

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. C07D231/12 A01N43/56 A01N43/72 C07D261/08 A01P7/00
C07D401/04 C07D403/04 C07D207/337 A01N43/80
ADD.
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07D A01N A01P

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
EPO-Internal, WPI Data, CHEM ABS Data, BEILSTEIN Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	GABRIEL G GAMBER ET AL: "3,5-Diarylazoles as novel and selective inhibitors of protein kinase D", BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS, PERGAMON, GB, vol. 21, no. 5, 6 January 2011 (2011-01-06), pages 1447-1451, XP028144502, ISSN: 0960-894X, DOI: 10.1016/J.BMCL.2011.01.014 [retrieved on 2011-01-11] page 1448; compound 16 Scheme 5; page 1449; compounds 22a-d,24a-c page 1450; table 2; compounds ----- -/--	1,14

[X] Further documents are listed in the continuation of Box C.

[X] See patent family annex.

* Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
25 November 2014	17/12/2014

Name and mailing address of the ISA/	Authorized officer
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Stix-Malaun, Elke

2

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (April 2005)

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2011/009484 A1 (NOVARTIS AG [CH]; CAPPARELLI MICHAEL PAUL [US]; GAMBER GABRIEL G [US];) 27 January 2011 (2011-01-27) page 91 - page 92; examples page 98 - page 102; examples page 105 - page 111; examples page 117 - page 119; examples page 135 - page 140; examples page 121; examples page 142 - page 156; examples page 158 - page 159; examples claims	1,14
X	WO 03/087061 A1 (PFIZER PHARMA [JP]; HIRANO MISATO [JP]; NAKAO KAZUNARI [JP]; NUKUI SEI) 23 October 2003 (2003-10-23) page 112 - page 117; examples 59-62 claims steps; compounds	1,14
X	LOUNKINE EUGEN ET AL: "Chemotography for multi-target SAR analysis in the context of biological pathways", BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY, vol. 20, no. 18, 20 February 2012 (2012-02-20), pages 5416-5427, XP028938241, ISSN: 0968-0896, DOI: 10.1016/J.BMC.2012.02.034 page 5425; compound 6m	1,14
X	DATABASE CA [Online] CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE, COLUMBUS, OHIO, US; BALLELL, LLUIS ET AL: "Fueling Open-Source Drug Discovery: 177 Small-Molecule Leads against Tuberculosis", XP002732971, retrieved from STN Database accession no. 2013:56758 abstract	1,14
A	WO 2013/041602 A1 (BAYER IP GMBH [DE]) 28 March 2013 (2013-03-28) examples claims	1-14
A	WO 2012/175474 A1 (SYNGENTA PARTICIPATIONS AG [CH]; JUNG PIERRE JOSEPH MARCEL [CH]; HUETE) 27 December 2012 (2012-12-27) cited in the application examples claims	1-14

2

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/EP2014/073795

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2011009484 A1	27-01-2011	NONE	
WO 03087061 A1	23-10-2003	AU 2003216581 A1	27-10-2003
		BR 0309188 A	09-02-2005
		CA 2482382 A1	23-10-2003
		EP 1495005 A1	12-01-2005
		JP 2005532291 A	27-10-2005
		MX PA04009960 A	13-12-2004
		US 2004019045 A1	29-01-2004
		WO 03087061 A1	23-10-2003
WO 2013041602 A1	28-03-2013	AR 087971 A1	30-04-2014
		CN 103929964 A	16-07-2014
		EP 2757886 A1	30-07-2014
		US 2014329684 A1	06-11-2014
		WO 2013041602 A1	28-03-2013
WO 2012175474 A1	27-12-2012	NONE	

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro

(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
14. Mai 2015 (14.05.2015)

WIPO | PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2015/067647 A1

(51) Internationale Patentklassifikation:
C07D 231/12 (2006.01) *C07D 401/04* (2006.01)
A01N 43/56 (2006.01) *C07D 403/04* (2006.01)
A01N 43/72 (2006.01) *C07D 207/337* (2006.01)
C07D 261/08 (2006.01) *A01N 43/80* (2006.01)
A01P 7/00 (2006.01)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2014/073795

(22) Internationales Anmeldedatum:
5. November 2014 (05.11.2014)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:
13191610.8 5. November 2013 (05.11.2013) EP
14181149.7 15. August 2014 (15.08.2014) EP

(71) Anmelder: **BAYER CROPSCIENCE AG** [DE/DE]; Alfred-Nobel-Str. 50, 40789 Monheim (DE).

(72) Erfinder: **HALLENBACH, Werner**; Lichtenberger Str. 68, 40789 Monheim (DE). **SCHWARZ, Hans-Georg**; Auf dem Beerenkamp 82b, 46282 Dorsten (DE). **ILG, Kerstin**; Nanssar Wall 32, 50670 Köln (DE). **GÖRGENS, Ulrich**; Fester Str. 37, 40882 Ratingen (DE). **KÖBBERLING, Johannes**; Azalienstr. 30, 41466 Neuss (DE). **TURBERG, Andreas**; Sinterstr. 86, 42781 Haan (DE). **BÖHNKE, Niels**; Angerstr. 20, 40593 Düsseldorf (DE). **MAUE, Michael**; Brunnenstr. 18a, 40764 Langenfeld (DE). **VELTEN, Robert**; Hoerstr. 17, 40764 Langenfeld (DE). **HARSCHNECK, Tobias**; Am Botanischen Garten 12, 40225 Düsseldorf (DE). **HAHN, Julia Johanna**; Benrather Schloßallee 17a, 40597 Düsseldorf (DE). **HORSTMANN, Sebastian**; Ober dem Hof 11, 51381 Leverkusen (DE).

(74) Anwalt: **BIP PATENTS**; c/o Bayer Intellectual Property GmbH, Alfred Nobel Str. 10, 40789 Monheim am Rhein (DE).

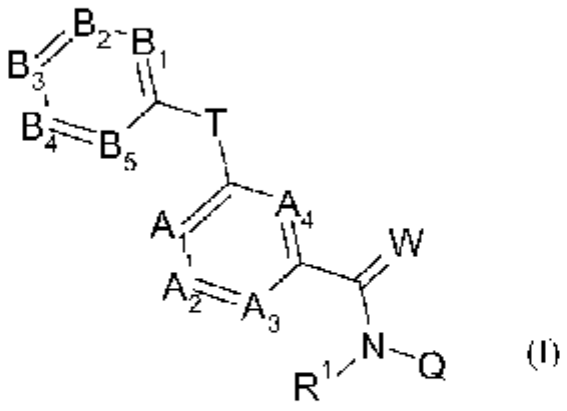
(81) Bestimmungsstaaten *(soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart)*: AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) Bestimmungsstaaten *(soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart)*: ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST,

(Fortsetzung auf der nächsten Seite)

(54) Title: SUBSTITUTED BENZAMIDES FOR THE TREATMENT OF ARTHROPODS

(54) Bezeichnung : SUBSTITUIERTE BENZAMIDE ZUR BEHANDLUNG VON ARTHROPODEN



(I)

(57) Abstract. The invention relates, inter alia, to compounds of general formula (I), where the groups A_1-A_4, T, n, W, Q, R^1 and B_1-B_5 have the meanings indicated in the description. Also described are methods for producing the compounds of formula (I). The compounds of the invention are particularly suitable for controlling insects, arachnids and nematodes in agriculture and ectoparasites in veterinary medicine.

(57) Zusammenfassung: Die Erfindung umfasst unter anderem Verbindungen der allgemeinen Formel (I), in denen die Reste A_1-A_4, T, n, W, Q, R^1 und B_1-B_5 die in der Beschreibung aufgeführten Bedeutungen haben. Ferner werden Verfahren zur Herstellung der Verbindungen der Formel (I) beschrieben. Die erfindungsgemäßen Verbindungen eignen sich insbesondere zur Bekämpfung von Insekten, Spinnentieren und Nematoden in der Landwirtschaft sowie von Ektoparasiten in der Veterinärmedizin.

WO 2015/067647 A1

SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), europäisches (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

— *mit internationalem Recherchenbericht (Artikel 21 Absatz 3)*

SUBSTITUIERTE BENZAMIDE ZUR BEHANDLUNG VON ARTHROPODEN

Einleitung

[0001] Die vorliegende Anmeldung betrifft trifluor neue Verbindungen, Verfahren zu ihrer Herstellung und ihre Verwendung zur Bekämpfung von tierischen Schädlingen, vor allem von Arthropoden und insbesondere von Insekten, Spinnentieren und Nematoden.

[0002] Es ist bekannt, dass bestimmte Halogen-substituierte Verbindungen insektizid wirksam sind (EP 1 911 751, WO2012/069366, WO2012/080376, WO2012/107434 und WO2012/175474).

[0003] WO 2011/113756 offenbart Triazol Derivate, die insektizidale Wirkung aufweisen.

[0004] Ferner ist bekannt, dass bestimmte Halogen-substituierte Verbindungen Cytokin-inhibitorische Aktivitäten aufweisen (WO 2000/07980).

[0005] Moderne Pflanzenschutzmittel müssen vielen Anforderungen genügen, beispielsweise in Bezug auf Höhe, Dauer und Breite ihrer Wirkung und möglichen Verwendung. Es spielen Fragen der Toxizität, der Kombinierbarkeit mit anderen Wirkstoffen oder Formulierhilfsmitteln eine Rolle sowie die Frage des Aufwands, der für die Synthese eines Wirkstoffs betrieben werden muss. Ferner können Resistenzen auftreten. Aus all diesen Gründen kann die Suche nach neuen Pflanzenschutzmitteln nie als abgeschlossen betrachtet werden und es besteht ständig Bedarf an neuen Verbindungen mit gegenüber den bekannten Verbindungen zumindest in Bezug auf einzelne Aspekte verbesserten Eigenschaften.

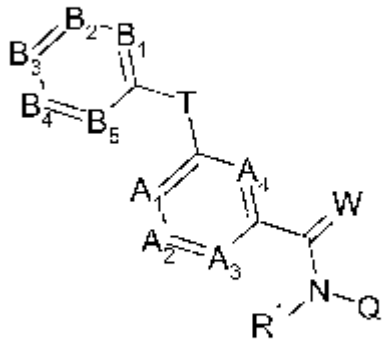
[0006] Aufgabe der vorliegenden Erfindung war es, Verbindungen bereitzustellen, durch die das Spektrum der Schädlingsbekämpfungsmittel unter verschiedenen Aspekten verbreitert und/oder ihre Aktivität verbessert wird.

[0007] Es wurde nun überraschenderweise gefunden, dass bestimmte Halogen-substituierte Verbindungen sowie deren Salze biologische Eigenschaften aufweisen und sich insbesondere zur Bekämpfung von tierischen Schädlingen eignen, und deshalb besonders gut im agrochemischen Bereich und im Bereich der Tiergesundheit einsetzbar sind.

[0008] Ähnliche Verbindungen sind bereits aus WO 2010/051926 bekannt geworden.

Zusammenfassung

[0009] Es wurden nun neue insektizid, akarizid und/oder parasitizid wirksame Halogen-substituierten Verbindungen der allgemeine Formel (I) gefunden:



(I)

worin

R^1 für H, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_2-C_6-Alkenyl, C_3-C_6-Alkinyl, C_3-C_7-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkoxycarbonyl, Aryl(C_1-C_3)-alkyl, Heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl steht oder für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht, bevorzugt für H steht oder bevorzugt für C_1-C_3-Alkyl steht, ganz besonders bevorzugt für H steht oder Methyl, insbesondere für H steht,

die Gruppierungen

A_1 für CR^2 oder N,

A_2 für CR^3 oder N,

A_3 für CR^4 oder N,

A_4 für CR^5 oder N,

B_1 für CR^6 oder N,

B_2 für CR^7 oder N,

B_3 für CR^8 oder N,

B_4 für CR^9 oder N, und

B_5 für CR^{10} oder N stehen,

wobei aber nicht mehr als drei der Gruppierungen A_1 bis A_4 für N und nicht mehr als drei der Gruppierungen B_1 bis B_5 für N stehen:

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, N-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, N-C_1-C_6-Alkylamino, N,N-Di-C_1-C_6-alkylamino oder N-C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-Alkylamino oder 1-Pyrrolidinyl stehen:

wenn keine der Gruppierungen A_2 und A_3 für N steht, können R^3 und R^4 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 5- oder 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome und/oder 0 oder 1 O Atom und/oder 0 oder 1 S Atom enthält; oder

wenn keine der Gruppierungen A¹ und A² für N steht, können R^4 und R^5 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome enthält:

R^6 für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino oder *N*,*N*-Di-C_1-C_6-alkylamino, steht;

W für O oder S steht;

Q für H, Formyl, Hydroxy, Amino oder jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_3-C_5-Heterocycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_6-Alkyl-C_3-C_6-cycloalkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Aryl, C_1-C_5-Heteroaryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Aryl-(C_1-C_3)-alkyl, C_1-C_5-Heteroaryl-(C_1-C_3)-alkyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N*-C_1-C_4-Alkylcarbonylamino, oder *N*,*N*-Di-C_1-C_4-alkylamino steht; oder

für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 6-gliedrigen Carbozyklus steht; oder

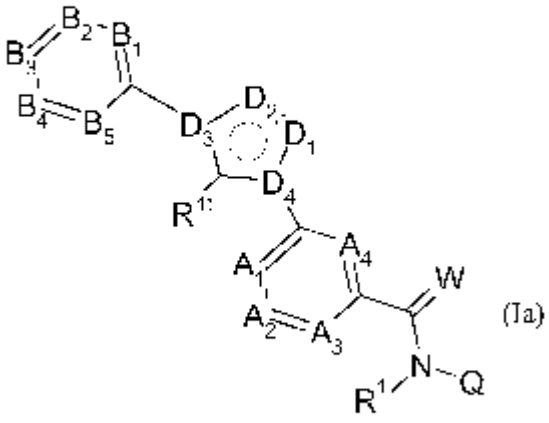
für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei

V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, oder *N*,*N*-Di-(C_1-C_6-alkyl)amino steht;

T für einen gegebenenfalls substituierten 5-gliedrigen Heteroaromaten enthaltend maximal 2 Heteroatome (1 oder 2 Heteroatome), wie vier C-Atome und ein (1) Heteroatom, bevorzugt ein (1) N-, ein (1) O- oder ein (1) S-Atom oder drei C-Atome und zwei Heteroatome, bevorzugt zwei N-Atome, ein (1) N- und ein (1) O-, oder ein (1) N- und ein (1) S-Atom, steht,

sowie Salze, N-Oxide und tautomere Formen der Verbindungen der Formel (I).

[0010] Ein Aspekt der vorliegenden Erfindung bezieht sich auf Verbindungen der Formel (Ia)



(Ia)

worin

die Gruppierungen D_1, D_2 jeweils unabhängig voneinander für C-$R^{1'}$ oder ein Heteroatom ausgewählt aus N und O, stehen;

die Gruppierungen D_3 und D_4 unabhängig voneinander für C oder für ein Heteroatom ausgewählt aus N stehen (in anderen Worten, die Gruppierungen D_3 und D_4 unabhängig voneinander für C oder N stehen);

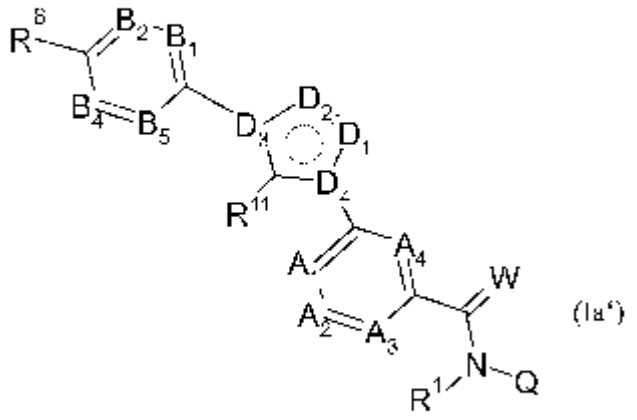
wobei maximal ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom steht/stehen, wobei ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O im Fall von D_1 und D_2, oder N im Fall von D_3 und D_4 stehen;

 für ein aromatisches System steht; und

$R^{1'}$, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^1, W, Q, V, und T wie hierin beschrieben definiert sind, wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht,

sowie Salze, N-Oxide und tautomere Formen der Verbindungen der Formel (I).

[0011] Eine Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen der Formel (Ia')



(Ia')

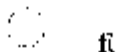
worin

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 und B_5 wie hierin beschrieben definiert sind, wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4 für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4 und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht;

D_1 und D_2 jeweils unabhängig voneinander für C-R^{11} oder ein Heteroatom stehen, bevorzugt für C-R^{11} oder ein Heteroatom ausgewählt aus N, O oder S, besonders bevorzugt für C-R^{11} oder ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O, stehen;

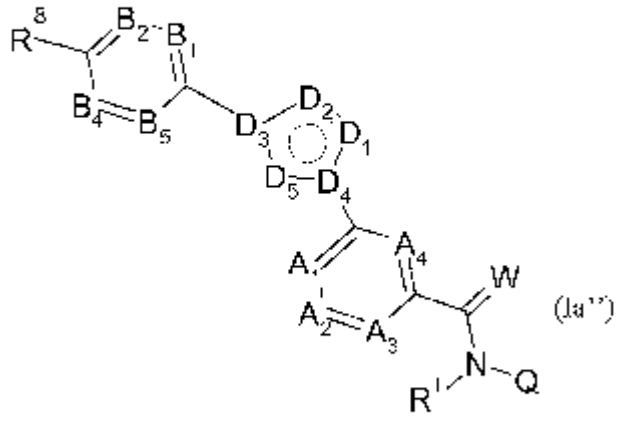
die Gruppierungen D_3 und D_4 unabhängig voneinander für C oder für ein Heteroatom ausgewählt aus N stehen;

wobei maximal ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom steht/stehen, wobei ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O im Fall von D_1 und D_2, oder N im Fall von D_3 und D_4 stehen;

 für ein aromatisches System steht

und R^5 wie hierin definiert ist, bevorzugt für perfluoriertes C_1-C_4-Alkyl steht.

[0012] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen der Formel (Ia'')



(Ia'')

worin

D_1 für C-$R^{1'}$ oder ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O steht;

D_2 für C-$R^{1'}$ oder ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O steht;

D_3 für C oder N steht;

D_4 für C, oder N steht;

D_5 für C-$R^{1'}$ oder N steht;

wobei maximal ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3, D_4 und D_5 für ein Heteroatom stehen;

 für ein aromatisches System steht; und

$R^{1'}$ für H, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_7-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkoxycarbonyl, Aryl(C_1-C_3)-alkyl, oder Heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl steht oder für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht, besonders bevorzugt für H steht;

die Gruppierungen

A_1 für CR^2 oder N,

A_2 für CR^3 oder N,

A_3 für CR^4 oder N,

A_4 für CR^5 oder N ,

B_1 für CR^6 oder N,

B_2 für CR^7 oder N,

B_3 für CR^8 oder N,

B_4 für CR^9 oder N, und

B_5 für CR^{10} oder N stehen,

wobei aber nicht mehr als drei der Gruppierungen A_1 bis A_6 für N und nicht mehr als drei der Gruppierungen B_1 bis B_5 gleichzeitig für N stehen;

R^2, R^5, R^4, R^3, R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_2-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino oder *N,N*-Di-C_1-C_6-alkylamino, stehen;

wenn keine der Gruppierungen A_2 und A_3 für N steht, können R^5 und R^4 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 5- oder 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome und/oder 0 oder 1 O-Atom und/oder 0 oder 1 S-Atom enthält, oder

wenn keine der Gruppierungen A_1 und A_6 für N steht, können R^2 und R^3 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome enthält;

R^8 für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_2-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino oder *N,N*-Di-C_1-C_6-alkylamino, steht;

R^1 unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, Amino oder ein gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_6-Alkyloxy, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, bevorzugt für H, steht;

W für O oder S steht;

Q für H, Formyl, Hydroxy, Amino oder jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_5-Heterocycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_6-Alkyl-C_3-C_6-cycloalkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-,C_{10}-,C_{12}-Aryl, C_1-C_5-Heteroaryl, C_6-,C_{10}-,C_{12}-Aryl-(C_1-C_2)-alkyl, C_1-C_5-Heteroaryl-(C_1-C_2)-alkyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N*-C_1-C_7-Alkylcarbonylamino, oder *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino steht; oder

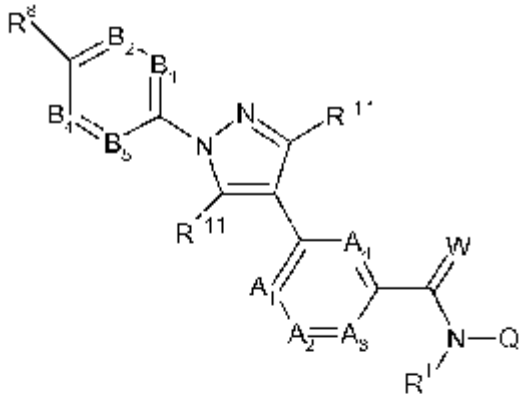
für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 6-gliedrigen Carbozyklus steht; oder

für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei

V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_4-Alkenyl, C_1-C_4-Alkinyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, oder *N*,*N*-Di-(C_1-C_6-alkyl)amino steht.

sowie Salze, N-Oxide und tautomere Formen der Verbindungen der Formel (Ia'').

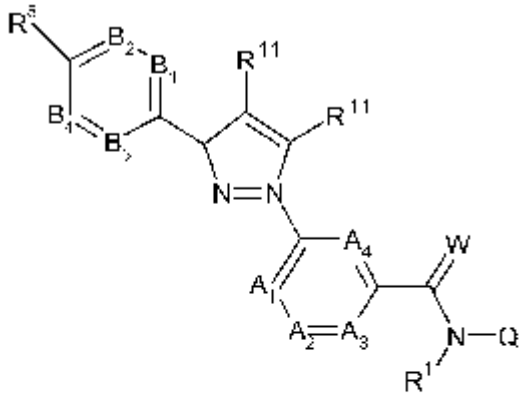
[0013] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen der Formel (Ia''), wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T3) darstellen



(I-T3)

worin R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht,

[0014] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen der Formel (Ia''), wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T2) darstellen

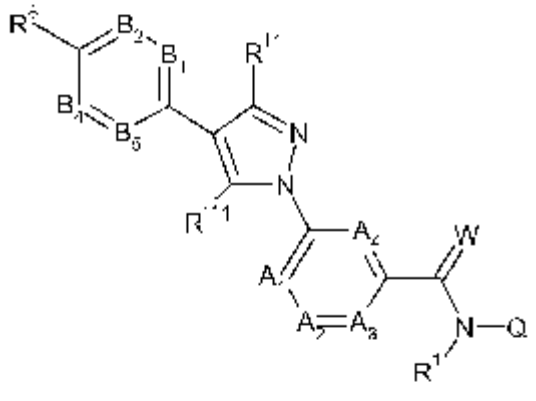


(I-T2)

worin R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung

ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

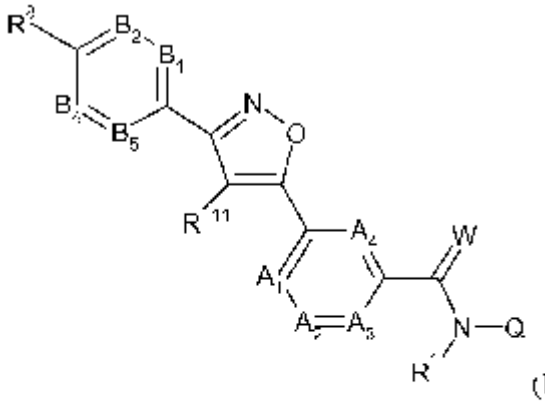
[0015] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen der Formel (Ia''), wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T4) darstellen



(I-T4)

worin R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, $R^{1'}$, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

[0016] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen der Formel (Ia''), wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T22) darstellen

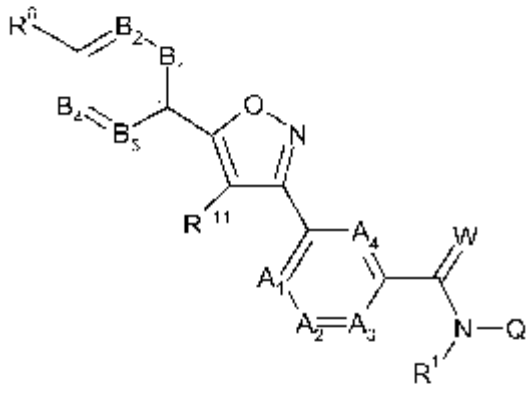


(I-T-22)

worin R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, $R^{1'}$, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung

ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

[0017] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen der Formel (Ia''), wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T23) darstellen



(I-T23)

worin R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

[0018] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln und Ausführungsformen, wobei R^{11} unabhängig voneinander für H steht und W für O steht.

[0019] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln und Ausführungsformen, wobei R^{11} unabhängig voneinander für H steht und W für O steht und B_3 für C-R^8 steht, R^8 für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perhalogeniertes C_1-C_3 Alkyl, besonders bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl) oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perhalogeniertes C_1-C_3-Alkoxy, besonders bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy) steht.

[0020] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln und Ausführungsformen, wobei die Gruppierungen A_1 bis A_4 und B_1 bis B_5 für

A_1 CH,
A_2 CR^3 oder N,
A_3 CR^4,

A_2 C-H,

B_1 CR^6 oder N,

B_2 C-H,

B_3 CR^8,

B_4 C-H und

B_5 CR^{10} oder N stehen.

[0021] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln und Ausführungsformen, wobei R^1 für H steht.

[0022] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln und Ausführungsformen, wobei Q für mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, gegebenenfalls mit Cyano oder Fluor substituiertes C_3-C_4-Cycloalkyl, C_4-C_6-Heterocycloalkyl, 1-Oxido-thietan-3-yl, 1,1-Dioxido-thietan-3-yl, Benzyl, Pyridin-2-ylmethyl, Methylsulfonyl, oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl steht.

[0023] Eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln und Ausführungsformen, wobei R^5 für Halogen oder mit Halogen substituiertes C_1-C_4 Alkyl steht.

[0024] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei R^{11} unabhängig voneinander für H steht.

[0025] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_2 Alkylsulfanyl, C_1-C_2 Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_2 Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen.

[0026] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei R^7, R^8, R^9, und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-C_1-C_4-Alkoxyimino-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, oder *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen.

[0027] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei die Gruppierungen A_1 bis A_2 und B_1 bis B_5 für

A_1 C-H,

A_2 CR^7 oder N,

A_1 CR^1,

A_2 C-H,

B_1 CR^6 oder N,

B_2 C-H,

B_3 CR^9,

B_4 C-H und

B_5 CR^{10} oder N stehen.

[0028] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei R^1 für H steht.

[0029] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei Q für mit Fluor oder mit Carbonamid (–C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_2-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_2-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_4-Alkyl, gegebenenfalls mit Cyano oder Fluor substituiertes C_3-C_4-Cycloalkyl, C_3-C_6-Heterocycloalkyl, 1-Oxido-thietan-3-yl, 1,1-Dioxido-thietan-3-yl, Benzyl, Pyridin-2-ylmethyl, Methylsulfonyl, oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl steht.

[0030] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei Q für 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 3,3,3-Trifluorpropyl, Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopropyl, Cyclobutyl, 1-Cyano-cyclopropyl, trans-2-Fluorcyclopropyl, oder cis-2-Fluorcyclopropyl, Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, 1,1-Dioxido-thietan-3-yl, Benzyl, Pyridin-2-ylmethyl, Methylsulfonyl, oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl steht.

[0031] Noch eine weitere Ausführungsform der vorliegenden Erfindung betrifft Verbindungen gemäß den hierin beschriebenen Formeln, wobei R^5 für Halogen oder mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl steht.

[0032] Ein weiterer Aspekt betrifft insektizide Mittel, gekennzeichnet durch einen Gehalt von mindestens einer Verbindung der Formel (I) wie hierin beschrieben und einem Streckmittel und/oder einer oberflächenaktiven Substanz.

[0033] Ein weiterer Aspekt betrifft ein Verfahren zum Schutz von transgenem oder konventionellem Saatgut und der daraus entstehenden Pflanze vor dem Befall von Schädlingen, dadurch gekennzeichnet, dass das Saatgut mit mindestens einer Verbindung der Formel (I) wie hierin beschrieben behandelt wird.

[0034] Noch ein weitere Aspekt betrifft die Verwendung von Verbindungen der Formel (I) wie hierin beschrieben oder von einem insektiziden Mittel wie hierin beschrieben zum Bekämpfen von Schädlingen.

[0035] Ein weiterer Aspekt betrifft die Verwendung von Verbindungen der Formel (I) wie hierin beschrieben in der Vektorkontrolle.

[0036] Noch ein weiterer Aspekt betrifft Saatgut, bei dem eine Verbindung der Formel (I) wie hierin beschrieben als Bestandteil einer Umhüllung oder als weitere Schicht oder weitere Schichten zusätzlich zu einer Umhüllung auf das Saatgut aufgebracht ist.

[0037] Entsprechend betrifft ein weiterer Aspekt ein Verfahren zum Aufbringen einer Umhüllung umfassend mindestens eine Verbindung der Formel (I) wie hierin beschrieben oder zum Aufbringen einer Verbindung der Formel (I) wie hierin beschrieben, die als Schicht oder weitere Schichten zusätzlich zu einer Umhüllung auf Saatgut aufgebracht wird, umfassend die Schritte, a) mischen von Samen mit einem Überzugsmaterial bestehend aus oder umfassend eine Verbindung der Formel (I) wie hierin beschrieben, b) anreichern der erhaltenen übergezogenen Samenmasse, c) trocknen der erhaltenen angereicherten Samenmasse, d) entballen (dis- oder entagglomerieren) der erhaltenen getrockneten Samenmasse.

[0038] Die hier beschriebenen Verbindungen der Formel (I) können gegebenenfalls in Abhängigkeit von der Art der Substituenten als geometrische und/oder als optisch aktive Isomere oder entsprechende Isomerengemische in unterschiedlicher Zusammensetzung vorliegen. Die Erfindung betrifft sowohl die reinen Isomere als auch die Isomerengemische.

[0039] Die erfindungsgemäßen Verbindungen können auch als Metallkomplexe vorliegen.

Definitionen

[0040] Der Fachmann ist sich bewusst, dass, wenn nicht ausdrücklich angegeben, die Ausdrücke "ein", „eine" oder „eines" wie in dieser Anmeldung genutzt je nach Situation "ein/eine/eines (1)", "ein/eine/eines (1) oder mehr" oder "mindestens ein/eine/eines (1)" bedeuten kann.

[0041] Für alle hierin beschriebenen Strukturen wie cyclischen Systeme und Gruppen gilt, dass benachbarte Atome nicht -O-O- oder -O-S- sein dürfen.

[0042] Strukturen mit einer variablen Anzahl an möglichen Kohlenstoffatomen (C-Atomen) können in der vorliegenden Anmeldung als $C_{\text{unterer Grenze C Atome}}$-$C_{\text{oberer Grenze C Atome}}$-Strukturen ($C_{uG}$-$C_{oG}$-Strukturen) bezeichnet werden, umso näher bestimmt zu werden. Beispiel: eine Alkylgruppe kann aus 3 bis 10 C-Atomen bestehen und entspricht dann C_3-C_{10}-Alkyl. Ringstrukturen aus C-Atomen und Heteroatomen können als „uG bis oG-gliedrige" Strukturen bezeichnet werden. Ein Beispiel einer 6-gliedrigen Ringstruktur ist Toluol (eine 6-gliedriges Ringstruktur, die mit einer Methylgruppe substituiert ist).

[0043] Steht ein Sammelbegriff für einen Substituenten, z. B. C_{uG}-C_{oG}-Alkyl, am Ende eines zusammengesetzten Substituenten wie z.B. bei C_{uG}-C_{oG}-Cycloalkyl-C_{uG}-C_{oG}-Alkyl, so kann der am

Anfang stehende Bestandteil des zusammengesetzten Substituenten, z.B. das C_{3G}-C_{6G}-Cycloalkyl, ein- bzw. mehrfach, gleich oder verschieden und unabhängig voneinander mit dem letzten Substituenten, z. B. C_{1G}-C_{6G}-Alkyl, substituiert sein. Alle in dieser Anmeldung verwendeten Sammelbegriffe für chemische Gruppen, cyclische Systeme und cyclische Gruppen können durch den Zusatz „C_{1G}-C_{6G}" oder „uG bis oG-gliedrig(e)" näher bestimmt werden.

[0044] Die Definition für Sammelbegriffe solange nicht anders definiert gilt auch für diese Sammelbegriffe in zusammengesetzten Substituenten. Beispiel: Die Definition für C_{1G}-C_{6G}-Alkyl gilt auch für C_{3G}-C_{6G}-Alkyl als Bestandteil eines zusammengesetzten Substituenten wie z.B. C_{3G}-C_{6G}-Cycloalkyl-C_{1G}-C_{6G}-Alkyl.

[0045] Dem Fachmann ist klar, dass in dieser Anmeldung genannte Beispiele nicht als beschränkend anzusehen sind sondern lediglich einige Ausführungsformen näher beschreiben.

[0046] Bei den in den vorstehenden Formeln angegebenen Definitionen der Symbole wurden Sammelbegriffe verwendet, die allgemein repräsentativ für die folgenden Substituenten stehen:

[0047] Halogen bezieht sich auf die Elemente der 7. Hauptgruppe, bevorzugt Fluor, Chlor, Brom und Iod, mehr bevorzugt Fluor, Chlor und Brom und noch bevorzugter Fluor und Chlor.

[0048] Beispiele für Heteroatom sind N, O, S, P, B, Si. Bevorzugt bezieht sich der Begriff Heteroatom auf N, S und O.

[0049] Erfindungsgemäß steht "Alkyl" - in Alleinstellung oder als Bestandteil einer chemischen Gruppe für geradkettige oder verzweigte Kohlenwasserstoffe, vorzugsweise mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl, Pentyl, 1-Methylbutyl, 2-Methylbutyl, 3-Methylbutyl, 1,2-Dimethylpropyl, 1,1-Dimethylpropyl, 2,2-Dimethylpropyl, 1-Ethylpropyl, Hexyl, 1-Methylpentyl, 2-Methylpentyl, 3-Methylpentyl, 4-Methylpentyl, 1,2-Dimethylpropyl, 1,3-Dimethylbutyl, 1,4-Dimethylbutyl, 2,3-Dimethylbutyl, 1,1-Dimethylbutyl, 2,2-Dimethylbutyl, 3,3-Dimethylbutyl, 1,1,2-Trimethylpropyl, 1,2,2-Trimethylpropyl, 1-Ethylbutyl und 2-Ethylbutyl. Ferner bevorzugt sind Alkyle mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen, wie unter anderem Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl oder t-Butyl. Die erfindungsgemäßen Alkyle können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0050] Erfindungsgemäß steht "Alkenyl" - in Alleinstellung oder als Bestandteil einer chemischen Gruppe für geradkettige oder verzweigte Kohlenwasserstoffe, vorzugsweise mit 2 bis 6 Kohlenstoffatomen und mindestens einer Doppelbindung, wie beispielsweise Vinyl, 2-Propenyl, 2-Butenyl, 3-Butenyl, 1-Methyl-2-propenyl, 2-Methyl-2-propenyl, 2-Pentenyl, 3-Pentenyl, 4-Pentenyl, 1-Methyl-2-butenyl, 2-Methyl-2-butenyl, 3-Methyl-2-butenyl, 1-Methyl-3-butenyl, 2-Methyl-3-butenyl, 3-

Methyl-3-butenyl, 1,1-Dimethyl-2-propenyl, 1,2-Dimethyl-2-propenyl, 1-Ethyl-2-propenyl, 2-Hexenyl, 3-Hexenyl, 4-Hexenyl, 5-Hexenyl, 1-Methyl-2-pentenyl, 2-Methyl-2-pentenyl, 3-Methyl-2-pentenyl, 4-Methyl-2-pentenyl, 3-Methyl-3-pentenyl, 4-Methyl-3-pentenyl, 1-Methyl-4-pentenyl, 2-Methyl-4-pentenyl, 3-Methyl-4-pentenyl, 4-Methyl-4-pentenyl, 1,1-Dimethyl-2-butenyl, 1,1-dimethyl-3-butenyl, 1,2-Dimethyl-2-butenyl, 1,2-Dimethyl-3-butenyl, 1,3-Dimethyl-2-butenyl, 2,2-Dimethyl-3-butenyl, 2,3-Dimethyl-2-butenyl, 2,3-Dimethyl-3-butenyl, 1-Ethyl-2-butenyl, 1-Ethyl-3-butenyl, 2-Ethyl-2-butenyl, 2-Ethyl-3-butenyl, 1,1,2-Trimethyl-2-propenyl, 1-Ethyl-1-methyl-2-propenyl und 1-Ethyl-2-methyl-2-propenyl. Ferner bevorzugt sind Alkenyle mit 2 bis 4 Kohlenstoffatomen, wie unter anderem 2-Propenyl, 2-Butenyl oder 1-Methyl-2-propenyl. Die erfindungsgemäßen Alkenyle können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0051] Erfindungsgemäß steht "Alkinyl" – in Alleinstellung oder als Bestandteil einer chemischen Gruppe – für geradkettige oder verzweigte Kohlenwasserstoffe, vorzugsweise mit 2 bis 6 Kohlenstoffatomen und mindestens einer Dreifachbindung wie beispielsweise 2-Propinyl, 2-Butinyl, 3-Butinyl, 1-Methyl-2-propinyl, 2-Pentinyl, 3-Pentinyl, 4-Pentinyl, 1-Methyl-3-butinyl, 2-Methyl-3-butinyl, 1-Methyl-2-butinyl, 1,1-Dimethyl-2-propinyl, 1-Ethyl-2-propinyl, 2-Hexinyl, 3-Hexinyl, 4-Hexinyl, 5-Hexinyl, 1-Methyl-2-pentinyl, 1-Methyl-3-pentinyl, 1-Methyl-4-pentinyl, 2-Methyl-3-pentinyl, 2-Methyl-4-pentinyl, 3-Methyl-4-pentinyl, 4-Methyl-2-pentinyl, 1,1-Dimethyl-3-butinyl, 1,2-Dimethyl-3-butinyl, 2,2-Dimethyl-3-butinyl, 1-Ethyl-3-butinyl, 2-Ethyl-3-butinyl, 1-Ethyl-1-methyl-2-propinyl und 2,5-Hexadiynyl. Ferner bevorzugt sind Alkinyle mit 2 bis 4 Kohlenstoffatomen wie unter anderem Ethinyl, 2-Propinyl oder 2-Butinyl-2-propenyl. Die erfindungsgemäßen Alkinyle können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0052] Erfindungsgemäß steht "Cycloalkyl" – in Alleinstellung oder als Bestandteil einer chemischen Gruppe – für mono-, bi- oder tricyclische Kohlenwasserstoffe, vorzugsweise mit 3 bis 10 Kohlenstoffen wie beispielsweise Cyclopropyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, Cycloheptyl, Cyclooctyl, Bicyclo[2.2.1]heptyl, Bicyclo[2.2.2]octyl oder Adamantyl. Ferner bevorzugt sind Cycloalkyle mit 3, 4, 5, 6 oder 7 Kohlenstoffatomen, wie unter anderem Cyclopropyl oder Cyclobutyl. Die erfindungsgemäßen Cycloalkyle können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0053] Erfindungsgemäß steht "Alkylcycloalkyl" für mono-, bi- oder tricyclisches Alkylcycloalkyl, vorzugsweise mit 4 bis 10 oder 4 bis 7 Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Methylcyclopropyl, Ethylcyclopropyl, Isopropylcyclobutyl, 3-Methylcyclopentyl und 4-Methyl-cyclohexyl. Ferner bevorzugt sind Alkylcycloalkyle mit 4, 5 oder 7 Kohlenstoffatomen wie unter anderen Ethylcyclopropyl oder 4-Methyl-cyclohexyl. Die erfindungsgemäßen Alkylcycloalkyle können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0054] Erfindungsgemäß steht "Cycloalkylalkyl" für mono, bi- oder tricyclisches Cycloalkylalkyl, vorzugsweise mit 4 bis 10 oder 4 bis 7 Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Cyclopropylmethyl, Cyclobutylmethyl, Cyclopentylmethyl, Cyclohexylmethyl und Cyclopentylethyl. Ferner bevorzugt sind Cycloalkylalkyle mit 4, 5 oder 7 Kohlenstoffatomen wie unter anderen Cyclopropylmethyl oder Cyclobutylmethyl. Die erfindungsgemäßen Cycloalkylalkyle können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0055] Erfindungsgemäß steht "Hydroxyalkyl" für geradkettigen oder verzweigten Alkohol, vorzugsweise mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Methanol, Ethanol, n-Propanol, Isopropanol, n-Butanol, Isobutanol, s-Butanol und t-Butanol. Ferner bevorzugt sind Hydroxyalkylgruppen mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die erfindungsgemäßen Hydroxyalkylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein

[0056] Erfindungsgemäß steht "Alkoxy" für geradkettiges oder verzweigtes O-Alkyl, vorzugsweise mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, Isopropoxy, n-Butoxy, Isobutoxy, s-Butoxy und t-Butoxy. Ferner bevorzugt sind Alkoxygruppen mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die erfindungsgemäßen Alkoxygruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0057] Erfindungsgemäß steht "Alkylsulfanyl" für geradkettiges oder verzweigtes S-Alkyl, vorzugsweise mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Methylthio, Ethylthio, n-Propylthio, Isopropylthio, n-Butylthio, Isobutylthio, s-Butylthio und t-Butylthio. Ferner bevorzugt sind Alkylsulfanylgruppen mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die erfindungsgemäßen Alkylsulfanylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0058] Erfindungsgemäß steht "Alkylsulfinyl" für geradkettiges oder verzweigtes Alkylsulfinyl, vorzugsweise mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen wie beispielsweise Methylsulfinyl, Ethylsulfinyl, n-Propylsulfinyl, Isopropylsulfinyl, n-Butylsulfinyl, Isobutylsulfinyl, s-Butylsulfinyl und t-Butylsulfinyl. Ferner bevorzugt sind Alkylsulfinylgruppen mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die erfindungsgemäßen Alkylsulfinylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0059] Erfindungsgemäß steht "Alkylsulfonyl" für geradkettiges oder verzweigtes Alkylsulfonyl, vorzugsweise mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen wie beispielsweise Methylsulfonyl, Ethylsulfonyl, n-Propylsulfonyl, Isopropylsulfonyl, n-Butylsulfonyl, Isobutylsulfonyl, s-Butylsulfonyl und t-Butylsulfonyl. Ferner bevorzugt sind Alkylsulfonylgruppen mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die erfindungsgemäßen Alkylsulfonylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0060] Erfindungsgemäß steht "Alkylcarbonyl" für geradkettiges oder verzweigtes Alkyl-C(=O), vorzugsweise mit 2 bis 7 Kohlenstoffatomen, wie Methylcarbonyl, Ethylcarbonyl, n-Propylcarbonyl, Isopropylcarbonyl, s-Butylcarbonyl und t-Butylcarbonyl. Ferner bevorzugt sind Alkylcarbonyle mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen. Die erfindungsgemäßen Alkylcarbonyle können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0061] Erfindungsgemäß steht "Cycloalkylcarbonyl" für geradkettiges oder verzweigtes Cycloalkylcarbonyl, vorzugsweise mit 3 bis 10 Kohlenstoffatomen im Cycloalkylteil, wie beispielsweise Cyclopropylcarbonyl, Cyclobutylcarbonyl, Cyclopentylcarbonyl, Cyclohexyl-carbonyl, Cycloheptyl-carbonyl, Cyclooctylcarbonyl, Bicyclo[2.2.1]heptyl, Bycyclo[2.2.2]octylcarbonyl und Adamantylcarbonyl. Ferner bevorzugt sind Cycloalkylcarbonyl mit 3, 5 oder 7 Kohlenstoffatomen im Cycloalkylteil. Die erfindungsgemäßen Cycloalkylcarbonylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0062] Erfindungsgemäß steht "Alkoxycarbonyl" in Alleinstellung oder als Bestandteil einer chemischen Gruppe – für geradkettiges oder verzweigtes Alkoxycarbonyl, vorzugsweise mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen oder 1 bis 4 Kohlenstoffatomen im Alkoxyteil, wie beispielsweise Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, n-Propoxycarbonyl, Isopropoxycarbonyl, s-Butoxycarbonyl und t-Butoxycarbonyl. Die erfindungsgemäßen Alkoxycarbonylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0063] Erfindungsgemäß steht "Alkylaminocarbonyl" für geradkettiges oder verzweigtes Alkylaminocarbonyl mit vorzugsweise 1 bis 6 Kohlenstoffatomen oder 1 bis 4 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, wie beispielsweise Methylaminocarbonyl, Ethylaminocarbonyl, n-Proylaminocarbonyl, Isopropylaminocarbonyl, s-Butylaminocarbonyl und t-Butylaminocarbonyl. Die erfindungsgemäßen Alkylaminocarbonylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0064] Erfindungsgemäß steht "*N,N*-Dialkylamino-carbonyl" für geradkettiges oder verzweigtes *N,N*-Dialkylaminocarbonyl mit vorzugsweise 1 bis 6 Kohlenstoffatomen oder 1 bis 4 Kohlenstoffatomen im Alkylteil, wie beispielsweise *N,N*-Dimethylamino-carbonyl, N,N-Diethylamino-carbonyl, *N,N*-Di(n-propylamino)-carbonyl, *N,N*-Di-(isopropylamino)-carbonyl und *N,N*-Di-(s-butylamino)-carbonyl. Die erfindungsgemäßen *N,N* Dialkylamino carbonylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0065] Erfindungsgemäß steht "Aryl" für ein mono-, bi- oder polycyclisches aromatisches System mit vorzugsweise 6 bis 14, insbesondere 6 bis 10 Ring-Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Phenyl, Naphthyl, Anthryl, Phenanthrenyl, vorzugsweise Phenyl. Ferner steht Aryl auch für mehrcyclische Systeme, wie Tetrahydronaphtyl, Indenyl, Indanyl, Fluorenyl, Biphenyl, wobei die Bindungsstelle am

aromatischen System ist. Die erfindungsgemäßen Arylgruppen können mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

[0066] Beispiele substituierter Aryle stellen die Arylalkyle dar, die gleichfalls mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten im C_1-C_4-Alkyl- und/oder C_6-C_{14}-Arylteil substituiert sein können. Beispiele solcher Arylalkyle sind unter anderem Benzyl und 1-Phenylethyl.

[0067] Erfindungsgemäß steht "Heterocyclus", "heterocyclischer Ring" oder "heterocyclisches Ringsystem" für ein carbocyclisches Ringsystem mit mindestens einem Ring, in dem mindestens ein Kohlenstoffatom durch ein Heteroatom ersetzt ist, vorzugsweise durch ein Heteroatom aus der Gruppe N, O, S, P, B, Si, Se und der gesättigt, ungesättigt oder heteroaromatisch ist und dabei unsubstituiert oder substituiert sein kann, wobei die Bindungsstelle an einem Ringatom lokalisiert ist. Wenn nicht anders definiert, enthält der heterocyclische Ring vorzugsweise 3 bis 9 Ringatome, insbesondere 3 bis 6 Ringatome, und ein oder mehrere, vorzugsweise 1 bis 4, insbesondere 1, 2 oder 3 Heteroatome im heterocyclischen Ring, vorzugsweise aus der Gruppe N, O, und S, wobei jedoch nicht zwei Sauerstoffatome direkt benachbart sein sollen. Die heterocyclischen Ringe enthalten gewöhnlicherweise nicht mehr als 4 Stickstoffatome, und/oder nicht mehr als 2 Sauerstoffatome und/oder nicht mehr als 2 Schwefelatome. Ist der Heterocyclylrest oder der heterocyclische Ring gegebenenfalls substituiert, kann er mit anderen carbocyclischen oder heterocyclischen Ringen annelliert sein. Im Falle von gegebenenfalls substituiertem Heterocyclyl werden erfindungsgemäß auch mehrcyclische Systeme umfaßt, wie beispielsweise 8-Aza-bicyclo[3.2.1]octanyl oder 1-Aza-bicyclo[2.2.1]heptyl. Im Falle von gegebenenfalls substituiertem Heterocyclyl werden erfindungsgemäß auch spirocyclische Systeme umfasst, wie beispielsweise 1-Oxa-5-aza-spiro[2.3]hexyl.

[0068] Erfindungsgemäße Heterocyclylgruppen sind beispielsweise Piperidinyl, Piperazinyl, Morpholinyl, Thiomorpholinyl, Dihydropyranyl, Tetrahydropyranyl, Dioxanyl, Pyrrolinyl, Pyrrolidinyl, Imidazolinyl, Imidazolidinyl, Thiazolidinyl, Oxazolidinyl, Dioxolanyl, Dioxolyl, Pyrazolidinyl, Tetrahydrofuranyl, Dihydrofuranyl, Oxetanyl, Oxiranyl, Azetidinyl, Aziridinyl, Oxazetidinyl, Oxaziridinyl, Oxazepanyl, Oxazinanyl, Azepanyl, Oxopyrrolidinyl, Dioxopyrrolidinyl, Oxomorpholinyl, Oxopiperazinyl und Oxepanyl.

[0069] Eine besondere Bedeutung kommt Heteroarylen, also heteroaromatischen Systemen zu. Erfindungsgemäß steht der Ausdruck Heteroaryl für heteroaromatische Verbindungen, das heißt vollständig ungesättigte aromatische heterocyclische Verbindungen, die unter die vorstehende Definiton von Heterocyclen fallen. Vorzugsweise für 5- bis 7-gliedrige Ringe mit 1 bis 3, vorzugsweise 1 oder 2 gleichen oder verschiedenen Heteroatomen aus der oben genannten Gruppe. Erfindungsgemäße Heteroaryle sind beispielsweise Furyl, Thienyl, Pyrazolyl, Imidazolyl, 1,2,3- und 1,2,4-Triazolyl, Isoxazolyl, Thiazolyl, Isothiazolyl, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- und 1,2,5-Oxadiazolyl, Azepinyl, Pyrrolyl, Pyridyl, Pyridazinyl, Pyrimidinyl, Pyrazinyl, 1,3,5-, 1,2,4- und 1,2,3-Triazinyl, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- und

1,2,6-Oxazinyl, Oxepinyl, Thiepinyl, 1,2,4-Triazolonyl und 1,2,4-Diazepinyl. Die erfindungsgemäßen Heteroarylgruppen können ferner mit einem oder mehreren, gleichen oder verschiedenen Resten substituiert sein.

Der Begriff „(gegebenenfalls) substituierte" Gruppen/Substituenten, wie ein substituierter Alkyl-, Alkenyl-, Alkinyl-, Alkoxy-, Alkylsulfanyl-, Alkylsulfinyl-, Alkylsulfonyl-, Cycloalkyl-, Aryl-, Phenyl-, Benzyl-, Heterocyclyl- und Heteroarylrest, bedeutet beispielsweise einen vom unsubstituierten Grundkörper abgeleiteten substituierten Rest, wobei die Substituenten beispielsweise ein (1) Substituent oder mehrere Substituenten, vorzugsweise 1, 2, 3, 4, 5, 6, oder 7, ausgewählt sind aus einer Gruppe bestehend aus Amino, Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Isocyano, Mercapto, Isothiocyanato, C_1-C_4-Carboxy, Carbonamid, SF_5, Aminosulfonyl, C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_7-Cycloalkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_3-C_7-Cycloalkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, *N*-Mono-C_1-C_6-alkyl-amino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino, *N*-C_1-C_6-Alkanoylamino, C_1-C_6-Alkoxy, C_3-C_4-Alkenyloxy, C_2-C_4-Alkinyloxy, C_3-C_6-Cycloalkoxy, C_3-C_6-Cycloalkenyloxy, C_1-C_6-Alkoxycarbonyl, C_2-C_4- C_2-C_4-Alkenyloxycarbonyl, C_3-C_6-Alkinyloxycarbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Aryloxycarbonyl, C_1-C_4-Alkanoyl, C_2-C_4-Alkenylcarbonyl, C_2-C_6-Alkinylcarbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Arylcarbonyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_3-C_4-Cycloalkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylthio, C_2-C_4-Alkenylthio, C_3-C_4 Cycloalkenylthio, C_3-C_4 Alkinylthio, C_1-C_4-Alkylsulfenyl und C_1-C_4-Alkylsulfinyl, wobei beide Enantiomere der C_1-C_4-Alkylsulfinylgruppe umfasst sind, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-Mono-C_1-C_4-alkyl-aminosulfonyl, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkyl-aminosulfonyl, C_1-C_6-Alkylphosphinyl, C_1-C_4-Alkylphosphonyl, wobei für C_1-C_6-Alkylphosphinyl bzw. C_1-C_6-Alkylphosphonyl beide Enantiomere umfasst sind, *N*-C_1-C_4-Alkyl-aminocarbonyl, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkyl-amino-carbonyl, N-C_1-C_4-Alkanoyl-amino-carbonyl, N-C_1-C_4-Alkanoyl-N-C_1-C_4-alkyl-aminocarbonyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Aryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Aryloxy, Benzyl, Benzyloxy, Benzylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Arylthio, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Arylamino, Benzylamino, Heterocyclyl und Trialkylsilyl, mit einer Doppelbindung verbundene Substituenten wie C_1-C_6-Alkyliden (z. B. Methyliden oder Ethyliden), eine Oxogruppe, eine Thioxogruppe, eine Iminogruppe sowie einer substituierten Iminogruppe. Wenn zwei oder mehrere Reste einen oder mehrere Ringe bilden, so können diese carbocyclisch, heterocyclisch, gesättigt, teilgesättigt, ungesättigt, beispielsweise auch aromatisch und weiter substituiert sein.

[0070] Die beispielhaft genannten Substituenten ("erste Substituentenebene") können, sofern sie kohlenwasserstoffhaltige Anteile enthalten, dort gegebenenfalls weiter substituiert sein ("zweite Substituentenebene"), beispielsweise durch einen oder mehreren der Substituenten jeweils unabhängig voneinander ausgewählt aus Halogen, Hydroxy, Amino, Nitro, Cyano, Isocyano, Azido, Acylamino, einer Oxogruppe und einer Iminogruppe. Vorzugsweise werden vom Begriff "(gegebenenfalls) substituierter" Gruppe nur ein oder zwei Substituentenebenen umfasst.

[0071] Die erfindungsgemäßen mit Halogen substituierten chemischen Gruppen bzw. halogenierte Gruppen (wie z. B. Alkyl oder Alkoxy) sind einfach oder mehrfach bis zur maximal möglichen Substituentenzahl mit Halogen substituiert. Solche Gruppen werden auch als Halogruppen bezeichnet

(wie, Z. B. Haloalkyl). Bei mehrfacher Substitution mit Halogen, können die Halogenatome gleich oder verschieden sein und können alle an eines oder an mehrere Kohlenstoffatome gebunden sein. Dabei steht Halogen insbesondere für Fluor, Chlor, Brom oder Iod, vorzugsweise für Fluor, Chlor oder Brom und besonders bevorzugt für Fluor. Insbesondere sind mit Halogen substituierte Gruppen Monohalocycloalkyl wie 1-Fluor-cyclopropyl, 2-Fluor-cyclopropyl oder 1-Fluor-cyclobutyl, Monohaloalkyl wie 2-Chlor-ethyl, 2-Fluor-ethyl, 1-Chlor-ethyl, 1-Fluor-ethyl, Chlormethyl, oder Fluormethyl; Perhaloalkyl wie Trichlormethyl oder Trifluormethyl oder CF_2CF_3, Polyhaloalkyl wie Difluormethyl, 2-Fluor-2-Chlor-ethyl, Dichlormethyl, 1,1,2,2-Tetraflourethyl, oder 2,2,2-Trifluorethyl. Weitere Beispiele für Halogenalkyle sind Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Dichlorfluormethyl, Chlormethyl, Brommethyl, 1-Fluorethyl, 2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl, Pentafluorethyl, 3,3,3-Trifluorpropyl und Pentafluor-t-butyl. Bevorzugt sind Halogenalkyle mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen und 1 bis 9, vorzugsweise 1 bis 5 gleichen oder verschiedenen Halogenatomen, die ausgewählt sind unter Fluor, Chlor oder Brom. Besonders bevorzugt sind Halogenalkyle mit 1 oder 2 Kohlenstoffatomen und mit 1 bis 5 gleichen oder verschiedenen Halogenatomen, die ausgewählt sind unter Fluor oder Chlor, wie unter anderen Difluormethyl, Trifluormethyl oder 2,2 Difluorethyl. Weitere Beispiele für mit Halogen substituierten Verbindungen sind Haloalkoxy wie OCF_3, $OCHF_2$, OCH_2F, OCF_2CF_3, OCH_2CF_3, OCH_2CHF_2 und OCH_2CH_2Cl, Halogenalkylsulfanyle wie Difluormethylthio, Trifluormethylthio, Trichlormethylthio, Chlordifluormethylthio, 1-Fluorethylthio, 2-Fluorethylthio, 2,2-Difluorethylthio, 1,1,2,2-Tetrafluorethylthio, 2,2,2-Trifluorethylthio oder 2-Chlor-1,1,2-trifluorethylthio, Halogenalkylsulfinyle wie Difluormethylsulfinyl, Trifluormethylsulfinyl, Trichlormethylsulfinyl, Chlordifluormethylsulfinyl, 1-Fluorethylsulfinyl, 2-Fluorethylsulfinyl, 2,2-Difluorethylsulfinyl, 1,1,2,2-Tetrafluorethylsulfinyl, 2,2,2-Trifluorethylsulfinyl und 2-Chlor-1,1,2-trifluorethylsulfinyl, Halogenalkylsulfinyle wie Difluormethylsulfinyl, Trifluormethylsulfinyl, Trichlormethylsulfinyl, Chlordifluormethylsulfinyl, 1-Fluorethylsulfinyl, 2-Fluorethylsulfinyl, 2,2-Difluorethylsulfinyl, 1,1,2,2-Tetrafluorethylsulfinyl, 2,2,2-Trifluorethylsulfinyl und 2-Chlor-1,1,2-trifluorethylsulfinyl, Halogenalkylsulfonylgrupen wie Difluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfonyl, Trichlormethylsulfonyl, Chlordifluormethylsulfonyl, 1-Fluorethylsulfonyl, 2-Fluorethylsulfonyl, 2,2-Difluorethylsulfonyl, 1,1,2,2-Tetrafluorethylsulfonyl, 2,2,2-Trifluorethylsulfonyl und 2-Chlor-1,1,2-trifluorethylsulfonyl.

[0072] Bei Resten mit C-Atomen sind solche mit 1 bis 4 C-Atomen, insbesondere 1 oder 2 C-Atomen bevorzugt. Bevorzugt sind in der Regel Substituenten aus der Gruppe Halogen, z.B. Fluor und Chlor, (C_1-C_4)Alkyl, vorzugsweise Methyl oder Ethyl, (C_1-C_4)Haloalkyl, vorzugsweise Trifluormethyl, (C_1-C_4)Alkoxy, vorzugsweise Methoxy oder Ethoxy, (C_1-C_4)Haloalkoxy, Nitro und Cyano. Besonders bevorzugt sind dabei die Substituenten Methyl, Methoxy, Fluor und Chlor.

[0073] Substituiertes Amino wie mono- oder disubstituiertes Amino bedeutet einen Rest aus der Gruppe der substituierten Aminoreste, welche beispielsweise durch einen bzw. zwei gleiche oder verschiedene Reste aus der Gruppe Alkyl, Hydroxy, Amino, Alkoxy, Acyl und Aryl *N*-substituiert sind;

vorzugsweise *N*-Mono- und *N,N*-Dialkylamino, (z.B. Methylamino, Ethylamino, *N,N*-Dimethylamino, *N,N*-Diethylamino, *N,N*-Di-n-propylamino, *N,N*-Diisopropylamino oder *N,N*-Dibutylamino), *N*-Mono- oder *N,N*-Dialkoxyalkylaminogruppen (z.B. *N*-Methoxymethylamino, *N*-Methoxyethylamino, *N,N*-Di-(methoxymethyl)-amino oder *N,N* Di-(methoxyethyl)-amino), *N* Mono- und *N,N* Diarylamino, wie gegebenenfalls substituierte Aniline, Acylamino, *N,N*-diacylamino, *N*-Alkyl-*N*-arylamino, *N*-Alkyl-*N*-acylamino sowie gesättigte *N*-Heterocyclen; dabei sind Alkylreste mit 1 bis 4 C-Atomen bevorzugt; Aryl ist dabei vorzugsweise Phenyl oder substituiertes Phenyl; für Acyl gilt dabei die weiter unten genannte Definition, vorzugsweise (C_1-C_4)Alkanoyl. Entsprechendes gilt für substituiertes Hydroxylamino oder Hydrazino.

[0074] Erfindungsgemäß umfasst der Begriff "cyclische Aminogruppen" heteroaromatische oder aliphatische Ringsysteme mit einem oder mehreren Stickstoffatomen. Die Heterocyclen sind gesättigt oder ungesättigt, bestehen aus einem oder mehreren, gegebenenfalls kondensierten Ringsystemen und beinhalten gegebenenfalls weitere Heteroatome, wie beispielsweise ein oder zwei Stickstoff-, Sauerstoff- und/oder Schwefelatome. Ferner umfasst der Begriff auch solche Gruppen, die einen Spiroring oder verbrücktes Ringsystem aufweisen. Die Anzahl der Atome, die die cyclische Aminogruppe bilden, ist beliebig und kann z.B. im Falle eines Einringsystems aus 3 bis 8 Ringatomen und im Falle eines Zweiringsystems aus 7 bis 11 Atomen bestehen.

[0075] Beispielhaft für cyclische Aminogruppen mit gesättigten und ungesättigten monocyclischen Gruppen mit einem Stickstoffatom als Heteroatom seien 1-Azetidinyl, Pyrrolidino, 2-Pyrrolidin-1-yl, 1-Pyrrolyl, Piperidino, 1,4-Dihydropyrazin-1-yl, 1,2,5,6-Tetrahydropyrazin-1-yl, 1,4-Dihydropyridin-1-yl, 1,2,5,6-Tetrahydropyridin-1-yl, Homopiperidinyl genannt; beispielhaft für cyclische Aminogruppen mit gesättigten und ungesättigten monocyclischen Gruppen mit zwei oder mehreren Stickstoffatomen als Heteroatome seien 1-Imidazolidinyl, 1-Imidazolyl, 1-Pyrazolyl, 1-Triazolyl, 1-Tetrazolyl, 1-Piperazinyl, 1-Homopiperazinyl, 1,2-Dihydro-piperazin-1-yl, 1,2-Dihydro-pyrimidin-1-yl, Perhydropyrimidin-1-yl, 1,4-Diazacycloheptan-1-yl, genannt; beispielhaft für cyclische Aminogruppen mit gesättigten und ungesättigten monocyclischen Gruppen mit einem oder zwei Sauerstoffatomen und einem bis drei Stickstoffatomen als Heteroatome, wie beispielsweise Oxazolidin-3-yl, 2,3-Dihydroisoxazol-2-yl, Isoxazol-2-yl, 1,2,3-Oxadiazin-2-yl, Morpholino, beispielhaft für cyclische Aminogruppen mit gesättigten und ungesättigten monocyclischen Gruppen mit einem bis drei Stickstoffatomen und einem bis zwei Schwefelatomen als Heteroatome seien Thiazolidin-3-yl, Isothiazolin-2-yl, Thiomorpholino, oder Dioxothiomorpholino genannt; beispielhaft für cyclische Aminogruppen mit gesättigten und ungesättigten kondensierten cyclischen Gruppen seien Indol-1-yl, 1,2-Dihydrobenzimidazol-1-yl, Perhydropyrrolo[1,2-a]pyrazin-2-yl genannt; beispielhaft für cyclische Aminogruppen mit spirocyclischen Gruppen sei das 2-Azaspiro[4,5]decan-2-yl genannt; beispielhaft für cyclische Aminogruppen mit verbrückten heterocyclischen Gruppen sei das 2-Azabicyclo[2,2,1]heptan-7-yl genannt.

[0076] Substituiertes Amino schließt auch quartäre Ammoniumverbindungen (Salze) mit vier organischen Substituenten am Stickstoffatom ein.

[0077] Gegebenenfalls substituiertes Phenyl ist vorzugsweise Phenyl, das unsubstituiert oder ein- oder mehrfach, vorzugsweise bis zu dreifach durch gleiche oder verschiedene Reste aus der Gruppe Halogen, C_1-C_4-Alkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-alkoxy , C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-Halogenalkyl, C_1-C_4-Halogenalkoxy, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Halogenalkylsulfanyl, Cyano, Isocyano und Nitro substituiert ist, z.B. o-, m- und p-Tolyl, Dimethylphenyle, 2-, 3- und 4-Chlorphenyl, 2-, 3- und 4-Fluorphenyl, 2-, 3- und 4-Trifluormethyl- und -Trichlormethylphenyl, 2,4-, 3,5-, 2,5- und 2,3-Dichlorphenyl, o-, m- und p-Methoxyphenyl, 4-Heptafluorphenyl.

[0078] Gegebenenfalls substituiertes Cycloalkyl ist vorzugsweise Cycloalkyl, das unsubstituiert oder ein- oder mehrfach, vorzugsweise bis zu dreifach durch gleiche oder verschiedene Reste aus der Gruppe Halogen, Cyano, C_1-C_4-Alkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-alkoxy , C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-Halogenalkyl und C_1-C_4-Halogenalkoxy substituiert ist, insbesondere durch einen oder zwei C_1-C_4-Alkylreste substituiert ist.

[0079] Gegebenenfalls substituiertes Heterocyclyl ist vorzugsweise Heterocyclyl, das unsubstituiert oder ein- oder mehrfach, vorzugsweise bis zu dreifach durch gleiche oder verschiedene Reste aus der Gruppe Halogen, Cyano, C_1-C_4-Alkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-alkoxy , C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-Halogenalkyl, C_1-C_4-Halogenalkoxy, Nitro und Oxo substituiert ist, insbesondere ein- oder mehrfach durch Reste aus der Gruppe Halogen, C_1-C_4-Alkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_4-Halogenalkyl und Oxo, ganz besonders durch einen oder zwei C_1-C_4-Alkylreste substituiert ist.

[0080] Beispiele für Alkyl substituierte Heteroaryle sind Furylmethyl, Thienylmethyl, Pyrazolylmethyl, Imidazolylmethyl, 1,2,3- und 1,2,4 Triazolylmethyl, Isoxazolylmethyl, Thiazolylmethyl, Isothiazolylmethyl, 1,2,3-, 1,3,4-, 1,2,4- und 1,2,5-Oxadiazolylmethyl, Azepinylmethyl, Pyrrolylmethyl, Pyridylmethyl,, Pyridazinylmethyl, Pyrimidinylmethyl, Pyrazinylmethyl, 1,3,5-, 1,2,4- und 1,2,3-Triazinylmethyl, 1,2,4-, 1,3,2-, 1,3,6- und 1,2,6-Oxazinylmethyl, Oxepinylmethyl, Thiepinylmethyl und 1,2,4-Diazepinylmethyl.

[0081] Erfindungsgemäße Verbindungen können in bevorzugten Ausführungsformen vorkommen. Einzelne hierin beschriebene Ausführungsformen können dabei miteinander kombiniert werden. Nicht umfasst sind solche Kombinationen, die den Naturgesetzen widersprechen und die der Fachmann daher aufgrund seines Fachwissens ausgeschlossen hätte. Beispielsweise sind Ringstrukturen mit drei oder mehreren benachbarten O-Atomen ausgeschlossen.

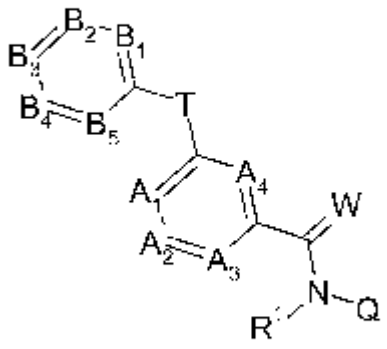
Ausführungsformen der erfindungsgemäßen Verbindungen

[0082] Dem Fachmann ist offenbar, dass alle Ausführungsformen alleine oder in Kombination vorliegen können.

[0083] Die Verbindungen der Formel (I), insbesondere Verbindungen der Formeln (Ia), (Ib), (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22) und (I-T23) können gegebenenfalls in Abhängigkeit der Art der Substituenten als Salze, Tautomere, geometrische und/oder optisch aktive Isomere oder entsprechende Isomerengemische in unterschiedlicher Zusammensetzung vorliegen.

[0084] Die erfindungsgemäßen Verbindungen können gegebenenfalls in verschiedenen polymorphen Formen oder als Mischung verschiedener polymorpher Formen vorliegen. Sowohl die reinen Polymorphe als auch die Polymorphgemische sind Gegenstand der Erfindung und können erfindungsgemäß verwendet werden.

[0085] Im folgenden werden Ausführungsformen der Verbindungen der Formel (I) näher beschrieben:



(I)

worin

R^1 für H, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_7-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkoxycarbonyl, Aryl(C_1-C_3)-alkyl, Heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl steht oder für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht, bevorzugt für H steht oder bevorzugt für C_1-C_2-Alkyl steht, ganz besonders bevorzugt für H steht oder Methyl steht,

die Gruppierungen

A_1 für CR^2 oder N,

A_2 für CR^3 oder N,

A_3 für CR^4 oder N,

A_4 für CR^5 oder N,

B_1 für CR^6 oder N,

B_2 für CR^7 oder N,

B_3 für CR^8 oder N,

B_4 für CR^9 oder N, und

B_5 für CR^{10} oder N stehen,

wobei aber nicht mehr als drei der Gruppierungen A_1 bis A_5 für N und nicht mehr als drei der Gruppierungen B_1 bis B_5 gleichzeitig für N stehen;

R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino, *N*,*N*-Di-C_1-C_6-alkylamino oder *N*-C_1-C_6-Alkoxy-C_1-C_4-Alkylamino oder 1-Pyrrolidinyl stehen;

wenn keine der Gruppierungen A_2 und A_3 für N steht, können R^3 und R^4 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 5- oder 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome und/oder 0 oder 1 O-Atom und/oder 0 oder 1 S-Atom enthält, oder

wenn keine der Gruppierungen A_1 und A_2 für N steht, können R^2 und R^3 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome enthält;

R^9 für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino oder *N*,*N*-Di-C_1-C_6-alkylamino, steht;

W für O oder S steht;

Q für H, Formyl, Hydroxy, Amino oder jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_8-Cycloalkyl, C_3-C_8-Heterocycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_6-Alkyl-C_3-C_8-cycloalkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-C_{10}-C_{14}-Aryl, C_1-C_5-Heteroaryl, C_6-C_{10}-C_{14}-Aryl-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_5-Heteroaryl-C_1-C_3-alkyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N*-C_1-C_6-Alkylcarbonylamino, oder *N*,*N*-Di-C_1-C_6-alkylamino steht; oder

für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 6-gliedrigen Carbozyklus steht; oder

für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei

V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-

C -C6-alkyl, C1-C6-Alkylsulfanyl, C1-C6-Alkylsulfinyl, C1-C6-Alkylsulfonyl, oder *N,N*-Di-(C -C6-alkyl)amino steht;

T für einen gegebenenfalls substituierten 5-gliedrigen Heteroaromaten enthaltend maximal 2 Heteroatome, wie vier C-Atome und ein (1) Heteroatom, bevorzugt ein (1) N-, ein (1) O- oder ein (1) S-Atom oder drei C-Atome und zwei Heteroatome, bevorzugt zwei N-Atome, ein (1) N- und ein (1) O-, oder ein (1) N- und ein (1) S-Atom, steht.

sowie Salze, N-Oxide und tautomere Formen der Verbindungen der Formel (I).

R^1

[0086] In einer bevorzugten Ausführungsform steht R^1 in einer Verbindung der Formel (I) für H, jeweils gegebenenfalls substituiertes Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl, Methoxymethyl, Ethoxymethyl, Propoxymethyl, Methylcarbonyl, Ethylcarbonyl, n-Propylcarbonyl, Isopropylcarbonyl, s-Butylcarbonyl, t-Butylcarbonyl, Methoxycarbonyl, Ethoxycarbonyl, n-Propoxycarbonyl, Isopropoxycarbonyl, s-Butoxycarbonyl, t-Butoxycarbonyl, Cyanomethyl, 2-Cyanoethyl, Benzyl, 4-Methoxybenzyl, Pyrid-2-yl-methyl, Pyrid-3-yl-methyl, Pyrid-4-yl-methyl, 4-Chlor-pyrid-3-yl-methyl.

[0087] In einer noch bevorzugteren Ausführungsform steht R^1 für H.

W

[0088] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht W für O.

Q

[0089] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht Q für II, jeweils gegebenenfalls substituiertes Methyl, Ethyl, n-Propyl, 1-Methylethyl, 1,1-Dimethylethyl, 1-Methylpropyl, n-Butyl, 2-Methylpropyl, 2-Methylbutyl, Hydroxymethyl, 2-Hydroxypropyl, Cyanomethyl, 2-Cyanoethyl, 2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1-Trifluormethylethyl, 2,2-Difluorpropyl, 3,3,3-Trifluorpropyl, 2,2-Dimethyl-3-fluorpropyl, Cyclopropyl, 1-Cyano-cyclopropyl, 1-Methoxycarbonyl-cyclopropyl, 1-(*N*-Methylcarbamoyl)cyclopropyl, 1-(*N*-Cyclopropylcarbamoyl)cyclopropyl, 1-(Thiocarbamoyl)cyclopropyl, Cyclopropyl-methyl, Cyclobutyl, Cyclopentyl, Cyclohexyl, 1-Cyclopropylethyl, Bis(cyclopropyl)methyl, 2,2-Dimethylcyclopropyl-methyl, 2-Phenylcyclopropyl, 2,2-Dichlorcyclopropyl, trans-2-Chlorcyclopropyl, cis-2-Chlorcyclopropyl, 2,2-Difluorcyclopropyl, trans-2-Fluorcyclopropyl, cis-2-Fluorcyclopropyl, trans-4-Hydroxycyclohexyl, 4-Trifluormethylcyclohexyl, Prop-2-enyl, 2-Methylprop-2-enyl, Prop-2-inyl, 1,1-Dimethylbut-2-inyl, 3-Chlor-prop-2-enyl., 3,3-Dichlor-prop-2-enyl, 3,3-Dichlor-1,1-dimethylprop-2-enyl, Phenyl, 2-Chlorphenyl, 3-Chlorphenyl, 4-Chlorphenyl, Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, 1,1-Dioxido-thietan-3-yl, Isoxazol-3-

ylmethyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl, 1,2,4-Triazol-3-ylmethyl, 3-Methyloxetan-3-ylmethyl, Benzyl, 2,6-Difluorphenylmethyl, 3-Fluorphenylmethyl, 2-Fluorphenylmethyl, 2,5-Difluorphenylmethyl, 1-Phenylethyl, 4-Chlorphenylethyl, 2-Trifluormethylphenylethyl, 1-Pyridin-2-ylethyl, Pyridin-2-ylmethyl, 5-Fluorpyridin-2-ylmethyl, (6-Chlor-pyridin-3-yl)methyl, Pyrimidin-2-ylmethyl, Methoxy, 2-Ethoxyethyl, 2-(Methylsulfanyl)ethyl, 1-Methyl-2-(ethylsulfanyl)ethyl, 2-Methyl-1-(methylsulfanyl)propan-2-yl, Methoxycarbonyl, Methoxycarbonylmethyl, NH_2, *N*-Ethylamino, *N*-Allylamino, *N*,*N*-Dimethylamino, *N*,*N*-Diethylamino; oder

Q steht für ein mit 0–4 Substituenten V substituiertes Phenyl, Naphthyl, Pyridazin, Pyrazin, Pyrimidin, Triazin, Pyridin, Pyrazol, Thiazol, Isothiazol, Oxazol, Isoxazol, Triazol, Imidazol, Furan, Thiophen, Pyrrol, Oxadiazol, Thiadiazol, wobei

V unabhängig voneinander für F, Cl, Br, I, Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Difluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Dichlorfluormethyl, Trifluormethyl, Chlormethyl, Brommethyl, 1-Fluorethyl, 2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,2,2,2-Tetrafluorethyl, 1-Chlor-1,2,2,2-tetrafluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl, 1,1-Difluorethyl, Pentafluorethyl, Heptafluor-n-propyl, Heptafluor-isopropyl, Nonafluor-n-butyl, Cyclopropyl, Cyclobutyl, Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, 1-Methylethoxy, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy, *N*-Methoxyiminomethyl, 1-(*N*-Methoxyimino)-ethyl, Methylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl, Trifluormethylsulfanyl, *N*,*N*-Dimethylamino steht.

[0090] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6 gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht. Bevorzugt steht Q für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (=$C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_3-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl: mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogenierten C_1-C_2-Alkyl substituierten C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6 gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht. Besonders bevorzugt steht Q für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CH_2F, CH_2CH_2F oder $CH_2CH_2CH_2F$; mit Carbonamid (=$C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; substituiertem C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl; Cyclopropyl; mit Cyano oder fluorierten C_1-C_2-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-

(trifluoromethyl)cyclopropyl); einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl.

[0091] In einer mehr bevorzugten Ausführungsform steht Q für mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl wie 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 3,3,3-Trifluorpropyl; C_3-C_4-Cycloalkyl wie Cyclopropyl oder Cyclobutyl; gegebenenfalls substituiertes C_3-C_4-Cycloalkyl wie 1-Trifluoromethyl-cyclopropyl, 1-tert.Butyl-cyclopropyl, 1-Thiocarbamoyl-cyclopropyl, 1-Cyano-cyclopropyl, trans-2-Fluorcyclopropyl, cis-2-Fluorcyclopropyl; C_4-C_6- Heterocycloalkyl wie Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, oder 1,1-Dioxido-thietan-3-yl; Benzyl; Pyridin-2-ylmethyl; Methylsulfonyl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl steht.

[0092] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform steht Q für mit Fluor substituiertes C_3-C_4-Alkyl wie 2,2,2-trifluoroethyl oder 3,3,3-trifluoropropyl; Cyclopropyl; gegebenenfalls substituiertes Cyclopropyl wie 1-Cyano-cyclopropyl oder 1-Trifluoromethyl-cyclopropyl, Thietan-3-yl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethyl)aminoethyl.

A1 bis A4

[0093] In einer bevorzugten Ausführungsform steht maximal eine (1) Gruppierung A_1 bis A_4 für N (in anderen Worten: ein (1) A_1 bis A_4 (bevorzugt A_2) steht für N); oder kein (0) A_1 bis A_4 steht für N (in anderen Worten: A_1 bis A_4 stehen für CR^2, CR^3, CR^4, und CR^5) ; oder eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

[0094] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^2, R^3, R^4, und R^5 (wenn die entsprechende Gruppierung A für CR steht) in einer Verbindung der Formel (I) unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-C_1-C_4-Alkoxyimino-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N*,*N*-Di-C_1-C_4-alkylamino oder *N*-C_1-C_4-Alkoxy-C_1-C_4-Alkylamino oder 1-Pyrrolidinyl.

[0095] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^3 und R^5 unabhängig voneinander für H, Methyl, F und Cl.

[0096] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^3 und R^4 unabhängig voneinander für H, F, Cl, Br, I, Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Fluormethyl, Difluormethyl, Chlordifluormethyl, Trifluormethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, 1-Methylethoxy, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy, N-Methoxyiminomethyl, 1-(N-Methoxyimino)-ethyl,

Methylsulfanyl, Trifluormethylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl.

B1 bis B5

[0097] In einer bevorzugten Ausführungsform steht maximal eine (1) Gruppierung B bis B_5 für N (in anderen Worten: ein (1) B_1 bis B_5 steht für N); oder kein (0) B_1 bis B_5 steht für N (B_1 bis B_5 stehen für CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 und CR^{10}).

[0098] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6, R^7, R^9 und R^{10} (wenn die entsprechende Gruppierung B für CR steht) unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino.

[0099] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Fluormethyl, Difluormethyl, Chlordifluormethyl, Trifluormethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, 1-Methylethoxy, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2 difluorethoxy, Pentafluorethoxy, N-Methoxyiminomethyl, 1-(N-Methoxyimino)-ethyl, Methylsulfanyl, Trifluormethylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl.

[0100] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen (insbesondere Chlor, Brom, Fluor), Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Difluormethyl, Chlordifluormethyl, Trifluormethyl, Methoxy, Ethoxy, 1-Methylethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2 Trifluorethoxy, 2 Chlor 2,2-difluorethoxy, Methylsulfanyl, Trifluormethylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl.

[0101] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} für die hierin beschriebenen Substituenten, jedoch stehen R^6 und R^{10} nicht gleichzeitig in einer Verbindung für H. Mit anderen Worten, wenn R^6 in einer Verbindung für H steht, steht R^{10} für einen der anderen hierin beschriebenen Substituenten und umgekehrt.

[0102] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Cl, Br oder F), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy.

[0103] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{III} jeweils für Halogen (wie Cl, Br oder F), jeweils für C_1-C_3-alkyl, oder jeweils für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie z. B. perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (Perfluormethyl, perFluoroethyl oder Perfluorpropyl).

[0104] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht R^6 für perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. Perfluormethyl) und R^{III} für Cl, Br oder F, besonders bevorzugt für Cl oder Br.

R8

[0105] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform steht B_1 für C-R^8 worin R^8 für Halogen, Cyano, Nitro, mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-C_1-C_4-Alkoxyimino-C_1-C_4-alkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, oder *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino steht.

[0106] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht R^8 für Halogen wie Fluor, Chlor, Brom, Iod oder mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl, Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Difluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Dichlorfluormethyl, Trifluormethyl, Chlormethyl, Brommethyl, 1-Fluorethyl, 2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,2,2,2-Tetrafluorethyl, 1-Chlor-1,2,2,2-tetrafluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl, 1,1-Difluorethyl, Pentafluorethyl, Pentafluor-tert-butyl, Heptafluor-n-propyl, Heptafluor-isopropyl, Nonafluor-n-butyl, Nonafluor-sec-butyl, Cyclopropyl, Cyclobutyl, Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, 1-Methylethoxy, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy, *N*-Methoxyiminomethyl, 1-(*N*-Methoxyimino)-ethyl, Methylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl, Trifluormethylsulfanyl, *N,N*-Dimethylamino.

[0107] In einer mehr bevorzugten Ausführungsform steht R^8 für Difluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Dichlorfluormethyl, Trifluormethyl, 1-Fluorethyl, 2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,2,2,2-Tetrafluorethyl, 1-Chlor-1,2,2,2-tetrafluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl, 1,1-Difluorethyl, Pentafluorethyl, Pentafluor-tert-butyl, Heptafluor-n-propyl, Heptafluor-isopropyl, Nonafluor-n-butyl, Nonafluor-sec-butyl, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl, Trifluormethylsulfanyl, steht.

[0108] In einer weiteren mehr bevorzugten Ausführungsform steht R^8 für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)) oder mit Halogen substituiertes Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)).

[0109] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform steht R^5 für perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie perfluoriertes n- bzw. i-Propyl ($-C_3F_7$), perfluoriertes Ethyl (C_2F_5) oder perfluoriertes Methyl (CF_3), besonders bevorzugt perfluoriertes n- bzw. i-Propyl ($-C_3F_7$) oder perfluoriertes Methyl.

A und B

[0110] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen die Gruppierungen A_1 bis A_4 und B_1 bis B_5 in Verbindungen der Formel (I) für

A_1 C-H,
A_2 CR^3 oder N,
A_3 CR^4,
A_4 CR^2 oder N,

B_1 CR^6 oder N,
B_2 CR^7,
B_3 CR^8,
B_4 CR^9 und
B_5 CR^{10} oder N.

[0111] In einer noch bevorzugteren Ausführungsform stehen die Gruppierungen A_1 bis A_4 und B_1 bis B_5 in Verbindungen der Formel (I) für

A_1 C-H,
A_2 CR^3 oder N,
A_3 CR^4,
A_4 C-H,

B_1 CR^6 oder N,
B_2 C-H,
B_3 CR^8,
B_4 C-H und
B_5 CR^{10} oder N.

[0112] In einer noch bevorzugteren Ausführungsform stehen die Gruppierungen A_1 bis A_4 und B_1 bis B_5 in Verbindungen der Formel (I) für

A_1 C-H,
A_2 CR^3 oder N,
A_3 CR^4,
A_4 C-H oder N,

B_1 CR^6,

B_2 C-H,

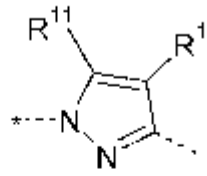
B_3 CR^6,

B_4 C-H und

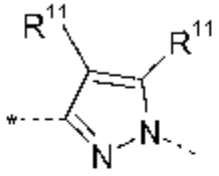
B_5 CR^{10} oder N.

T

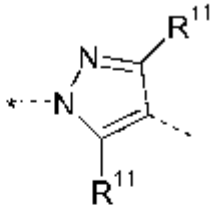
[0113] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht T für einen der nachfolgend aufgeführten 5 gliedrigen Heteroaromaten, wobei die Bindung zum C-Atom des (C-B_1-B_5)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung mit Sternchen und die Bindung zum C-Atom des (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung gekennzeichnet ist.



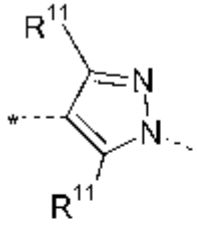
T1



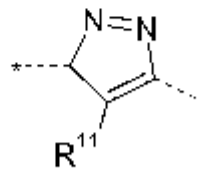
T2



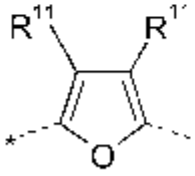
T3



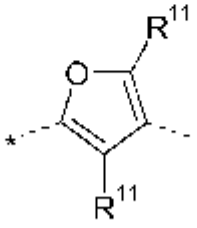
T4



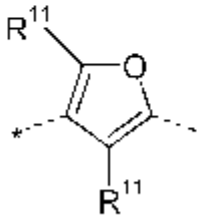
T5



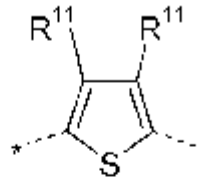
T8



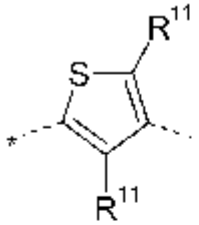
T9



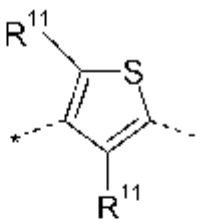
T10



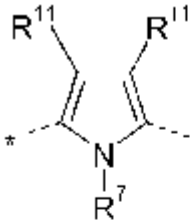
T11



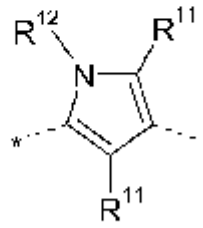
T12

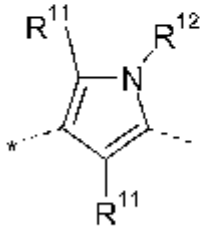


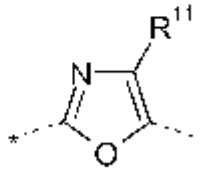
T13

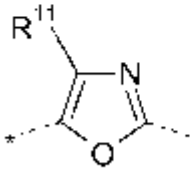


T14

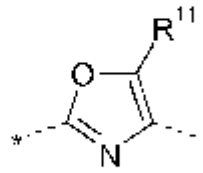
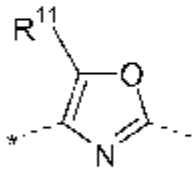
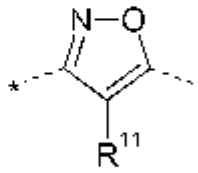
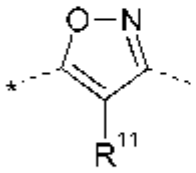




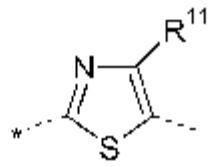
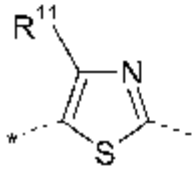
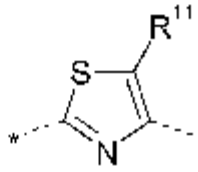
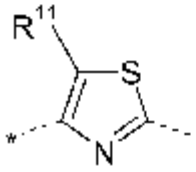




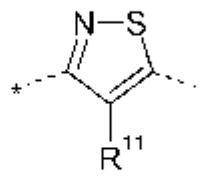
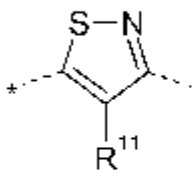
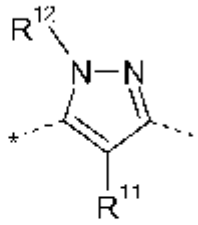
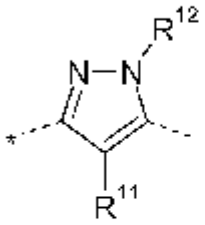
T15 T16 T18 T19

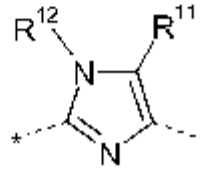
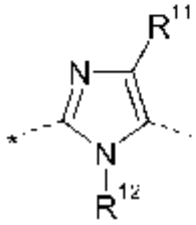
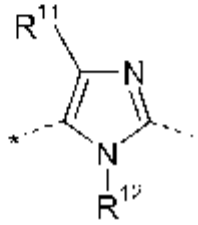
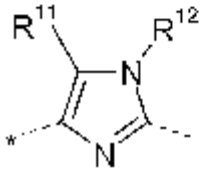
T20 T21 T22 T23

T24 T25 T26 T27

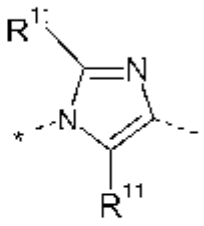
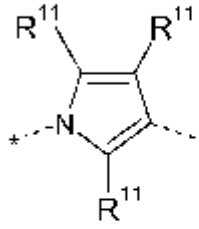
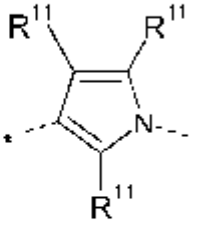





T28 T29 T30 T31

T32 T33 T34 T35

T45 T46 T47

wobei

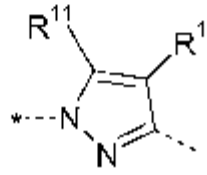
R^{11} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, Amino oder ein gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_6-Alkyloxy, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, bevorzugt für H, steht; und

R^{12} für H, Halogen, Cyano, Nitro, Amino oder ein gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_6-Alkyloxy, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, bevorzugt für H oder Methyl, steht.

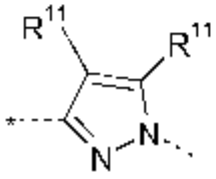
[0114] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht R^{11} unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Amino, Methyl, Ethyl, 1-Methylethyl, tert-Butyl, Trifluormethyl, Difluormethyl, Methoxy, Ethoxy, Trifluormethoxy, 2,2-Difluorethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, Methylcarbonyl, Ethylcarbonyl, Trifluormethylcarbonyl, Methylsulfanyl, Methylsulfinyl, Methylsulfonyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfanyl, oder Trifluormethylsulfinyl.

[0115] In einer mehr bevorzugten Ausführungsform steht R^{11} unabhängig voneinander für H, Methyl, Ethyl, 2-Methylethyl, 2,2-Dimethylethyl, Fluor, Chlor, Brom, Iod, Nitro, Trifluormethyl, oder Amino.

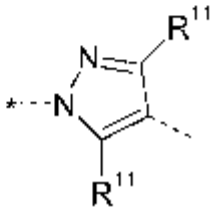
[0116] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht T für einen der nachfolgend aufgeführten 5 gliedrigen Heteroaromaten, wobei die Bindung zum C-Atom des (C-B_1-B_5)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung mit Sternchen und die Bindung zum C-Atom des (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung gekennzeichnet ist,



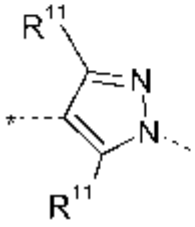
T1



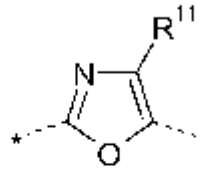
T2



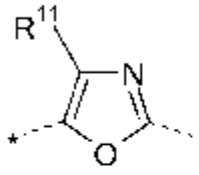
T3



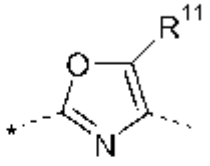
T4



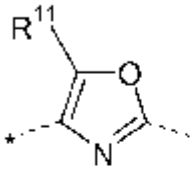
T18



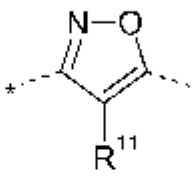
T19



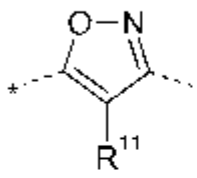
T20



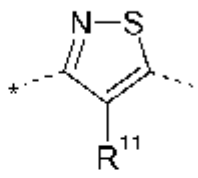
T21



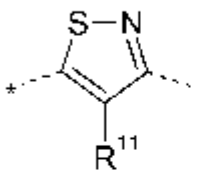
T22



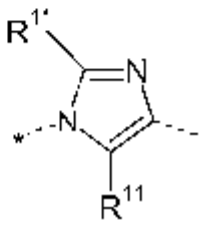
T23



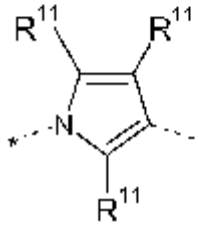
T28



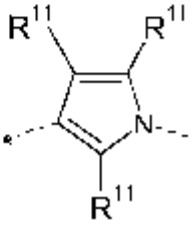
T29



T45



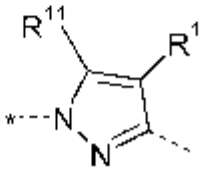
T46



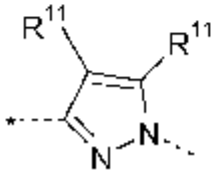
T47

wobei $R^{1'}$ unabhängig voneinander wie hierin beschrieben definiert ist.

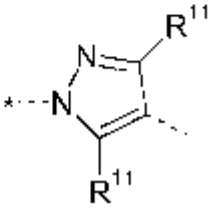
[0117] In einer mehr bevorzugten Ausführungsform steht T für einen der nachfolgend aufgeführten 5 gliedrigen Heteroaromaten, wobei die Bindung zum C-Atom des (C-B_1-B_5)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung mit Sternchen und die Bindung zum C-Atom des (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung gekennzeichnet ist,



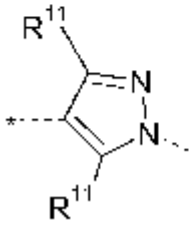
T1



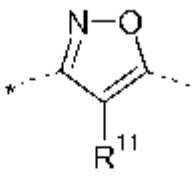
T2



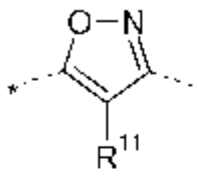
T3



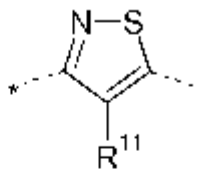
T4



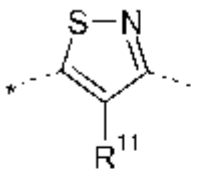
T22



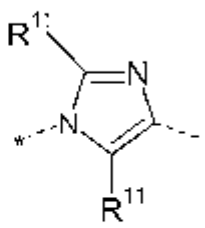
T23

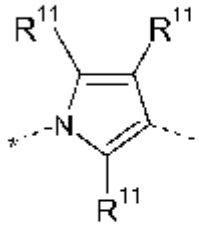


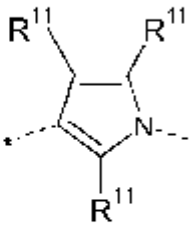
T28



T29

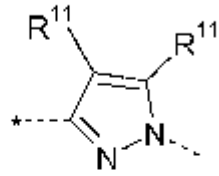

T45

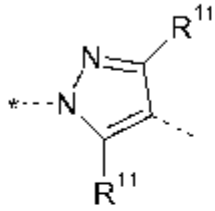

T46

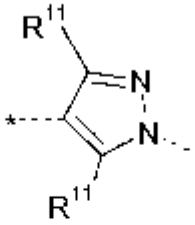

T47

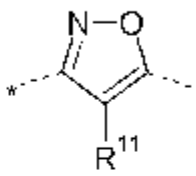
wobei R^{11} wie hierin beschrieben definiert ist und n für die Werte 1 oder 2 steht.

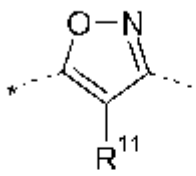
[0118] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform steht T für einen der nachfolgend aufgeführten 5 gliedrigen Heteroaromaten, wobei die Bindung zum C-Atom des (C-B_1-B_2)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung mit Sternchen und die Bindung zum C-Atom des (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung gekennzeichnet ist,

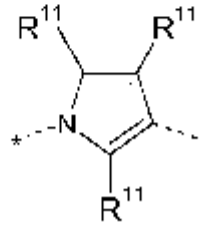

T2

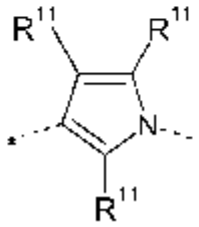

T3


T4


T22

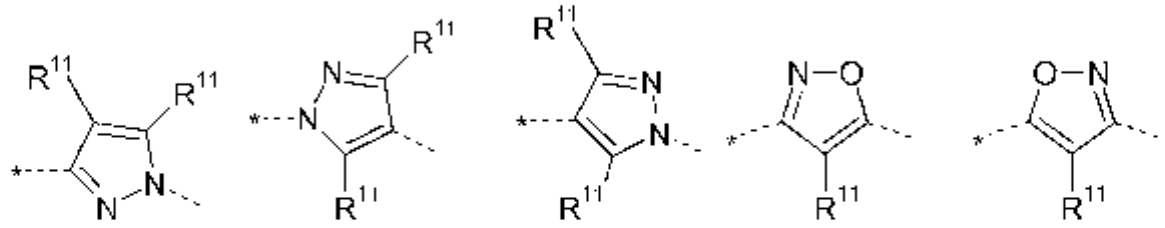

T23


T46


T47

wobei R^{11} unabhängig voneinander wie hierin beschrieben definiert ist.

[0119] In einer weiteren besonders bevorzugten Ausführungsform steht T für einen der nachfolgend aufgeführten 5 gliedrigen Heteroaromaten, wobei die Bindung zum C-Atom des (C-B_1-B_2)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung mit Sternchen und die Bindung zum C-Atom des (C-A_1-A_2-A_3-C-A_4)-Ringsystems mit einer gestrichelten Bindung gekennzeichnet ist,



T2 T3 T4 T22 T23

wobei R^{11} unabhängig voneinander wie hierin beschrieben definiert ist.

[0120] In einer noch bevorzugteren Ausführungsform steht in der Formel (I) und weiteren hierin aufgeführten allgemeinen Formeln

A_1 für C-R^2 oder N, bevorzugt für C- R^2,

A_2 für CR^3 oder N,

A_3 für CR^4,

A_4 für C-R^5 oder N,

B_1 für CR^6,

B_2 für C-H,

B_3 für CR^8,

B_4 für C-H,

B_5 für CR^{10} oder N,

R^1 für Wasserstoff,

R^2 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, Fluor oder Chlor, bevorzugt für H,

R^3 für Wasserstoff oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)),

R^4 für Wasserstoff, Chlor, Fluor, C_1-C_3-Alkyl (wie -CH_3), Cyclopropyl, C_1-C_3-Alkoxy (wie-O-CH_3), *N*-C_1-C_4-Alkylamino (-NH-C_1-C_3-Alkyl wie - NH-CH_3), C_3-cycloalkylamino (wie NH-C_3H_5), *N*-C_1-C_3-Alkoxy-C_1-C_3-Alkylamino (wie -NH-C_2H_4-O-CH_3) oder 1-Pyrrolidinyl, besonders bevorzugt Chlor,

R^5 für Wasserstoff oder Fluor, bevorzugt H,

R^6 und R^{10} unabhängig voneinander für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt stehen R^6 und R^{10} für C_1-C_3-Alkyl), C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7))mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes

C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl, Fluor, Brom oder Chlor (bevorzugt stehen R^6 und R^{10} für Chlor),

R^8 für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)) oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)),

R^{10} für Wasserstoff, Cyano (CN) oder Amino (NH_2),

W für Sauerstoff oder Schwefel, bevorzugt für Sauerstoff,

Q für C_1-C_6-Alkyl, Cyclopropyl, 1-(Cyano)-cyclopropyl, 1-(perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl)-cyclopropyl (wie (1-(Trifluoromethyl)-cyclopropyl), 1-(C_1-C_4-Alkyl)-cyclopropyl (wie 1-(tert.Butyl)-cyclopropyl), 1-(Thiocarbamoyl)-cyclopropyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl (z. B. CH_2CF_3, $CH_2CH_2CF_3$), Thietan-3-yl, N-Methyl-Pyrazol-3-yl, 2-oxo-2(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl, und

T für ein T ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus T1 bis T47, bevorzugt für T2, T3, T4, T22 oder T23 (besonders bevorzugt für T22 oder T23).

[0121] In einer weiteren noch bevorzugteren Ausführungsform stehen in der Formel (I) und weiteren hierin aufgeführten allegmeinen Formeln

A_1 für C-R^2 oder N, bevorzugt für C- R^2,

A_2 für CR^3 oder N,

A_3 für CR^4,

A_4 für C-R^5 oder N,

B_1 für CR^5,

B_2 für C-H,

B_3 für CR^8,

B_4 für C-H,

B_5 für CR^{10} oder N,

R^1 für C_1-C_2-Alkyl (Methyl oder Ethyl, besonders bevorzugt für Methyl),

R^2 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, Fluor oder Chlor, bevorzugt für H,

R^3 für Wasserstoff oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)),

R^1 für Wasserstoff, Chlor, Fluor, C_1-C_3-Alkyl (wie -CH_3), Cyclopropyl, C_1-C_3-Alkoxy (wie-O-CH_3), N-C_1-C_4-Alkylamino (-NH-C_1-C_2-Alkyl wie -NH-CH_3), C_3-cycloalkylamino (wie -NH-C_3H_5), N-C_1-C_3-Alkoxy-C_1-C_3-Alkylamino (wie, -NH-C_2H_4-O-CH_3) oder 1-Pyrrolidinyl, besonders bevorzugt Chlor,

R^5 für Wasserstoff oder Fluor, bevorzugt H,

R^6 und R^{10} unabhängig voneinander für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt stehen R^6 und R^{10} für C_1-C_3-Alkyl), C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7))mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl, Fluor, Brom oder Chlor (bevorzugt stehen R^6 und R^{10} für Chlor),

R^8 für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)) oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)),

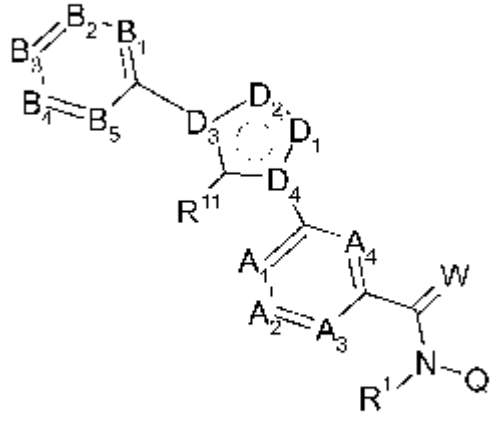
R^{11} für Wasserstoff, Cyano (CN) oder Amino (NH_2),

W für Sauerstoff oder Schwefel, bevorzugt für Sauerstoff,

Q für C, C_3 Alkyl, Cyclopropyl, 1-(Cyano)-cyclopropyl, 1-(perfluoriertes C_1-C_2-Alkyl)-cyclopropyl (wie (1-(Trifluoromethyl)-cyclopropyl), 1-(C_1-C_4-Alkyl)-cyclopropyl (wie 1-(tert.Butyl)-cyclopropyl), 1-(Thiocarbamoyl)-cyclopropyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl (z. B. CH_2CF_3, $CH_2CH_2CF_3$), Thietan-3-yl, N-Methyl-Pyrazol-3-yl, 2-oxo-2(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl, und

T für ein T ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus T1 bis T47, bevorzugt für T2, T3, T4, T22 oder T23 (besonders bevorzugt für T22 oder T23).

[0122] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft zudem Verbindungen der Formel (Ia)



(Ia)

worin

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 und B_5 wie hierin beschrieben definiert sind, wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; und

D_1 und D_2 jeweils unabhängig voneinander für $C\text{-}R^{11}$ oder ein Heteroatom stehen, bevorzugt für $C\text{-}R^{11}$ oder ein Heteroatom ausgewählt aus N, O oder S, besonders bevorzugt für $C\text{-}R^{11}$ oder ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O, stehen;

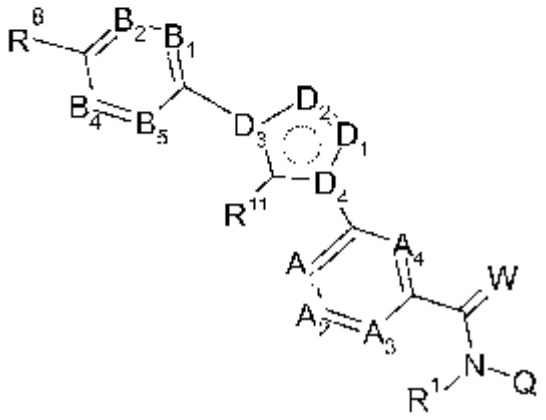
die Gruppierungen D_3 und D_4 unabhängig voneinander für C oder für ein Heteroatom ausgewählt aus N stehen;

wobei ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom stehen;



für ein aromatisches System steht.

[0123] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft zudem Verbindungen der Formel (Ia')



(Ia')

worin

R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, und B_5 wie hierin beschrieben definiert sind, wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht;

D_1 und D_2 jeweils unabhängig voneinander für $C\text{-}R^{11}$ oder ein Heteroatom stehen, bevorzugt für $C\text{-}R^{11}$ oder ein Heteroatom ausgewählt aus N, O oder S, besonders bevorzugt für $C\text{-}R^{11}$ oder ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O, stehen;

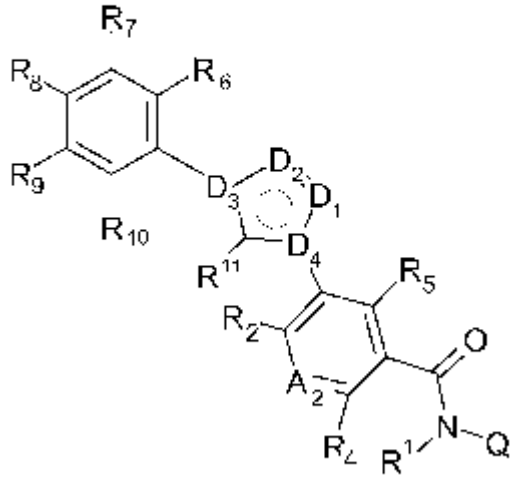
die Gruppierungen D_3 und D_4 unabhängig voneinander für C oder für ein Heteroatom ausgewählt aus N stehen;

wobei ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom stehen; in anderen Worten: wobei maximal ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom steht/stehen, wobei ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O im Fall von D_1 und D_2, oder N im Fall von D_3 und D_4 stehen;

 für ein aromatisches System steht

und R^3 wie hierin definiert ist, bevorzugt für perfluoriertes C_1-C_4-Alkyl steht.

[0124] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ib)



(Ib)

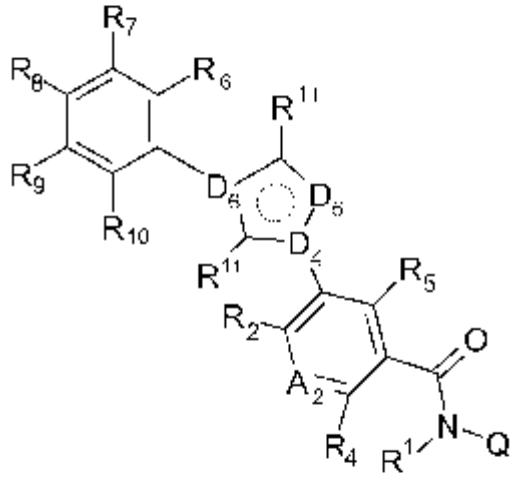
worin R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{11}, A_2, Q, D_1, D_2, D_3 D_4 und  wie hierin beschrieben definiert sind und wobei ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom stehen.

[0125] Zwei besonders bevorzugte Ausführungsformen betreffen Verbindungen der Formel (Ib) und (Id) worin D_1 für N, D_2 für O und D_3 und D_4 für C stehen; oder D_1 für C-R^{11}, D_2 für N und D_3 für N und D_4 für C steht wobei R_{11} für H, Halogen, Cyano, Nitro, Amino oder ein gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_6-Alkyloxy, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, bevorzugt für H oder Halogen wie F, Cl, Br oder I, und besonders bevorzugt für H, steht; und R_2 bevorzugt für H steht oder R_1 bevorzugt für Methyl steht.

[0126] Eine weitere besonders bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ib) und (Id) worin D_1 für O, D_2 für N und D_3 und D_4 für C stehen; wobei R_{11} für H, Halogen, Cyano, Nitro,

Amino oder ein gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_6-Alkyloxy, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, bevorzugt für H oder Halogen wie F, Cl, Br oder I, und besonders bevorzugt für H, steht; und R_{11} bevorzugt für H steht oder R_{11} bevorzugt für Methyl steht.

[0127] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ic)



(Ic)

worin R_1, R_2, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9, R_{10}, R_{11}, A_2 und Q wie hierin beschrieben definiert sind und  für ein aromatisches System steht; und

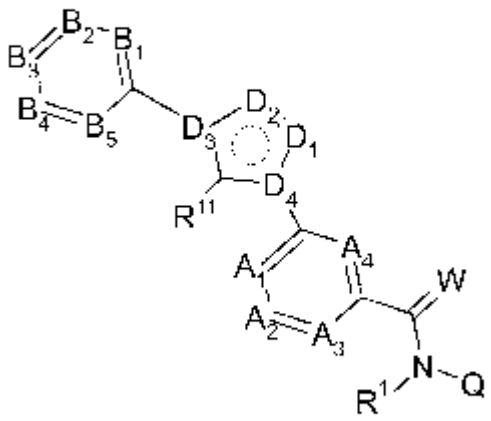
eine Gruppierung ausgewählt aus D_4 und D_6 für N steht, wobei die jeweils andere Gruppierung ausgewählt aus D_4 und D_6 für N oder C steht; und

D_5 für N oder C-R^{11} steht;

unter der Bedingung, dass maximal zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_4, D_5 und D_6 für N stehen.

[0128] Bevorzugte Ausführungsformen betreffen Verbindungen der Formel (Ic), worin D_4 für N und D_5 und D_6 jeweils für C-R^{11} stehen; worin D_6 für N und D_5 und D_4 jeweils für C-R^{11} stehen; oder worin D_4 und D_5 jeweils für N stehen und D_6 für C-R^{11} steht.

[0129] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Id)



(Id)

[0130] wobei R^1, R^{11}, Q, W, A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 und B_5, D_1, D_2, D_3 und D_4 sowie ⋯ wie hierin beschrieben definiert sind, wobei maximal ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3 und D_4 für ein Heteroatom stehen und wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

[0131] Eine besonders bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ia), (Ib), (Ic) oder (Id) worin R^8 für C_1-C_6-Alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, mit Halogen substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkylsulfanyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkylsulfinyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino, *N*,*N*-Di-C_1-C_4-Alkylamino, sowie für Halogen, Cyano oder Nitro steht. Beispiele sind Fluor, Chlor, Brom, Iod, Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Difluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Dichlorfluormethyl, Trifluormethyl, Chlormethyl, Brommethyl, 1-Fluorethyl, 2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,2,2,2-Tetrafluorethyl, 1-Chlor-1,2,2,2-tetrafluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl, 1,1-Difluorethyl, Pentafluorethyl Pentafluor-tert-butyl, Heptafluor-n-propyl, Heptafluor-isopropyl, Nonafluor-n-butyl, Nonafluor-sec-butyl, Cyclopropyl, Cyclobutyl, Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, 1-Methylethoxy, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy, *N*-Methoxyiminomethyl, 1-(*N*-Methoxyimino)-ethyl, Methylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl, Trifluormethylsulfanyl, *N*,*N*-Dimethylamino. Mehr bevorzugt steht R^8 für mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl wie Difluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Dichlorfluormethyl, Trifluormethyl, 1-Fluorethyl, 2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,2,2,2-Tetrafluorethyl, 1-Chlor-1,2,2,2-tetrafluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl, 1,1-Difluorethyl, Pentafluorethyl Pentafluor-tert-butyl, Heptafluor-n-propyl, Heptafluor-isopropyl, Nonafluor-n-butyl, Nonafluor-sec-butyl; mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkoxy wie Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy; Trifluormethylsulfonyl; Trifluormethylsulfinyl; oder Trifluormethylsulfanyl steht. Noch mehr bevorzugt steht R^8 für Difluormethyl, Trichlormethyl, Chlordifluormethyl, Dichlorfluormethyl, Trifluormethyl, 1-Fluorethyl,

2-Fluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, 1,2,2,2-Tetrafluorethyl, 1-Chlor-1,2,2,2-tetrafluorethyl, 2,2,2-Trichlorethyl, 2-Chlor-2,2-difluorethyl, 1,1-Difluorethyl, Pentafluorethyl Pentafluor-tert-butyl, Heptafluor-n-propyl, Heptafluor-isopropyl, Nonafluor-n-butyl, Nonafluor-sec-butyl, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl, oder Trifluormethylsulfanyl. Besonders bevorzugt steht R^8 in Verbindungen der Formel (Ib) für perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie perfluoriertes Propyl ($-C_3F_7$), perfluoriertes Ethyl (C_2F_5) oder perfluoriertes Methyl (CF_3), ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes Propyl ($-C_3F_7$) oder perfluoriertes Methyl.

[0132] Besonders bevorzugte Verbindungen entsprechend den Verbindungen der Formel (Ia) sind Verbindungen der Formel (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22) und (I-T23).

[0133] Eine Ausführungsform der vorliegenden Erfindung bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I-T2) und (I-T4).

[0134] Eine weitere Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I-T3).

[0135] Eine weitere Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formeln (I-T22) und (I-T23).

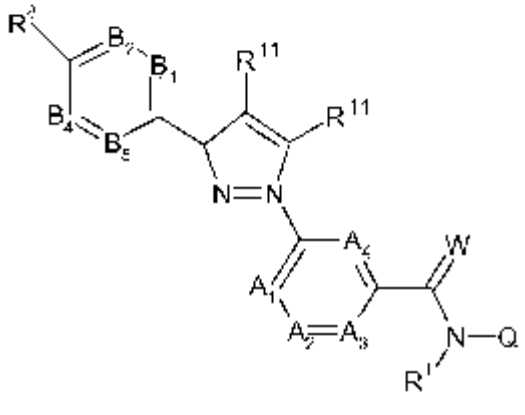
[0136] Somit bezieht sich eine ganz besonders bevorzugte Ausführungsform auf Verbindungen der Formel (I-T2). Eine bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T2) in der R^1 für H steht. Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T2) in der R^1 für Methyl steht.

[0137] Eine weitere ganz besonders bevorzugte Ausführungsform auf Verbindungen der Formel (I-T3). Eine bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T3) in der R^1 für H steht. Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T3) in der R^1 für Methyl steht.

[0138] Eine weitere ganz besonders bevorzugte Ausführungsform auf Verbindungen der Formel (I-T4). Eine bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T4) in der R^1 für H steht. Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T4) in der R^1 für Methyl steht.

[0139] Eine weitere ganz besonders bevorzugte Ausführungsform auf Verbindungen der Formel (I-T22). Eine bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T22) in der R^1 für H steht. Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T22) in der R^1 für Methyl steht.

[0140] Eine weitere ganz besonders bevorzugte Ausführungsform auf Verbindungen der Formel (I-T23). Eine bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T23) in der R^1 für H steht. Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich dabei wiederum auf Verbindungen der Formel (I-T23) in der R^1 für Methyl steht.

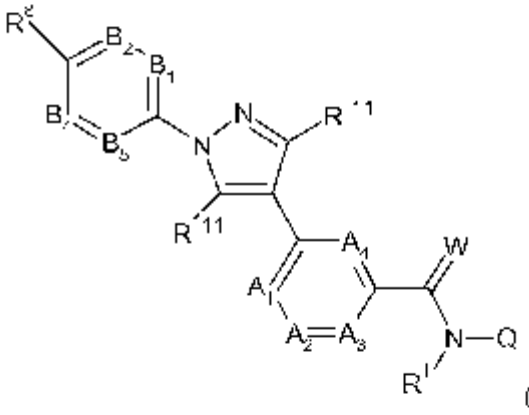


(I-T2)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q und W wie hierin beschrieben definiert sind

wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4 für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; bzw.

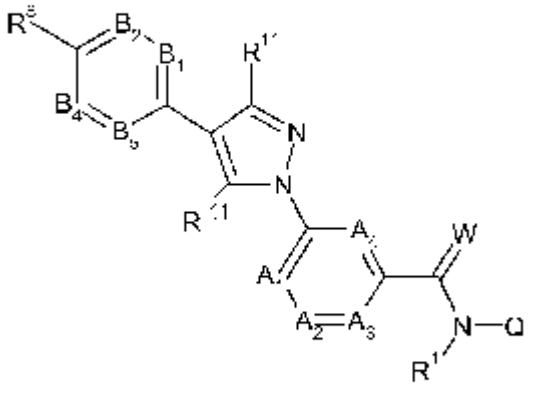


(I-T3)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q und W wie hierin beschrieben definiert sind

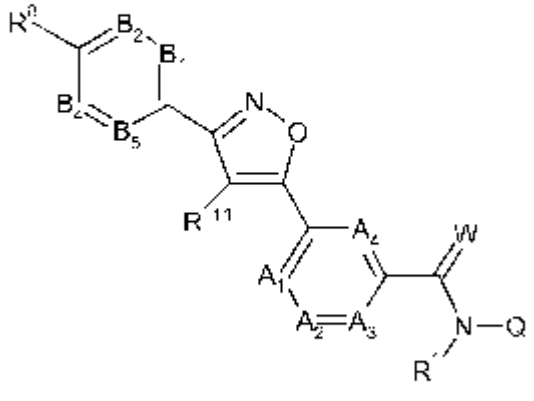
wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4 für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; bzw.



(I-T4)

worin

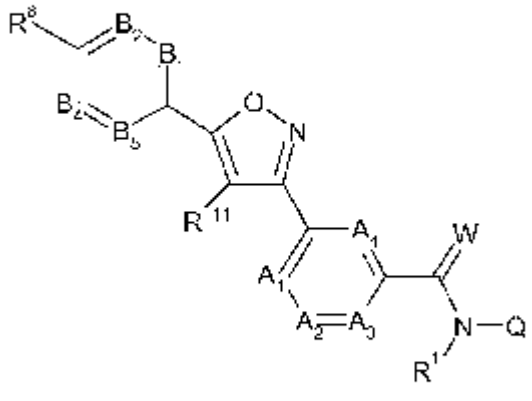
R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; bzw.



(T-22)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; bzw.

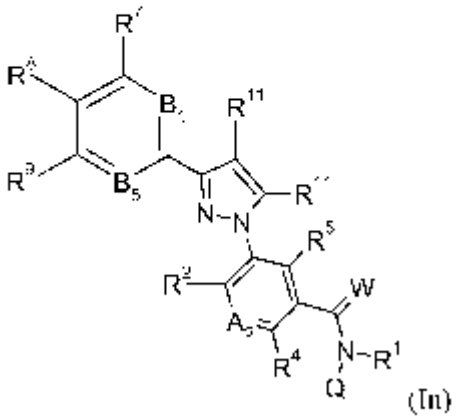


(I-T23)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, R^{11} Q und W wie hierin beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht,

[0141] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (In) (T = T2)



(In)

worin R', Q, W, A_3, B_1, B_5, R^2, R^3, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 und R^{11} wie hierin beschrieben definiert sind, bevorzugt, worin R^1 H darstellt oder worin R^1 Methyl darstellt.

[0142] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (In) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_8-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_4-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;

bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid ($C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_2-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogeniertem C_1-C_2-Alkyl substituiertes C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_2-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid ($C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_4-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_2-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht;

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

R^1 jeweils für H steht;

R^1 für H steht;

R^2 für H, Halogen oder C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

B_5 für N oder C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

A_2 für N or C-R^3 steht, bevorzugt für C-R^3, worin

R^3 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl, Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-

alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie fluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. fluoriertes C_3-alkyl wie perFluoropropyl) steht.

[0143] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (In) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_2-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6 Alkyl, C_2-C_4 Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6 Alkylsulfanyl, C_1-C_6 Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;
bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (-C(=O)N(R_2), wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_3-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogeniertem C_1-C_3-Alkyl substituiertes C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid (-C(=O)N(R_2), wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluoriertem C_1-C_2-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht;

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

R^{11} jeweils für H steht;

R^1 für Methyl steht;

R^2 für H, Halogen oder C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder Methyl steht;

R^1 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

B_5 für N or C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

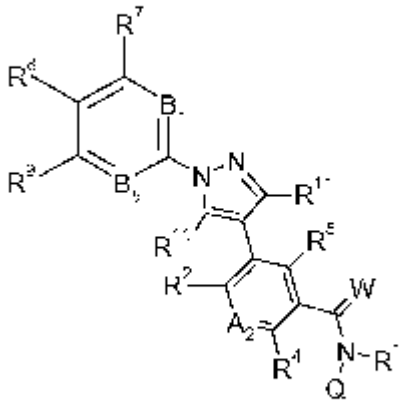
A_2 für N or C-R^5 steht, bevorzugt für C-R^5, worin

R^5 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3 Alkylsulfanyl, C_1-C_3 Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie fluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. fluoriertes C_3-alkyl wie perFluoropropyl) steht.

[0144] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ic) (T – T3)



(Ic)

worin R', Q, W, A_5, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 und R^{11} wie hierin beschrieben definiert sind, bevorzugt, worin R^1 H darstellt oder worin R^1 Methyl darstellt.

[0145] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ie) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_2-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_4-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;
bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (–C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_2-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_2-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogenierten C_1-C_2-Alkyl substituierten C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid (–C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_4-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_2-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht;

R' und R^9 jeweils für H stehen;

R^{11} jeweils für H steht;

R^1 für H steht;

R^2 für H, Halogen oder C_1-C_3-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

B_5 für N or C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-

C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

A_2 für N or C-R^5 steht, bevorzugt für C-R^5, worin

R^5 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl wie fluoriertes C_1-C_2-alkyl (z. B. fluoriertes C_2 alkyl wie perFluoropropyl) steht.

[0146] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ie) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_2-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6 Alkyl, C_2-C_4 Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6 Alkylsulfanyl, C_1-C_6 Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;
bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (-C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_3-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_2-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogenierten C_1-C_2-Alkyl substituierten C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus

N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid (-C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_3-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht;

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

R^{11} jeweils für H steht;

R^1 für Methyl steht;

R^2 für H, Halogen oder C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluoro oder Chloro steht;

B_5 für N or C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

A_2 für N or C-R^5 steht, bevorzugt für C-R^5, worin

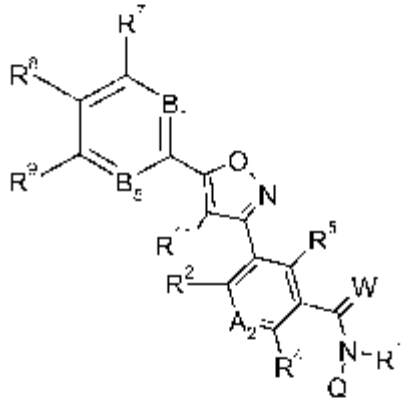
R^3 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkoxy steht, bevorzugt für mit

Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie fluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. fluoriertes C_3-alkyl wie perfluoropropyl) steht.

[0147] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (If) (T T23)



(If)

worin R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 und R^1 wie hierin beschrieben definiert sind bevorzugt, worin R^1 H darstellt oder worin R^1 Methyl darstellt.

[0148] Eine bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (If) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;
bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_2 Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid ($C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_3-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogeniertem C_1-C_2-Alkyl substituiertes C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid (–C(–O)N(R)2, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl

oder mit Halogen substituiertes C -C₆-Alkyl steht) substituiertes C₁-C₆-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C₁-C₂-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht;

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

R^{11} jeweils für H steht;

R^1 für H steht;

R^3 für H, Halogen oder C -C₄-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder Methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

B_5 für N oder C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für H, Halogen, C -C₄-alkyl oder C₁-C₄-alkoxy steht, bevorzugt für H, Fluor, Brom, Chlor, C₁-C₂-alkyl oder C -C₄-alkoxy, besonders bevorzugt für H, Chlor, Brom Fluor, methyl oder methoxy steht;

A_2 für N oder C-R^3 steht, bevorzugt für C-R^3, worin

R^3 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C₁-C₄-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C₁-C₂-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluor substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für H, Halogen, gegebenenfalls substituiertes C₁-C₄-alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C₁-C₄-alkoxy steht, bevorzugt für Fluor, Chlor, C, C₂ alkyl, mit Halogen substituiertes C -C₂-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C₁-C₂-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C₁-C₂-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C₁-C₄-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C₁-C₃-alkyl oder mit Halogen substituiertes C₁-C₃-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C -C₃-alkyl wie fluoriertes C -C₃-alkyl (z. B. fluoriertes C₃-alkyl wie Perfluorpropyl) steht.

[0149] Eine bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (If) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C -C₆-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C₃-C₆-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig

voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_4-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;

bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (–C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_2-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogeniertem C_1-C_4-Alkyl substituiertes C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht, steht;

besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_2-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid (–C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_2-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_2 Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht.

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

R^{11} jeweils für H steht;

R^1 für Methyl steht;

R^3 für H, Halogen oder C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder Methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

B_5 für N oder C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

A_6 für N or C-R^6 steht, bevorzugt für C-R^6, worin

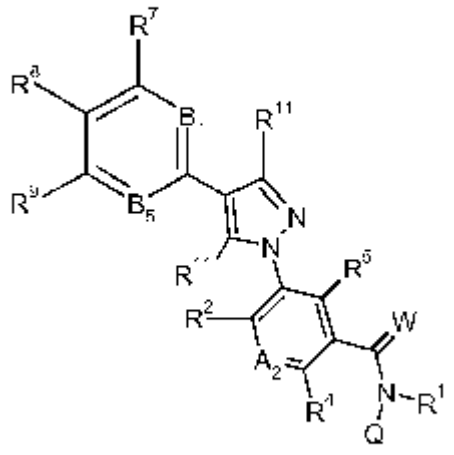
R^2 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_2-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-

C_1-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^9 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie fluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. fluoriertes C_3-alkyl wie Perfluorpropyl) steht.

[0150] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ig) (T = T4)



(Ig)

worin R^1, Q, W, A_2, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 und R^{11} wie hierin beschrieben definiert sind bevorzugt, worin R^1 H darstellt oder worin R^1 Methyl darstellt.

[0151] Eine bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ig) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_2-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6 Alkyl, C_2-C_4 Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6 Alkylsulfanyl, C_1-C_6 Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;
bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (–C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_2-Alkyl

steht, substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogenierten C_1-C_2-Alkyl substituierten C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid (–C(=O)N(R)–, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_3-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischen Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht.

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

R^1 jeweils für H steht;

R^1 für H steht;

R^2 für H, Halogen oder C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder Methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

B_5 für N oder C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_2 Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

A_2 für N or C-R^3 steht, bevorzugt für C-R^3, worin

R^3 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2 alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl),

fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^6 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie fluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. fluoriertes C_3-alkyl wie Perfluorpropyl) steht.

[0152] Eine bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ig) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;
bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_2-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (–$C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_3-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_4-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogeniertem C_1-C_2-Alkyl substituiertes C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid (–$C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_3-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluormethyl)cyclopropyl); für einem 4 gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht.

R^7 und R^8 jeweils für H stehen;

R^1 jeweils für H steht;

R^5 für Methyl steht;

R^3 für H, Halogen oder C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder Methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

R^2 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

B_5 für N oder C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

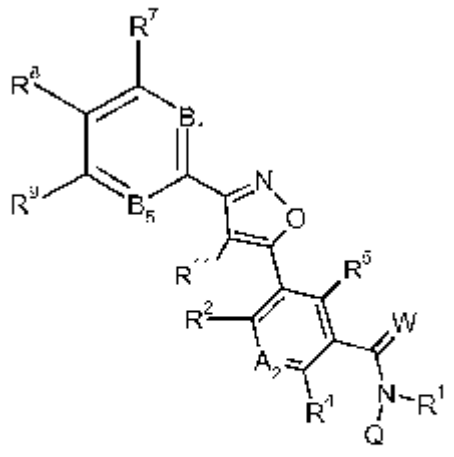
A_2 für N or C-R^3 steht, bevorzugt für C-R^3, worin

R^3 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie fluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. fluoriertes C_3-alkyl wie Perfluorpropyl) steht.

[0153] Eine weiter bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Io) (T = T27)



(Io)

worin R^1, Q, W, A_5, B_1, B_5, R^2, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9 und $R^{1'}$ wie hierin beschrieben definiert sind bevorzugt, worin R^1 H darstellt oder worin R^1 Methyl darstellt.

[0154] Eine bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Io) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_2-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_4-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl steht;
bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid ($-C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_2-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_2-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogenierten C_1-C_2-Alkyl substituierten C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht, steht;
besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid ($-C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_4-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_2-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluoromethyl)cyclopropyl); für einem 4-gliedrigen heterocyclischem Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht.

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

$R^{1'}$ jeweils für H steht;

R^1 für H steht;

R^2 für H, Halogen oder C_1-C_3-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder Methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

B_5 für N oder C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_4-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-

C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

A_2 für N or C-R^5 steht, bevorzugt für C-R^5, worin

R^5 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_3-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie fluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. fluoriertes C_3-alkyl wie Perfluorpropyl) steht.

[0155] Eine bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Io) worin

W für O steht;

Q für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl oder gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl oder für einen gegebenenfalls mit ein, zwei oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_1-C_6-Alkoxy, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6 Alkylsulfonyl steht;

bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_4-Alkyl; mit Cyano, Hydroxy oder Carbonamid (–C(=O)N(R)$_2$, wobei R unabhängig voneinander für H oder C_1-C_3-Alkyl steht, substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht; C_3-Cycloalkyl; mit Cyano, Halogen, Nitro oder halogenierten C_1-C_2-Alkyl substituierten C_3-Cycloalkyl; einem gegebenenfalls mit ein, zwei, oder drei V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring enthaltend ein oder zwei Heteroatome ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O und S, wobei V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, Oxo (=O), gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht, steht:

besonders bevorzugt für fluoriertes C_1-C_3-Alkyl wie CF_3, CH_2CF_3 oder $CH_2CH_2CF_3$; für mit Carbonamid ($C(=O)N(R)_2$, wobei R unabhängig voneinander für H, C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl steht) substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl; für Cyclopropyl; für mit Cyano oder fluorierten C_1-C_2-Alkyl substituierte Cyclopropyl wie 1-(cyano)cyclopropyl oder 1-(trifluormethyl)cyclopropyl); für einen 4-gliedrigen heterocyclischen Ring enthaltend ein Heteroatom ausgewählt aus einer Gruppe bestehend aus N, O oder S wie Thietan-3-yl steht.

R^7 und R^9 jeweils für H stehen;

R^{1a} jeweils für H steht;

R^1 für Methyl steht;

R^2 für H, Halogen oder C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder Methyl steht;

R^4 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

R^5 für H oder Halogen steht, bevorzugt für H, Fluor oder Chlor steht;

B_5 für N oder C-R^{10} steht, bevorzugt für C-R^{10}, worin

R^{10} für Wasserstoff, C_1-C_2-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht;

A_5 für N or C-R^3 steht, bevorzugt für C-R^3, worin

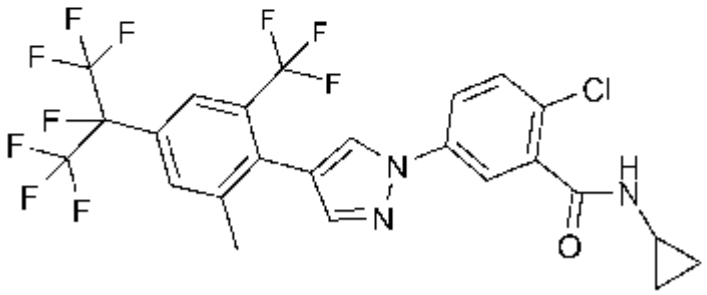
R^3 für H, Halogen, oder gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-alkyl steht, bevorzugt für H, Fluor, Chlor oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkyl steht, besonders bevorzugt für H oder mit Fluoro substituiertes Methyl wie z. B. Perfluormethyl steht;

R^6 für Wasserstoff, C_1-C_2-Alkyl, C_1-C_3-Alkoxy, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkyl (CF_3, C_2F_5 oder C_3F_7)), mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy (bevorzugt perfluoriertes C_1-C_3-Alkoxy (OCF_3, OC_2F_5 oder OC_3F_7)), C_1-C_3-Alkylsulfanyl, C_1-C_3-Alkylsulfinyl, C_1-C_3-Alkylsulfonyl Fluor, Brom oder Chlor steht, bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, C_1-C_2 alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2 alkyl (z. B. Perfluormethyl) oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_2-alkoxy, besonders bevorzugt für Fluor, Brom, Chlor, Methyl, Ethyl, fluoriertes Methyl oder fluoriertes Ethyl (besonders bevorzugt Perfluormethyl oder Perfluorethyl), fluoriertes Methoxy oder fluoriertes Ethoxy (besonders bevorzugt Perfluormethoxy) steht;

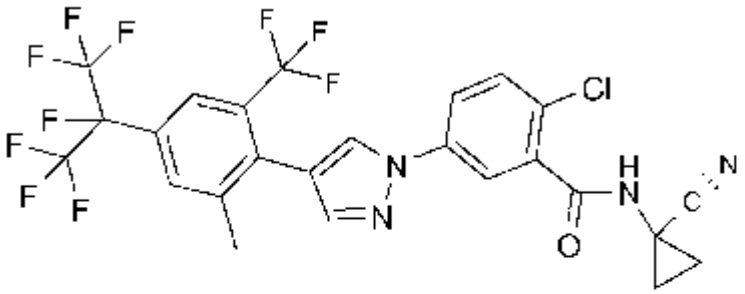
R^8 für Halogen oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkyl oder gegebenenfalls mit Halogen substituiertes C_1-C_4-alkoxy steht, bevorzugt für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy, mehr

bevorzugt für mit Halogen substituiertes C -C6-alkyl wie fluoriertes C -C6-alkyl (z. B. fluoriertes C3-alkyl wie Perfluorpropyl) steht.

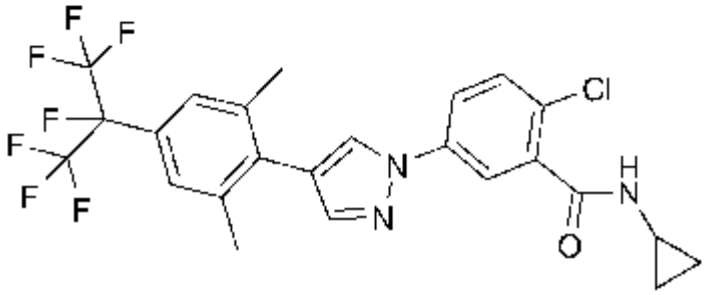
[0156] Beispielhaft für Verbindungen der Formel (I) seien folgende Strukturen genannt:



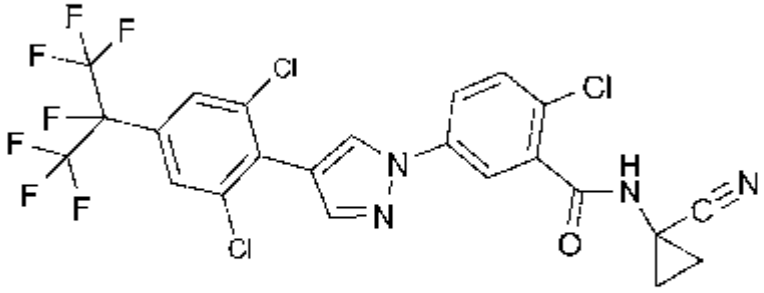
2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)-2-methyl-6-(trifluormethyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl]benzamid,



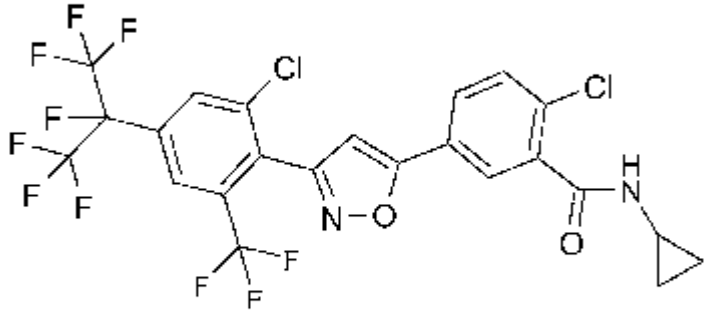
2-Chlor-N-(1-cyanocyclopropyl-5-[1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)-2-methyl-6-(trifluormethyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl]benzamid,



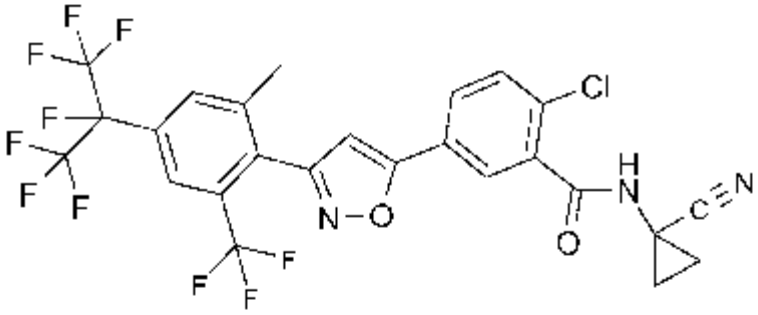
2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamid,



2-Chlor-N-(1-cyanocyclopropyl)-5-[4-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamid,

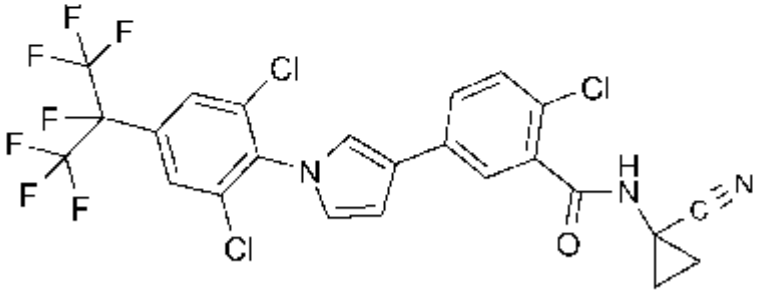


2-Chlor-5-[3-[2-chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]isoxazol-5-yl]-N-cyclopropyl-benzamid,

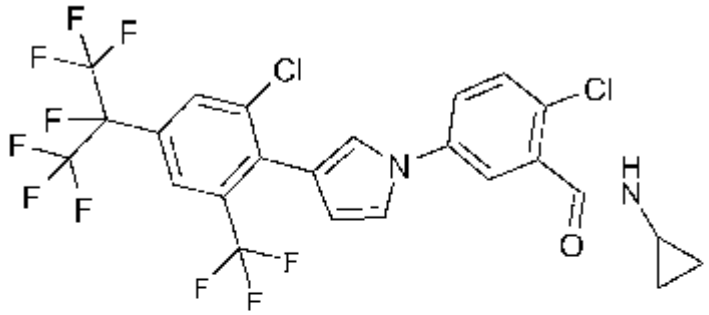


2-Chlor-N-(1-cyanocyclopropyl)-5-[3-[2-methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]isoxazol-5-yl]benzamid,

Weitere erfindungsgemäße Verbindungen sind



2-Chlor-N-(1-cyanocyclopropyl)-5-[1-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol-3-yl]benzamid,



2-Chlor-5-[3-[2-chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]pyrrol-1-yl]-N-cyclopropyl-benzamid.

R1 Methyl

[0157] Eine bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I), in der R^1 für Methyl steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] definiert sind.

T3 - Methyl

[0158] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0159] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^7, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0160] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0161] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

T2 - Methyl

[0162] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0163] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^7, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0164] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0165] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

T4 - Methyl

[0166] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0167] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^4, A_2 für CR^5 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0168] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0169] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

T22 - Methyl

[0170] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0171] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0172] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0173] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

T23 - Methyl

[0174] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T23 steht, R^{11} in T23 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0175] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T23 steht, R^{11} in T23 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0176] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T23 steht, R^{11} in T23 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0177] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T23 steht, R^{11} in T23 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff. definiert sind.

T3 - H

[0178] Eine bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I), in der R^{11} für Wasserstoff (H) steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0179] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff. definiert sind.

[0180] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff. definiert sind.

[0181] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0182] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T3 steht, R^{11} in T3 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

T2 - H

[0183] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0184] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0185] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0186] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T2 steht, R^{11} in T2 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

T4 - H

[0187] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0188] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0189] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0190] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T4 steht, R^{11} in T4 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_4-

alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff. definiert sind.

T22 - H

[0191] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff. definiert sind.

[0192] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0193] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff. definiert sind.

[0194] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T22 steht, R^{11} in T22 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

T23 - H

[0195] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T23 steht, R^{11} in T23 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff definiert sind.

[0196] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T23 steht, R^{11} in T23 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph |0085| und Paragraph |0113| ff. definiert sind.

[0197] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T23 steht, R^{11} in T23 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10}

jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C1-C6-alkyl, mit Halogen substituiertes C1-C3-alkyl, C1-C3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C1-C2-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0198] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T23 steht, $R^{1'}$ in T23 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^5, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C1-C6-alkyl, mit Halogen substituiertes C1-C6-alkyl, C1-C6-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C1-C3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0199] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I), in der B_1 für C-R^6 steht und R^6 für Halogen (bevorzugt für Chlor oder Fluor), C1-C2-Alkyl, C1-C2-Alkoxy, C1-C4-Halogenalkyl (bevorzugt perfluoriertes C1-C4-Alkyl), C1-C2-Halogenalkoxy (bevorzugt perfluoriertes C1-C4-Alkoxy), C1-C4-Alkylsulfanyl oder C1-C4-Alkylsulfonyl steht.

[0200] Erfindungsgemäß geeignete Salze der erfindungsgemäßen Verbindungen, beispielsweise Salze mit Basen oder Säureadditionssalze, sind alle üblichen nicht toxischen Salze, vorzugsweise landwirtschaftlich und/oder physiologisch annehmbare Salze. Bevorzugt werden Salze mit anorganischen Basen, wie beispielsweise Alkalimetallsalze (z.B. Natrium-, Kalium- oder Cäsiumsalze), Erdalkalimetallsalze (z.B. Calcium- oder Magnesiumsalze), Ammoniumsalze oder Salze mit organischen Basen, insbesondere mit organischen Aminen, wie beispielsweise Triethylammonium-, Dicyclohexylammonium-, *N,N'*-Dibenzylethylendiammonium-, Pyridinium-, Picolinium- oder Ethanolammoniumsalze, Salze mit anorganischen Säuren (z.B. Hydrochloride, Hydrobromide, Dihydrosulfate, Trihydrosulfate, oder Phosphate), Salze mit organischen Carbonsäuren oder organischen Sulfosäuren (z.b. Formiate, Acetate, Trifluoracetate, Maleate, Tartrate, Methansulfonate, Benzolsulfonate oder 4-Toluolsulfonate). Bekanntermaßen können t-Amine, wie beispielsweise manche der erfindungsgemäßen Verbindungen, *N*-Oxide bilden, welche ebenfalls erfindungsgemäße Salze darstellen.

[0201] Die Verbindungen der Formel (I) können in Abhängigkeit von der Art der Substituenten als geometrische und/oder als optisch aktive Isomere oder entsprechende Isomerengemische in unterschiedlicher Zusammensetzung vorliegen. Diese Stereoisomere sind beispielsweise Enantiomere, Diastereomere, Atropisomere oder geometrische Isomere. Die Erfindung umfasst somit reine Stereoisomere als auch beliebige Gemische dieser Isomere.

[0202] Die Erfindung betrifft auch Verfahren zur Bekämpfung von tierischen Schädlingen, bei dem man Verbindungen der Formel (I) auf tierische Schädlinge und/oder ihren Lebensraum einwirken lässt. Bevorzugt wird die Bekämpfung der tierischen Schädlinge in der Land- und Forstwirtschaft und im Materialschutz durchgeführt. Hierunter vorzugsweise ausgeschlossen sind Verfahren zur chirurgischen

oder therapeutischen Behandlung des menschlichen oder tierischen Körpers und Diagnostizierverfahren, die am menschlichen oder tierischen Körper vorgenommen werden.

[0203] Die Erfindung betrifft ferner die Verwendung der Verbindungen der Formel (I) als Schädlingsbekämpfungsmittel, insbesondere Pflanzenschutzmittel.

[0204] Im Rahmen der vorliegenden Anmeldung umfasst der Begriff Schädlingsbekämpfungsmittel immer auch den Begriff Pflanzenschutzmittel.

[0205] Die Verbindungen der Formel (I) eignen sich bei guter Pflanzenverträglichkeit, günstiger Warmblütertoxizität und guter Umweltverträglichkeit zum Schutz von Pflanzen und Pflanzenorganen vor biotischen und abiotischen Stressfaktoren, zur Steigerung der Ernteerträge, Verbesserung der Qualität des Erntegutes und zur Bekämpfung von tierischen Schädlingen, insbesondere Insekten, Spinnentieren, Helminthen, Nematoden und Mollusken, die in der Landwirtschaft, im Gartenbau, bei der Tierzucht, in Aquakulturen, in Forsten, in Gärten und Freizeiteinrichtungen, im Vorrats- und Materialschutz sowie auf dem Hygienesektor vorkommen. Sie können vorzugsweise als Schädlingsbekämpfungsmittel eingesetzt werden. Sie sind gegen normal sensible und resistente Arten sowie gegen alle oder einzelne Entwicklungsstadien wirksam. Zu den oben erwähnten Schädlingen gehören:

[0206] Schädlinge aus dem Stamm der Arthropoda, insbesondere aus der Klasse der Arachnida z.B. Acarus spp., z.B. Acarus siro, Aceria kuko, Aceria sheldoni, Aculops spp., Aculus spp., z.B. Aculus fockeui, Aculus schlechtendali, Amblyomma spp., Amphitetranychus viennensis, Argas spp., Boophilus spp., Brevipalpus spp., z.B. Brevipalpus phoenicis, Bryobia graminum, Bryobia praetiosa, Centruroides spp., Chorioptes spp., Dermanyssus gallinae, Dermatophagoides pteronyssinus, Dermatophagoides farinae, Dermacentor spp., Eotetranychus spp., z.B. Eotetranychus hicoriae, Epitrimerus pyri, Eutetranychus spp., z.B. Eutetranychus banksi, Eriophyes spp., z.B. Eriophyes pyri, Glycyphagus domesticus, Halotydeus destructor, Hemitarsonemus spp., z.B. Hemitarsonemus latus (=Polyphagotarsonemus latus), Hyalomma spp., Ixodes spp., Latrodectus spp., Loxosceles spp., Neutrombicula autumnalis, Nuphersa spp., Oligonychus spp., z.B. Oligonychus coniferarum, Oligonychus ilicis, Oligonychus indicus, Oligonychus mangiferus, Oligonychus pratensis, Oligonychus punicae, Oligonychus yothersi, Ornithodorus spp., Ornithonyssus spp., Panonychus spp., z.B. Panonychus citri (=Metatetranychus citri), Panonychus ulmi (=Metatetranychus ulmi), Phyllocoptruta oleivora, Platytetranychus multidigituli, Polyphagotarsonemus latus, Psoroptes spp., Rhipicephalus spp., Rhizoglyphus spp., Sarcoptes spp., Scorpio maurus, Steneotarsonemus spp., Steneotarsonemus spinki, Tarsonemus spp., z.B. Tarsonemus confusus, Tarsonemus pallidus, Tetranychus spp., z.B. Tetranychus canadensis, Tetranychus cinnabarinus, Tetranychus turkestani, Tetranychus urticae, Trombicula alfreddugesi, Vaejovis spp., Vasates lycopersici;

aus der Klasse der Chilopoda z.B. Geophilus spp., Scutigera spp.;

aus der Ordnung oder der Klasse der Collembola z.B. Onychiurus armatus; Sminthurus viridis;

aus der Klasse der Diplopoda z.B. Blaniulus guttulatus;

aus der Klasse der Insecta, z.B. aus der Ordnung der Blattodea z.B. Blatta orientalis, Blattella asahinai, Blattella germanica, Leucophaea maderae, Panchlora spp., Parcoblatta spp., Periplaneta spp., z.B. Periplaneta americana, Periplaneta australasiae, Supella longipalpa;

aus der Ordnung der Coleoptera z.B. Acalymma vittatum, Acanthoscelides obtectus, Adoretus spp., Agelastica alni, Agriotes spp., z.B. Agriotes linneatus, Agriotes mancus, Alphitobius diaperinus, Amphimallon solstitialis, Anobium punctatum, Anoplophora spp., Anthonomus spp., z.B. Anthonomus grandis, Anthrenus spp., Apion spp., Apogonia spp., Atomaria spp., z.B. Atomaria linearis, Attagenus spp., Baris caerulescens, Bruchidius obtectus, Bruchus spp., z.B. Bruchus pisorum, Bruchus rufimanus, Cassida spp., Cerotoma trifurcata, Ceutorrhynchus spp., z.B. Ceutorrhynchus assimilis, Ceutorrhynchus quadridens, Ceutorrhynchus rapae, Chaetocnema spp., z.B. Chaetocnema confinis, Chaetocnema denticulata, Chaetocnema ectypa, Cleonus mendicus, Conoderus spp., Cosmopolites spp., z.B. Cosmopolites sordidus, Costelytra zealandica, Ctenicera spp., Curculio spp., z.B. Curculio caryae, Curculio caryatrypes,Curculio obtusus, Curculio sayi, Cryptolestes ferrugineus, Cryptolestes pusillus, Cryptorhynchus lapathi, Cryptorhynchus mangiferae, Cylindrocopturus spp., Cylindrocopturus adspersus, Cylindrocopturus furnissi, Dermestes spp., Diabrotica spp., z.B. Diabrotica balteata, Diabrotica barberi, Diabrotica undecimpunctata howardi, Diabrotica undecimpunctata undecimpunctata, Diabrotica virgifera virgifera, Diabrotica virgifera zeae, Diebocreis spp., Dicladispa armigera, Diloboderus spp., Epilachna spp., z.B. Epilachna borealis, Epilachna varivestis, Epitrix spp., z.B. Epitrix cucumeris, Epitrix fuscula, Epitrix hirtipennis, Epitrix subcrinita, Epitrix tuberis, Faustinus spp., Gibbium psylloides, Gnathocerus cornutus, Hellula undalis, Heteronychus arator, Heteronyx spp., Hylamorpha elegans, Hylotrupes bajulus, Hypera postica, Hypomeces squamosus, Hypothenemus spp., z.B. Hypothenemus hampei, Hypothenemus obscurus, Hypothenemus pubescens, Lachnosterna consanguinea, Lasioderma serricorne, Latheticus oryzae, Lathridius spp., Lema spp., Leptinotarsa decemlineata, Leucoptera spp., z.B. Leucoptera coffeella, Lissorhoptrus oryzophilus, Lixus spp., Luperomorpha xanthodera, Luperodes spp., Lyctus spp., Megascelis spp., Melanotus spp., z.B. Melanotus longulus oregonensis, Meligethes aeneus, Melolontha spp., z.B. Melolontha melolontha, Migdolus spp., Monochamus spp., Naupactus xanthographus, Necrobia spp., Niptus hololeucus, Oryctes rhinoceros, Oryzaephilus surinamensis, Oryzaphagus oryzae, Otiorhynchus spp., z.B. Otiorhynchus cribricollis, Otiorhynchus ligustici, Otiorhynchus ovatus, Otiorhynchus rugosostriarus, Otiorhynchus sulcatus, Oxycetonia jucunda, Phaedon cochleariae, Phyllophaga spp., Phyllophaga helleri, Phyllotreta spp., z.B. Phyllotreta armoraciae, Phyllotreta pusilla, Phyllotreta ramosa, Phyllotreta striolata, Popillia japonica, Premnotrypes spp., Prostephanus truncatus, Psylliodes spp., z.B. Psylliodes affinis, Psylliodes chrysocephala, Psylliodes punctulata, Ptinus spp., Rhizobius ventralis, Rhizopertha dominica, Sitophilus spp., z.B. Sitophilus granarius, Sitophilus linearis, Sitophilus oryzae, Sitophilus zeamais, Sphenophorus

spp., Stegobium paniceum, Stemechus spp., z.B. Stemechus paludatus, Symphyletes spp., Tanymecus spp., z.B. Tanymecus dilaticollis, Tanymecus indicus, Tanymecus palliatus, Tenebrio molitor, Tenebrioides mauretanicus, Tribolium spp., z.B. Tribolium audax, Tribolium castaneum, Tribolium confusum, Trogoderma spp., Tychius spp., Xylotrechus spp., Zabrus spp., z.B. Zabrus tenebrioides;

aus der Ordnung der Diptera z.B. Aedes spp., z.B. Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes sticticus, Aedes vexans, Agromyza spp., z.B. Agromyza frontella, Agromyza parvicornis, Anastrepha spp., Anopheles spp., z.B. Anopheles quadrimaculatus, Anopheles gambiae, Asphondylia spp., Bactrocera spp., z.B. Bactrocera cucurbitae, Bactrocera dorsalis, Bactrocera oleae, Bibio hortulanus, Calliphora erythrocephala, Calliphora vicina, Ceratitis capitata, Chironomus spp., Chrysomya spp., Chrysops spp., Chrysozona pluvialis, Cochliomya spp., Contarinia spp., z.B. Contarinia johnsoni, Contarinia nasturtii, Contarinia pyrivora, Contarinia schulzi, Contarinia sorghicola, Contarinia tritici.Cordylobia anthropophaga, Cricotopus sylvestris, Culex spp., z.B. Culex pipiens, Culex quinquefasciatus, Culicoides spp., Culiseta spp., Cuterebra spp., Dacus oleae, Dasineura spp., z.B. Dasineura brassicae, Delia spp., z.B. Delia antiqua, Delia coarctata, Delia florilega, Delia platura, Delia radicum, Dermatobia hominis, Drosophila spp., z.B. Drosphila melanogaster, Drosophila suzukii, Echinocnemus spp., Fannia spp., Gasterophilus spp., Glossina spp., Haematopota spp., Hydrellia spp., Hydrellia griseola, Hylemya spp., Hippobosca spp., Hypoderma spp., Liriomyza spp., z.B. Liriomyza brassicae, Liriomyza huidobrensis, Liriomyza sativae, Lucilia spp., z.B. Lucilia cuprina, Lutzomyia spp., Mansonia spp., Musca spp., z.B. Musca domestica, Musca domestica vicina, Oestrus spp., Oscinella frit, Paratanytarsus spp., Paralauterborniella subcincta, Pegomya spp., z.B. Pegomya betae, Pegomya hyoscyami, Pegomya rubivora, Phlebotomus spp., Phorbia spp., Phormia spp., Piophila casei, Prodiplosis spp., Psila rosae, Rhagoletis spp., z.B. Rhagoletis cingulata, Rhagoletis completa, Rhagoletis fausta, Rhagoletis indifferens, Rhagoletis mendax, Rhagoletis pomonella, Sarcophaga spp., Simulium spp., z.B. Simulium meridionale, Stomoxys spp., Tabanus spp., Tetanops spp., Tipula spp., z.B. Tipula paludosa, Tipula simplex;

aus der Ordnung der Heteroptera z.B. Anasa tristis, Antestiopsis spp., Boisea spp., Blissus spp., Calocoris spp., Campylomma livida, Cavelerius spp., Cimex spp., z.B. Cimex adjunctus, Cimex hemipterus, Cimex lectularius, Cimex pilosellus, Collaria spp., Creontiades dilutus, Dasynus piperis, Dichelops furcatus, Diconocoris hewetti, Dysdercus spp., Euschistus spp., z.B. Euschistus heros, Euschistus servus, Euschistus tristigmus, Euschistus variolarius, Eurygaster spp., Halyomorpha halys, Heliopeltis spp., Horcias nobilellus, Leptocorisa spp., Leptocorisa varicornis, Leptoglossus occidentalis, Leptoglossus phyllopus, Lygocoris spp., z.B. Lygocoris pabulinus, Lygus spp., z.B. Lygus elisus, Lygus hesperus, Lygus lineolaris, Macropes excavatus, Monalonion atratum, Nezara spp., z.B. Nezara viridula, Oebalus spp., Piesma quadrata, Piezodorus spp., z.B. Piezodorus guildinii, Psallus spp., Pseudacysta persea, Rhodnius spp., Sahlbergella singularis, Scaptocoris castanea, Scotinophora spp., Stephanitis nashi, Tibraca spp., Triatoma spp.:

aus der Ordnung der Homoptera z.B. Acizzia acaciaebaileyanae, Acizzia dodonaeae, Acizzia uncatoides, Acrida turrita, Acyrthosipon spp., z.B. Acyrthosiphon pisum, Acrogonia spp., Aeneolamia spp., Agonoscena spp., Aleyrodes proletella, Aleurolobus barodensis, Aleurothrixus floccosus, Allocaridara malayensis, Amrasca spp., z.B. Amrasca bigutulla, Amrasca devastans, Anuraphis cardui, Aonidiella spp., z.B. Aonidiella aurantii, Aonidiella citrina, Aonidiella inornata, Aphanostigma piri, Aphis spp., z.B. Aphis craccivora, Aphis fabae, Aphis forbesi, Aphis glycines, Aphis gossypii, Aphis hederae, Aphis illinoisensis, Aphis middletoni, Aphis nasturtii, Aphis nerii, Aphis pomi, Aphis spiraecola, Aphis viburniphila, Arboridia apicalis, Arytainilla spp., Aspidiella spp., Aspidiotus spp., z.B. Aspidiotus nerii, Atanus spp., Aulacorthum solani, Bemisia tabaci, Blastopsylla occidentalis, Boreioglycaspis melaleucae, Brachycaudus helichrysi, Brachycolus spp., Brevicoryne brassicae, Cacopsylla spp., z.B. Cacopsylla pyricola, Calligypona marginata, Carneocephala fulgida, Ceratovacuna lanigera, Cercopidae, Ceroplastes spp., Chaetosiphon fragaefolii, Chionaspis tegalensis, Chlorita onukii, Chondracris rosea, Chromaphis juglandicola, Chrysomphalus ficus, Cicadulina mbila, Coccomytilus halli, Coccus spp., z.B. Coccus hesperidum, Coccus longulus, Coccus pseudomagnoliarum, Coccus viridis, Cryptomyzus ribis, Cryptoneossa spp., Ctenarytaina spp., Dalbulus spp., Dialeurodes citri, Diaphorina citri, Diaspis spp., Drosicha spp., Dysaphis spp., z.B. Dysaphis apiifolia, Dysaphis plantaginea, Dysaphis tulipae, Dysmicoccus spp., Empoasca spp., z.B. Empoasca abrupta, Empoasca fabae, Empoasca maligna, Empoasca solana, Empoasca stevensi, Eriosoma spp., z.B. Eriosoma americanum, Eriosoma lanigerum, Eriosoma pyricola, Erythroneura spp., Eucalyptolyma spp., Euphyllura spp., Euscelis bilobatus, Ferrisia spp., Geococcus coffeae, Glycaspis spp., Heteropsylla cubana, Heteropsylla spinulosa, Homalodisca coagulata, Hyalopterus arundinis, Hyalopterus pruni, Icerya spp., z.B. Icerya purchasi, Idiocerus spp., Idioscopus spp., Laodelphax striatellus, Lecanium spp., z.B. Lecanium corni (=Parthenolecanium corni), Lepidosaphes spp., z.B. Lepidosaphes ulmi, Lipaphis erysimi, Macrosiphum spp., z.B. Macrosiphum euphorbiae, Macrosiphum lilii, Macrosiphum rosae, Macrosteles facifrons, Mahanarva spp., Melanaphis sacchari, Metcalfiella spp., Metopolophium dirhodum, Monellia costalis, Monelliopsis pecanis, Myzus spp., z.B. Myzus ascalonicus, Myzus cerasi, Myzus ligustri, Myzus ornatus, Myzus persicae,. Myzus nicotianae, Nasonovia ribisnigri, Nephotettix spp., z.B. Nephotettix cincticeps., Nephotettix nigropictus, Nilaparvata lugens, Oncometopia spp., Orthezia praelonga, Oxya chinensis, Pachypsylla spp., Parabemisia myricae, Paratrioza spp., z.B. Paratrioza cockerelli, Parlatoria spp., Pemphigus spp., z.B. Pemphigus bursarius, Pemphigus populivenae, Peregrinus maidis, Phenacoccus spp., z.B. Phenacoccus madeirensis, Phloeomyzus passerinii, Phorodon humuli, Phylloxera spp., z.B. Phylloxera devastatrix, Phylloxera notabilis, Pinnaspis aspidistrae, Planococcus spp., z.B. Planococcus citri, Prosopidopsylla flava, Protopulvinaria pyriformis, Pseudaulacaspis pentagona, Pseudococcus spp., z.B. Pseudococcus calceolariae, Pseudococcus comstocki, Pseudococcus longispinus, Pseudococcus maritimus, Pseudococcus viburni, Psyllopsis spp., Psylla spp., z.B. Psylla buxi, Psylla mali, Psylla pyri, Pteromalus spp., Pyrilla spp., Quadraspidiotus spp., z.B. Quadraspidiotus juglansregiae, Quadraspidiotus ostreaeformis, Quadraspidiotus perniciosus, Quesada gigas, Rastrococcus spp., Rhopalosiphum spp., z.B. Rhopalosiphum maidis, Rhopalosiphum oxyacanthae, Rhopalosiphum padi, Rhopalosiphum

rufiabdominale, Saissetia spp., z.B. Saissetia coffeae, Saissetia miranda, Saissetia neglecta, Saissetia oleae, Scaphoideus titanus, Schizaphis graminum, Selenaspidus articulatus, Sitobion avenae, Sogata spp., Sogatella furcifera, Sogatodes spp., Stictocephala festina, Siphoninus phillyreae, Tenalaphara malayensis,Tetragonocephela spp., Tinocallis caryaefoliae, Tomaspis spp., Toxoptera spp., z.B. Toxoptera aurantii, Toxoptera citricidus, Trialeurodes vaporariorum, Trioza spp., z.B. Trioza diospyri, Typhlocyba spp., Unaspis spp., Viteus vitifolii, Zygina spp.;

aus der Ordnung der Hymenoptera z.B. Acromyrmex spp., Athalia spp., z.B. Athalia rosae, Atta spp., Diprion spp., z.B. Diprion similis, Hoplocampa spp., z.B. Hoplocampa cookei, Hoplocampa testudinea, Lasius spp., Monomorium pharaonis, Sirex spp., Solenopsis invicta, Tapinoma spp., Urocerus spp., Vespa spp., z.B. Vespa crabro, Xeris spp.;

aus der Ordnung der Isopoda z.B. Armadillidium vulgare, Oniscus asellus, Porcellio scaber;

aus der Ordnung der Isoptera z.B. Coptotermes spp., z.B. Coptotermes formosanus, Cornitermes cumulans, Cryptotermes spp., Incisitermes spp., Microtermes obesi, Odontotermes spp., Reticulitermes spp., z.B. Reticulitermes flavipes, Reticulitermes hesperus;

aus der Ordnung der Lepidoptera z.B. Achroia grisella, Acronicta major, Adoxophyes spp., z.B. Adoxophyes orana, Aedia leucomelas, Agrotis spp., z.B. Agrotis segetum, Agrotis ipsilon, Alabama spp., z.B. Alabama argillacea, Amyelois transitella, Anarsia spp., Anticarsia spp., z.B. Anticarsia gemmatalis, Argyroploce spp., Barathra brassicae, Borbo cinnara, Bucculatrix thurberiella, Bupalus piniarius, Busseola spp., Cacoecia spp., Caloptilia theivora, Capua reticulana, Carpocapsa pomonella, Carposina niponensis, Cheimatobia brumata, Chilo spp., z.B. Chilo plejadellus, Chilo suppressalis, Choristoneura spp., Clysia ambiguella, Cnaphalocerus spp., Cnaphalocrocis medinalis, Cnephasia spp., Conopomorpha spp., Conotrachelus spp., Copitarsia spp., Cydia spp., z.B. Cydia nigricana, Cydia pomonella, Dalaca noctuides, Diaphania spp., Diatraea saccharalis, Earias spp., Ecdytolopha aurantium, Elasmopalpus lignosellus, Eldana saccharina, Ephestia spp., z.B. Ephestia elutella, Ephestia kuehniella, Epinotia spp., Epiphyas postvittana, Etiella spp., Eulia spp., Eupoecilia ambiguella, Euproctis spp., z.B. Euproctis chrysorrhoea, Euxoa spp., Feltia spp., Galleria mellonella, Gracillaria spp., Grapholitha spp., z.B. Grapholita molesta, Grapholita prunivora, Hedylepta spp., Helicoverpa spp., z.B. Helicoverpa armigera, Helicoverpa zea, Heliothis spp., z.B. Heliothis virescens Hofmannophila pseudospretella, Homoeosoma spp., Homona spp., Hyponomeuta padella, Kakivoria flavofasciata, Laphygma spp., Leucinodes orbonalis, Leucoptera spp., z.B. Leucoptera coffeella, Lithocolletis spp., z.B. Lithocolletis blancardella, Lithophane antennata, Lobesia spp., z.B. Lobesia botrana, Loxagrotis albicosta, Lymantria spp., z.b. Lymantria dispar, Lyonetia spp., z.B. Lyonetia clerkella, Malacosoma neustria, Maruca testulalis, Mamestra brassicae, Melanitis leda, Mocis spp., Monopis obviella, Mythimna separata, Nemapogon cloacellus, Nymphula spp., Oiketicus spp., Oria spp., Orthaga spp., Ostrinia spp., z.B. Ostrinia nubilalis, Oulema melanopus, Oulema oryzae, Panolis flammea, Parnara spp., Pectinophora

spp., z.B. Pectinophora gossypiella, Perileucoptera spp., Phthorimaea spp., z.B. Phthorimaea operculella, Phyllocnistis citrella, Phyllonoryeter spp., z.B. Phyllonoryeter blancardella, Phyllonoryeter crataegella, Pieris spp., z.B. Pieris rapae, Platynota stultana, Plodia interpunctella, Plusia spp., Plutella xylostella (Plutella maculipennis), Prays spp., Prodenia spp., Protoparce spp., Pseudaletia spp., z.B. Pseudaletia unipuncta, Pseudoplusia includens, Pyrausta nubilalis, Rachiplusia nu, Schoenobius spp., z.B. Schoenobius bipunctifer, Scirpophaga spp., z.B. Scirpophaga innotata, Scotia segetum, Sesamia spp., z.B. Sesamia inferens, Sparganothis spp., Spodoptera spp., z.b. Spodoptera eradiana, Spodoptera exigua, Spodoptera frugiperda, Spodoptera praefica, Stathmopoda spp., Stomopteryx subsecivella, Synanthedon spp., Tecia solanivora, Thermesia gemmatalis, Tinea cloacella, Tinea pellionella, Tineola bisselliella, Tortrix spp., Trichophaga tapetzella, Trichoplusia spp., z.B. Trichoplusia ni, Tryporyza incertulas, Tuta absoluta, Virachola spp.;

aus der Ordnung der Orthoptera oder Saltatoria z.B. Acheta domesticus, Dichroplus spp., Gryllotalpa spp., z.B. Gryllotalpa gryllotalpa, Hieroglyphus spp., Locusta spp., z.B. Locusta migratoria, Melanoplus spp., z.B. Melanoplus devastator, Schistocerca gregaria;

aus der Ordnung der Phthiraptera z.B. Damalinia spp., Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phylloxera vastatrix, Phthirus pubis, Trichodectes spp.;

aus der Ordnung der Psocoptera z.B. Lepinotus spp., Liposcelis spp.;

aus der Ordnung der Siphonaptera z.B. Ceratophyllus spp., Ctenocephalides spp., z.B. Ctenocephalides canis, Ctenocephalides felis, Pulex irritans, Tunga penetrans, Xenopsylla cheopis;

aus der Ordnung der Thysanoptera z.B. Anaphothrips obscurus, Baliothrips biformis, Drepanothrips reuteri, Enneothrips flavens, Frankliniella spp., z.B. Frankliniella fusca, Frankliniella occidentalis, Frankliniella schultzei, Frankliniella tritici, Frankliniella vaccinii, Frankliniella williamsi, Heliothrips spp., Hercinothrips femoralis, Rhipiphorothrips cruentatus, Scirtothrips spp., Taeniothrips cardamomi, Thrips spp., z.B. Thrips palmi, Thrips tabaci;

aus der Ordnung der Zygentoma (= Thysanura), z. B. Ctenolepisma spp., Lepisma saccharina, Lepismodes inquilinus, Thermobia domestica;

aus der Klasse der Symphyla z.B. Scutigerella spp., z.B. Scutigerella immaculata;

[0207] Schädlinge aus dem Stamm der Mollusca, insbesondere aus der Klasse der Bivalvia, z.B. Dreissena spp.;

sowie aus der Klasse der Gastropoda z.B. Arion spp., z.B. Arion ater rufus, Biomphalaria spp., Bulinus spp., Deroceras spp., z.B. Deroceras laeve, Galba spp., Lymnaea spp., Oncomelania spp., Pomacea spp., Succinea spp.:

[0208] Tierparasiten aus den Stämmen der Plathelminthes und Nematoda, z.B. Ancylostoma spp., z.B. Ancylostoma duodenale, Ancylostoma ceylanicum, Ancylostoma braziliensis, Ascaris spp., Brugia malayi, Brugia timori, Bunostomum spp., Chabertia spp., Clonorchis spp., Cooperia spp., Dicrocoelium spp., Dictyocaulus filaria, Diphyllobothrium latum, Dracunculus medinensis, Echinococcus granulosus, Echinococcus multilocularis, Enterobius vermicularis, Faciola spp., Haemonchus spp., Heterakis spp., Hymenolepis nana, Hyostrongulus spp., Loa Loa, Nematodirus spp., Oesophagostomum spp., Opisthorchis spp., Onchocerca volvulus, Ostertagia spp., Paragonimus spp., Schistosomen spp., Strongyloides fuelleborni, Strongyloides stercoralis, Stronyloides spp., Taenia saginata, Taenia solium, Trichinella spiralis, Trichinella nativa, Trichinella britovi, Trichinella nelsoni, Trichinella pseudopsiralis, Trichostrongulus spp., Trichuris trichuria, Wuchereria bancrofti;

[0209] Pflanzenschädlinge aus dem Stamm der Nematoda, d.h. pflanzenparasitäre Nematoden, insbesondere Aglenchus spp., z.B. Aglenchus agricola, Anguina spp., z.B. Anguina tritici, Aphelenchoides spp., z.B. Aphelenchoides arachidis, Aphelenchoides fragariae, Belonolaimus spp., z.B. Belonolaimus gracilis, Belonolaimus longicaudatus, Belonolaimus nortoni, Bursaphelenchus spp., z.B. Bursaphelenchus cocophilus, Bursaphelenchus eremus, Bursaphelenchus xylophilus, Cacopaurus spp., z.B. Cacopaurus pestis, Criconemella spp., z.B. Criconemella curvata, Criconemella onoensis, Criconemella ornata, Criconemella rusium, Criconemella xenoplax (= Mesocriconema xenoplax), Criconemoides spp., z.B. Criconemoides ferniae, Criconemoides onoense, Criconemoides ornatum, Ditylenchus spp., z.B. Ditylenchus dipsaci, Dolichodorus spp., Globodera spp., z.B. Globodera pallida, Globodera rostochiensis, Helicotylenchus spp., z.B. Helicotylenchus dihystera, Hemicriconemoides spp., Hemicycliophora spp., Heterodera spp., z.B. Heterodera avenae, Heterodera glycines, Heterodera schachtii, Hoplolaimus spp., Longidorus spp., z.B. Longidorus africanus, Meloidogyne spp., z.B. Meloidogyne chitwoodi, Meloidogyne fallax, Meloidogyne hapla, Meloidogyne incognita, Meloinema spp., Nacobbus spp., Neotylenchus spp., Paraphelenchus spp., Paratrichodorus spp., z.B. Paratrichodorus minor, Pratylenchus spp., z.B. Pratylenchus penetrans, Pseudohalenchus spp., Psilenchus spp., Punctodera spp., Quinisulcius spp., Radopholus spp., z.B. Radopholus citrophilus, Radopholus similis, Rotylenchulus spp., Rotylenchus spp., Scutellonema spp., Subanguina spp., Trichodorus spp., z.B. Trichodorus obtusus, Trichodorus primitivus, Tylenchorhynchus spp., z.B. Tylenchorhynchus annulatus, Tylenchulus spp., z.B. Tylenchulus semipenetrans, Xiphinema spp., z.B. Xiphinema index;

[0210] Weiterhin lässt sich aus dem Unterreich der Protozoa die Ordnung der Coccidia z.B. Eimeria spp. bekämpfen.

[0211] Die Verbindungen der Formel (I) können gegebenenfalls in bestimmten Konzentrationen bzw. Aufwandmengen auch als Herbizide, Safener, Wachstumsregulatoren oder Mittel zur Verbesserung der Pflanzeneigenschaften, als Mikrobizide oder Gametozide, beispielsweise als Fungizide, Antimykotika, Bakterizide, Virizide (einschließlich Mittel gegen Viroide) oder als Mittel gegen MLO (Mycoplasma-like-organism) und RLO (Rickettsia-like-organism) verwendet werden. Sie lassen sich gegebenenfalls auch als Zwischen- oder Vorprodukte für die Synthese weiterer Wirkstoffe einsetzen.

[0212] Die vorliegende Erfindung betrifft weiterhin Formulierungen und daraus bereitete Anwendungsformen als Schädlingsbekämpfungsmittel wie z. B. Drench-, Drip- und Spritzbrühen, umfassend mindestens eine Verbindung der Formel (I). Gegebenenfalls enthalten die Anwendungsformen weitere Schädlingsbekämpfungsmittel und/oder die Wirkung verbessernde Adjuvantien wie Penetrationsförderer, z. B. vegetative Öle wie beispielsweise Rapsöl, Sonnenblumenöl, Mineralöle wie beispielsweise Paraffinöle, Alkylester vegetativer Fettsäuren wie beispielsweise Rapsöl- oder Sojaölmethylester oder Alkanol-alkoxylate und/oder Spreitmittel wie beispielsweise Alkylsiloxane und/oder Salze z.B. organische oder anorganische Ammonium- oder Phosphoniumsalze wie beispielsweise Ammoniumsulfat oder Diammonium-hydrogenphosphat und/oder die Retention fördernde Mittel wie z. B. Dioctylsulfosuccinat oder Hydroxypropyl guar Polymere und/oder Humectants wie z.B. Glycerin und/oder Dünger wie beispielsweise Ammonium-, Kalium- oder Phosphor-enthaltende Dünger.

[0213] Übliche Formulierungen sind beispielsweise wasserlösliche Flüssigkeiten (SL), Emulsionskonzentrate (EC), Emulsionen in Wasser (EW), Suspensionskonzentrate (SC, SE, FS, OD), in Wasser dispergierbare Granulate (WG), Granulate (GR) und Kapselkonzentrate (CS); diese und weitere mögliche Formuliertypen sind beispielsweise durch Crop Life International und in Pesticide Specifications, Manual on development and use of FAO and WHO specifications for pesticides, FAO Plant Production and Protection Papers – 173, prepared by the FAO/WHO Joint Meeting on Pesticide Specifications, 2004, ISBN: 9251048576 beschrieben. Gegebenenfalls enthalten die Formulierungen neben einem oder mehreren Verbindungen der Formel (I) weitere agrochemische Wirkstoffe.

[0214] Vorzugsweise handelt es sich um Formulierungen oder Anwendungsformen, welche Hilfsstoffe wie beispielsweise Streckmittel, Lösemittel, Spontanitätsförderer, Trägerstoffe, Emulgiermittel, Dispergiermittel, Frostschutzmittel, Biozide, Verdicker und/oder weitere Hilfsstoffe wie beispielsweise Adjuvantien enthalten. Ein Adjuvant in diesem Kontext ist eine Komponente, die die biologische Wirkung der Formulierung verbessert, ohne dass die Komponente selbst eine biologische Wirkung hat. Beispiele für Adjuvantien sind Mittel, die die Retention, das Spreitverhalten, das Anhaften an der Blattoberfläche oder die Penetration fördern.

[0215] Diese Formulierungen werden in bekannter Weise hergestellt, z.B. durch Vermischen der Verbindungen der Formel (I) mit Hilfsstoffen wie beispielsweise Streckmitteln, Lösemitteln und/oder

festen Trägerstoffen und/oder weiteren Hilfsstoffen wie beispielsweise oberflächenaktive Stoffe. Die Herstellung der Formulierungen erfolgt entweder in geeigneten Anlagen oder auch vor oder während der Anwendung.

[0216] Als Hilfsstoffe können solche Stoffe Verwendung finden, die geeignet sind, der Formulierung der Verbindungen der Formel (I) oder den aus diesen Formulierungen bereiteten Anwendungsformen (wie z.B. gebrauchsfähigen Schädlingsbekämpfungsmitteln wie Spritzbrühen oder Saatgutbeizen) besondere Eigenschaften, wie bestimmte physikalische, technische und/oder biologische Eigenschaften zu verleihen.

[0217] Als Streckmittel eignen sich z.B. Wasser, polare und unpolare organische chemische Flüssigkeiten z.B. aus den Klassen der aromatischen und nicht-aromatischen Kohlenwasserstoffe (wie Paraffine, Alkylbenzole, Alkylnaphthaline, Chlorbenzole), der Alkohole und Polyole (die ggf. auch substituiert, verethert und/oder verestert sein können), der Ketone (wie Aceton, Cyclohexanon), Ester (auch Fette und Öle) und (Poly-)Ether, der einfachen und substituierten Amine, Amide, Lactame (wie N-Alkylpyrrolidone) und Lactone, der Sulfone und Sulfoxide (wie Dimethylsulfoxid).

[0218] Im Falle der Benutzung von Wasser als Streckmittel können z.B. auch organische Lösemittel als Hilfslösemittel verwendet werden. Als flüssige Lösemittel kommen im Wesentlichen infrage: Aromaten wie Xylol, Toluol oder Alkylnaphthaline, chlorierte Aromaten oder chlorierte aliphatische Kohlenwasser-stoffe wie Chlorbenzole, Chlorethylene oder Methylenchlorid, aliphatische Kohlenwasserstoffe, wie Cyclohexan oder Paraffine, z.B. Erdölfraktionen, mineralische und pflanzliche Öle, Alkohole wie Butanol oder Glykol sowie deren Ether und Ester, Ketone wie Aceton, Methylethylketon, Methylisobutylketon oder Cyclohexanon, stark polare Lösemittel wie Dimethylformamid und Dimethylsulfoxid sowie Wasser.

[0219] Grundsätzlich können alle geeigneten Lösemittel verwendet werden. Geeignete Lösemittel sind beispielsweise aromatische Kohlenwasserstoffe wie z.B. Xylol, Toluol oder Alkylnaphthaline, chlorierte aromatische oder aliphatische Kohlenwasserstoffe wie z.B. Chlorbenzol, Chlorethylen, oder Methylenchlorid, aliphatische Kohlenwasserstoffe wie z.B. Cyclohexan, Paraffine, Erdölfraktionen, mineralische und pflanzliche Öle, Alkohole wie z.B. Methanol, Ethanol, iso-Propanol, Butanol oder Glykol sowie deren Ether und Ester, Ketone wie z.B. Aceton, Methylethylketon, Methylisobutylketon oder Cyclohexanon, stark polare Lösemittel wie Dimethylsulfoxid sowie Wasser.

[0220] Grundsätzlich können alle geeigneten Trägerstoffe eingesetzt werden. Als Trägerstoffe kommen insbesondere infrage: z.B. Ammoniumsalze und natürliche Gesteinsmehle wie Kaoline, Tonerden, Talkum, Kreide, Quarz, Attapulgit, Montmorillonit oder Diatomeenerde und synthetische Gesteinsmehl, wie hochdisperse Kieselsäure, Aluminiumoxid und natürliche oder synthetische Silikate, Harze, Wachse und /oder feste Düngemittel. Mischungen solcher Trägerstoffe können ebenfalls verwendet werden. Als Trägerstoffe für Granulate kommen infrage: z.B. gebrochene und fraktionierte natürliche Gesteine wie

Calcit, Marmor, Bims, Sepiolith, Dolomit sowie synthetische Granulate aus anorganischen und organischen Mehlen sowie Granulate aus organischem Material wie Sägemehl, Papier, Kokosnussschalen, Maiskolben und Tabakstängel.

[0221] Auch verflüssigte gasförmige Streckmittel oder Lösemittel können eingesetzt werden. Insbesondere eignen sich solche Streckmittel oder Trägerstoffe, welche bei normaler Temperatur und unter Normaldruck gasförmig sind, z.B. Aerosol-Treibgase wie Halogenkohlenwasserstoffe sowie Butan, Propan, Stickstoff und Kohlendioxid.

[0222] Beispiele für Emulgier- und/oder Schaum erzeugende Mittel, Dispergiermittel oder Benetzungsmittel mit ionischen oder nicht-ionischen Eigenschaften oder Mischungen dieser oberflächenaktiven Stoffe sind Salze von Polyacrylsäure, Salze von Lignosulphonsäure, Salze von Phenolsulphonsäure oder Naphthalinsulphonsäure, Polykondensate von Ethylenoxid mit Fettalkoholen oder mit Fettsäuren oder mit Fettaminen, mit substituierten Phenolen (vorzugsweise Alkylphenole oder Arylphenole), Salze von Sulphobernsteinsäureestern, Taurinderivate (vorzugsweise Alkyltaurate), Phosphorsäureester von polyethoxylierten Alkoholen oder Phenole, Fettsäureester von Polyolen und Derivate der Verbindungen enthaltend Sulphate, Sulphonate und Phosphate, z.B. Alkylarylpolyglycolether, Alkylsulfonate, Alkylsulfate, Arylsulfonate, Eiweißhydrolysate, Lignin Sulfitablaugen und Methylcellulose. Die Anwesenheit einer oberflächenaktiven Substanz ist vorteilhaft, wenn eine der Verbindungen der Formel (I) und/oder einer der inerten Trägerstoffe nicht in Wasser löslich ist und wenn die Anwendung in Wasser erfolgt.

[0223] Als weitere Hilfsstoffe können in den Formulierungen und den daraus abgeleiteten Anwendungsformen Farbstoffe wie anorganische Pigmente, z.B. Eisenoxid, Titanoxid, Ferrocyanblau und organische Farbstoffe wie Alizarin , Azo und Metallphthalocyaninfarbstoffe und Nähr und Spurennährstoffe wie Salze von Eisen, Mangan, Bor, Kupfer, Kobalt, Molybdän und Zink vorhanden sein.

[0224] Weiterhin enthalten sein können Stabilisatoren wie Kältestabilisatoren, Konservierungsmittel, Oxidationsschutzmittel, Lichtschutzmittel oder andere die chemische und / oder physikalische Stabilität verbessernde Mittel. Weiterhin enthalten sein können schaumerzeugende Mittel oder Entschäumer.

[0225] Ferner können die Formulierungen und daraus abgeleiteten Anwendungsformen als zusätzliche Hilfsstoffe auch Haftmittel wie Carboxymethylcellulose, natürliche und synthetische pulverige, körnige oder latexförmige Polymere enthalten wie Gummiarabikum, Polyvinylalkohol, Polyvinylacetat sowie natürliche Phospholipide wie Kephaline und Lecithine und synthetische Phospholipide. Weitere Hilfsstoffe können mineralische und vegetabile Öle sein.

[0226] Gegebenenfalls können noch weitere Hilfsstoffe in den Formulierungen und den daraus abgeleiteten Anwendungsformen enthalten sein. Solche Zusatzstoffe sind beispielsweise Duftstoffe,

schützende Kolloide, Bindemittel, Klebstoffe, Verdicker, thixotrope Stoffe, Penetrationsförderer, Retentionsförderer, Stabilisatoren, Sequestiermittel, Komplexbildner, Humectans, Spreitmittel. Im Allgemeinen können die Verbindungen der Formel (I) mit jedem festen oder flüssigen Zusatzstoff, welches für Formulierungszwecke gewöhnlich verwendet wird, kombiniert werden.

[0227] Als Retentionsförderer kommen alle diejenigen Substanzen in Betracht, die die dynamische Oberflächenspannung verringern wie beispielsweise Dioctylsulfosuccinat oder die die Visko-Elastizität erhöhen wie beispielsweise Hydroxypropyl-guar Polymere.

[0228] Als Penetrationsförderer kommen im vorliegenden Zusammenhang alle diejenigen Substanzen in Betracht, die üblicherweise eingesetzt werden, um das Eindringen von agrochemischen Wirkstoffen in Pflanzen zu verbessern. Penetrationsförderer werden in diesem Zusammenhang dadurch definiert, dass sie aus der (in der Regel wässerigen) Applikationsbrühe und/oder aus dem Spritzbelag in die Kutikula der Pflanze eindringen und dadurch die Stoffbeweglichkeit (Mobilität) der Wirkstoffe in der Kutikula erhöhen können. Die in der Literatur (Baur et al., 1997, Pesticide Science 51, 131-152) beschriebene Methode kann zur Bestimmung dieser Eigenschaft eingesetzt werden. Beispielhaft werden genannt Alkoholalkoxylate wie beispielsweise Kokosfettethoxylat (10) oder Isotridecylethoxylat (12), Fettsäureester wie beispielsweise Rapsöl- oder Sojaölmethylester, Fettamine Alkoxylate wie beispielsweise Tallowamine-ethoxylat (15) oder Ammonium- und/oder Phosphonium-Salze wie beispielsweise Ammoniumsulfat oder Diammonium-hydrogenphosphat.

[0229] Die Formulierungen enthalten bevorzugt zwischen 0,00000001 und 98 Gew.-% der Verbindung der Formel (I), besonders bevorzugt zwischen 0,01 und 95 Gew.-% der Verbindung der Formel (I), ganz besonders bevorzugt zwischen 0,5 und 90 Gew.-% der Verbindung der Formel (I), bezogen auf das Gewicht der Formulierung.

[0230] Der Gehalt an der Verbindung der Formel (I) in den aus den Formulierungen bereiteten Anwendungsformen (insbesondere Schädlingsbekämpfungsmittel) kann in weiten Bereichen variieren. Die Konzentration der Verbindung der Formel (I) in den Anwendungsformen kann üblicherweise zwischen 0,00000001 und 95 Gew.-% der Verbindung der Formel (I), vorzugsweise zwischen 0,00001 und 1 Gew.-%, bezogen auf das Gewicht der Anwendungsform, liegen. Die Anwendung geschieht in einer den Anwendungsformen angepaßten üblichen Weise.

[0231] Die Verbindungen der Formel (I) können auch in Mischung mit einem oder mehreren geeigneten Fungiziden, Bakteriziden, Akariziden, Molluskiziden, Nematiziden, Insektiziden, Mikrobiologika, Nützlingen, Herbizide, Düngemitteln, Vogelrepellentien, Phytotonics, Sterilantien, Safenern, Semiochemicals und/oder Pflanzenwachstumsregulatoren verwendet werden, um so z.B. das Wirkungsspektrum zu verbreitern, die Wirkdauer zu verlängern, die Wirkgeschwindigkeit zu steigern, Repellenz zu verhindern oder Resistenzentwicklungen vorzubeugen. Desweiteren können solche Wirkstoffkombinationen das Pflanzenwachstum und/oder die Toleranz gegenüber abiotischen Faktoren

wie z. B. hohen oder niedrigen Temperaturen, gegen Trockenheit oder gegen erhöhten Wasser- bzw. Bodensalzgehalt verbessern. Auch lässt sich das Blüh- und Fruchtverhalten verbessern, die Keimfähigkeit und Bewurzelung optimieren, die Ernte erleichtern und Ernteerträge steigern, die Reife beeinflussen, die Qualität und/oder den Ernährungswert der Ernteprodukte steigern, die Lagerfähigkeit verlängern und/oder die Bearbeitbarkeit der Ernteprodukte verbessern.

[0232] Weiterhin können die Verbindungen der Formel (I) in Mischung mit weiteren Wirkstoffen oder Semiochemicals, wie Lockstoffen und/oder Vogelrepellentien und/oder Pflanzenaktivatoren und/oder Wachstumsregulatoren und/oder Düngemitteln vorliegen. Gleichfalls können die Verbindungen der Formel (I) in Mischungen mit Mitteln zur Verbesserung der Pflanzeneigenschaften wie zum Beispiel Wuchs, Ertrag und Qualität des Erntegutes eingesetzt werden.

[0233] In einer besonderen erfindungsgemäßen Ausführungsform liegen die Verbindungen der Formel (I) in Formulierungen bzw. in den aus diesen Formulierungen bereiteten Anwendungsformen in Mischung mit weiteren Verbindungen vor, vorzugsweise solchen wie nachstehend beschrieben.

[0234] Wenn eine der im Folgenden genannten Verbindungen in verschiedenen tautomeren Formen vorkommen kann sind auch diese Formen mit umfasst, auch wenn sie sie nicht in jedem Fall explizit genannt wurden.

Insektizide / Akarizide / Nematizide

[0235] Die hier mit ihrem „common name" genannten Wirkstoffe sind bekannt und beispielsweise im Pestizidhandbuch („The Pesticide Manual" 16th Ed., British Crop Protection Council 2012) beschrieben oder im Internet recherchierbar (z.B. http://www.alanwood.net/pesticides).

(1) Acetylcholinesterase (AChE) Inhibitoren, wie beispielsweise Carbamate, z.B. Alanycarb, Aldicarb, Bendiocarb, Benfuracarb, Butocarboxim, Butoxycarboxim, Carbaryl, Carbofuran, Carbosulfan, Ethiofencarb, Fenobucarb, Formetanate, Furathiocarb, Isoprocarb, Methiocarb, Methomyl, Metolcarb, Oxamyl, Pirimicarb, Propoxur, Thiodicarb, Thiofanox, Triazamate, Trimethacarb, XMC und Xylylcarb oder organophosphate, z.B. Acephate, Azamethiphos, Azinphos-ethyl, Azinphos-methyl, Cadusafos, Chlorethoxyfos, Chlorfenvinphos, Chlormephos, Chlorpyrifos, Chlorpyrifos-methyl, Coumaphos, Cyanophos, Demeton-S-methyl, Diazinon, Dichlorvos/DDVP, Dicrotophos, Dimethoate, Dimethylvinphos, Disulfoton, EPN, Ethion, Ethoprophos, Famphur, Fenamiphos, Fenitrothion, Fenthion, Fosthiazate, Heptenophos, Imicyafos, Isofenphos, Isopropyl O-(methoxyaminothio-phosphoryl) salicylat, Isoxathion, Malathion, Mecarbam, Methamidophos, Methidathion, Mevinphos, Monocrotophos, Naled, Omethoate, Oxydemeton-methyl, Parathion, Parathion-methyl, Phenthoate, Phorate, Phosalone, Phosmet, Phosphamidon, Phoxim, Pirimiphos-methyl, Profenofos, Propetamphos, Prothiofos,

Pyraclofos, Pyridaphenthion, Quinalphos, Sulfotep, Tebupirimfos, Temephos, Terbufos, Tetrachlorvinphos, Thiometon, Triazophos, Trichlorfon und Vamidothion.

(2) GABA-gesteuerte Chlorid-Kanal-Antagonisten, wie beispielsweise Cyclodien-organochlorine, z.B. Chlordane und Endosulfan oder Phenylpyrazole (Fiprole), z.B. Ethiprole und Fipronil.

(3) Natrium-Kanal-Modulatoren / Spannungsabhängige Natrium-Kanal-Blocker, wie beispielsweise Pyrethroide, z.B. Acrinathrin, Allethrin, d-cis-trans Allethrin, d-trans Allethrin, Bifenthrin, Bioallethrin, Bioallethrin S-cyclopentenyl Isomer, Bioresmethrin, Cycloprothrin, Cyfluthrin, beta-Cyfluthrin, Cyhalothrin, lambda-Cyhalothrin, gamma-Cyhalothrin, Cypermethrin, alpha-Cypermethrin, beta-Cypermethrin, theta-Cypermethrin, zeta-Cypermethrin, Cyphenothrin [(1R)-trans-Isomere], Deltamethrin, Empenthrin [(1Z)-(1R)-Isomere), Esfenvalerate, Etofenprox, Fenpropathrin, Fenvalerate, Flucythrinate, Flumethrin, tau-Fluvalinate, Halfenprox, Imiprothrin, Kadethrin, Permethrin, Phenothrin [(1R)-trans-Isomer), Prallethrin, Pyrethrine (pyrethrum), Resmethrin, Silafluofen, Tefluthrin, Tetramethrin, Tetramethrin [(1R)- Isomere)], Tralomethrin und Transfluthrin oder DDT oder Methoxychlor.

(4) Nikotinerge Acetylcholin-Rezeptor (nAChR) Agonisten, wie beispielsweise Neonikotinoide, z.B. Acetamiprid, Clothianidin, Dinotefuran, Imidacloprid, Nitenpyram, Thiacloprid und Thiamethoxam oder Nikotin oder Sulfoxaflor.

(5) Nikotinerge Acetylcholin-Rezeptor (nAChR) allosterische Aktivatoren, wie beispielsweise Spinosine, z.B. Spinetoram und Spinosad.

(6) Chlorid-Kanal-Aktivatoren, wie beispielsweise Avermectine/Milbemycine, z.B. Abamectin, Ematmectin-benzoat, Lepimectin und Milbemectin.

(7) Juvenilhormon Imitatoren, wie beispielsweise Juvenilhormon Analoge, z.B. Hydroprene, Kinoprene und Methoprene oder Fenoxycarb oder Pyriproxyfen.

(8) Wirkstoffe mit unbekannten oder nicht spezifischen Wirkmechanismen, wie beispielsweise

Alkylhalide, z.B. Methylbromid und andere Alkylhalide; oderChloropicrin oder Sulfurylfluorid oder Borax oder Brechweinstein.

(9) Selektive Fraßhemmer, z.B. Pymetrozine oder Flonicamid.

(10) Milbenwachstumsinhibitoren, z.B. Clofentezine, Hexythiazox und Diflovidazin oder Etoxazole.

(11) Mikrobielle Disruptoren der Insektendarmmembran, z.B. Bacillus thuringiensis Subspezies israelensis, Bacillus sphaericus, Bacillus thuringiensis Subspezies aizawai, Bacillus thuringiensis

Subspezies kurstaki, Bacillus thuringiensis Subspezies tenebrionis und BT Pflanzenproteine: Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1Fa, Cry2Ab, mCry3A, Cry3Ab, Cry3Bb, Cry34/35Ab1.

(12) Inhibitoren der oxidativen Phosphorylierung, ATP-Disruptoren, wie beispielsweise Diafenthiuron oder Organozinnverbindungen, z.B. Azocyclotin, Cyhexatin und Fenbutatin-oxid oder Propargite oder Tetradifon.

(13) Entkoppler der oxidativen Phoshorylierung durch Unterbrechung des H-Protongradienten, wie beispielsweise Chlorfenapyr, DNOC und Sulfluramid.

(14) Nikotinerge Acetylcholin-Rezeptor-Antagonisten, wie beispielsweise Bensultap, Cartap-hydrochlorid, Thiocyclam und Thiosultap-Natrium.

(15) Inhibitoren der Chitinbiosynthese, Typ 0, wie beispielsweise Bistrifluron, Chlorfluazuron, Diflubenzuron, Flucycloxuron, Flufenoxuron, Hexaflumuron, Lufenuron, Novaluron, Noviflumuron, Teflubenzuron und Triflumuron.

(16) Inhibitoren der Chitinbiosynthese, Typ 1, wie beispielsweise Buprofezin.

(17) Häutungsstörende Wirkstoffe, (insbesondere bei Dipteren, d.h.Zweiflüglern) wie beispielsweise Cyromazine.

(18) Ecdyson-Rezeptor Agonisten, wie beispielsweise Chromafenozide, Halofenozide, Methoxyfenozide und Tebufenozide.

(19) Oktopaminerge Agonisten, wie beispielsweise Amitraz.

(20) Komplex-III-Elektronentransportinhibitoren, wie beispielsweise Hydramethylnon oder Acequinocyl oder Fluacrypyrim.

(21) Komplex-I-Elektronentransportinhibitoren, beispielsweise METI-Akarizide, z.B. Fenazaquin, Fenpyroximate, Pyrimidifen, Pyridaben, Tebufenpyrad und Tolfenpyrad oder Rotenone (Derris).

(22) Spannungsabhängige Natriumkanal-Blocker, z.B. Indoxacarb oder Metaflumizone.

(23) Inhibitoren der Acetyl-CoA-Carboxylase, wie beispielsweise Tetron- und Tetramsäurederivate, z.B. Spirodiclofen, Spiromesifen und Spirotetramat.

(24) Komplex-IV-Elektronentransportinhibitoren, wie beispielsweise Phosphine, z.B. Aluminiumphosphid, Calciumphosphid, Phosphin und Zinkphosphid oder Cyanid.

(25) Komplex-II-Elektronentransportinhibitoren, wie beispielsweise Cyenopyrafen und Cyflumetofen,

(28) Ryanodinrezeptor-Effektoren, wie beispielsweise Diamide, z.B. Chlorantraniliprole, Cyantraniliprole und Flubendiamide.

weitere Wirkstoffe wie beispielsweise Afidopyropen, Azadirachtin, Benclothiaz, Benzoximate, Bifenazate, Bromopropylate, Chinomethionat, Cryolite,

Dicofol, Diflovidazin, Fluensulfone, Flometoquin, Flufenerim, Flufenoxystrobin, Fluliprole, Fluopyram, Flupyradifurone, Fufenozide, Heptafluthrin, Imidaclothiz, Iprodione, Meperfluthrin, Paichongding, Pyflubumide, Pyrifluquinazon, Pyriminostrobin, Tetramethylfluthrin und Iodmethan; desweiteren Präparate auf Basis von Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo) , sowie folgende Verbindungen:3-Brom-N-{2-brom-4-chlor-6-[(1-cyclopropylethyl)carbamoyl]phenyl}-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamid (bekannt aus WO2005/077934) und 1-{2-Fluor-4-methyl-5-[(2,2,2-trifluorethyl)sulfinyl]phenyl}-3-(trifluormethyl)-1H-1,2,4-triazol-5-amin (bekannt aus WO2006/043635), {1'-[(2E)-3-(4-Chlorphenyl)prop-2-en-1-yl]-5-fluorspiro[indol-3,4'-piperidin]-1(2H)-yl}(2-chlorpyridin-4-yl)methanon (bekannt aus WO2003/106457), 2-Chlor-N-[2-{1-[(2E)-3-(4-chlorphenyl)prop-2-en-1-yl]piperidin-4-yl}-4-(trifluormethyl)phenyl]isonicotinamid (bekannt aus WO2006/003494), 3-(2,5-Dimethylphenyl)-4-hydroxy-8-methoxy-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (bekannt aus WO2009/049851), 3-(2,5-Dimethylphenyl)-8-methoxy-2-oxo-1,8-diazaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl-ethylcarbonat (bekannt aus WO2009/049851), 4-(But-2-in-1-yloxy)-6-(3,5-dimethylpiperidin-1-yl)-5-fluorpyrimidin (bekannt aus WO2004/099160), 4-(But-2-in-1-yloxy)-6-(3-chlorphenyl)pyrimidin (bekannt aus WO2003/076415), PF1364 (CAS-Reg.No. 1204776-60-2), 4-[5-(3,5-Dichlorphenyl)-5-(trifluormethyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-methyl-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifluorethyl)amino]ethyl}benzamid (bekannt aus WO2005/085216), 4-{5-[3-Chlor-5-(trifluormethyl)phenyl]-5-(trifluormethyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl}-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifluorethyl)amino]ethyl}-1-naphthamid (bekannt aus WO2009/002809), Methyl-2-[2-({[3-brom-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)-5-chlor-3-methylbenzoyl]-2-methylhydrazincarboxylat (bekannt aus WO2005/085216), Methyl-2-[2-({3-brom-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)-5-cyan-3-methylbenzoyl]-2-ethylhydrazincarboxylat (bekannt aus WO2005/085216), Methyl-2-[2-({[3-brom-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)-5-cyan-3-methylbenzoyl]-2-methylhydrazincarboxylat (bekannt aus WO2005/085216), Methyl-2-[3,5-dibrom-2-({[3-brom-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)benzoyl]-2-ethylhydrazincarboxylat (bekannt aus WO2005/085216), 1-(3-Chlorpyridin-2-yl)-N-[4-cyan-2-methyl-6-(methylcarbamoyl)phenyl]-3-{[5-(trifluormethyl)-2H-tetrazol-2-yl]methyl}-1H-pyrazol-5-carboxamid (bekannt aus WO2010/069502), N-[2-(5-Amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl)-4-chlor-6-methylphenyl]-3-brom-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamid (bekannt aus CN102057925), 3-Chlor-N-(2-cyanopropan-2-yl)-N-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)-2-methylphenyl]phthalamid (bekannt aus WO2012/034472), 8-Chlor-N-[(2-chlor-5-methoxyphenyl)sulfonyl]-6-(trifluormethyl)imidazo[1,2-

a]pyridin-2-carboxamid (bekannt aus WO2010/129500), 4-[5-(3,5-Dichlorphenyl)-5-(trifluormethyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-methyl-N-(1-oxidothietan-3-yl)benzamid (bekannt aus WO2009/080250), 4-[5-(3,5-Dichlorphenyl)-5-(trifluormethyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-2-methyl-N-(1-oxidothietan-3-yl)benzamid (bekannt aus WO2012/029672), 1-[(2-Chlor-1,3-thiazol-5-yl)methyl]-4-oxo-3-phenyl-4H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-1-ium-2-olat (bekannt aus WO2009/099929), 1-[(6-Chlorpyridin-3-yl)methyl]-4-oxo-3-phenyl-4H-pyrido[1,2-a]pyrimidin-1-ium-2-olat (bekannt aus WO2009/099929), (5S,8R)-1-[(6-Chlorpyridin-3-yl)methyl]-9-nitro-2,3,5,6,7,8-hexahydro-1H-5,8-epoxyimidazo[1,2-a]azepin (bekannt aus WO2010/069266), (2E)-1-[(6-Chlorpyridin-3-yl)methyl]-N'-nitro-2-pentylidenhydrazincarboximidamid (bekannt aus WO2010/060231), 4-(3-{2,6-Dichlor-4-[(3,3-dichlorprop-2-en-1-yl)oxy]phenoxy}propoxy)-2-methoxy-6-(trifluormethyl)pyrimidin (bekannt aus CN101337940), N-[2-(tert-Butylcarbamoyl)-4-chlor-6-methylphenyl]-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-3-(fluormethoxy)-1H-pyrazol-5-carboxamid (bekannt aus WO2008/134969).

Fungizide

[0236] Die hier mit ihrem "common name" spezifizierten Wirkstoffe sind bekannt, beispielsweise beschrieben im "Pesticide Manual" oder im Internet (beispielsweise: http://www.alanwood.net/pesticides).

(1) Inhibitoren der Ergosterol Biosynthese, wie beispielsweise (1.1) Aldimorph, (1.2) Azaconazol, (1.3) Bitertanol, (1.4) Bromuconazol, (1.5) Cyproconazol, (1.6) Diclobutrazol, (1.7) Difenoconazol, (1.8) Diniconazol, (1.9) Diniconazol-M, (1.10) Dodemorph, (1.11) Dodemorph Acetat, (1.12) Epoxiconazol, (1.13) Etaconazol, (1.14) Fenarimol, (1.15) Fenbuconazol, (1.16) Fenhexamid, (1.17) Fenpropidin, (1.18) Fenpropimorph, (1.19) Fluquinconazol, (1.20) Flurprimidol, (1.21) Flusilazol, (1.22) Flutriafol, (1.23) Furconazol, (1.24) Furconazol-Cis, (1.25) Hexaconazol, (1.26) Imazalil, (1.27) Imazalil Sulfat, (1.28) Imibenconazol, (1.29) Ipconazol, (1.30) Metconazol, (1.31) Myclobutanil, (1.32) Naftifin, (1.33) Nuarimol, (1.34) Oxpoconazol, (1.35) Paclobutrazol, (1.36) Pefurazoat, (1.37) Penconazol, (1.38) Piperalin, (1.39) Prochloraz, (1.40) Propiconazol, (1.41) Prothioconazol, (1.42) Pyributicarb, (1.43) Pyrifenox, (1.44) Quinconazol, (1.45) Simeconazol, (1.46) Spiroxamin, (1.47) Tebuconazol, (1.48) Terbinafin, (1.49) Tetraconazol, (1.50) Triadimefon, (1.51) Triadimenol, (1.52) Tridemorph, (1.53) Triflumizol, (1.54) Triforin, (1.55) Triticonazol, (1.56) Uniconazol, (1.57) Uniconazol-p, (1.58) Viniconazol, (1.59) Voriconazol, (1.60) 1-(4-Chlorphenyl)-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)cycloheptanol, (1.61) Methyl 1-(2,2-dimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-1-yl)-1H-imidazol-5-carboxylat, (1.62) N'-{5-(Difluormethyl)-2-methyl-4-[3-(trimethylsilyl)propoxy]phenyl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (1.63) N-Ethyl-N-methyl-N'-{2-methyl-5-(trifluormethyl)-4-[3-(trimethylsilyl)propoxy]phenyl}imidoformamid und (1.64) O-[1-(4-Methoxyphenoxy)-3,3-dimethylbutan-2-yl]-1H-imidazol-1-carbothioat, (1.65) Pyrisoxazole.

(2) Inhibitoren der Respiration (Atmungsketten-Inhibitoren), wie beispielsweise (2.1) Bixafen, (2.2) Boscalid, (2.3) Carboxin, (2.4) Diflumetorim, (2.5) Fenfuram, (2.6) Fluopyram, (2.7) Flutolanil, (2.8) Fluxapyroxad, (2.9) Furametpyr, (2.10) Furmecyclox, (2.11) Isopyrazam Mischung des syn-epimeren Razemates 1RS,4SR,9RS und des anti-empimeren Razemates 1RS,4SR,9SR, (2.12) Isopyrazam (anti-epimeres Razemat), (2.13) Isopyrazam (anti-epimeres Enantiomer 1R,4S,9S), (2.14) Isopyrazam (anti-epimeres Enantiomer 1S,4R,9R), (2.15) Isopyrazam (syn-epimeres Razemat 1RS,4SR,9RS), (2.16) Isopyrazam (syn-epimeres Enantiomer 1R,4S,9R), (2.17) Isopyrazam (syn-epimeres Enantiomer 1S,4R,9S), (2.18) Mepronil, (2.19) Oxycarboxin, (2.20) Penflufen, (2.21) Penthiopyrad, (2.22) Sedaxane, (2.23) Thifluzamid, (2.24) 1-Methyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafluorethoxy)phenyl]-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.25) 3-(Difluormethyl)-1-methyl-N-[2-(1,1,2,2-tetrafluorethoxy)phenyl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.26) 3-(Difluormethyl)-N-[4-fluor-2-(1,1,2,3,3,3-hexafluorpropoxy)phenyl]-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.27) N-[1-(2,4-Dichlorphenyl)-1-methoxypropan-2-yl]-3-(difluormethyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.28) 5,8-Difluor-N-[2-(2-fluor-4-{[4-(trifluormethyl)pyridin-2-yl]oxy}phenyl)ethyl]quinazolin-4-amin, (2.29) Benzovindiflupyr, (2.30) N-[(1S,4R)-9-(Dichlormethylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-methanonaphthalen-5-yl]-3-(difluormethyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid und (2.31) N-[(1R,4S)-9-(Dichlormethylen)-1,2,3,4-tetrahydro-1,4-methanonaphthalen-5-yl]-3-(difluormethyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.32) 3-(Difluormethyl)-1-methyl-N-(1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.33) 1,3,5-Trimethyl-N-(1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.34) 1-Methyl-3-(trifluormethyl)-N-(1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.35) 1-Methyl-3-(trifluormethyl)-N-[(3R)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.36) 1-Methyl-3-(trifluormethyl)-N-[(3S)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.37) 3-(Difluormethyl)-1-methyl-N-[(3S)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.38) 3-(Difluormethyl)-1-methyl-N-[(3R)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.39) 1,3,5-Trimethyl-N-[(3R)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.40) 1,3,5-Trimethyl-N-[(3S)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (2.41) Benodanil, (2.42) 2-Chlor-N-(1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)pyridine-3-carboxamid, (2.43) Isofetamid

(3) Inhibitoren der Respiration (Atmungsketten-Inhibitoren) am Komplex III der Atmungskette, wie beispielsweise (3.1) Ametoctradin, (3.2) Amisulbrom, (3.3) Azoxystrobin, (3.4) Cyazofamid, (3.5) Coumethoxystrobin, (3.6) Coumoxystrobin, (3.5) Dimoxystrobin, (3.8) Enestroburin, (3.9) Famoxadon, (3.10) Fenamidon, (3.11) Flufenoxystrobin, (3.12) Fluoxastrobin, (3.13) Kresoxim-Methyl, (3.14) Metominostrobin, (3.15) Orysastrobin, (3.16) Picoxystrobin, (3.17) Pyraclostrobin, (3.18) Pyrametostrobin, (3.19) Pyraoxystrobin, (3.20) Pyribencarb, (3.21) Triclopyricarb, (3.22) Trifloxystrobin, (3.23) (2E)-2-(2-{[6-(3-Chlor-2-methylphenoxy)-5-fluorpyrimidin-4-yl]oxy}phenyl)-2-(methoxyimino)-N-methylethanamid, (3.24) (2E)-2-(Methoxyimino)-N-methyl-2-(2-{[({(1E)-1-[3-(trifluormethyl)phenyl]ethyliden}amino)oxy]methyl}phenyl)ethanamid, (3.25) (2E)-2-(Methoxyimino)-

N-methyl-2-{2-[(1)-({1-[3-(trifluormethyl)phenyl]ethoxy}imino)methyl]phenyl}ethanamid, (3.26) (2E)-2-{2-[({[(1E)-1-(3-{[(E)-1-Fluor-2-phenylethenyl]oxy}phenyl)ethyliden]amino}oxy)methyl]phenyl}-2-(methoxyimino)-N-methylethanamid, (3.27) (2E)-2-{2-[({[(2E,3E)-4-(2,6-Dichlorphenyl)but-3-en-2-yliden]amino}oxy)methyl]phenyl}-2-(methoxyimino)-N-methylethanamid, (3.28) 2-Chlor-N-(1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)pyridin-3-carboxamid, (3.29) 5-Methoxy-2-methyl-4-(2-{[({(1E)-1-[3-(trifluormethyl)phenyl]ethyliden}amino)oxy]methyl}phenyl)-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-on, (3.30) Methyl-(2E)-2-{2-[({cyclopropyl[(4-methoxyphenyl)imino]methyl}sulfanyl)methyl]phenyl}-3-methoxyprop-2-enoat, (3.31) N-(3-Ethyl-3,5,5-trimethylcyclohexyl)-3-(formylamino)-2-hydroxybenzamid, (3.32) 2-{2-[(2,5-Dimethylphenoxy)methyl]phenyl}-2-methoxy-N-methylacetamid, (4) Inhibitoren der Mitose und Zellteilung, wie beispielsweise (4.1) Benomyl, (4.2) Carbendazim, (4.3) Chlorfenazol, (4.4) Diethofencarb, (4.5) Ethaboxam, (4.6) Fluopicolid, (4.7) Fuberidazol, (4.8) Pencycuron, (4.9) Thiabendazol, (4.10) Thiophanat-Methyl, (4.11) Thiophanat, (4.12) Zoxamid, (4.13) 5-Chlor-7-(4-methylpiperidin-1-yl)-6-(2,4,6-trifluorphenyl)[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin und (4.14) 3-Chlor-5-(6-chlorpyridin-3-yl)-6-methyl-4-(2,4,6-trifluorphenyl)pyridazin.

(5) Verbindungen mit Multisite-Aktivität, wie beispielsweise (5.1) Bordeauxmischung, (5.2) Captafol, (5.3) Captan, (5.4) Chlorthalonil, (5.5) Kupferzubereitungen wie Kupferhydroxid, (5.6) Kupfernaphthenat, (5.7) Kupferoxid, (5.8) Kupferoxychlorid, (5.9) Kupfersulfat, (5.10) Dichlofluanid, (5.11) Dithianon, (5.12) Dodine, (5.13) Dodine freie Base, (5.14) Ferbam, (5.15) Fluorfolpet, (5.16) Folpet, (5.17) Guazatin, (5.18) Guazatinacetat, (5.19) Iminoctadin, (5.20) Iminoctadinalbesilat, (5.21) Iminoctadintriacetat, (5.22) Mankupfer, (5.23) Mancozeb, (5.24) Maneb, (5.25) Metiram, (5.26) Zinkmetiram, (5.27) Kupfer Oxin, (5.28) Propamidin, (5.29) Propineb, (5.30) Schwefel und Schwefelzubereitungen wie beispielsweise Calciumpolysulfid, (5.31) Thiram, (5.32) Tolylfluanid, (5.33) Zineb, (5.34) Ziram und (5,35) Anilazin.

(6) Resistenzinduktoren, wie beispielsweise (6.1) Acibenzolar-S-Methyl, (6.2) Isotianil, (6.3) Probenazol, (6.4) Tiadinil und (6.5) Laminarin.

(7) Inhibitoren der Aminosäure- und Protein-Biosynthese, wie beispielsweise (7.1) , (7.2) Blasticidin-S, (7.3) Cyprodinil, (7.4) Kasugamycin, (7.5) Kasugamycin Hydrochlorid Hydrat, (7.6) Mepanipyrim, (7.7) Pyrimethanil, (7.8) 3-(5-Fluor 3,3,4,4 tetramethyl 3,4 dihydroisochinolin-1 yl)chinolin und (7.9) Oxytetracyclin und (7.10) Streptomycin.

(8) Inhibitoren der ATP Produktion, wie beispielsweise (8.1) Fentin Acetat, (8.2) Fentin Chlorid, (8.3) Fentin Hydroxid und (8.4) Silthiofam.

(9) Inhibitoren der Zellwandsynthese, wie beispielsweise (9.1) Benthiavalicarb, (9.2) Dimethomorph, (9.3) Flumorph, (9.4) Iprovalicarb, (9.5) Mandipropamid, (9.6) Polyoxins, (9.7) Polyoxorim, (9.8) Validamycin A, (9.9) Valifenalat und (9.10) Polyoxin B.

(10) Inhibitoren der Lipid- und Membran-Synthese, wie beispielsweise (10.1) Biphenyl, (10.2) Chlorneb, (10.3) Dicloran, (10.4) Edifenphos, (10.5) Etridiazol, (10.6) Iodocarb, (10.7) Iprobenfos, (10.8) Isoprothiolan, (10.9) Propamocarb, (10.10) Propamocarb Hydrochlorid, (10.11) Prothiocarb, (10.12) Pyrazophos, (10.13) Quintozen, (10.14) Tecnazene und (10.15) Tolclofos-Methyl.

(11) Inhibitoren der Melanin-Biosynthese, wie beispielsweise (11.1) Carpropamid, (11.2) Diclocymet, (11.3) Fenoxanil, (11.4) Fthalid, (11.5) Pyroquilon, (11.6) Tricyclazol, und (11.7) 2,2,2-Trifluorethyl {3-methyl-1-[(4-methylbenzoyl)amino]butan-2-yl}carbamat.

(12) Inhibitoren der Nukleinsäuresynthese, wie beispielsweise (12.1) Benalaxyl, (12.2) Benalaxyl-M (Kiralaxyl), (12.3) Bupirimat, (12.4) Clozylacon, (12.5) Dimethirimol, (12.6) Ethirimol, (12.7) Furalaxyl, (12.8) Hymexazol, (12.9) Metalaxyl, (12.10) Metalaxyl-M (Mefenoxam), (12.11) Ofurace, (12.12) Oxadixyl, (12.13) Oxolinsäure und (12.14) Octhilinon.

(13) Inhibitoren der Signaltransduktion, wie beispielsweise (13.1) Chlozolinat, (13.2) Fenpiclonil, (13.3) Fludioxonil, (13.4) Iprodion, (13.5) Procymidon, (13.6) Quinoxyfen, (13.7) Vinclozolin und (13.8) Proquinazid.

(14) Entkoppler, wie beispielsweise (14.1) Binapacryl, (14.2) Dinocap, (14.3) Ferimzon, (14.4) Fluazinam und (14.5) Meptyldinocap.

(15) Weitere Verbindungen, wie beispielsweise (15.1) Benthiazol, (15.2) Bethoxazin, (15.3) Capsimycin, (15.4) Carvon, (15.5) Chinomethionat, (15.6) Pyriofenon (Chlazafenon), (15.7) Cufraneb, (15.8) Cyflufenamid, (15.9) Cymoxanil, (15.10) Cyprosulfamid, (15.11) Dazomet, (15.12) Debacarb, (15.13) Dichlorphen, (15.14) Diclomezin, (15.15) Difenzoquat, (15.16) Difenzoquat Methylsulphat, (15.17) Diphenylamin, (15.18) Ecomat, (15.19) Fenpyrazamin, (15.20) Flumetover, (15.21) Fluorimid, (15.22) Flusulfamid, (15.23) Flutianil, (15.24) Fosetyl Aluminium, (15.25) Fosetyl-Calcium, (15.26) Fosetyl-Natrium, (15.27) Hexachlorbenzol, (15.28) Irumamycin, (15.29) Methasulfocarb, (15.30) Methylisothiocyanat, (15.31) Metrafenon, (15.32) Mildiomycin, (15.33) Natamycin, (15.34) Nickel Dimethyldithiocarbamat, (15.35) Nitrothal-Isopropyl, (15.36) Octhilinone, (15.37) Oxamocarb, (15.38) Oxyfenthiin, (15.39) Pentachlorphenol und dessen Salze, (15.40) Phenothrin, (15.41) Phosphorsäure und deren Salze, (15.42) Propamocarb-Fosetylat, (15.43) Propanosin-Natrium, (15.44) Pyrimorph, (15.45) (2E)-3-(4-Tert-butylphenyl)-3-(2-chlorpyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (15.46) (2Z)-3-(4-Tert-butylphenyl)-3-(2-chlorpyridin-4-yl)-1-(morpholin-4-yl)prop-2-en-1-on, (15.47) Pyrrolnitrin, (15.48) Tebufloquin, (15.49) Tecloftalam, (15.50) Tolnifanide, (15.51) Triazoxid, (15.52) Trichlamid, (15.53) Zarilamid, (15.54) (3S,6S,7R,8R)-8-Benzyl-3-[({3-[(isobutyryloxy)methoxy]-4-methoxypyridin-2-yl}carbonyl)amino]-6-methyl-4,9-dioxo-1,5-dioxonan-7-yl 2-methylpropanoat, (15.55) 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6-Difluorphenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl]ethanon, (15.56) 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6-Difluorphenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-methyl-3-

(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl]ethanon, (15.57) 1-(4-{4-[5-(2,6-Difluorphenyl)-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)-2-[5-methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl ethanon, (15.58) 1-(4-Methoxyphenoxy)-3,3-dimethylbutan-2-yl 1H-imidazole-1-carboxylat, (15.59) 2,3,5,6-Tetrachlor-4-(methylsulfonyl)pyridin, (15.60) 2,3-Dibutyl-6-chlorthieno[2,3-d]pyrimidin-4(3H)-on, (15.61) 2,6-Dimethyl-1H,5H-[1,4]dithiino[2,3-c:5,6-c']dipyrrole-1,3,5,7(2H,6H)-tetron, (15.62) 2-[5-Methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl -1-(4-{4-[(5R)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)ethanon, (15.63) 2-[5-Methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl]-1-(4-{4-[(5S)-5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl]-1,3-thiazol-2-yl}piperidin-1-yl)ethanon, (15.64) 2-[5-Methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl -1-{4- 4-(5-phenyl-4,5-dihydro-1,2-oxazol-3-yl)-1,3-thiazol-2-yl]piperidin-1-yl}ethanon, (15.65) 2-Butoxy-6-iodo-3-propyl-4H-chromen-4-on, (15.66) 2-Chlor-5-[2-chlor-1-(2,6-difluor-4-methoxyphenyl)-4-methyl-1H-imidazol-5-yl]pyridin, (15.67) 2-Phenylphenol und Salze, (15.68) 3-(4,4,5-Trifluor-3,3-dimethyl-3,4-dihydroisochinolin-1-yl)chinolin, (15.69) 3,4,5-Trichlorpyridine-2,6-dicarbonitril, (15.70) 3-Chlor-5-(4-chlorphenyl)-4-(2,6-difluorphenyl)-6-methylpyridazin, (15.71) 4-(4-Chlorphenyl)-5-(2,6-difluorphenyl)-3,6-dimethylpyridazin, (15.72) 5-Amino-1,3,4-thiadiazole-2-thiol, (15.73) 5-Chlor-N'-phenyl-N'-(prop-2-yn-1-yl)thiophene-2-sulfonohydrazid, (15.74) 5 Fluor 2-[(4 fluorbenzyl)oxy]pyrimidin-4-amin, (15.75) 5-Fluor 2 [(4 methylbenzyl)oxy pyrimidin-4-amin, (15.76) 5-Methyl-6-octyl[1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidin-7-amin, (15.77) Ethyl (2Z)-3-amino-2-cyano-3-phenylacrylat, (15.78) N'-(4-{[3-(4-Chlorbenzyl)-1,2,4-thiadiazol-5-yl]oxy}-2,5-dimethylphenyl)-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.79) N-(4-Chlorbenzyl)-3-[3-methoxy-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamid, (15.80) N-[(4-Chlorphenyl)(cyano)methyl]-3-[3-methoxy-4-(prop-2-yn-1-yloxy)phenyl]propanamid, (15.81) N-[(5-Brom-3-chlorpyridin-2-yl)methyl] 2,4 dichlornicotinamid, (15.82) N-[1-(5-Brom-3-chlorpyridin-2-yl)ethyl]-2,4-dichlornicotinamid, (15.83) N-[1-(5-Brom-3-chlorpyridin-2-yl)ethyl]-2-fluor-4-iodonicotinamid, (15.84) N-{(E)-[(Cyclopropylmethoxy)imino][6-(difluormethoxy)-2,3-difluorphenyl]methyl}-2-phenylacetamid, (15.85) N-{(Z)-[(Cyclopropylmethoxy)imino][6-(difluormethoxy)-2,3-difluorphenyl]methyl}-2-phenylacetamid, (15.86) N'-{4-[(3-Tert-butyl-4-cyano-1,2-thiazol-5-yl)oxy]-2-chlor-5-methylphenyl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.87) N-Methyl-2-(1-{[5-methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl]acetyl}piperidin-4-yl)-N-(1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl)-1,3-thiazole-4-carboxamid, (15.88) N-Methyl-2-(1-{[5-methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl]acetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1R)-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl]-1,3-thiazole-4-carboxamid, (15.89) N-Methyl-2-(1-{[5-methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-1-yl]acetyl}piperidin-4-yl)-N-[(1S)-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl]-1,3-thiazole-4-carboxamid, (15.90) Pentyl {6-[({[(1-methyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)methylene amino}oxy)methyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.91) Phenazine-1-carbonsäure, (15.92) Chinolin-8-ol, (15.93) Chinolin-8-ol sulfate (2:1), (15.94) Tert-butyl {6-[({[(1-methyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)methylene]amino}oxy)methyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.95) 1-Methyl-3-(trifluormethyl)-N-[2'-(trifluormethyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.96) N-(4'-Chlorbiphenyl-2-yl)-3-(difluormethyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.97) N-(2',4'-Dichlorbiphenyl-2-yl)-3-(difluormethyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.98) 3-

(Difluormethyl)-1-methyl-N-[4'-(trifluormethyl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.99) N-(2',5'-Difluorbiphenyl-2-yl)-1-methyl-3-(trifluormethyl)-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.100) 3-(Difluormethyl)-1-methyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.101) 5-Fluor-1,3-dimethyl-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.102) 2-Chlor-N-[4'-(prop-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamid, (15.103) 3-(Difluormethyl)-N-[4'-(3,3-dimethylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.104) N-[4'-(3,3-dimethylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-5-fluor-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.105) 3-(Difluormethyl)-N-(4'-ethinylbiphenyl-2-yl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.106) N-(4'-Ethinylbiphenyl-2-yl)-5-fluor-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.107) 2-Chlor-N-(4'-ethinylbiphenyl-2-yl)nicotinamid, (15.108) 2-Chlor-N-[4'-(3,3-dimethylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamid, (15.109) 4-(Difluormethyl)-2-methyl-N-[4'-(trifluormethyl)biphenyl-2-yl]-1,3-thiazole-5-carboxamid, (15.110) 5-Fluor-N-[4'-(3-hydroxy-3-methylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.111) 2-Chlor-N-[4'-(3-hydroxy-3-methylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamid, (15.112) 3-(Difluormethyl)-N-[4'-(3-methoxy-3-methylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.113) 5-Fluor-N-[4'-(3-methoxy-3-methylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.114) 2-Chlor-N-[4'-(3-methoxy-3-methylbut-1-yn-1-yl)biphenyl-2-yl]nicotinamid, (15.115) (5-Brom-2-methoxy-4-methylpyridin-3-yl)(2,3,4-trimethoxy-6-methylphenyl)methanon, (15.116) N-[2-(4-{[3-(4-Chlorphenyl)prop-2-yn-1-yl]oxy}-3-methoxyphenyl)ethyl]-N2-(methylsulfonyl)valinamid, (15.117) 4-Oxo-4-[(2-phenylethyl)amino]butansäure, (15.118) But-3-yn-1-yl {6-[({[(Z)-(1-methyl-1H-tetrazol-5-yl)(phenyl)methylene]amino}oxy)methyl]pyridin-2-yl}carbamat, (15.119) 4-Amino-5-fluorpyrimidin-2-ol (Tautomere Form: 4-Amino-5-fluorpyrimidin-2(1H)-on), (15.120) Propyl-3,4,5-trihydroxybenzoat, (15.121) 1,3-Dimethyl-N-(1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.122) 1,3-Dimethyl-N-[(3R)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.123) 1,3-Dimethyl-N-[(3S)-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.124) [3-(4-Chlor-2-fluorphenyl)-5-(2,4-difluorphenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)methanol, (15.125) (S)-[3-(4-Chlor-2-fluorphenyl)-5-(2,4-difluorphenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)methanol, (15.126) (R)-[3-(4-Chlor-2-fluorphenyl)-5-(2,4-difluorphenyl)-1,2-oxazol-4-yl](pyridin-3-yl)methanol, (15.127) 2-{[3-(2-Chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.128) 1-{[3-(2-Chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thiocyanat, (15.129) 5-(Allylsulfanyl)-1-{[3-(2-chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.130) 2-[1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.131) 2-{[rel(2R,3S)-3-(2-Chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.132) 2-{[rel(2R,3R)-3-(2-Chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.133) 1-{[rel(2R,3S)-3-(2-Chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thiocyanat, (15.134) 1-{[rel(2R,3R)-3-(2-Chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-1H-1,2,4-triazol-5-yl thiocyanat, (15.135) 5-(Allylsulfanyl)-1-{[rel(2R,3S)-3-(2-chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-

yl]methyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.136) 5-(Allylsulfanyl)-1-{[rel(2R,3R)-3-(2-chlorphenyl)-2-(2,4-difluorphenyl)oxiran-2-yl]methyl}-1H-1,2,4-triazol, (15.137) 2-[(2S,4S,5S)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.138) 2-[(2R,4S,5S)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.139) 2-[(2R,4R,5R)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.140) 2-[(2S,4R,5R)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.141) 2-[(2S,4S,5R)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.142) 2-[(2R,4S,5R)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.143) 2-[(2R,4R,5S)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.144) 2-[(2S,4R,5S)-1-(2,4-Dichlorphenyl)-5-hydroxy-2,6,6-trimethylheptan-4-yl]-2,4-dihydro-3H-1,2,4-triazol-3-thion, (15.145) 2-Fluor-6-(trifluormethyl)-N-(1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)benzamid, (15.146) 2-(6-Benzylpyridin-2-yl)quinazolin, (15.147) 2-[6-(3-Fluor-4-methoxyphenyl)-5-methylpyridin-2-yl]quinazolin, (15.148) 3-(4,4-Difluor-3,3-dimethyl-3,4-dihydroisochinolin-1-yl)chinolin, (15.149) Abscisinsäure, (15.150) 3-(Difluormethyl)-N-methoxy-1-methyl-N-[1-(2,4,6-trichlorphenyl)propan-2-yl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.151) N'-[5-Brom-6-(2,3-dihydro-1H-inden-2-yloxy)-2-methylpyridin-3-yl]-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.152) N'-{5-Brom-6-[1-(3,5-difluorphenyl)ethoxy]-2-methylpyridin-3-yl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.153) N'-{5-Brom-6-[(1R)-1-(3,5-difluorphenyl)ethoxy]-2-methylpyridin-3-yl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.154) N'-{5-Brom-6-[(1S)-1-(3,5-difluorphenyl)ethoxy]-2-methylpyridin-3-yl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.155) N'-{5-Brom-6-[(cis-4-isopropylcyclohexyl)oxy]-2-methylpyridin-3-yl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.156) N'-{5-Brom-6-[(trans-4-isopropylcyclohexyl)oxy]-2-methylpyridin-3-yl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.157) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-N-(2-isopropylbenzyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.158) N-Cyclopropyl-N-(2-cyclopropylbenzyl)-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.159) N-(2-Tert-butylbenzyl)-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.160) N-(5-Chlor-2-ethylbenzyl)-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.161) N-(5-Chlor-2-isopropylbenzyl)-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.162) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-N-(2-ethyl-5-fluorbenzyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.163) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-N-(5-fluor-2-isopropylbenzyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.164) N-Cyclopropyl-N-(2-cyclopropyl-5-fluorbenzyl)-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.165) N-(2-Cyclopentyl-5-fluorbenzyl)-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.166) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-N-(2-fluor-6-isopropylbenzyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.167) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-N-(2-ethyl-5-methylbenzyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.168) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-N-(2-isopropyl-5-methylbenzyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.169) N-Cyclopropyl-N-(2-cyclopropyl-5-methylbenzyl)-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-

carboxamid, (15.170) N-(2-Tert-butyl-5-methylbenzyl)-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.171) N-[5-Chlor-2-(trifluormethyl)benzyl]-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.172) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-N-[5-methyl-2-(trifluormethyl)benzyl]-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.173) N-[2-Chlor-6-(trifluormethyl)benzyl]-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.174) N-[3-Chlor-2-fluor-6-(trifluormethyl)benzyl]-N-cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.175) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-N-(2-ethyl-4,5-dimethylbenzyl)-5-fluor-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.176) N-Cyclopropyl-3-(difluormethyl)-5-fluor-N-(2-isopropylbenzyl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carbothioamid, (15.177) 3-(Difluormethyl)-N-(7-fluor-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl)-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.178) 3-(Difluormethyl)-N-[(3R)-7-fluor-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.179) 3-(Difluormethyl)-N-[(3S)-7-fluor-1,1,3-trimethyl-2,3-dihydro-1H-inden-4-yl]-1-methyl-1H-pyrazol-4-carboxamid, (15.180) N'-(2,5-Dimethyl-4-phenoxyphenyl)-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.181) N'-{4-[(4,5-Dichlor-1,3-thiazol-2-yl)oxy]-2,5-dimethylphenyl}-N-ethyl-N-methylimidoformamid, (15.182) N-(4-Chlor-2,6-difluorphenyl)-4-(2-chlor-4-fluorphenyl)-1,3-dimethyl-1H-pyrazol-5-amin. Alle genannten Mischpartner der Klassen (1) bis (15) können, wenn sie auf Grund ihrer funktionellen Gruppen dazu imstande sind, gegebenenfalls mit geeigneten Basen oder Säuren Salze bilden.

Biologische Schädlingsbekämpfungsmittel als Mischungspartner

[0237] Die Verbindungen der Formel (I) können mit biologischen Schädlingsbekämpfungsmitteln kombiniert werden.

[0238] Biologische Schädlingsbekämpfungsmittel umfassen insbesondere Bakterien, Pilze, Hefen, Pflanzenextrakte, und solche Produkte, die von Mikroorganismen gebildet wurden inklusive Proteine und sekundäre Stoffwechselprodukte.

[0239] Biologische Schädlingsbekämpfungsmittel umfassen Bakterien wie sporenbildende Bakterien, wurzelbesiedelnde Bakterien und Bakterien, die als biologische Insektizide, Fungizide oder Nematizide wirken.

[0240] Beispiele für solche Bakterien, die als biologische Schädlingsbekämpfungsmittel eingesetzt werden bzw. verwendet werden können, sind:

Bacillus amyloliquefaciens, Stamm FZB42 (DSM 231179), oder *Bacillus cereus*, insbesondere *B. cereus* Stamm CNCM I-1562 oder *Bacillus firmus*, Stamm I-1582 (Accession number CNCM I-1582) oder *Bacillus pumilus*, insbesondere Stamm GB34 (Accession No. ATCC 700814), und Stamm QST2808 (Accession No. NRRL B-30087), oder *Bacillus subtilis*, insbesondere Stamm GB03 (Accession No. ATCC SD-1397), oder *Bacillus subtilis* Stamm QST713 (Accession No. NRRL B-21661) oder *Bacillus*

subtilis Stamm OST 30002 (Accession No. NRRL B-50421) *Bacillus thuringiensis*, insbesondere *B. thuringiensis* subspecies *israelensis* (serotype H-14), Stamm AM65-52 (Accession No. ATCC 1276), oder *B. thuringiensis subsp. aizawai*, insbesondere Stamm ABTS-1857 (SD-1372), oder *B. thuringiensis subsp. kurstaki* Stamm HD-1, oder *B. thuringiensis subsp. tenebrionis* Stamm NB 176 (SD-5428), *Pasteuria penetrans*, *Pasteuria spp.* (Rotylenchulus reniformis nematode)-PR3 (Accession Number ATCC SD-5834), *Streptomyces microflavus* Stamm AQ6121 (= QRD 31.013, NRRL B-50550), *Streptomyces galbus* Stamm AQ 6047 (Acession Number NRRL 30232).

[0241] Beispiele für Pilze und Hefen, die als biologische Schädlingsbekämpfungsmittel eingesetzt werden bzw. verwendet werden können, sind:

Beauveria bassiana, insbesondere Stamm ATCC 74040, *Coniothyrium minitans*, insbesondere Stamm CON/M/91-8 (Accession No. DSM-9660), *Lecanicillium spp.*, insbesondere Stamm HRO LEC 12, *Lecanicillium lecanii*, (ehemals bekannt als *Verticillium lecanii*), insbesondereStamm KV01, *Metarhizium anisopliae*, insbesondere Stamm F52 (DSM3884/ ATCC 90448), *Metschnikowia fructicola*, insbesondere Stamm NRRL Y-30752, *Paecilomyces fumosoroseus* (neu: *Isaria fumosorosea*), insbesondere Stamm IFPC 200613, oder Stamm Apopka 97 (Accesion No. ATCC 20874), *Paecilomyces lilacinus*, insbesondere *P. lilacinus* Stamm 251 (AGAL 89/030550), *Talaromyces flavus*, insbesondere Stamm V117b, *Trichoderma atroviride*, insbesondere Stamm SC1 (Accession Number CBS 122089), *Trichoderma harzianum*, insbesondere *T. harzianum rifai T39*. (Accession Number CNCM I-952).

[0242] Beispiele für Viren, die als biologische Schädlingsbekämpfungsmittel eingesetzt werden bzw. verwendet werden können, sind:

Adoxophyes orana (Apfelschalenwickler) Granulosevirus (GV), *Cydia pomonella* (Apfelwickler) Granulosevirus (GV), *Helicoverpa armigera* (Baumwollkapselwurm) Nuklear Polyhedrosis Virus (NPV), *Spodoptera exigua* (Zuckerrübeneule) mNPV, *Spodoptera frugiperda* (Heerwurm) mNPV, *Spodoptera littoralis* (Afrikanischer Baumwollwurm) NPV.

[0243] Es sind auch Bakterien und Pilze umfasst, die als ‚Inokulant' Pflanzen oder Pflanzenteilen oder Pflanzenorganen beigegeben werden und durch ihre besonderen Eigenschaften das Pflanzenwachstum und die Pflanzengesundheit fördern. Als Beispiele sind genannt:

Agrobacterium spp., *Azorhizobium caulinodans*, *Azospirillum spp.*, *Azotobacter spp.*, *Bradyrhizobium spp.*, *Burkholderia spp.*, insbesondere *Burkholderia cepacia* (ehemals bekannt als *Pseudomonas cepacia*), *Gigaspora spp.*, oder *Gigaspora monosporum*, *Glomus spp.*, *Laccaria spp.*, *Lactobacillus buchneri*, *Paraglomus spp.*, *Pisolithus tinctorus*, *Pseudomonas spp.*, *Rhizobium spp.*, insbesondere *Rhizobium trifolii*, *Rhizopogon spp.*, *Scleroderma spp.*, *Suillus spp.*, *Streptomyces spp.*.

Safener als Mischpartner

[0244] Die Verbindungen der Formel (I) können mit Safenern kombiniert werden, wie zum Beispiel Benoxacor, Cloquintocet (-mexyl), Cyometrinil, Cyprosulfamide, Dichlormid, Fenchlorazole (-ethyl), Fenclorim, Flurazole, Fluxofenim, Furilazole, Isoxadifen (-ethyl), Mefenpyr (-diethyl), Naphthalic anhydride, Oxabetrinil, 2-Methoxy-N-({4-[(methylcarbamoyl)amino]phenyl}sulfonyl)benzamid (CAS 129531-12-0), 4-(Dichloroacetyl)-1-oxa-4-azaspiro[4.5]decane der (CAS 71526-07-3), 2,2,5-Trimethyl-3-(dechloroacetyl)-1,3-oxazolidine (CAS 52836-31-4).

Pflanzen und Pflanzenteile

[0245] Erfindungsgemäß können alle Pflanzen und Pflanzenteile behandelt werden. Unter Pflanzen werden hierbei alle Pflanzen und Pflanzenpopulationen verstanden wie erwünschte und unerwünschte Wildpflanzen oder Kulturpflanzen (einschließlich natürlich vorkommender Kulturpflanzen), beispielsweise Getreide (Weizen, Reis, Triticale, Gerste, Roggen, Hafer), Mais, Soja, Kartoffel, Zuckerrüben, Zuckerrohr, Tomaten, Erbsen und andere Gemüsesorten, Baumwolle, Tabak, Raps, sowie Obstpflanzen (mit den Früchten Äpfel, Birnen, Zitrusfrüchten und Weintrauben). Kulturpflanzen können Pflanzen sein, die durch konventionelle Züchtungs- und Optimierungsmethoden oder durch biotechnologische und gentechnologische Methoden oder Kombinationen dieser Methoden erhalten werden können, einschließlich der transgenen Pflanzen und einschließlich der durch Sortenschutzrechte schützbaren oder nicht schützbaren Pflanzensorten. Unter Pflanzenteilen sollen alle oberirdischen und unterirdischen Teile und Organe der Pflanzen wie Spross, Blatt, Blüte und Wurzel verstanden werden, wobei beispielhaft Blätter, Nadeln, Stängel, Stämme, Blüten, Fruchtkörper, Früchte und Samen sowie Wurzeln, Knollen und Rhizome aufgeführt werden. Zu den Pflanzenteilen gehört auch Erntegut sowie vegetatives und generatives Vermehrungsmaterial, beispielsweise Stecklinge, Knollen, Rhizome, Ableger und Samen.

[0246] Die erfindungsgemäße Behandlung der Pflanzen und Pflanzenteile mit den Verbindungen der Formel (I) erfolgt direkt oder durch Einwirkung auf deren Umgebung, Lebensraum oder Lagerraum nach den üblichen Behandlungsmethoden, z.B. durch Tauchen, Sprühen, Verdampfen, Vernebeln, Streuen, Aufstreichen, Injizieren und bei Vermehrungsmaterial, insbesondere bei Saatgut, weiterhin durch ein- oder mehrschichtiges Umhüllen.

[0247] Wie bereits oben erwähnt können erfindungsgemäß alle Pflanzen und deren Teile behandelt werden. In einer bevorzugten Ausführungsform werden wild vorkommende oder durch konventionelle biologische Zuchtmethoden wie Kreuzung oder Protoplastenfusion erhaltene Pflanzenarten und Pflanzensorten sowie deren Teile behandelt. In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform werden transgene Pflanzen und Pflanzensorten, die durch gentechnologische Methoden gegebenenfalls in Kombination mit konventionellen Methoden erhalten wurden (Genetically Modified Organisms) und deren Teile behandelt. Der Begriff „Teile" bzw. „Teile von Pflanzen" oder „Pflanzenteile" wurde oben

erläutert. Besonders bevorzugt werden erfindungsgemäß Pflanzen der jeweils handelsüblichen oder in Gebrauch befindlichen Pflanzensorten behandelt. Unter Pflanzensorten versteht man Pflanzen mit neuen Eigenschaften („Traits"), die sowohl durch konventionelle Züchtung, durch Mutagenese oder durch rekombinante DNA-Techniken gezüchtet worden sind. Dies können Sorten, Rassen, Bio- und Genotypen sein.

Transgene Pflanze, Saatgutbehandlung und Integrationsereignisse

[0248] Zu den bevorzugten erfindungsgemäß zu behandelnden transgenen (gentechnologisch erhaltenen) Pflanzen bzw. Pflanzensorten gehören alle Pflanzen, die durch die gentechnologische Modifikation genetisches Material erhielten, welches diesen Pflanzen besondere vorteilhafte wertvolle Eigenschaften ("Traits") verleiht. Beispiele für solche Eigenschaften sind besseres Pflanzenwachstum, erhöhte Toleranz gegenüber hohen oder niedrigen Temperaturen, erhöhte Toleranz gegen Trockenheit oder gegen Wasser- bzw. Bodensalzgehalt, erhöhte Blühleistung, erleichterte Ernte, Beschleunigung der Reife, höhere Ernteerträge, höhere Qualität und/oder höherer Ernährungswert der Erzeugnisse, höhere Lagerfähigkeit und/oder Bearbeitbarkeit der Erzeugnisse. Weitere und besonders hervorgehobene Beispiele für solche Eigenschaften sind eine erhöhte Abwehrfähigkeit der Pflanzen gegen tierische und mikrobielle Schädlinge, wie Insekten, Spinnentiere, Nematoden, Milben, Schnecken, bewirkt z.B. durch in den Pflanzen entstehende Toxine, insbesondere solche, die durch das genetische Material aus Bacillus Thuringiensis (z.B. durch die Gene CryIA(a), CryIA(b), CryIA(c), CryIIA, CryIIIA, CryIIIB2, Cry9c Cry2Ab, Cry3Bb und CryIF sowie deren Kombinationen) in den Pflanzen erzeugt werden, ferner eine erhöhte Abwehrfähigkeit der Pflanzen gegen pflanzenpathogene Pilze, Bakterien und/oder Viren, bewirkt z.B. durch Systemisch Akquirierte Resistenz (SAR), Systemin, Phytoalexine, Elicitoren sowie Resistenzgene und entsprechend exprimierte Proteine und Toxine, sowie eine erhöhte Toleranz der Pflanzen gegen bestimmte herbizide Wirkstoffe, beispielsweise Imidazolinonen, Sulfonyl-harnstoffen, Glyphosate oder Phosphinotricin (z.B. "PAT"-Gen). Die jeweils die gewünschten Eigenschaften ("Traits") verleihenden Gene können auch in Kombinationen miteinander in den transgenen Pflanzen vorkommen. Als Beispiele transgener Pflanzen werden die wichtigen Kulturpflanzen, wie Getreide (Weizen, Reis, Triticale, Gerste, Roggen, Hafer), Mais, Soja, Kartoffel, Zuckerrüben, Zuckerrohr, Tomaten, Erbsen und andere Gemüsesorten, Baumwolle, Tabak, Raps, sowie Obstpflanzen (mit den Früchten Äpfel, Birnen, Zitrusfrüchten und Weintrauben) erwähnt, wobei Mais, Soja, Weizen, Reis, Kartoffel, Baumwolle, Zuckerrohr, Tabak und Raps besonders hervorgehoben werden. Als Eigenschaften ("Traits") werden besonders hervorgehoben die erhöhte Abwehrfähigkeit der Pflanzen gegen Insekten, Spinnentiere, Nematoden und Schnecken.

Pflanzenschutz – Behandlungsarten

[0249] Die Behandlung der Pflanzen und Pflanzenteile mit den Verbindungen der Formel (I) erfolgt direkt oder durch Einwirkung auf deren Umgebung, Lebensraum oder Lagerraum nach den üblichen

Behandlungsmethoden, z.B. durch Tauchen, (Ver-) Spritzen, (Ver-)Sprühen, Berieseln, Verdampfen, Zerstäuben, Vernebeln, (Ver-)Streuen, Verschäumen, Bestreichen, Verstreichen, Injizieren, Gießen (drenchen), Tröpfchenbewässerung und bei Vermehrungsmaterial, insbesondere bei Saatgut, weiterhin durch Trockenbeizen, Nassbeizen, Schlämmbeizen, Inkrustieren, ein- oder mehrschichtiges Umhüllen, usw. Es ist ferner möglich, die Verbindungen der Formel (I) nach dem Ultra-Low-Volume-Verfahren auszubringen oder die Anwendungsform oder die Verbindung der Formel (I) selbst in den Boden zu injizieren.

[0250] Eine bevorzugte direkte Behandlung der Pflanzen ist die Blattapplikation, d.h. Verbindungen der Formel (I) werden auf das Blattwerk aufgebracht, wobei die Behandlungsfrequenz und die Aufwandmenge auf den Befallsdruck des jeweiligen Schädlings abgestimmt sein sollte.

[0251] Bei systemisch wirksamen Verbindungen gelangen die Verbindungen der Formel (I) auch über das Wurzelwerk in die Pflanzen. Die Behandlung der Pflanzen erfolgt dann durch Einwirkung der Verbindungen der Formel (I) auf den Lebensraum der Pflanze. Das kann beispielsweise durch Drenchen, Einmischen in den Boden oder die Nährlösung sein, d.h. der Standort der Pflanze (z.B. Boden oder hydroponische Systeme) wird mit einer flüssigen Form der Verbindungen der Formel (I) getränkt, oder durch die Bodenapplikation, d.h. die Verbindungen der Formel (I) werden in fester Form, (z.B. in Form eines Granulats) in den Standort der Pflanzen eingebracht. Bei Wasserreiskulturen kann das auch durch Zudosieren der Verbindung der Formel (I) in einer festen Anwendungsform (z.B. als Granulat) in ein überflutetes Reisfeld sein.

Saatgutbehandlung

[0252] Die Bekämpfung von tierischen Schädlingen durch die Behandlung des Saatguts von Pflanzen ist seit langem bekannt und ist Gegenstand ständiger Verbesserungen. Dennoch ergeben sich bei der Behandlung von Saatgut eine Reihe von Problemen, die nicht immer zufriedenstellend gelöst werden können. So ist es erstrebenswert, Verfahren zum Schutz des Saatguts und der keimenden Pflanze zu entwickeln, die das zusätzliche Ausbringen von Schädlingsbekämpfungsmitteln bei der Lagerung, nach der Saat oder nach dem Auflaufen der Pflanzen überflüssig machen oder zumindest deutlich verringern. Es ist weiterhin erstrebenswert, die Menge des eingesetzten Wirkstoffs dahingehend zu optimieren, dass das Saatgut und die keimende Pflanze vor dem Befall durch tierische Schädlinge bestmöglich geschützt werden, ohne jedoch die Pflanze selbst durch den eingesetzten Wirkstoff zu schädigen. Insbesondere sollten Verfahren zur Behandlung von Saatgut auch die intrinsischen insektiziden bzw. nematiziden Eigenschaften schädlingsresistenter bzw. – toleranter transgener Pflanzen einbeziehen, um einen optimalen Schutz des Saatguts und der keimenden Pflanze bei einem minimalen Aufwand an Schädlingsbekämpfungsmitteln zu erreichen.

[0253] Die vorliegende Erfindung bezieht sich daher insbesondere auch auf ein Verfahren zum Schutz von Saatgut und keimenden Pflanzen vor dem Befall von Schädlingen, indem das Saatgut mit einer der

Verbindungen der Formel (I) behandelt wird. Das erfindungsgemäße Verfahren zum Schutz von Saatgut und keimenden Pflanzen vor dem Befall von Schädlingen umfasst ferner ein Verfahren, in dem das Saatgut gleichzeitig in einem Vorgang oder sequentiell mit einer Verbindung der Formel (I) und Mischungspartner behandelt wird. Es umfasst ferner auch ein Verfahren, in dem das Saatgut zu unterschiedlichen Zeiten mit einer Verbindung der Formel (I) und Mischungspartner behandelt wird.

[0254] Die Erfindung bezieht sich ebenfalls auf die Verwendung der Verbindungen der Formel (I) zur Behandlung von Saatgut zum Schutz des Saatguts und der daraus entstehenden Pflanze vor tierischen Schädlingen.

[0255] Weiterhin bezieht sich die Erfindung auf Saatgut, welches zum Schutz vor tierischen Schädlingen mit einer Verbindung der Formel (I) behandelt wurde. Die Erfindung bezieht sich auch auf Saatgut, welches zur gleichen Zeit mit einer Verbindung der Formel (I) und Mischungspartner behandelt wurde. Die Erfindung bezieht sich weiterhin auf Saatgut, welches zu unterschiedlichen Zeiten mit einer Verbindung der Formel (I) und Mischungspartner behandelt wurde. Bei Saatgut, welches zu unterschiedlichen Zeiten mit einer Verbindung der Formel (I) und Mischungspartner behandelt wurde, können die einzelnen Substanzen in unterschiedlichen Schichten auf dem Saatgut enthalten sein. Dabei können die Schichten, die eine Verbindung der Formel (I) und Mischungspartner enthalten, gegebenenfalls durch eine Zwischenschicht getrennt sein. Die Erfindung bezieht sich auch auf Saatgut, bei dem eine Verbindung der Formel (I) und Mischungspartner als Bestandteil einer Umhüllung oder als weitere Schicht oder weitere Schichten zusätzlich zu einer Umhüllung aufgebracht sind.

[0256] Des Weiteren bezieht sich die Erfindung auf Saatgut, welches nach der Behandlung mit einer Verbindung der Formel (I) einem Filmcoating - Verfahren unterzogen wird, um Staubabrieb am Saatgut zu vermeiden.

[0257] Einer der auftretenden Vorteile, wenn eine der Verbindungen der Formel (I) systemisch wirkt, ist es, dass die Behandlung des Saatguts nicht nur das Saatgut selbst, sondern auch die daraus hervorgehenden Pflanzen nach dem Auflaufen vor tierischen Schädlingen schützt. Auf diese Weise kann die unmittelbare Behandlung der Kultur zum Zeitpunkt der Aussaat oder kurz danach entfallen.

[0258] Ein weiterer Vorteil ist darin zu sehen, dass durch die Behandlung des Saatguts mit einer Verbindung der Formel (I) Keimung und Auflauf des behandelten Saatguts gefördert werden können.

[0259] Ebenso ist es als vorteilhaft anzusehen, dass Verbindungen der Formel (I) insbesondere auch bei transgenem Saatgut eingesetzt werden können.

[0260] Verbindungen der Formel (I) können ferner in Kombination mit Mitteln der Signaltechnologie eingesetzt werden, wodurch eine bessere Besiedlung mit Symbionten, wie zum Beispiel Rhizobien,

Mycorrhiza und/oder endophytischen Bakterien oder Pilzen, stattfindet und/oder es zu einer optimierten Stickstofffixierung kommt.

[0261] Die Verbindungen der Formel (I) eignen sich zum Schutz von Saatgut jeglicher Pflanzensorte, die in der Landwirtschaft, im Gewächshaus, in Forsten oder im Gartenbau eingesetzt wird. Insbesondere handelt es sich dabei um Saatgut von Getreide (z. B. Weizen, Gerste, Roggen, Hirse und Hafer), Mais, Baum-wolle, Soja, Reis, Kartoffeln, Sonnenblume, Kaffee, Tabak, Canola, Raps, Rübe (z.B. Zuckerrübe und Futterrübe), Erdnuss, Gemüse (z. B. Tomate, Gurke, Bohne, Kohlgewächse, Zwiebeln und Salat), Obstpflanzen, Rasen und Zierpflanzen. Besondere Bedeutung kommt der Behandlung des Saatguts von Getreide (wie Weizen, Gerste, Roggen und Hafer), Mais, Soja, Baumwolle, Canola, Raps und Reis zu.

[0262] Wie vorstehend bereits erwähnt, kommt auch der Behandlung von transgenem Saatgut mit einer Verbindung der Formel (I) eine besondere Bedeutung zu. Dabei handelt es sich um das Saatgut von Pflanzen, die in der Regel zumindest ein heterologes Gen enthalten, das die Expression eines Polypeptids mit insbesondere insektiziden bzw. nematiziden Eigenschaften steuert. Die heterologen Gene in transgenem Saatgut können dabei aus Mikro-organismen wie Bacillus, Rhizobium, Pseudomonas, Serratia, Trichoderma, Clavibacter, Glomus oder Gliocladium stammen. Die vorliegende Erfindung eignet sich besonders für die Behandlung von trans genem Saatgut, das zumindest ein heterologes Gen enthält, das aus Bacillus sp. stammt. Besonders bevorzugt handelt es sich dabei um ein heterologes Gen, das aus Bacillus thuringiensis stammt.

[0263] Im Rahmen der vorliegenden Erfindung wird die Verbindung der Formel (I) auf das Saatgut aufgebracht. Vorzugsweise wird das Saatgut in einem Zustand behandelt, in dem es so stabil ist, dass keine Schäden bei der Behandlung auftreten. Im Allgemeinen kann die Behandlung des Saatguts zu jedem Zeitpunkt zwischen der Ernte und der Aussaat erfolgen. Üblicherweise wird Saatgut verwendet, das von der Pflanze getrennt und von Kolben, Schalen, Stängeln, Hülle, Wolle oder Fruchtfleisch befreit wurde. So kann zum Beispiel Saatgut verwendet werden, das geerntet, gereinigt und bis zu einem lagerfähigen Feuchtigkeitsgehalt getrocknet wurde. Alternativ kann auch Saatgut verwendet werden, das nach dem Trocknen z.B. mit Wasser behandelt und dann erneut getrocknet wurde, zum Beispiel Priming.

[0264] Im Allgemeinen muss bei der Behandlung des Saatguts darauf geachtet werden, dass die Menge der auf das Saatgut aufgebrachten Verbindung der Formel (I) und/oder weiterer Zusatzstoffe so gewählt wird, dass die Keimung des Saatguts nicht beeinträchtigt bzw. die daraus hervorgehende Pflanze nicht geschädigt wird. Dies ist vor allem bei Wirkstoffen zu beachten, die in bestimmten Aufwandmengen phytotoxische Effekte zeigen können.

[0265] Die Verbindungen der Formel (I) werden in der Regel in Form einer geeigneten Formulierung auf das Saatgut aufgebracht. Geeignete Formulierungen und Verfahren für die Saatgutbehandlung sind dem Fachmann bekannt.

[0266] Die Verbindungen der Formel (I) können in die üblichen Beizmittel-Formulierungen überführt werden, wie Lösungen, Emulsionen, Suspensionen, Pulver, Schäume, Slurries oder andere Hüllmassen für Saatgut, sowie ULV-Formulierungen.

[0267] Diese Formulierungen werden in bekannter Weise hergestellt, indem man Verbindungen der Formel (I) mit üblichen Zusatzstoffen vermischt, wie zum Beispiel übliche Streckmittel sowie Lösungs- oder Verdünnungsmittel, Farbstoffe, Netzmittel, Dispergiermittel, Emulgatoren, Entschäumer, Konservierungsmittel, sekundäre Verdickungsmittel, Kleber, Gibberelline und auch Wasser.

[0268] Als Farbstoffe, die in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen enthalten sein können, kommen alle für derartige Zwecke üblichen Farbstoffe in Betracht. Dabei sind sowohl in Wasser wenig lösliche Pigmente als auch in Wasser lösliche Farbstoffe verwendbar. Als Beispiele genannt seien die unter den Bezeichnungen Rhodamin B, C.I. Pigment Red 112 und C.I. Solvent Red 1 bekannten Farbstoffe.

[0269] Als Netzmittel, die in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen enthalten sein können, kommen alle zur Formulierung von agrochemischen Wirkstoffen üblichen, die Benetzung fördernden Stoffe in Frage. Vorzugsweise verwendbar sind Alkylnaphthalin-Sulfonate, wie Diisopropyl- oder Diisobutyl-naphthalin-Sulfonate.

[0270] Als Dispergiermittel und/oder Emulgatoren, die in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen enthalten sein können, kommen alle zur Formulierung von agrochemischen Wirkstoffen üblichen nichtionischen, anionischen und kationischen Dispergiermittel in Betracht. Vorzugsweise verwendbar sind nichtionische oder anionische Dispergiermittel oder Gemische von nichtionischen oder anionischen Dispergiermitteln. Als geeignete nichtionische Dispergiermittel sind insbesondere Ethylenoxid-Propylenoxid Blockpolymere, Alkylphenolpolyglykolether sowie Tristryrylphenolpolyglykolether und deren phosphatierte oder sulfatierte Derivate zu nennen. Geeignete anionische Dispergiermittel sind insbesondere Ligninsulfonate, Polyacrylsäuresalze und Arylsulfonat-Formaldehydkondensate.

[0271] Als Entschäumer können in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen alle zur Formulierung von agrochemischen Wirkstoffen üblichen schaumhemmenden Stoffe enthalten sein. Vorzugsweise verwendbar sind Silikonentschäumer und Magnesiumstearat.

[0272] Als Konservierungsmittel können in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel Formulierungen alle für derartige Zwecke in agrochemischen Mitteln einsetzbaren Stoffe vorhanden sein. Beispielhaft genannt seien Dichlorophen und Benzylalkoholhemiformal.

[0273] Als sekundäre Verdickungsmittel, die in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen enthalten sein können, kommen alle für derartige Zwecke in agrochemischen Mitteln ein-

setzbaren Stoffe in Frage. Vorzugsweise in Betracht kommen Cellulosederivate, Acrylsäurederivate, Xanthan, modifizierte Tone und hochdisperse Kieselsäure.

[0274] Als Kleber, die in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen enthalten sein können, kommen alle üblichen in Beizmitteln einsetzbaren Bindemittel in Frage. Vorzugsweise genannt seien Polyvinylpyrrolidon, Polyvinylacetat, Polyvinylalkohol und Tylose.

[0275] Als Gibberelline, die in den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen enthalten sein können, kommen vorzugsweise die Gibberelline A1, A3 (= Gibberellinsäure), A4 und A7 infrage, be-sonders bevorzugt verwendet man die Gibberellinsäure. Die Gibberelline sind bekannt (vgl. R. Wegler „Chemie der Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel", Bd. 2, Springer Verlag, 1970, S. 401-412).

[0276] Die erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen können entweder direkt oder nach vorherigem Verdünnen mit Wasser zur Behandlung von Saatgut der verschiedensten Art eingesetzt werden. So lassen sich die Konzentrate oder die daraus durch Verdünnen mit Wasser erhältlichen Zubereitungen einsetzen zur Beizung des Saatgutes von Getreide, wie Weizen, Gerste, Roggen, Hafer und Triticale, sowie des Saatgutes von Mais, Reis, Raps, Erbsen, Bohnen, Baumwolle, Sonnenblumen, Soja und Rüben oder auch von Gemüsesaatgut der verschiedensten Natur. Die erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen oder deren verdünnte Anwendungsformen können auch zum Beizen von Saatgut transgener Pflanzen eingesetzt werden.

[0277] Zur Behandlung von Saatgut mit den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen oder daraus hergestellten Anwendungsformen kommen alle üblicherweise für die Beizung einsetzbaren Mischgeräte in Betracht. Im einzelnen geht man bei der Beizung so vor, dass man das Saatgut in einen Mischer im diskontinuierlichem oder kontinuierlichem Betrieb gibt, die jeweils gewünschte Menge an Beizmittel-Formulierungen entweder als solche oder nach vorherigem Verdünnen mit Wasser hinzufügt und bis zur gleichmäßigen Verteilung der Formulierung auf dem Saatgut mischt. Gegebenenfalls schließt sich ein Trocknungsvorgang an.

[0278] Die Aufwandmenge an den erfindungsgemäß verwendbaren Beizmittel-Formulierungen kann inner-halb eines größeren Bereiches variiert werden. Sie richtet sich nach dem jeweiligen Gehalt der Verbindungen der Formel (I) in den Formulierungen und nach dem Saatgut. Die Aufwandmengen bei der Verbindung der Formel (I) liegen im Allgemeinen zwischen 0,001 und 50 g pro Kilogramm Saatgut, vorzugsweise zwischen 0,01 und 15 g pro Kilogramm Saatgut.

Verwendung Animal Health

[0279] Im Bereich Tiergesundheit, d.h. auf dem veterinärmedizinischen Gebiet, wirken die Wirkstoffe gemäß der vorliegenden Erfindung gegen tierische Parasiten, insbesondere Ektoparasiten oder, in einer

weiteren Ausführungsform auch Endoparasiten. Der Begriff Endoparasiten schließt insbesondere Helminthen wie Cestoden, Nematoden oder Trematoden, und Protozoen wie Kokzidien ein. Ektoparasiten sind typischerweise und vorzugsweise Arthropoden, insbesondere Insekten wie Fliegen (stechend und leckend), parasitische Fliegenlarven, Läuse, Haarlinge, Federlinge, Flöhe und dergleichen; oder Akariden wie Zecken, zum Beispiel Schildzecken oder Lederzecken, oder Milben wie Räudemilben, Laufmilben, Federmilben und dergleichen sowie aquatische Ektoparasiten wie Copepoden.

[0280] Auf dem Gebiet der Tiermedizin eignen sich die Verbindungen der Formel (I), die eine günstige Toxizität gegenüber Warmblütern aufweisen, für die Bekämpfung von Parasiten, die in der Tierzucht und Tierhaltung bei Nutztieren, Zuchttieren, Zootieren, Laboratoriumstieren, Versuchstieren und Haustieren auftreten. Sie sind gegen alle oder einzelne Entwicklungsstadien der Parasiten wirksam.

[0281] Zu den landwirtschaftlichen Nutztieren zählen zum Beispiel Säugetiere wie Schafe, Ziegen, Pferde, Esel, Kamele, Büffel, Kaninchen, Rentiere, Damhirsche und insbesondere Rinder und Schweine; Geflügel wie Truthähne, Enten, Gänse und insbesondere Hühner; Fische und Krustentiere, z.B. in der Aquakultur und auch Insekten wie Bienen.

[0282] Zu den Haustieren zählen zum Beispiel Säugetiere wie Hamster, Meerschweinchen, Ratten, Mäuse, Chinchillas, Frettchen und insbesondere Hunde, Katzen, Stubenvögel, Reptilien, Amphibien und Aquariumfische.

[0283] Gemäß einer bevorzugten Ausführungsform werden die Verbindungen der Formel (I) an Säugetiere verabreicht.

[0284] Gemäß einer weiteren bevorzugten Ausführungsform werden die Verbindungen der Formel (I) an Vögel, nämlich Stubenvögel und insbesondere Geflügel, verabreicht.

[0285] Durch Verwendung der Verbindungen der Formel (I) für die Bekämpfung von Tierparasiten sollen Krankheit, Todesfälle und Leistungsminderungen (bei Fleisch, Milch, Wolle, Häuten, Eiern, Honig und dergleichen) verringert bzw. vorgebeugt werden, so dass eine wirtschaftlichere und einfachere Tierhaltung ermöglicht wird und ein besseres Wohlbefinden der Tiere erzielbar ist.

[0286] In Bezug auf das Gebiet der Tiergesundheit bedeutet der Begriff "Bekämpfung" oder "bekämpfen", dass durch die Verbindungen der Formel (I) wirksam das Auftreten des jeweiligen Parasiten in einem Tier, das mit solchen Parasiten in einem harmlosen Ausmaß infiziert ist, reduziert werden kann. Genauer gesagt bedeutet "bekämpfen" im vorliegenden Zusammenhang, dass die Verbindung der Formel (I) den jeweiligen Parasiten abtöten, sein Wachstum verhindern oder seine Vermehrung verhindern kann.

[0287] Zu diesen Parasiten gehören:

Aus der Ordnung der Anoplurida z.B. Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phthirus spp., Solenopotes spp.; spezielle Beispiele sind: Linognathus setosus, Linognathus vituli, Linognathus ovillus, Linognathus oviformis, Linognathus pedalis, Linognathus stenopsis, Haematopinus asini macrocephalus, Haematopinus eurysternus, Haematopinus suis, Pediculus humanus capitis, Pediculus humanus corporis, Phylloera vastatrix, Phthirus pubis, Solenopotes capillatus;

Aus der Ordnung der Mallophagida und den Unterordnungen Amblycerina und Ischnocerina z.B. Trimenopon spp., Menopon spp., Trinoton spp., Bovicola spp., Werneckiella spp., Lepikentron spp., Damalina spp., Trichodectes spp., Felicola spp.; spezielle Beispiele sind: Bovicola bovis, Bovicola ovis, Bovicola limbata, Damalina bovis, Trichodectes canis, Felicola subrostratus, Bovicola caprae, Lepikentron ovis, Werneckiella equi;

Aus der Ordnung der Diptera und den Unterordnungen Nematocerina und Brachycerina z.B. Aedes spp., Anopheles spp., Culex spp., Simulium spp., Eusimulium spp., Phlebotomus spp., Lutzomyia spp., Culicoides spp., Chrysops spp., Odagmia spp., Wilhelmia spp., Hybomitra spp., Atylotus spp., Tabanus spp., Haematopota spp., Philipomyia spp., Braula spp., Musca spp., Hydrotaea spp., Stomoxys spp., Haematobia spp., Morellia spp., Fannia spp., Glossina spp., Calliphora spp., Lucilia spp., Chrysomyia spp., Wohlfahrtia spp., Sarcophaga spp., Oestrus spp., Hypoderma spp., Gasterophilus spp., Hippobosca spp., Lipoptena spp., Melophagus spp., Rhinoestrus spp., Tipula spp.; spezielle Beispiele sind: Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes taeniorhynchus, Anopheles gambiae, Anopheles maculipennis, Calliphora erythrocephala, Chrysozona pluvialis, Culex quinquefasciatus, Culex pipiens, Culex tarsalis, Fannia canicularis, Sarcophaga carnaria, Stomoxys calcitrans, Tipula paludosa, Lucilia cuprina, Lucilia sericata, Simulium reptans, Phlebotomus papatasi, Phlebotomus longipalpis, Odagmia ornata, Wilhelmia equina, Boophthora erythrocephala, Tabanus bromius, Tabanus spodopterus, Tabanus atratus, Tabanus sudeticus, Hybomitra ciurea, Chrysops caecutiens, Chrysops relictus, Haematopota pluvialis, Haematopota italica, Musca autumnalis, Musca domestica, Haematobia irritans irritans, Haematobia irritans exigua, Haematobia stimulans, Hydrotaea irritans, Hydrotaea albipuncta, Chrysomya Chloropyga, Chrysomya bezziana, Oestrus ovis, Hypoderma bovis, Hypoderma lineatum, Przhevalskiana silenus, Dermatobia hominis, Melophagus ovinus, Lipoptena capreoli, Lipoptena cervi, Hippobosca variegata, Hippobosca equina, Gasterophilus intestinalis, Gasterophilus haemorroidalis, Gasterophilus inermis, Gasterophilus nasalis, Gasterophilus nigricornis, Gasterophilus pecorum, Braula coeca;

Aus der Ordnung der Siphonapterida z.B. Pulex spp., Ctenocephalides spp., Tunga spp., Xenopsylla spp., Ceratophyllus spp.; spezielle Beispiele sind: Ctenocephalides canis, Ctenocephalides felis, Pulex irritans, Tunga penetrans, Xenopsylla cheopis;

Aus der Ordnung der Heteropterida z.B. Cimex spp., Triatoma spp., Rhodnius spp., Panstrongylus spp.

Aus der Ordnung der Blattarida z.B. Blatta orientalis, Periplaneta americana, Blattela germanica, Supella spp. (z.B. Suppella longipalpa);

Aus der Unterklasse der Acari (Acarina) und den Ordnungen der Meta- und Mesostigmata z.B. Argas spp., Ornithodorus spp., Otobius spp., Ixodes spp., Amblyomma spp., Rhipicephalus (Boophilus) spp., Dermacentor spp., Haemophysalis spp., Hyalomma spp., Dermanyssus spp., Rhipicephalus spp. (der ursprünglichen Gattung der Mehrwirtszecken), Ornithonyssus spp., Pneumonyssus spp., Raillietia spp., Pneumonyssus spp., Sternostoma spp., Varroa spp., Acarapis spp.; spezielle Beispiele sind: Argas persicus, Argas reflexus, Ornithodorus moubata, Otobius megnini, Rhipicephalus (Boophilus) microplus, Rhipicephalus (Boophilus) decoloratus, Rhipicephalus (Boophilus) annulatus, Rhipicephalus (Boophilus) calceratus, Hyalomma anatolicum, Hyalomma aegypticum, Hyalomma marginatum, Hyalomma transiens, Rhipicephalus evertsi, Ixodes ricinus, Ixodes hexagonus, Ixodes canisuga, Ixodes pilosus, Ixodes rubicundus, Ixodes scapularis, Ixodes holocyclus, Haemaphysalis concinna, Haemaphysalis punctata, Haemaphysalis cinnabarina, Haemaphysalis otophila, Haemaphysalis leachi, Haemaphysalis longicorni, Dermacentor marginatus, Dermacentor reticulatus, Dermacentor pictus, Dermacentor albipictus, Dermacentor andersoni, Dermacentor variabilis, Hyalomma mauritanicum, Rhipicephalus sanguineus, Rhipicephalus bursa, Rhipicephalus appendiculatus, Rhipicephalus capensis, Rhipicephalus turanicus, Rhipicephalus zambeziensis, Amblyomma americanum, Amblyomma variegatum, Amblyomma maculatum, Amblyomma hebraeum, Amblyomma cajennense, Dermanyssus gallinae, Ornithonyssus bursa, Ornithonyssus sylviarum, Varroa jacobsoni;

Aus der Ordnung der Actinedida (Prostigmata) und Acaridida (Astigmata) z.B. Acarapis spp., Cheyletiella spp., Ornithocheyletia spp., Myobia spp., Psorergates spp., Demodex spp., Trombicula spp., Listrophorus spp., Acarus spp., Tyrophagus spp., Caloglyphus spp., Hypodectes spp., Pterolichus spp., Psoroptes spp., Chorioptes spp., Otodectes spp., Sarcoptes spp., Notoedres spp., Knemidocoptes spp., Cytodites spp., Laminosioptes spp.; spezielle Beispiele sind: Cheyletiella yasguri, Cheyletiella blakei, Demodex canis, Demodex bovis, Demodex ovis, Demodex caprae, Demodex equi, Demodex caballi, Demodex suis, Neotrombicula autumnalis, Neotrombicula desalcri, Neoschöngastia xerothermobia, Trombicula akamushi, Otodectes cynotis, Notoedres cati, Sarcoptis canis, Sarcoptes bovis, Sarcoptes ovis, Sarcoptes rupicaprae (=S. caprae), Sarcoptes equi, Sarcoptes suis, Psoroptes ovis, Psoroptes cuniculi, Psoroptes equi, Chorioptes bovis, Psoergates ovis, Pneumonyssoidic mange, Pneumonyssoides caninum, Acarapis woodi.

Aus Unterklasse der Copepoden mit der Ordnung der Siphonostomatoida insbesondere die Gattungen Lepeophtheirus und Caligus, beispielhaft und besonders bevorzugt seien die Arten Lepeophtheirus salmonis, Caligus elongatus und Caligus clemensi genannt

[0288] Im Allgemeinen können die erfindungsgemäßen Wirkstoffe, wenn sie für die Behandlung von Tieren eingesetzt werden, direkt angewendet werden. Vorzugsweise werden sie als pharmazeutische

Zusammensetzungen angewendet, die im Stand der Technik bekannte pharmazeutisch unbedenkliche Exzipienten und/oder Hilfsstoffe enthalten können.

[0289] Die Anwendung (= Verabreichung) der Wirkstoffe im Bereich Tiergesundheit und in der Tierhaltung erfolgt in bekannter Weise durch enterale Verabreichung in Form von beispielsweise Tabletten, Kapseln, Tränken, Drenchen, Granulaten, Pasten, Boli, des feed-through-Verfahrens, von Zäpfchen, durch parenterale Verabreichung, wie zum Beispiel durch Injektionen (intramuskulär, subkutan, intravenös, intraperitoneal u.a.), Implantate, durch nasale Applikation, durch dermale Applikation in Form beispielsweise des Tauchens oder Badens (Dippen), Sprühens (Spray), Aufgießens (Pour-on und Spot-on), des Waschens, des Einpuderns sowie mit Hilfe von wirkstoffhaltigen Formkörpern, wie Halsbändern, Ohrmarken, Schwanzmarken, Gliedmaßenbändern, Halftern, Markierungsvorrichtungen usw. Die Wirkstoffe können als Shampoo oder als geeignete, in Aerosolen oder drucklosen Sprays, z.B. Pumpsprays und Zerstäubersprays, anwendbare, Formulierungen formuliert werden.

[0290] Bei der Anwendung für Nutztiere, Geflügel, Haustiere etc. kann man die erfindungsgemäßen Wirkstoffe als Formulierungen (beispielsweise Pulver, Spritzpulver [wettable powders, "WP"], Emulsionen, Emulsionskonzentrate [emulsifiable concentrates ,"EC"], fließfähige Mittel, homogene Lösungen und Suspensionskonzentrate [suspension concentrates, "SC"]), die die Wirkstoffe in einer Menge von 1 bis 80 Gew.-% enthalten, direkt oder nach Verdünnung (z.B. 100- bis 10 000facher Verdünnung) anwenden oder sie als chemisches Bad verwenden.

[0291] Beim Einsatz im Bereich Tiergesundheit können die erfindungsgemäßen Wirkstoffe zur Erweiterung des Wirkspektrums in Kombination mit geeigneten Synergisten, Repellentien oder anderen Wirkstoffen wie beispielsweise Akariziden, Insektiziden, Anthelmintika, Mitteln gegen Protozoen, verwendet werden. Potentielle Mischpartner für erfindungsgemäße Verbindungen der Formel (I) können bei Anwendungen in der Tiergesundheit eine oder mehrere Verbindungen der Gruppen (In-1) bis (In-25) sein.

(In-1) Acetylcholinesterase (AChE) Inhibitoren, wie beispielsweise Carbamate, z. B. Alanycarb, Aldicarb, Bendiocarb, Benfuracarb, Butocarboxim, Butoxycarboxim, Carbaryl, Carbofuran, Carbosulfan, Ethiofencarb, Fenobucarb, Formetanate, Furathiocarb, Isoprocarb, Methiocarb, Methomyl, Metolcarb, Oxamyl, Pirimicarb, Propoxur, Thiodicarb, Thiofanox, Triazamate, Trimethacarb, XMC und Xylylcarb; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Bendiocarb, Carbaryl, Methomyl, Promacyl und Propoxur genannt: oder

Organophosphate, z. B. Acephate, Azamethiphos, Azinphos (-methyl, -ethyl), Cadusafos, Chlorethoxyfos, Chlorfenvinphos, Chlormephos, Chlorpyrifos (-methyl), Coumaphos, Cyanophos, Demeton-S-methyl, Diazinon, Dichlorvos/DDVP, Dicrotophos, Dimethoate, Dimethylvinphos, Disulfoton, EPN, Ethion, Ethoprophos, Famphur, Fenamiphos, Fenitrothion, Fenthion, Fosthiazate, Heptenophos,

Isofenphos, Isopropyl O-(methoxyaminothio-phosphoryl) salicylat, Isoxathion, Malathion, Mecarbam, Methamidophos, Methidathion, Mevinphos, Monocrotophos, Naled, Omethoate, Oxydemeton-methyl, Parathion (-methyl), Phenthoate, Phorate, Phosalone, Phosmet, Phosphamidon, Phoxim, Pirimiphos (-methyl), Profenofos, Propetamphos, Prothiofos, Pyraclofos, Pyridaphenthion, Quinalphos, Sulfotep, Tebupirimfos, Temephos, Terbufos, Tetrachlorvinphos, Thiometon, Triazophos, Triclorfon und Vamidothion; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Azamethiphos, Chlorfenvinphos, Chlorpyrifos, Coumaphos, Cythioate, Diazinon (Dimpylate), Dichlorvos (DDVP), Dicrotophos, Dimethoate, Ethion (Diethion), Famphur (Famophos), Fenitrothion, Fenthion (MPP), Heptenophos, Malathion, Naled, Phosmet (PMP, Phtalofos) Phoxim, Propetamphos, Temephos, Tetrachlorvinphos (CVMP) und Triclorfon/Metrifonate genannt.

(In-2) GABA-gesteuerte Chlorid-Kanal-Antagonisten, wie beispielsweise Organochlorine, z. B. Bromocyclene, Chlordane und Endosulfan (alpha-), Heptachlor, Lindan, und Toxaphene; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Endosulfan (alpha-) und Lindan genannt; oder

Fiprole (Phenylpyrazole), z. B. Acetoprole, Ethiprole, Fipronil, Pyrafluprole und Pyriprole, Rizazole; besonders, bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Fipronil und Pyriprole genannt; oder

Arylisoxazoline, Arylpyrroline, Arylpyrrolidine z. B. Fluralaner (bekannt aus WO2009/2024541, Bsp . 11-1; aber auch Verbindungen aus WO2012007426, WO20120420006, WO2012042007, WO2012107533, WO2012120135, WO2012165186, WO2012155676, WO2012017359, WO2012127347, WO20120388851, WO2012120399, WO2012156400, WO2012163959, WO2011161130, WO2011073444, WO2011092287, WO2011075591, WO2011157748, WO 2007/075459, WO 2007/125984, WO 2005/085216, WO 2009/002809), Afoxolaner (z.B. in WO2011149749) und strukturell verwandte Arylpyrroline (bekannt z.B. aus WO2009/072621, WO 20100020522, WO 2009112275, WO 2009097992, WO 2009072621, JP 2008133273, JP 2007091708), oder Arylpyrrolidine (z.B. in WO20120043226, WO20120350111, WO20170457000,WO 20100903444, WO 20100433155, WO 2008128711, JP 2008110971), und Verbindungen aus der Gruppe der sogenannten Metadiamide (bekannt z.B. aus WO20120204833, WO20120204844, WO20120770221, WO20120693666, WO20121754744, WO20110954622, WO20110567136, WO20110934155, WO200507316511) besonders bevorzugt sei hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Afoxolaner und Fluaralaner genannt.

(In-3) Natrium-Kanal-Modulatoren / Spannungsabhängige Natrium-Kanal-Blocker, wie beispielsweise Pyrethroide, z. B. Acrinathrin, Allethrin (d-cis-trans, d-trans), Bifenthrin, Bioallethrin, Bioallethrin-S-cyclopentenyl, Bioresmethrin, Cycloprothrin, Cyfluthrin (beta-), Cyhalothrin (gamma-, lambda-), Cypermethrin (alpha-, beta-, theta-, zeta-), Cyphenothrin [(1*R*)-*trans*-Isomere], Deltamethrin, Dimefluthrin,

Empenthrin [(*EZ*)-(1*R*)-Isomere], Esfenvalerate, Etofenprox, Fenpropathrin, Fenvalerate, Flucythrinate, Flumethrin, Fluvalinate (tau-), Halfenprox, Imiprothrin, Metofluthrin, Permethrin, Phenothrin (1*R*)-trans-Isomer], Prallethrin, Profluthrin, Pyrethrine (pyrethrum), Resmethrin, RU 15525, Silafluofen, Tefluthrin, Tetramethrin [(1*R*)- Isomere], Tralomethrin, Transfluthrin und ZXI 8901; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten die Typ I Pyrethroide Allethrin, Bioallethrin, Permethrin, Phenothrin, Resmethrin, Tetramethrin und die Typ II Pyrethroide (Alphacyanopyrethroide) Alpha-cypermethrin, Cyfluthrin (beta-), Cyhalothrin (lambda-), Cypermethrin (alpha-, zeta-), Deltamethrin, Fenvalerate, Flucythrinate, Flumethrin, Fluvalinate (tau-), und die esterfreien Pyrethroide Etofenprox und Silafluofen genannt; oder Organochlorverbindungen z. B. DDT; oder Methoxychlor. Wirkstoffe aus dieser Klasse eignen sich ganz besonders als Mischpartner da sie eine längeranhaltende Kontakt-repellierende Wirkung haben und somit das Wirkspektrum um diese Komponente erweitern.

(In-4) Nikotinerge Acetylcholin-Rezeptor-Agonisten, wie beispielsweise Neonikotinoide, z. B. Acetamiprid, Clothianidin, Dinotefuran, Imidacloprid, Imidaclothiz, Nitenpyram, Thiacloprid, Thiamethoxam; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Clothianidin, Dinotefuran, Imidacloprid, Nitenpyram, und Thiacloprid genannt; oder Nikotin.

(In-5) Allosterische Acetylcholin-Rezeptor-Modulatoren (Agonisten), wie beispielsweise Spinosyne, z. B. Spinetoram und Spinosad; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Spinosad und Spinetoram genannt.

(In-6) Chlorid-Kanal-Aktivatoren, wie beispielsweise Avermectine/Milbemycine, z. B. Abamectin, Doramectin, Emamectin-benzoate, Eprinomectin, Ivermectin, Latidectin, Lepimectin, Milbemycin oxime, Milbemectin, Moxidectin, und Selamectin; Indolterpenoide wie z.B. Nodulisporinsäurederivate insbesondere Nodulisporinsäure A; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Doramectin, Eprinomectin, Ivermectin, Milbemycin oxime, Moxidectin, Selamectin und Nodulisporinsäure A genannt.

(In-7) Juvenilhormon-Analoge, z. B. Hydroprene (S-), Kinoprene, Methoprene (S-); oder Fenoxycarb; Pyriproxyfen; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Methoprene (S-) und Pyriproxyfen genannt.

(In 8) Milbenwachstumsinhibitoren, z. B. Clofentezine, Diflovidazin, Hexythiazox, Etoxazole; besonders bevorzugt sei hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Etoxazole genannt.

(In-9) Slo-1- und Latrophilin-Rezeptor Agonisten, wie beispielsweise zyklische Depsipeptide, z. B. Emodepsid sowie seine Ausgangsverbindung PF1022A (bekannt aus EP 382173, compound 1); besonders bevorzugt sei hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Emodepsid genannt.

(In-10) Inhibitoren der oxidativen Phosphorylierung, ATP-Disruptoren, wie beispielsweise Diafenthiuron,

(In-12) Nikotinerge Acetylcholin-Rezeptor-Antagonisten, wie beispielsweise Bensultap, Cartap (-Hydrochlorid), Thiocylam, und Thiosultap (-sodium).

(In-13) Inhibitoren der Chitinbiosynthese, Typ 0, wie beispielsweise Benzoylharnstoffe, z. B. Bistrifluron, Chlorfluazuron, Diflubenzuron, Flucycloxuron, Flufenoxuron, Hexaflumuron, Lufenuron, Novaluron, Noviflumuron, Teflubenzuron und Triflumuron; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Diflubenzuron, Flnazuron, Lufenuron und Triflumuron genannt.

(In-14) Inhibitoren der Chitinbiosynthese, Typ 1, wie beispielsweise Buprofezin,

(In-15) Häutungsstörende Wirkstoffe, wie beispielsweise Cyromazine und Dicyclanil; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Cyromazin und Dicyclanil genannt.

(In-16) Ecdysonagonisten/-disruptoren, wie beispielsweise Diacylhydrazine, z. B. Chromafenozide, Halofenozide, Methoxyfenozide und Tebufenozide.

(In-17) Oktopaminerge Agonisten, wie beispielsweise Amitraz, Cymiazole, Chlordimeform und Demiditraz; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Amitraz, Cymiazole und Demiditraz genannt,

(In-18) Komplex-III-Elektronentransportinhibitoren, wie beispielsweise Hydramethylnon; Acequinocyl; Fluacrypyrim.

(In-19) Komplex-I-Elektronentransportinhibitoren, wie beispielsweise aus der Gruppe der METI-Akarizide, z. B. Fenazaquin, Fenpyroximate, Pyrimidifen, Pyridaben, Tebufenpyrad, Tolfenpyrad; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Fenpyroximate, Pyrimidifen und Tolfenpyrad genannt;

(In-20) Blocker des spannungsabhängigen Natriumkanals, wie beispielsweise Indoxacarb und Metaflumizone; besonders bevorzugt seien hier für Anwendungen gegen Ektoparasiten Indoxacarb und Metaflumizone genannt.

(In-21) Inhibitoren der Acetyl-CoA-Carboxylase, wie beispielsweise Tetronsäure-Derivate, z. B. Spirodiclofen und Spiromesifen; oder Tetramsäure-Derivate, z. B. Spirotetramat.

(In-22) Komplex-II-Elektronentransportinhibitoren, wie beispielsweise Cyenopyrafen.

(In 23) Ryanodinrezeptor-Effektoren, wie beispielsweise Diamide, z. B. Flubendiamide, Chlorantraniliprole (Rynaxypyr), Cyantraniliprole (Cyazypyr) sowie 3-Brom-N-{2-brom-4-chlor-6-[(1-

cyclopropylethyl)carbamoyl]phenyl}-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-carboxamid (bekannt aus WO2005/077934) oder Methyl-2-[3,5-dibrom-2-({3-brom-1-(3-chlorpyridin-2-yl)-1H-pyrazol-5-yl]carbonyl}amino)benzoyl]-1,2-dimethylhydrazincarboxylat (bekannt aus WO2007/043677).

(In-24) Weitere Wirkstoffe mit unbekanntem Wirkmechanismus, wie beispielsweise Azadirachtin, Amidoflumet, Benzoximate, Bifenazate, Chinomethionat, Cryolite, Cyflumetofen, Dicofol, Fluensulfone (5-Chloro-2-[(3,4,4-trifluorobut-3-en-1-yl)sulfonyl -1,3-thiazole), Flufenerim, Pyridalyl und Pyrifluquinazon: desweiteren Präparate auf Basis von Bacillus firmus (I-1582, BioNeem, Votivo) sowie folgende bekannte wirksame Verbindungen 4-{[(6-Brompyrid-3-yl)methyl](2-fluorethyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/115644), 4-{[(6-Fluorpyrid-3-yl)methyl](2,2-difluorethyl)-amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/115644), 4-{[(2-Chlor-1,3-thiazol-5-yl)methyl](2-fluorethyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/115644), 4-{[(6-Chlorpyrid-3-yl)methyl](2-fluorethyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/ 115644), 4-{[(6-Chlorpyrid-3-yl)methyl](2,2-difluorethyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/115644), 4-{[(6-Chlor-5-fluorpyrid-3-yl)methyl](methyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/115643), 4-{[(5,6-Dichlorpyrid-3-yl)methyl](2-fluorethyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/115646), 4-{[(6-Chlor-5-fluorpyrid-3-yl)methyl](cyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus WO 2007/115643), 4-{[(6-Chlorpyrid-3-yl)methyl](cyclopropyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus EP-A-0 539 588), 4-{[(6-Chlorpyrid-3-yl)methyl](methyl)amino}furan-2(5H)-on (bekannt aus EP-A-0 539 588), [(6-Chlorpyridin-3-yl)methyl](methyl)oxido-λ^4-sulfanylidencyanamid (bekannt aus WO 2007/149134), [1-(6-Chlorpyridin-3-yl)ethyl](methyl)oxido-λ^4-sulfanylidencyanamid (bekannt aus WO 2007/149134), [(6-Trifluormethylpyridin-3-yl)methyl](methyl)oxido-λ^4-sulfanylidencyanamid (bekannt aus WO 2007/095229), Sulfoxaflor (ebenfalls bekannt aus WO 2007/149134), 11-(4-Chlor-2,6-dimethylphenyl)-12-hydroxy-1,4-dioxa-9-azadispiro[4.2.4.2]tetradec-11-en-10-on (bekannt aus WO 2006/089633), 3-(4'-Fluor-2,4-dimethylbiphenyl-3-yl)-4-hydroxy-8-oxa-1-azaspiro[4.5]dec-3-en-2-on (bekannt aus WO 2008/067911), 1-[2-Fluoro-4-methyl-5-[(2,2,2-trifluorethyl)sulfinyl]phenyl]-3-(trifluormethyl)-1H-1,2,4-Triazol-5-amine (bekannt aus WO 2006/ 043635), [(3S,4aR,12R,12aS,12bS)-3-[(Cyclopropylcarbonyl)oxy]-6,12-dihydroxy-4,12b-dimethyl-11-oxo-9-(pyridin-3-yl)-1,3,4,4a,5,6,6a,12,12a,12b-decahydro-2H,11H-benzo[f]pyrano[4,3-b]chromen-4-yl]methylcyclopropancarboxylat (bekannt aus WO 2006/129714), 2-Cyano-3-(difluoromethoxy)-N-ethylbenzenesulfonamide (bekannt aus WO 2005/035486), N-[1-(2,3-Dimethylphenyl)-2-(3,5-dimethylphenyl)ethyl]-4,5-dihydro-2-thiazolamine (bekannt aus WO 2008/104503); Penigequinolone A (bekannt aus JP 2248422 (compound 1) und WO 2009/060015 (compound No. 11).

(In-25) Als geeignete Synergisten bei Verwendung mit Ektoparasitiziden seien hier MGK264 (*N*-Octylbicycloheptencarboxamid), Piperonylbutoxid (PBO) und Verbutin genannt: besonders bevorzugt seien hier Piperonylbutoxid und MGK264 genannt.

[0292] Zusätzlich zu diesen Gruppen können in Mischungen oder in Kombinationsanwendung auch Kurzzeitrepellentien verwendet werden. Beispiele sind DEET (N,N-diethyl-3-methylbenzamide), icaridin (1-Piperidine carboxylic acid), (1S, 2OS)-2-methylpiperidinyl-3-cyclohexene-1-carboxamide (SS220), indalone (butyl 3,4-dihydro-2, 2-dimethyl-4-oxo-2H-pyran-6-carboxylate), dihydronepetalactones, nootkatone, IR3535 (3-[N-butyl-N-acetyl]-aminopropionic acid ethyl ester), 2-Ethylhexane-1,3-diol, (1R,2R,5R)-2-(2-Hydroxypropan-2-yl)-5-methyl-cyclohexan-1-ol, Dimethyl benzene-1,2-dicarboxylate, Dodecanoic acid, Undecan-2-one, N,N-Diethyl-2-phenyl-acetamide und aetherische Öle oder andere Pflanzeninhaltsstofef mit bekannter repellierender Wirkung wie z.B. Borneol, Callicarpenal, 1,8-Cineol (eucalyptol), Carvacerol, b-Citronellol, a-Copaene, Coumarin (oder seine synthetischen Derviate bekannt aus US20120329832). Beim Einsatz gegen Ectoparasiten besonders bevorzugt sind icaridin, indalone und IR3535 (3-[N-butyl-N-acetyl]-aminopropionic acid ethyl ester)

[0293] Von den vorstehend genannten Gruppen (In-1) bis (In-25) sind die folgenden Gruppen als Mischpartner bevorzugt: (In-2), (In-3), (In-4), (In-5), (In-6), (In-17), (In-25).

[0294] Besonders bevorzugte Beispiele für insektizid oder akarizid wirksame Verbindungen, Synergisten oder Repellentien als Mischpartner der erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel (I) sind Afoxolaner, Allethrin, Amitraz, Bioallethrin, Chlothianidin, Cyfluthrin (beta-), Cyhalothrin (lambda-), Cymiazole, Cypermethrin (alpha-, zeta-), Cyphenothrin, Deltamethrin, Demiditraz, Dinotefuran, Doramectin, Eprinomectin, Etofenprox, Fenvalerate, Fipronil, Fluazuron, Flucythrinate, Flumethrin, Fluralaner, Fluvalinate (tau-), Icaridin, Imidacloprid, Ivermectin, MCK264, Milbemycin oxime, Moxidectin, Nitenpyram, Permethrin, Phenothrin, Piperonylbutoxid, Pyriprole, Resmethrin, Selamectin, Silafluofen, Spinetoram, Spinosad, Tetramethrin, Thiacloprid.

Vektorkontrolle

[0295] Die Verbindungen der Formel (I) können auch in der Vektorkontrolle eingesetzt werden. Ein Vektor im Sinne der vorliegenden Erfindung ist ein Arthropode, insbesondere ein Insekt oder Arachnide, der in der Lage ist, Krankheitserreger wie z. B. Viren, Würmer, Einzeller und Bakterien aus einem Reservoir (Pflanze, Tier, Mensch, etc.) auf einen Wirt zu übertragen. Die Krankheitserreger können entweder mechanisch (z.B. Trachoma durch nicht-stechende Fliegen) auf einem Wirt, oder nach Injektion (z.B. Malaria-Parasiten durch Mücken) in einen Wirt übertragen werden.

[0296] Beispiele für Vektoren und die von ihnen übertragenen Krankheiten bzw. Krankheitserreger sind:

1) Mücken

- Anopheles: Malaria, Filariose;

- Culex: Japanische Encephalitis, Filariasis, weitere virale Erkrankungen, Übertragung von Würmern;

- Aedes: Gelbfieber, Dengue-Fieber, Filariasis, weitere virale Erkrankungen;

- Simulien: Übertragung von Würmern insbesondere Onchocerca volvulus;

2) Läuse: Hautinfektionen, Fleckfieber (epidemic typhus);

3) Flöhe: Pest, endemisches Fleckfieber;

4) Fliegen: Schlafkrankheit (Trypanosomiasis); Cholera, weitere bakterielle Erkrankungen;

5) Milben: Acariose, Fleckfieber, Rickettsipocken, Tularämie, Saint-Louis-Enzephalitis, virale Hirnhaut-entzündung (FSME), Krim-Kongo-Fieber, Borreliose;

6) Zecken: Borelliosen wie Borrelia duttoni, Frühsommer-Meningoenzephalitis, Q-Fieber (Coxiella burnetii), Babesien (Babesia canis canis).

[0297] Beispiele für Vektoren im Sinne der vorliegenden Erfindung sind Insekten wie Aphiden, Fliegen, Zikaden oder Thripse, die Pflanzenviren auf Pflanzen übertragen können. Weitere Vektoren, die Pflanzenviren übertragen können, sind Spinnmilben, Läuse, Käfer und Nematoden.

[0298] Weitere Beispiele für Vektoren im Sinne der vorliegenden Erfindung sind Insekten und Arachniden wie Mücken, insbesondere der Gattungen Aedes, Anopheles, z.B. A. gambiae, A. arabiensis, A. funestus, A. dirus (Malaria) und Culex, Läuse, Flöhe, Fliegen, Milben und Zecken, die Krankheitserreger auf Tiere und/oder Menschen übertragen können.

[0299] Eine Vektorkontrolle ist auch möglich, wenn die Verbindungen der Formel (I) Resistenz brechend sind.

[0300] Verbindungen der Formel (I) sind zur Verwendung in der Prävention von Krankheiten bzw. vor Krankheitserregern, die durch Vektoren übertragen werden, geeignet. Somit ist ein weiterer Aspekt der vorliegenden Erfindung die Verwendung von Verbindungen der Formel (I) zur Vektorkontrolle, z.B. in der Landwirtschaft, im Gartenbau, in Forsten, in Gärten und Freizeiteinrichtungen sowie im Vorrats- und Materialschutz.

Schutz von technischen Materialien

[0301] Die Verbindungen der Formel (I) eignen sich zum Schutz von technischen Materialien gegen Befall oder Zerstörung durch Insekten, z.B. aus der Ordnung Coleoptera, Hymenoptera, Isoptera, Lepidoptera, Psocoptera und Zygentoma.

[0302] Unter technischen Materialien sind im vorliegenden Zusammenhang nicht lebende Materialien zu verstehen, wie vorzugsweise Kunststoffe, Klebstoffe, Leime, Papiere und Kartone, Leder, Holz, Holzverarbeitungsprodukte und Anstrichmittel. Die Anwendung der Erfindung zum Schutz von Holz ist besonders bevorzugt.

[0303] In einer weiteren Ausführungsform werden die Verbindungen der Formel (I) zusammen mit mindestens einem weiteren Insektizid und/oder mindestens einem Fungizid eingesetzt.

[0304] In einer weiteren Ausführungsform liegen die Verbindungen der Formel (I) als ein anwendungsfertiges (ready-to-use) Schädlingsbekämpfungsmittel vor, d.h., es kann ohne weitere Änderungen auf das entsprechende Material aufgebracht werden. Als weitere Insektizide oder als Fungizide kommen insbesondere die oben genannten in Frage.

[0305] Überraschenderweise wurde auch gefunden, dass die Verbindungen der Formel (I) zum Schutz vor Bewuchs von Gegenständen, insbesondere von Schiffskörpern, Sieben, Netzen, Bauwerken, Kaianlagen und Signalanlagen, welche mit See- oder Brackwasser in Verbindung kommen, verwendet werden können. Gleichfalls können die Verbindungen der Formel (I) allein oder in Kombinationen mit anderen Wirkstoffen als Antifouling-Mittel eingesetzt werden.

Bekämpfung von tierischen Schädlingen auf dem Hygienesektor

[0306] Die Verbindungen der Formel (I) eignen sich zur Bekämpfung von tierischen Schädlingen auf dem Hygienesektor. Insbesondere kann die Erfindung im Haushalts-, Hygiene- und Vorratsschutz verwendet werden, vor allem zur Bekämpfung von Insekten, Spinnentieren und Milben, die in geschlossenen Räumen, wie beispielsweise Wohnungen, Fabrikhallen, Büros, Fahrzeugkabinen vorkommen. Zur Bekämpfung der tierischen Schädlinge werden die Verbindungen der Formel (I) allein oder in Kombination mit anderen Wirk- und/oder Hilfsstoffen verwendet. Bevorzugt werden sie in Haushaltsinsektizid-Produkten verwendet. Die Verbindungen der Formel (I) sind gegen sensible und resistente Arten sowie gegen alle Entwicklungsstadien wirksam.

[0307] Zu diesen Schädlingen gehören beispielsweise Schädlinge aus der Klasse Arachnida, aus den Ordnungen Scorpiones, Araneae und Opiliones, aus den Klassen Chilopoda und Diplopoda, aus der Klasse Insecta die Ordnung Blattodea, aus den Ordnungen Coleoptera, Dermaptera, Diptera, Heteroptera, Hymenoptera, Isoptera, Lepidoptera, Phthiraptera, Psocoptera, Saltatoria oder Orthoptera, Siphonaptera und Zygentoma und aus der Klasse Malacostraca die Ordnung Isopoda.

[0308] Die Anwendung erfolgt beispielsweise in Aerosolen, drucklosen Sprühmitteln, z.B. Pump- und Zerstäubersprays, Nebelautomaten, Foggern, Schäumen, Gelen, Verdampferprodukten mit Verdampferplättchen aus Cellulose oder Kunststoff, Flüssigverdampfern, Gel- und Membranverdampfern, propellergetriebenen Verdampfern, energielosen bzw. passiven

Verdampfungssystemen, Mottenpapieren, Mottensäckchen und Mottengelen, als Granulate oder Stäbe, in Streuködern oder Köderstationen.

Herstellungs Verfahren

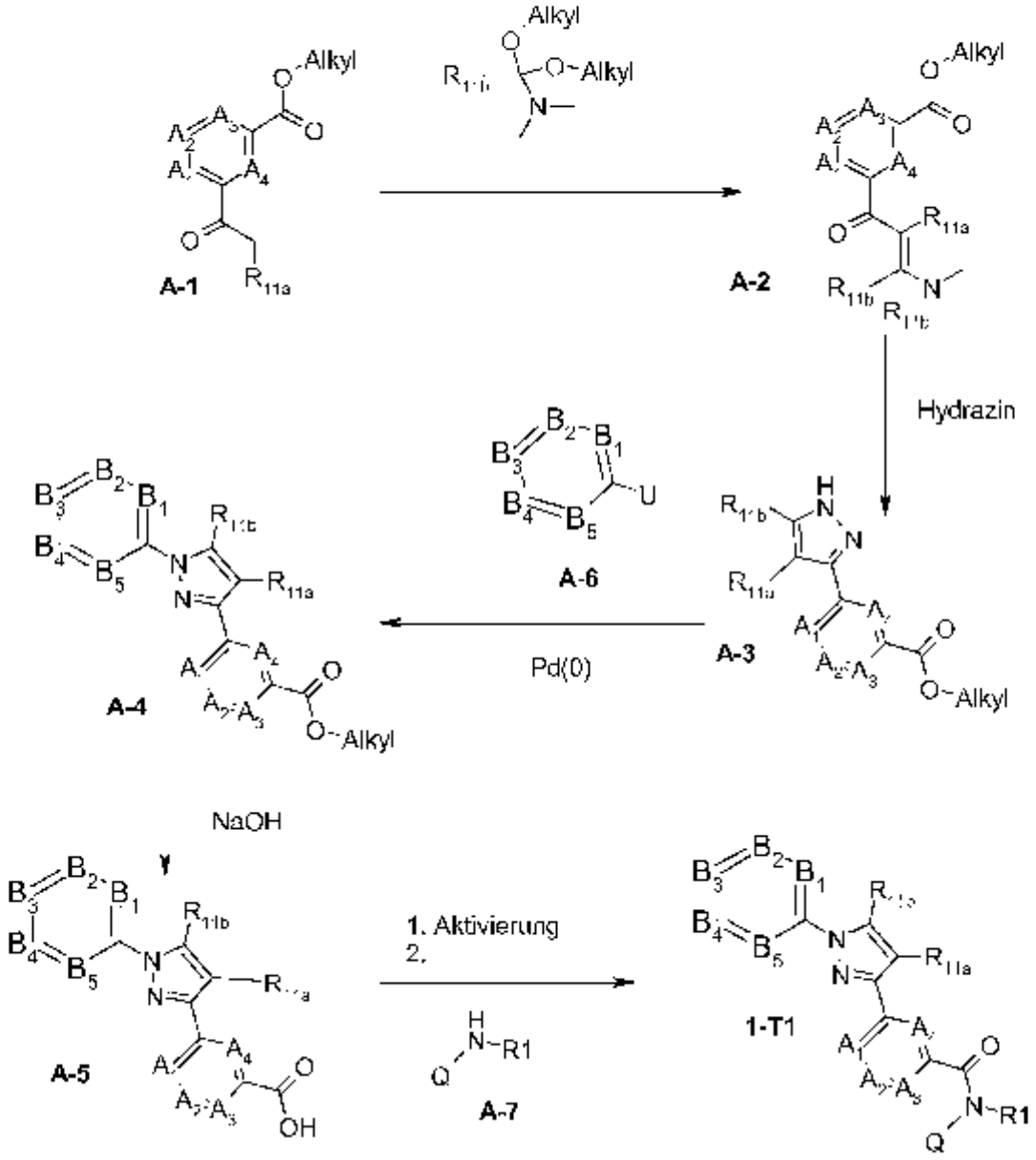
[0309] Die erfindungsgemäßen Verbindungen können nach üblichen, dem Fachmann bekannten Methoden hergestellt werden.

[0310] Die Verbindungen der Struktur (I-T1) und (I-T2) können nach den in der Literatur für analoge Verbindungen bereits beschrieben Methoden hergestellt werden:

Verfahren I-T1

[0311] Die Verbindungen der Struktur (I-T1) können nach dem im Reaktionsschema 1 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 1



[0312] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht z. B. für Brom, Iod oder Triflat. Ausgangsverbindungen der Struktur (**A-1**) (z.B. WO 2004/099146, S. 75-76) und (**A-7**) (z.B. US 5,739,083 Seite 10, US 2003/187233A1, S. 6) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden.

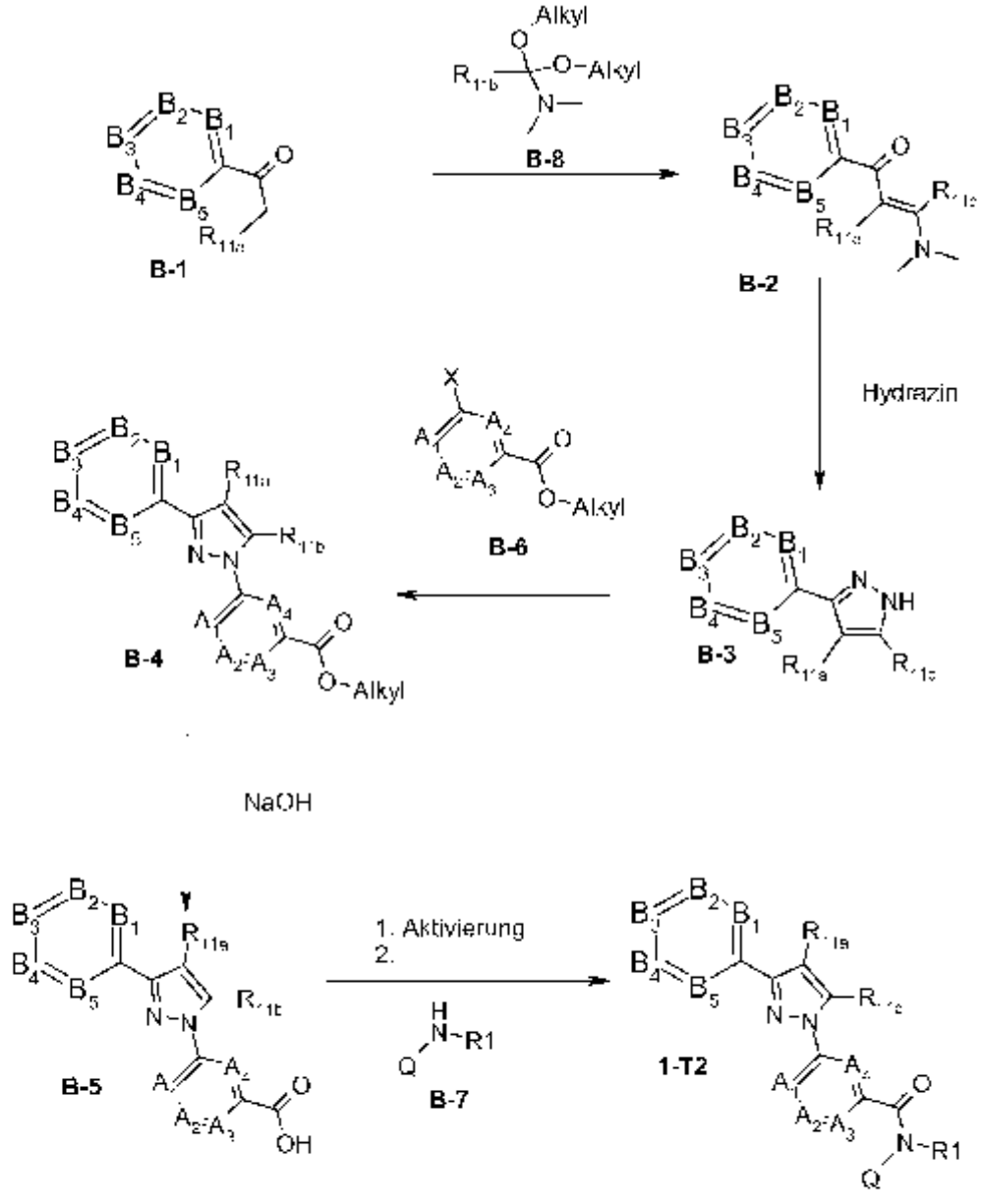
[0313] Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-2**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-1**) und Carbonsäureamidacetalen (**B-8**) herstellen (z.B. WO 2013/009791, S. 50, Example 43; WO 2004/099146, S. 75-76). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-3**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-2**) und Hydrazin herstellen (z.B. WO 2013/009791, S. 50, Example 43; WO 2004/099146, S. 75-76). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-4**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-3**) und (**A-6**) herstellen (z.B. WO 2013/009791, S. 50, Example 44). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-5**)

lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur (**A-4**) herstellen (siehe z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312). Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**I-T1**) können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien (**A-5**) und (**A-7**) hergestellt werden (z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312).

Verfahren I-T2

[0314] Die Verbindungen der Struktur (**I-T2**) können nach dem im Reaktionsschema 2 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 2

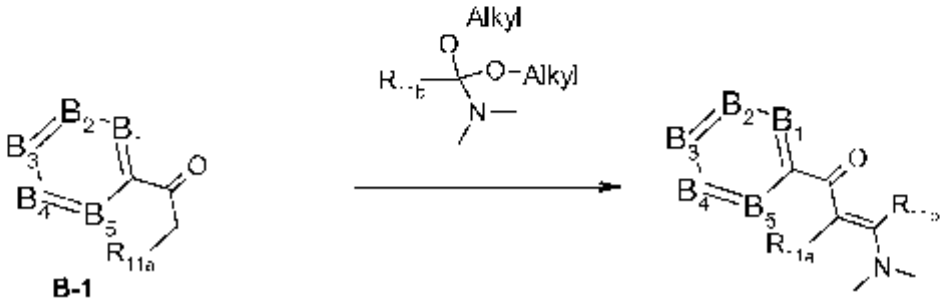


[0315] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht z. B. für Cl, Br, I oder einen Boronsäure- bzw. Boronsäureester-Rest.

Ausgangsverbindungen der Struktur (**B-1**) (z.B. Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang Journal of Fluorine Chemistry, 80 (1996) S. 71 – 76; US2003/187233, S. 14, Example 21) und (**B-6**) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden.

[0316] Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-2**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-1**) und Carbonsäureamidacetalen (**B-8**) herstellen (z.B. WO 2006/044505, Compound 60, Part A; WO 2012/4604, Intermediate 2). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-3**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-2**) und Hydrazin herstellen (z.B. WO 2013/009791, S. 50, Example 43; WO 2004/099146, S. 75-76). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-4**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-3**) und (**B-6**) herstellen (z.B. WO 2013/009791, S. 50, Example 44, X = Br). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-5**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-4**) herstellen (z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312). Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**I-T1**) können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien (**B-5**) und (**B-7**) hergestellt werden (z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312).

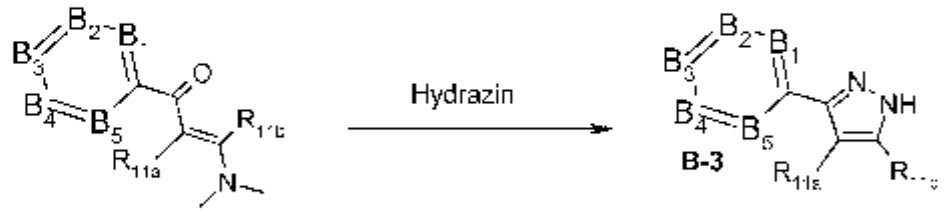
Stufe 1 Dialkylaminoalkenylierung



(**B-1**) (**B-8**) (**B-2**)

[0317] Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-2**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**B-1**) und (**B-8**) hergestellt werden. Die Reste B^1-B^5, Alkyl und R^1 haben die weiter oben beschriebenen Bedeutungen. Ausgangsverbindungen der Struktur (**B-1**) (z.B. Filler, Robert; Kong, Zhengrong; Zhang, Zhaoxu; Sinha, Arun Kr.; Li, Xiaofang Journal of Fluorine Chemistry, 80 (1996) S. 71 – 76; US2003/187233, S. 14, Example 21 [0294]; US5739083, Example 6) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Die Reaktion wird durchgeführt indem man die Verbindungen (**B-1**) mit den Verbindungen (**B-8**) unter den für analoge Reaktionen in der Literatur bekannten Bedingungen umsetzt (z.B. EP1204323, S. 25, Example 13).

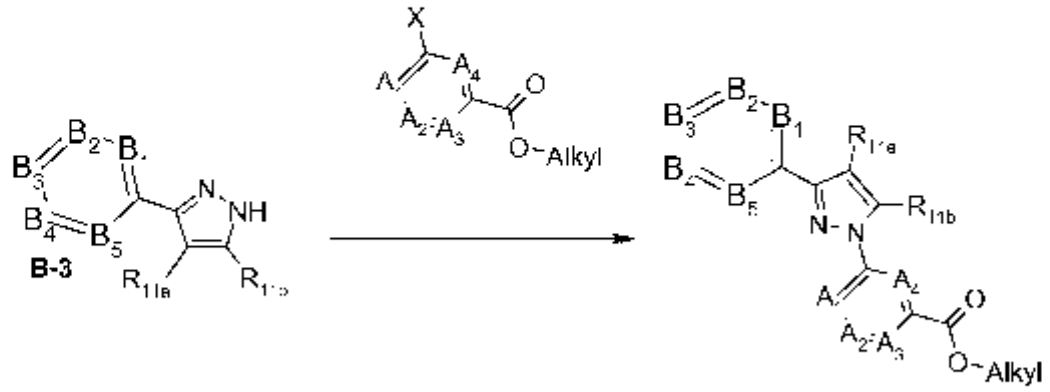
Stufe 2 Pyrazol Ringschluss



(B-2) **(B-3)**

[0318] Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-3**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**B-2**) und Hydrazin hergestellt werden. Die Reste B^1-B^5, und R^{11} haben die weiter oben beschriebenen Bedeutungen. Die Herstellung der Ausgangsverbindungen der Struktur (**B-2**) ist weiter oben beschrieben. Die Reaktion wird durchgeführt indem man die Verbindungen (**B-2**) mit Hydrazin unter den für analoge Reaktionen in der Literatur bekannten Bedingungen umsetzt (EP1382603, Example 3, S. 43)

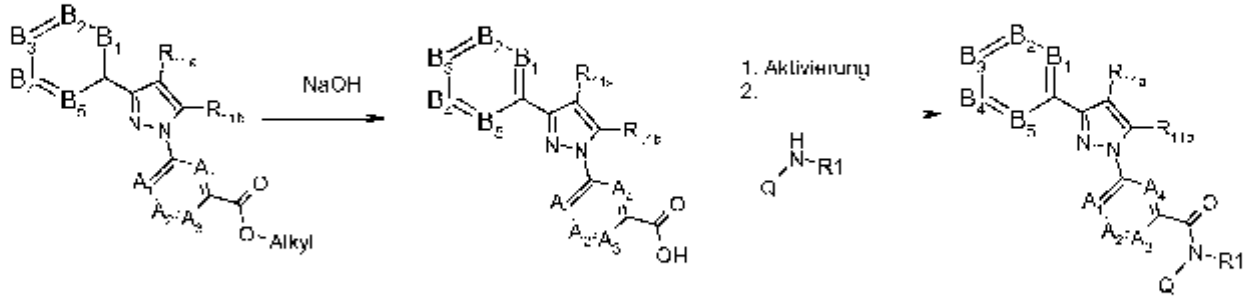
Stufe 3 Aryl-Kupplung



(B-3) **(B-6)** **(B-4)**

[0319] Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-4**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**B-3**) und (**B-6**) hergestellt werden. Die Reste A^1-A^4, B^1-B^5, Alkyl, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht für einen Boronsäure- bzw. einen Boronsäureesterrest. Die Herstellung der Ausgangsverbindungen der Struktur (**B-3**) ist weiter oben beschrieben. Die Verbindungen der allgemeinen Struktur (**B-6**) sind entweder kommerziell erhältlich oder können nach dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden. Die Reaktion wird unter den für analoge Reaktionen in der Literatur bekannten Bedingungen durchgeführt (WO2009140342, S. 96).

Stufen 4, 5 Verseifung, Amidierung



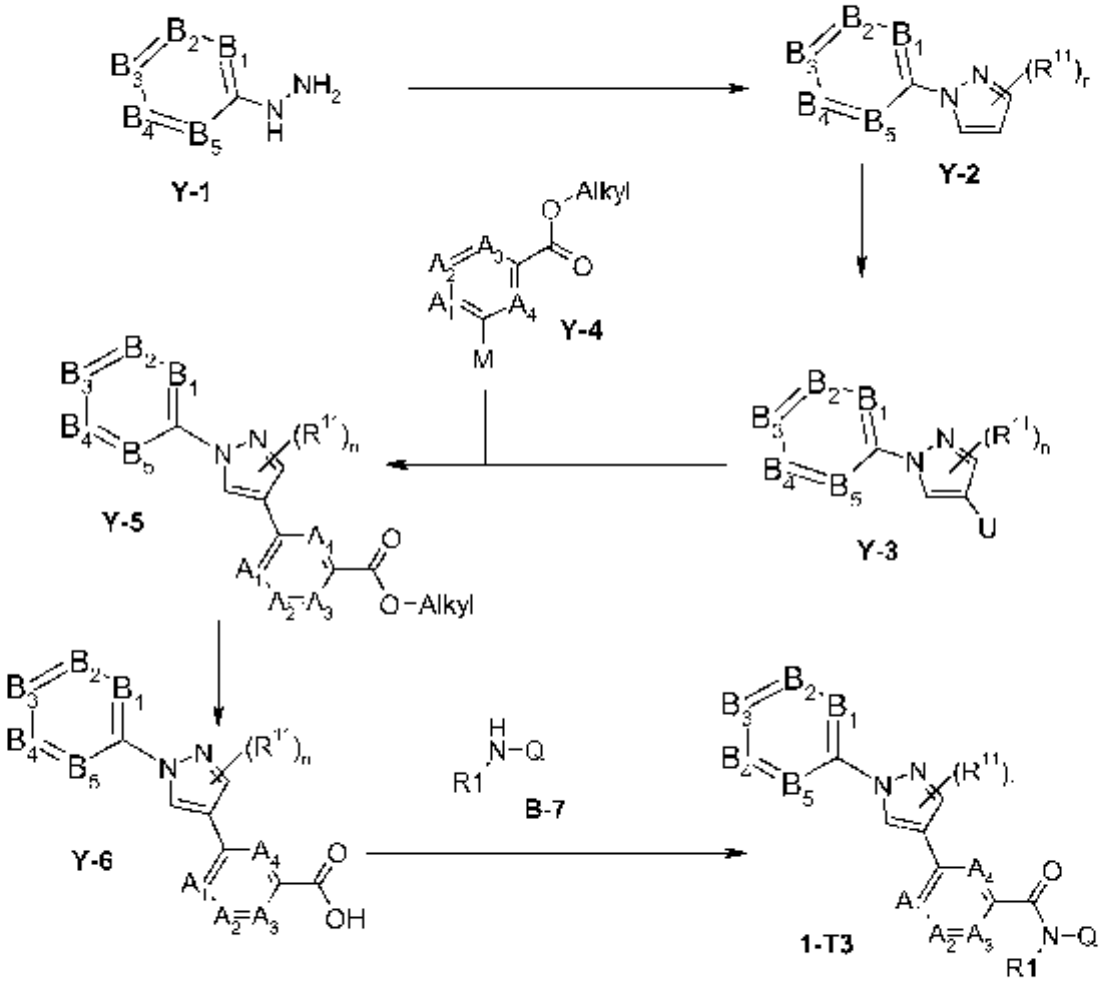
(B4) **(B5)** **(B7)** **(I-T2)**

[0320] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(I-T2)** können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien **(B5)** und **(B7)** hergestellt werden [WO2010-051926; WO2010-133312]. Verbindungen der allgemeinen Struktur **(B5)** lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur **(B4)** herstellen [WO2010-051926; WO2010-133312]. Die Reste A^1-A^4, B^1-B^5, Alkyl, Q, R^1 und R^{1a} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Die Herstellung der Verbindungen der Struktur (**B-7**) ist weiter oben beschrieben.

Verfahren I-T3

[0321] Die Verbindungen der Struktur (I-T3) können nach dem im Reaktionsschema 3a angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 3a



Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, Q, R^1, n und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. M steht z.B. für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat . U steht z. B. für Brom, Iod oder Triflat. X steht z. B. für Cl, Br, I.

Stufe 1 Pyrazol

[0322] Stufe 1 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (1-T3):



[0323] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (Y-2) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (Y-1) hergestellt werden. Die Reste B_1-B_5 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Ausgangsverbindungen der Struktur (Y1) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien 2,6-

Dichlor-4-(trifluormethyl)phenyl]hydrazin, [3-Chlor-5-(trifluormethyl)-2-pyridyl]hydrazin, [2,6-Dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]hydrazin, [2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]hydrazin, [2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]hydrazin, oder [2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]hydrazin genannt. Sie können z.B. nach US 2003/187233, S. 13; Haga, Takahiro et al., Heterocycles, 22 (1984), S. 117-124 beschriebenen Methoden hergestellt werden.

Stufe 2 Iod-Pyrazol

[0324] Stufe 2 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (I-T3):



Y-2 Y-3

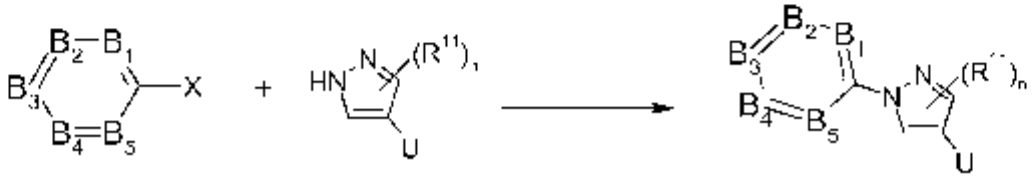
[0325] Die Reste B_1-B_5, n und $R^{1'}$ haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht z. B. für Brom oder Iod.

[0326] Die Verbindungen der Strukturformel (Y-3) sind z.B. 1-(2,6-dichloro-4-trifluoromethyl-phenyl)-4-iod-pyrazol, 3-Chlor-2-(4-iodpyrazol-1-yl)-5-(trifluormethyl)pyridin (CAS-RN: 8611-89-2), 1-(2,6-Dichlor-4-heptafluorisopropyl-phenyl)-4-iod-pyrazol, 1-(2,6-Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-phenyl)-4-iod-pyrazol, 1-[2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]-4-iod-pyrazol, 1-[2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]-4-iod-pyrazol, oder 1-[2-Ethyl-6-methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4-iod-pyrazol.

[0327] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (Y-3) werden hergestellt indem man die Pyrazole der Struktur (Y-2) mit halogenierenden Mitteln umsetzt. Die Reste B^1 bis B^5 und $R^{1'}$ haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Geeignete halogenierende Verbindungen sind dem Fachmann bekannt wie z.B. Chlor, Brom, Iod, N-Chlorsuccinimid, N-Bromsuccinimid, N-Iodsuccinimid, 1,3-Dichlor-5,5-dimethylhydantoin, 1,3-Dibrom-5,5-dimethylhydantoin, Natriumhypochlorit und Jodmonochlorid. Bevorzugt werden Brom, Iod und Iodsuccinimid eingesetzt. Gegebenenfalls ist es vorteilhaft, die Reaktion in Gegenwart eines Oxidationsmittels z.B. Wasserstoffperoxid durchzuführen. Die Umsetzung folgt den aus der Literatur bekannten Bedingungen z. B. Guo Li et al., Tetrahedron Letters 48 (2007), 4595-4599; Mary M. Kim et al., Tetrahedron Letters 49 (2008), 4026-4028.

Alternativ Kupplung mit Pyrazol

[0328] Alternativ lassen sich die Verbindungen der Struktur Y-3 auch nach literaturbekannten Verfahren durch direkte Kupplung von Iodpyrazolen mit entsprechenden Arylhalogeniden herstellen (z. B. Sammelson, Robert E. et al., J. of Organic Chemistry, 68 (2003), 8075-8079).



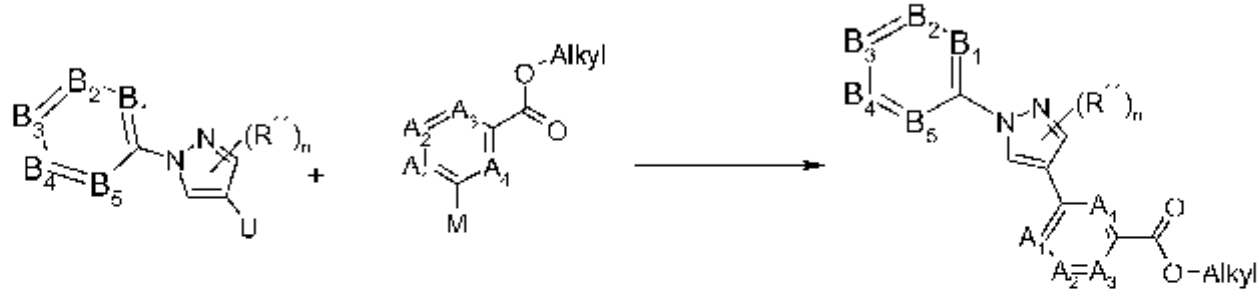
(Y-8) (Y-9) (Y-3)

[0329] Die Reste B_1 bis B_5, n und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht z. B. für ein Halogen. U steht z. B. für Brom, Iod oder Triflat

[0330] Ausgangsverbindungen der Struktur (Y-8) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien 2-Brom-1,3-dichlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1-ethyl-3-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Brom-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Brom-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol, 2-Brom-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol genannt. Sie können z.B. nach den in EP1253128, Seiten 8-10 beschriebenen Methoden hergestellt werden.

Stufe 3 Boronsäure Kupplung

[0331] Stufe 3 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (I-T3):

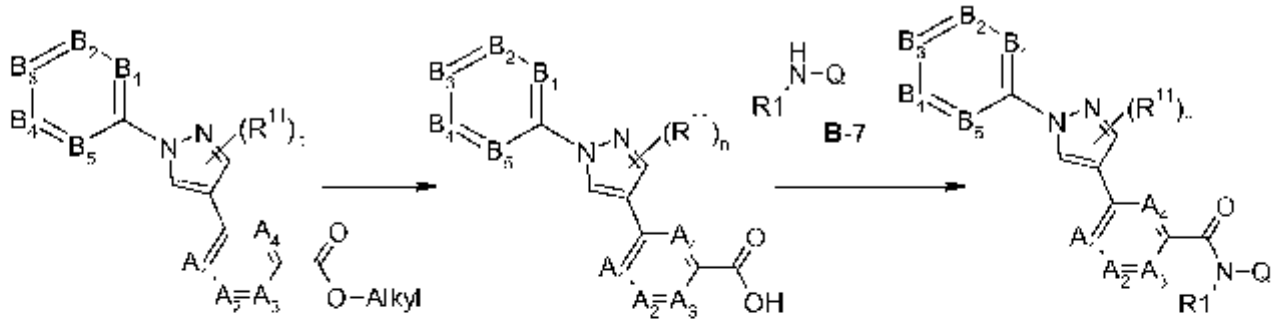


(Y-3) (Y-4) (Y-5)

[0332] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, n und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht z. B. für Brom, Iod oder Triflat, wenn M für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat steht; oder U steht z. B. für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat, wenn M für Brom, Iod oder Triflat steht.

[0333] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(Y-5)** können nach literaturbekannten Verfahren mittels Palladium katalysierten Reaktionen aus den Reaktionspartnern **(Y-3)** und **(Y-4)** hergestellt werden (z. B. WO 2005/040110 oder WO 2009/089508). Die Verbindungen der allgemeinen Struktur **(Y-4)** sind entweder kommerziell erhältlich oder können nach dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden.

Stufen 4, 5 Verseifung, Amidierung



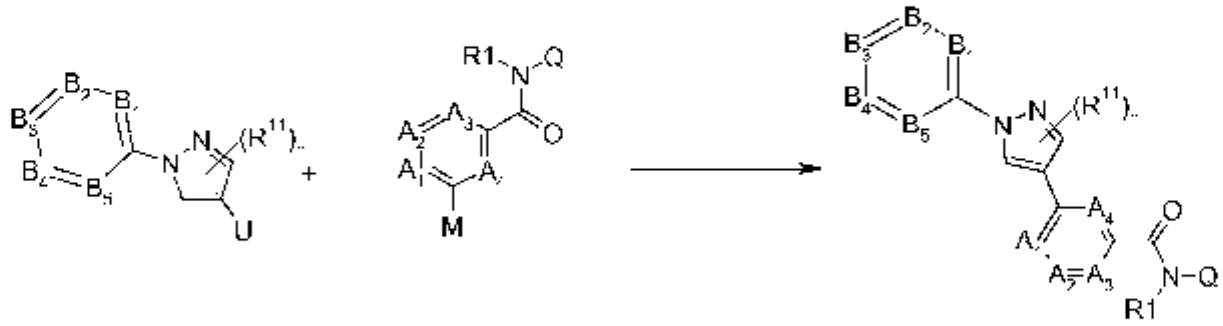
(Y-5) (Y-6) (I-T3)

[0334] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(I-T3)** können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien **(Y-6)** und **(Y-7)** hergestellt werden (z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312). Verbindungen der allgemeinen Struktur **(Y-6)** lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur **(Y-5)** herstellen (z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312). Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen.

Stufe 3 Alternativ: Kupplung mit Amiden

[0335] Alternativ können die erfindungsgemäßen Verbindungen **(I-T3)** durch das allgemeine Darstellungsverfahren 3b dargestellt werden.

Reaktionsschema 3b



(Y-3) (Y-10) (I-T3)

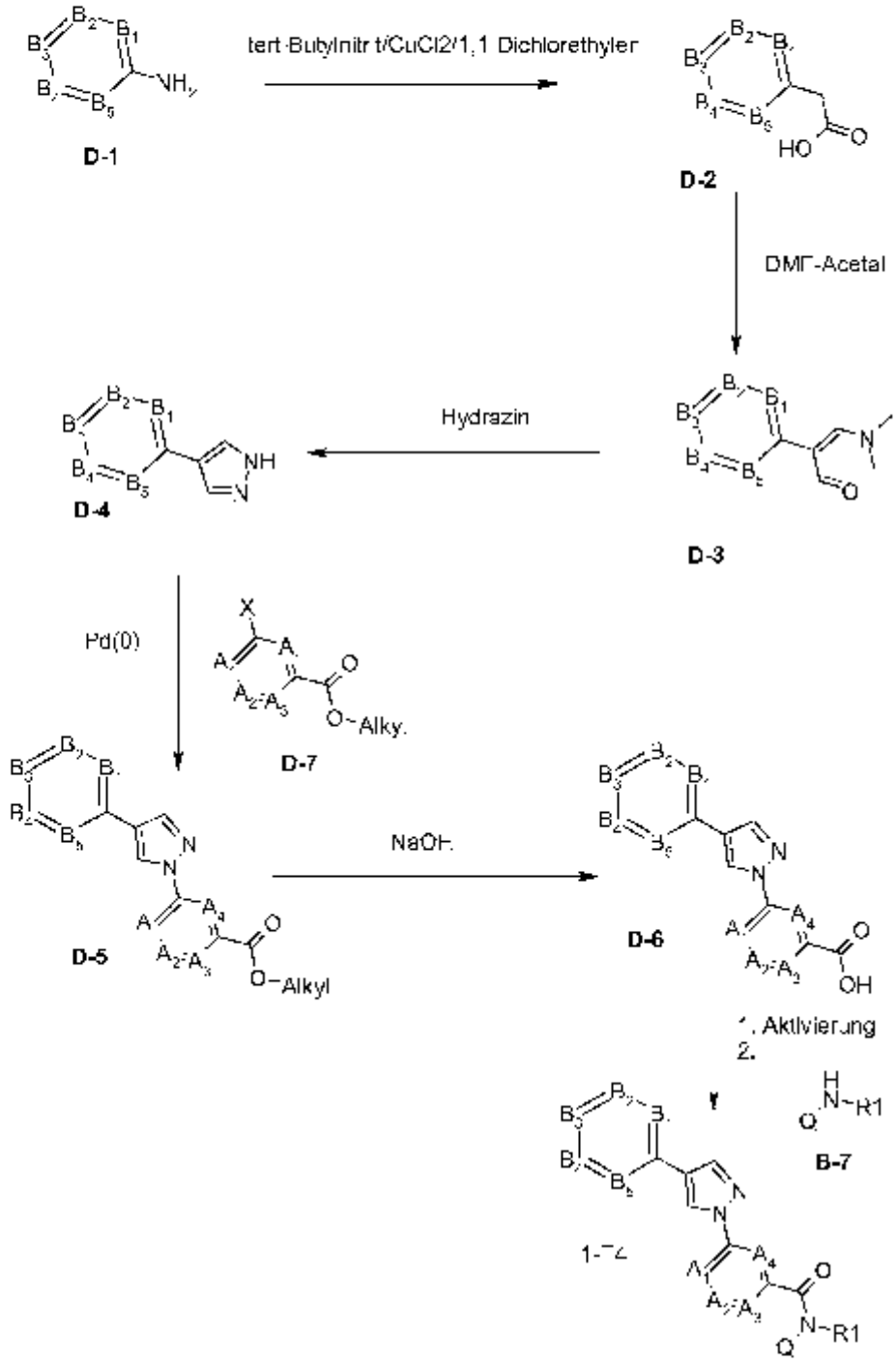
[0336] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, Q, R', n und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht für Brom, Iod oder Triflat, wenn M für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat steht. U steht für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat, wenn M für Brom, Iod oder Triflat steht.

[0337] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(I-T3)** können nach literaturbekannten Verfahren mittels Palladium katalysierten Reaktionen aus den Reaktionspartnern **(Y-3)** und **(Y-10)** hergestellt werden (z. B. WO 2005/040110 oder WO 2009/089508). Die Verbindungen der allgemeinen Struktur **(Y-10)** sind entweder kommerziell erhältlich oder können nach dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden. Die Herstellung Verbindungen der Struktur **(Y-3)** ist bereits oben beschrieben.

Verfahren I-T4

[0338] Die Verbindungen der Struktur **(I-T4)** können nach dem im Reaktionsschema 4 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 4



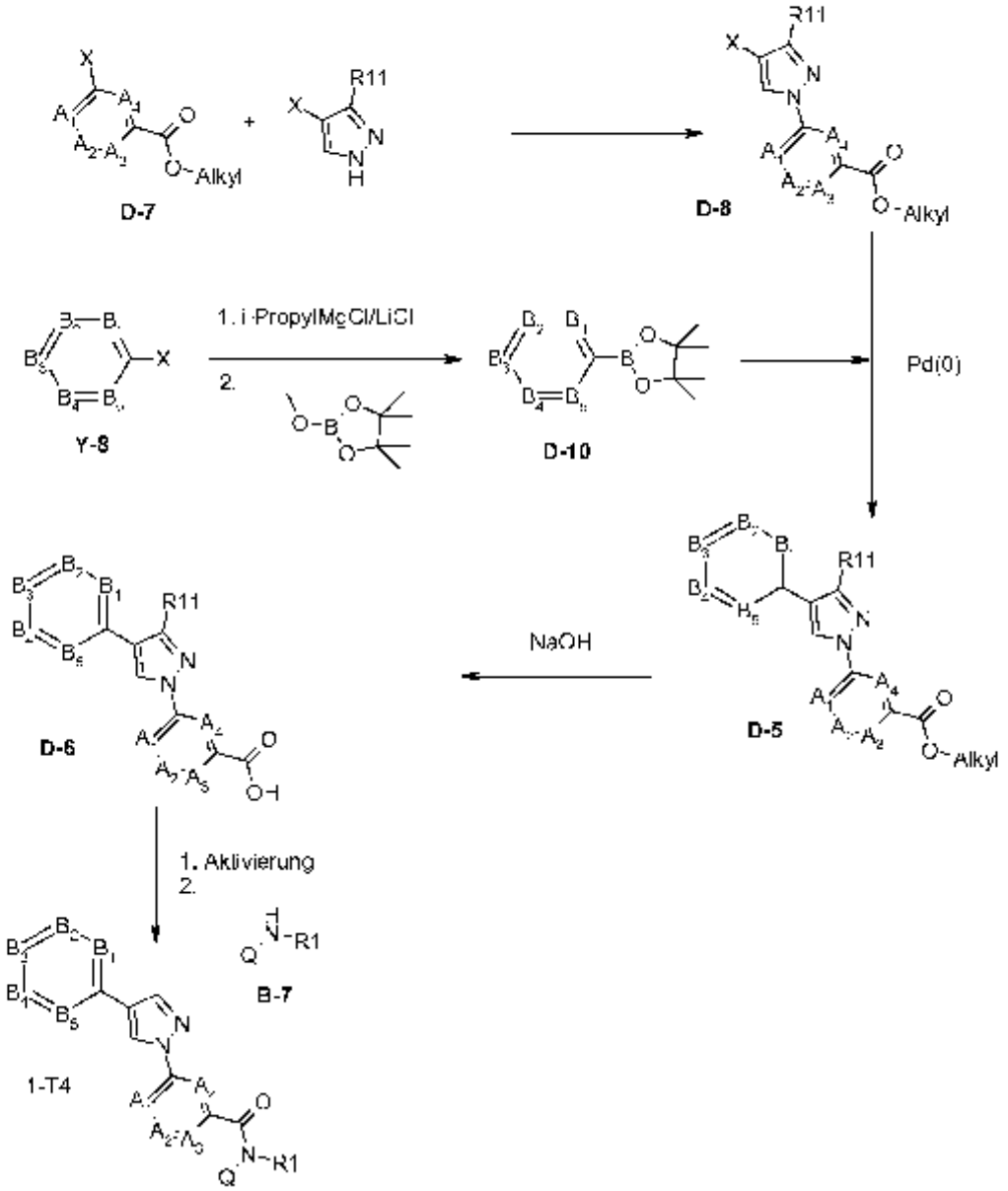
[0339] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, Q, und R^1 haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht für Cl, Br, I. Ausgangsverbindungen der Struktur (D-1) (z.B. EP2319830, S. 330) und (D-7) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden.

[0340] Die Durchführung der Reaktionen kann nach den in der Literatur beschriebenen Verfahren erfolgen z.B. WO 2012/149236, Majumder, Supriyo et al., Advanced Synthesis and Catalysis, 351 (2009), 2013-2023, oder US 5,061,705.

[0341] Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D2**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D1**) hergestellen (z.B. WO2008148868A1, S. 87). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D3**) können in Analogie zu literaturbekannten Reaktionen aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D2**) und einem Iminium Salz hergestellt werden (z.B. Knorr, Rudolf; Loew, Peter; Hassel, Petra; Bronberger, Hildegard Journal of Organic Chemistry, 49 (1984) S. 1288-1290). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D4**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D3**) und Hydrazin hergestellt werden (z.B. WO2008080969 A1, S. 102-103, Example 104). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D5**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D4**) und (**D7**) herstellen (z.B. WO2013009791, S. 50, Example44). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D6**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D5**) herstellen [WO2010-051926; WO2010-133312]. Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**I-T4**) können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien (**D6**) und (**D8**) hergestellt werden [WO2010-051926; WO2010-133312].

[0342] Die Verbindungen der Struktur (I-T4) können alternativ nach dem im Raktionsschema 5 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 5

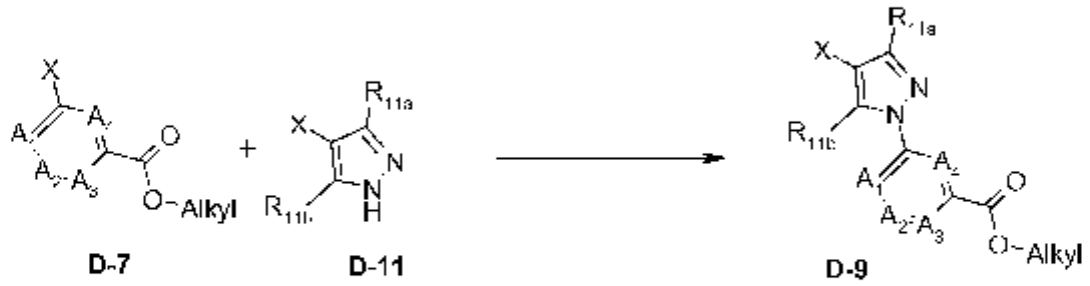


[0343] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{1a} haben die hierin beschriebenen Bedeutungen. X steht für Cl, Br, I. Ausgangsverbindungen der Struktur (**D-7**), (**D-9**) und (**D-11**) (z.B. EP1253128, S. 8-10) sind bekannt und teilweise käuflich oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden.

[0344] Die Durchführung der Reaktionen kann nach den in der Literatur beschriebenen Verfahren erfolgen:

Stufe 1 Pyrazol-Kupplung

[0345] Stufe 1 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (**I-T4**):



D-7 D-11 D-9

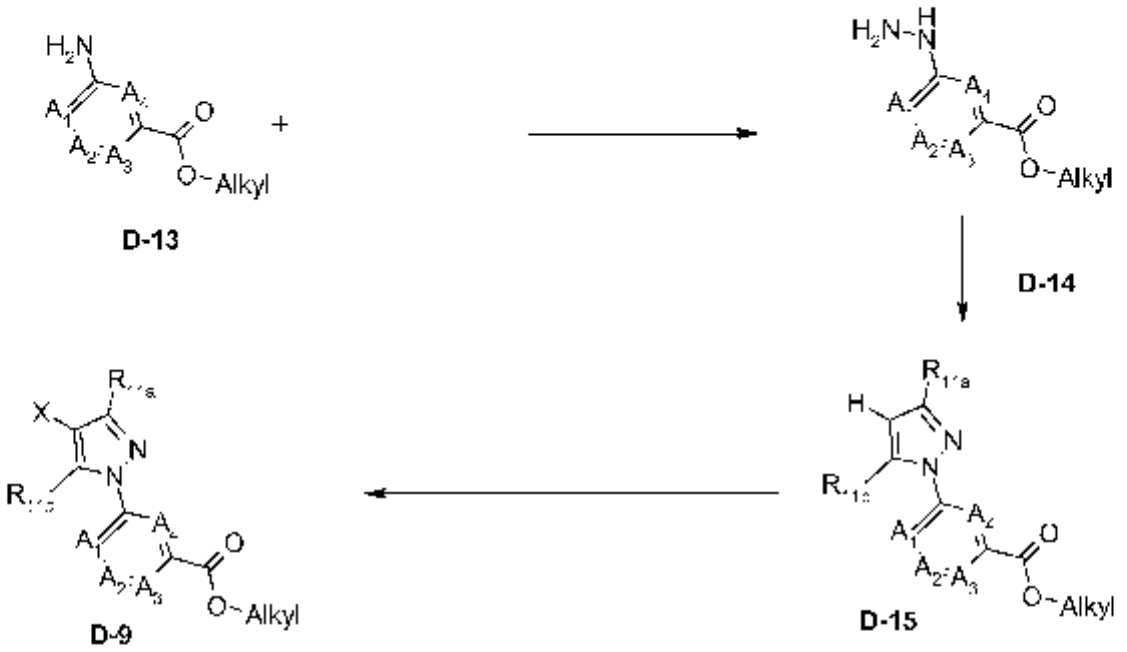
[0346] Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D-9**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**D-7**) und (**D-11**) hergestellt werden. Die Reste A^1-A^4, Alkyl und X haben die weiter oben beschriebenen Bedeutungen. Ausgangsverbindungen der Struktur (**D-7**) sind bekannt (z.B. WO2004099146A1, S. 68-69) oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien genannt: 2-Chlor-5-iod-benzoesäuremethylester, 2-Brom-5-iod-benzoesäureethylester, 5-Brom-2-chlor-3-fluor-benzoesäuremethylester, 5-Brom-2-chlor-nicotinsäureethylester. Die Ausgangsverbindungen der Struktur (**D-11**) sind bekannt und teilweise käuflich oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien 4-Brom-pyrazol, 4-Brom-3-methyl-pyrazol 4-Brom-3,5-dimethylpyrazol und 4-Brom-3-(trifluormethyl)-pyrazol genannt.

[0347] Die Herstellung der noch unbekannten Verbindungen (**D-9**) kann in Analogie zu den bekannten Verfahren zur Verknüpfung von Pyrazolen mit Aromaten erfolgen. (z.B. WO2013009791, S. 50, Example 44).

Pyrazol Alternative Herstellung

[0348] Alternativ können die erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D9**) über den im Reaktionsschema 6 angegebenen Weg erhalten werden.

Reaktionsschema 6



[0349] Die Reste A_1 bis A_4, Alkyl, und R_{1a} haben die weiter oben beschriebenen Bedeutungen. X steht für Cl, Br, I. Ausgangsverbindungen der Struktur (**D-13**) sind bekannt (z.B. WO2004099146A1, S. 68-69) oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien genannt: 5-Amino-2-chlor-benzoesäuremethylester, 5-Amino-2-chlor-benzoesäureethylester, 5-Amino-2-chlor-3-fluor-benzoesäuremethylester, 5-Amino-2-chlor-nicotinsäureethylester.

[0350] Die Herstellung der noch unbekannten Verbindungen (**D-14**) kann in Analogie zu den bekannten Verfahren zur Herstellung von Arylhydrazinen erfolgen (z.B. WO 2004058731, S.65).

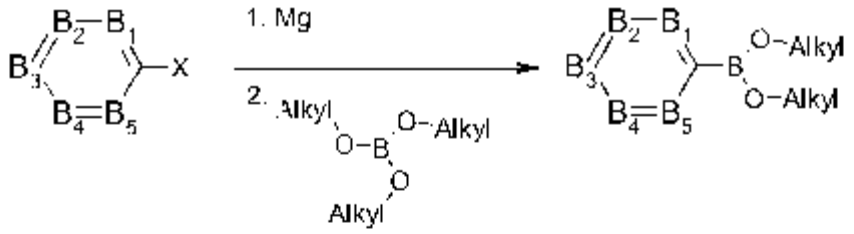
[0351] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D-15**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**D-14**) hergestellt werden. Die Reste A_1 bis A_4, Alkyl, und R_{1a} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Ausgangsverbindungen der Struktur (**D-14**) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien 2-Chlor-5-hydrazino-benzoesäuremethylester, 2-Chlor-5-hydrazino-benzoesäureethylester, 2-Chlor-3-fluor-5-hydrazino-benzoesäuremethylester, 2-Chlor-5-hydrazino-nicotinsäureethylester genannt. Die Reaktion kann analog zu den in der Literatur bekannten Bedingungen zum Pyrazol Ringschluss durchgeführt werden (z.B. Sachweh, Volker; Langhals, Heinz Chemische Berichte, 119 (1986) 1627-1639).

[0352] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D9**) werden hergestellt indem man die Pyrazole der Struktur (**D-15**) mit halogenierenden Mitteln umsetzt. Die Reste A_1 bis A_4, Alkyl, und R_{1a} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Als bevorzugte Verbindungen der Struktur (**D15**) seien 2-Chlor-5-(pyrazol-1-yl)-benzoesäuremethylester, 2-Chlor-5-(pyrazol-1-yl)-benzoesäureethylester, 2-Chlor-3-fluor-5-(pyrazol-1-yl)-benzoesäuremethylester, 2-Chlor-5-(pyrazol-1-yl)-nicotinsäureethylester genannt

[0353] Geeignete halogenierende Verbindungen sind dem Fachmann bekannt wie z.B. z.B. Chlor, Brom, Iod, N-Chlorsuccinimid, N-Bromsuccinimid, N-Iodsuccinimid, 1,3-Dichlor-5,5-dimethylhydantoin, 1,3-Dibrom-5,5-dimethylhydantoin, Natriumhypochlorit und Jodmonochlorid. Bevorzugt werden Brom, Iod, Bromsuccinimid und Iodsuccinimid eingesetzt. Gegebenenfalls ist es vorteilhaft, die Reaktion in Gegenwart eines Oxidationsmittels z.B. Wasserstoffperoxid durchzuführen. Die Umsetzung folgt den aus der Literatur bekannten Bedingungen z. B. Guo Li et al., Tetrahedron Letters 48 (2007), 4595-4599; Mary M. Kim et al., Tetrahedron Letters 49 (2008), 4026-4028.

Stufe 2 Boronester

[0354] Stufe 2: Herstellung der Ausgangsverbindungen der Struktur (**D12**)



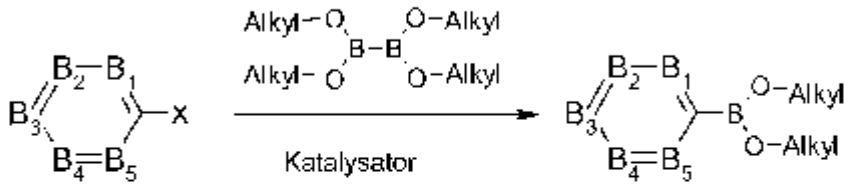
(**Y-8**) (**D-16**) (**D-12**)

[0355] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D-12**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden (Chien, Yuh-Yih; Chou, Meng-Yen; Leung, Man-Kit; Liao, Yuan-Li; Lin, Chang-Chih; Wong, Ken-Tsung; Journal of Organic Chemistry, 67 (2002) S. 1041-1044) aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**D-10**) durch Umsetzung mit Magnesium und anschliessende Umsetzung mit Borsäureestern der Struktur (**D-16**) hergestellt werden.

[0356] Die Reste B^1-B^5 und Alkyl haben die oben beschriebenen Bedeutungen.

[0357] Die in der Reaktion verwendeten Borsäureester der Struktur (**D-13**) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien Borsäuretrimethylester, Borsäuretriethylester und 2-Methoxy-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan genannt.

[0358] Alternativ können die erfindungsgemäßen Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D-12**) in Analogie zu literaturbekannten Methoden (Tang, Wenjun; Keshipeddy, Santosh; Zhang, Yongda; Wei, Xudong; Savoie, Jolaine; Patel, Nitinchandra D.; Yee, Nathan K.; Senanayake, Chris H.; Organic Letters, 13 (2011) S. 1366-1369) aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**D-10**) durch Umsetzung mit Diboranen der Struktur (**D-14**) in Gegenwart von Katalysatoren hergestellt werden.

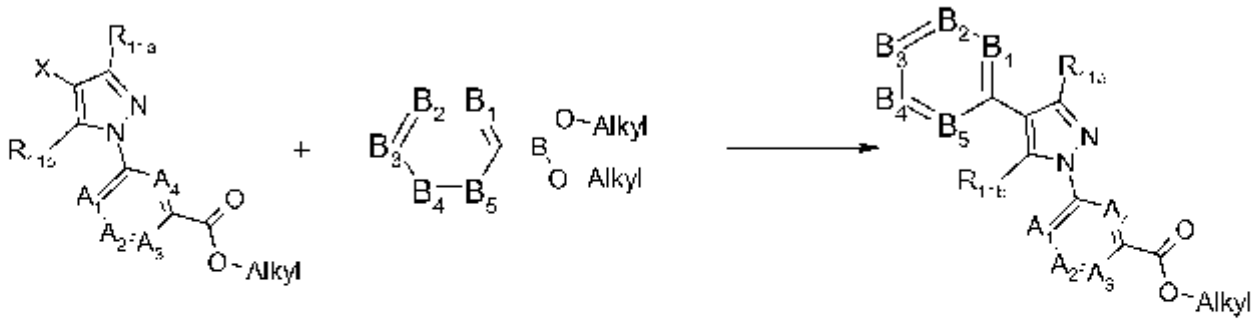


(Y-8) (D-17) (D-12)

[0359] Die in der Reaktion verwendeten Borsäureester der Struktur (**D-17**) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele sei 4,4,5,5-Tetramethyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl 1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1,3,2 dioxaborolan (Bis(pinacolato)dibor) genannt.

[0360] Als Katalysatoren können vor allem Verbindungen und Komplexe von Palladium und Cu(I) verwendet werden.

Stufe 3 Aryl-Kupplung



(D-9) (D-12) (D-5)

[0361] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**D-5**) werden hergestellt indem man die Verbindungen der Struktur (**D-9**) mit Boronsäureestern der Struktur (**D-12**) umsetzt.

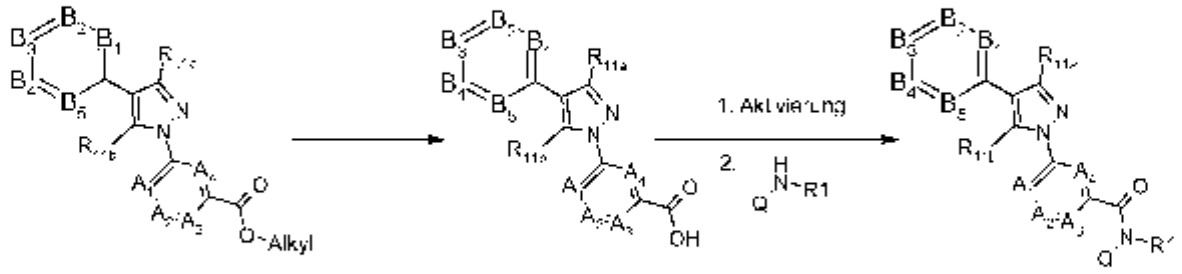
[0362] Die Reste A^1-A^4, B^1-B^5, R^1, Alkyl und X haben die weiter oben beschriebenen Bedeutungen.

[0363] Die Herstellung der Verbindungen der Strukturen (**D-9**) und (**D-12**) ist weiter oben beschrieben.

[0364] Als Beispiele für Verbindungen der Struktur (**D-9**) seien genannt: 5-(4-Brompyrazol-1-yl)-2-chlor-benzoesäuremethylester, 5-(4-Iodpyrazol-1-yl)-2-chlor-benzoesäuremethylester, 5-(4-Brom-3-methylpyrazol-1-yl)-2-chlor-benzoesäureethylester, 5-(4-Brom-3-(trifluormethyl)pyrazol-1-yl)-2-chlor-benzoesäuremethylester, 5-(4-Brom-3-(trifluormethyl)pyrazol-1-yl)-2-chlor-benzoesäuremethylester, 5-(4-Brom-3,5 dimethylpyrazol 1 yl)-2-chlor-benzoesäuremethylester und 5-(4 Brom 3-methylpyrazol 1 yl)-2-chlor-nikotinsäureethylester.

[0365] Die Reaktion wird unter den in der Literatur beschriebenen Bedingungen durchgeführt z.B. WO 2005040110 oder WO 2009089508.

Stufen 4, 5 Verseifung, Amidierung



(D-5) **(D-6)** **(D-8)** **(I-T4)**

[0366] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(I-T4)** können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien **(D-6)** und **(D-8)** hergestellt werden [WO2010051926; WO2010133312]. Verbindungen der allgemeinen Struktur **(D-6)** lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur **(D-5)** herstellen [WO2010-051926; WO2010133312]. Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R' und R'' haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Die Herstellung der Verbindungen der Struktur **(D5)** ist weiter oben beschrieben.

[0367] (I-T5): Verbindungen der Formel (I-T5) können z.B. analog zu **Friedrich**, L.E. et al. Journal of Organic Chemistry, 43 (1978), 34-38; oder Huettel, R. et al. Chemische Berichte, 93 (1960), S. 1425-1432; oder Sato, T et al., Bulletin of the Chemical Society of Japan, 41 (1968), S. 3017-3018 hergestellt werden.

[0368] (I-T8): Verbindungen der Formel (I-T8) können z.B. analog zu EP 1 405 636, Example 5; oder EP 2 301 538, S. 162; oder Schmidt, Bernd et al., European Journal of Organic Chemistry, (2011), S. 4814-4822 hergestellt werden.

[0369] (I-T9): Verbindungen der Formel (I-T9) können z.B. analog zu Ma, Shengming et al., Chemistry-A European Journal, 9 (2003), S. 2447-2456 hergestellt werden.

[0370] (I-T10): Verbindungen der Formel (I-T10) können z.B. analog zu EP 2 301 538, S. 162 hergestellt werden.

[0371] (I-T11): Verbindungen der Formel (I-T11) können z.B. analog zu EP 2 301 538, S. 165 hergestellt werden.

[0372] (I-T12): Verbindungen der Formel (I-T12) können z.B. analog zu EP 2 301 538, S. 164 hergestellt werden.

[0373] (I-T13): Verbindungen der Formel (I-T13) können z.B. analog zu EP 2 301 538, S. 164 hergestellt werden.

[0374] (I-T14): Verbindungen der Formel (I-T14) können z.B. analog zu Hibi, Shigeki et al., Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 10 (2000), S. 623–626 oder Wang, Xiang et al. Journal of Organic Chemistry, 72 (2007), 1476-1479; EP1405636, Seite 31 hergestellt werden.

[0375] (I-T15): Verbindungen der Formel (I-T15) können z.B. analog zu Chattopadhyay, Buddhadeb et al., Organic Letters, 13 (2011), S. 3746-3749 hergestellt werden.

[0376] (I-T16): Verbindungen der Formel (I-T16) können z.B. analog zu Campi, Eva M. et al. Tetrahedron Letters, 32 (1991), S. 1093-1094; oder Thompson, Benjamin B. et al., Organic Letters, 13 (2011), S. 3289-3291; oder Kloetzel et al. Journal of the American Chemical Society, 79 (1957), S. 4222; oder Chi, Yonggui Robin et al., Journal of the American Chemical Society, 135 (2013), S. 8113-8116 hergestellt werden.

[0377] (I-T18): Verbindungen der Formel (I-T18) können z.B. analog zu EP 2 311 455, S. 150; oder Balaban, A.T. et al. Tetrahedron, 19 (1963), S. 2199-2207 hergestellt werden.

[0378] (I-T19): Verbindungen der Formel (I-T19) können z.B. analog zu WO 2004/14366, S. 108 hergestellt werden.

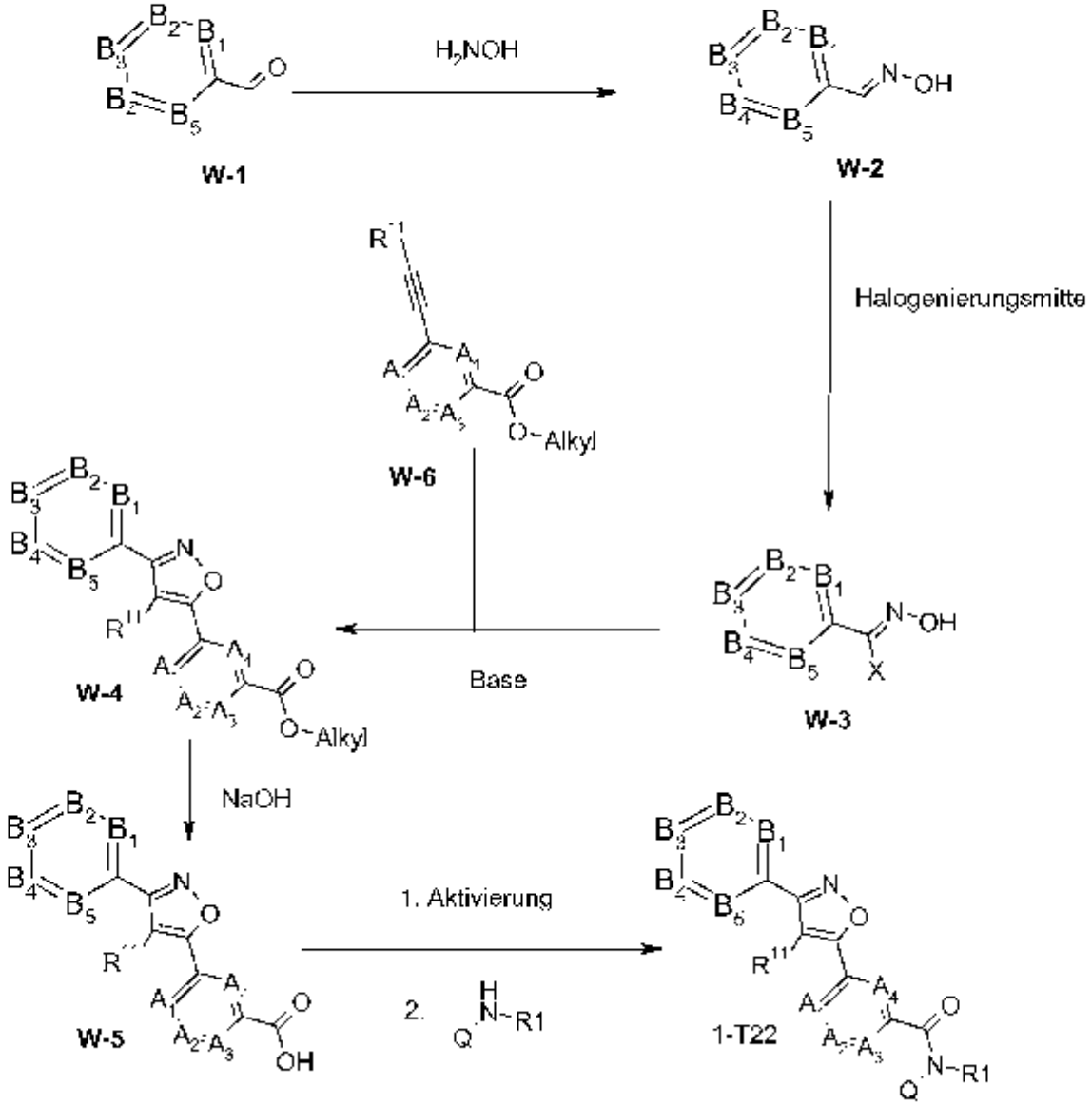
[0379] (I-T20): Verbindungen der Formel (I-T20) können z.B. analog zu Araki, Hiroshi; Katoh, Tadashi; Inoue, Munenori; Synlett, (2006), S. 555-558; US 6,545,009, S. 27, Example 1 hergestellt werden.

[0380] (I-T21): Verbindungen der Formel (I-T21) können z.B. analog zu WO 2004/72050, S. 13; oder US 6,545,009, S. 27 hergestellt werden.

Verfahren I-T22

[0381] Die Verbindungen der Struktur (**I-T22**) können nach dem im Schema 7 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

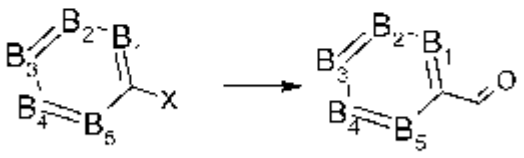
Reaktionsschema 7



[0382] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{-1} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht für Cl, Br, I. Ausgangsverbindungen der Struktur (W-1) und (W-6) sind bekannt (W1 z.B. US 2011/53904 S. 19, W6 z.B. WO 2012/175474, S. 117-118) oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Die Reaktionen werden analog den zur Herstellung der Verbindungen (**I-T23**) angegebenen Bedingungen durchgeführt.

Stufe 1 Aldehyd

[0383] Stufe 1 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (**I-T22**):



(W1) (W2)

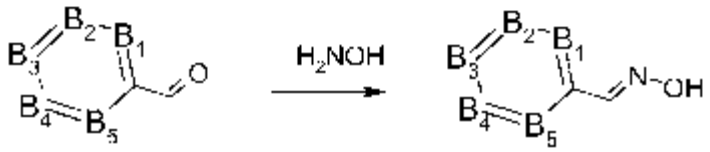
[0384] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (W2) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden (US5739083, Example 2; WO2011/23667, S. 34) aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (W1) hergestellt werden.

[0385] Die Reste B^1-B^5 und X haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht z.B. für Chlor, Brom oder Iod.

[0386] Ausgangsverbindungen der Struktur (B1) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien 2-Brom-1,3-dichlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1-ethyl-3-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Brom-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Brom-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol, 2-Brom-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol, 1,3-Dimethyl-2-iod-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Iod-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol genannt. Sie können z.B. nach den in EP1253128, Seiten 8-10 beschriebenen Methoden hergestellt werden.

Stufe 2 Oxim

[0387] Stufe 2 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (1-T22):



(W2) (W3)

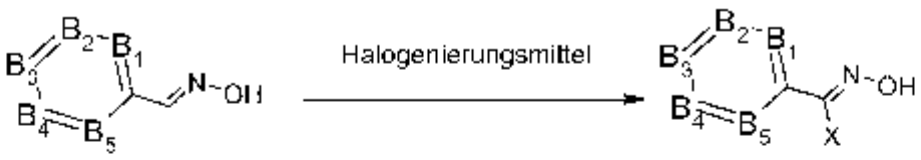
[0388] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (W3) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (W2) hergestellt werden. Die Reste B_1-B_5 haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Die Herstellung der Ausgangsverbindungen der Struktur (W2) ist weiter oben beschrieben. Als Beispiele seien 2,6-Dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzaldehyd, 2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzaldehyd, 2-Ethyl-6-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzaldehyd, 2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)benzaldehyd, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)benzaldehyd, 2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-

(trifluormethoxy)benzaldehyd, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethoxy)benzaldehyd, genannt. Ihre Herstellung ist weiter oben beschrieben.

[0389] Die Verbindungen der Strukturformel (**W3**) sind neu. Die Herstellung der noch unbekannten Verbindungen (**W3**) kann in Analogie zu den bekannten Verfahren zur Herstellung von Oximen aus Aldehyden erfolgen (H. Metzger in Houben-Weyl, Band X/4, Seite 55 ff. Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Die Verbindungen der Strukturformel (**W3**) können als reine Stereoisomere, aber auch als Mischungen der Stereoisomere vorliegen.

Stufe 3 Hydroxamsäurechlorid

[0390] Stufe 3 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (**I-T22**):



(W3) **(W4)**

[0391] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**W4**) werden hergestellt indem man die Oxime der Struktur (**W3**) mit halogenierenden Mitteln umsetzt.

[0392] Die Reste B1-B5 haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X ist Chlor, Brom oder Iod.

[0393] Typische Verbindungen der Struktur (**W4**) sind z.B. 2,6-Dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Ethyl-6-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethoxy)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethoxy)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)-N-hydroxybenzimidoylbromid.

[0394] Geeignete halogenierende Verbindungen sind dem Fachmann bekannt wie z.B. Chlor, Brom, Iod, N-Chlorsuccinimid, N-Bromsuccinimid, N-Iodsuccinimid, 1,3-Dichlor-5,5-dimethylhydantoin, 1,3-Dibrom-5,5-dimethylhydantoin, Benzyltrimethylammonium-tetrachloroiodat und Natriumhypochlorit. Bevorzugt werden chlorierende Reagenzien eingesetzt.

[0395] Zur Durchführung der Reaktion können geeignete Lösungsmittel verwendet werden.

[0396] Als Verdünnungs- bzw. Lösungsmittel zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren kommen grundsätzlich alle unter den spezifischen Reaktionsbedingungen inerten organischen Lösungsmittel in Frage. Als Beispiele sind zu nennen: Halogenkohlenwasserstoffe (z.B. Chlorkohlenwasserstoffe, wie Tetrachlethylen, Tetrachlorethan, Dichlorpropan, Methylenchlorid, Dichlorbutan, Chloroform, Tetrachlorkohlenstoff, Trichlorethan, Trichlorethylen, Pentachlorethan, Difluorbenzol, 1,2-Dichlorethan, Chlorbenzol, Brombenzol, Dichlorbenzol, Chlortoluol, Trichlorbenzol), Alkohole (z.B. Methanol, Ethanol, Isopropanol, Butanol), Ether (z.B. Ethylpropylether, Methyl-tert-butylether, n-Butylether, Anisol, Phenetol, Cyclohexylmethylether, Dimethylether, Diethylether, Dipropylether, Diisopropylether, Di-n-butylether, Diisobutylether, Diisoamylether, Ethylenglycoldimethylether, Tetrahydrofuran, Dioxan, Dichlordiethylether und Polyether des Ethylenoxids und/oder Propylenoxids), Amine (z.B. Trimethyl-, Triethyl-, Tripropyl-, Tributylamin, N-Methylmorpholin, Pyridin und Tetramethylendiamin), Nitrokohlenwasserstoffe (z.B. Nitromethan, Nitroethan, Nitropropan, Nitrobenzol, Chlornitrobenzol, o-Nitrotoluol; Nitrile wie Acetonitril, Propionitril, Butyronitril, Isobutyronitril, Benzonitril, m-Chlorbenzonitril), Tetrahydrothiophendioxid, Dimethylsulfoxid, Tetramethylensulfoxid, Dipropylsulfoxid, Benzylmethylsulfoxid, Diisobutylsulfoxid, Dibutylsulfoxid, Diisoamylsulfoxid, Sulfone (z.B. Dimethyl , Diethyl-, Dipropyl-, Dibutyl-, Diphenyl-, Dihexyl-, Methylethyl-, Ethylpropyl-, Ethylisobutyl- und Pentamethylensulfon), aliphatische, cycloaliphatische oder aromatische Kohlenwasserstoffe (z.B. Pentan, Hexan, Heptan, Oktan, Nonan und technische Kohlenwasserstoffe), ferner sogenannte "White Spirits" mit Komponenten mit Siedepunkten im Bereich von beispielsweise 40 °C bis 250 °C, Cymol, Benzinfraktionen innerhalb eines Siedeintervalles von 70°C bis 190 °C, Cyclohexan, Methylcyclohexan, Petrolether, Ligroin, Octan, Benzol, Toluol, Chlorbenzol, Brombenzol, Nitrobenzol, Xylol, Ester (z.B. Methyl-, Ethyl , Butyl-, Isobutylacetat, Dimethyl-, Dibutyl-, Ethylencarbonat); Amide (z.B. Hexamethylenphosphorsäuretriamid, Formamid, N-Methyl-formamid, N,N-Dimethyl-formamid, N,N-Dipropyl-formamid, N,N-Dibutyl-formamid, N-Methyl-pyrrolidin, N-Methyl-caprolactam, 1,3-Dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, Octylpyrrolidon, Octylcaprolactam, 1,3-Dimethyl-2-imidazolidion, N-Formyl-piperidin, N,N'-1,4-Diformyl-piperazin) und Ketone (z.B. Aceton, Acetophenon, Methylethylketon, Methylbutylketon).

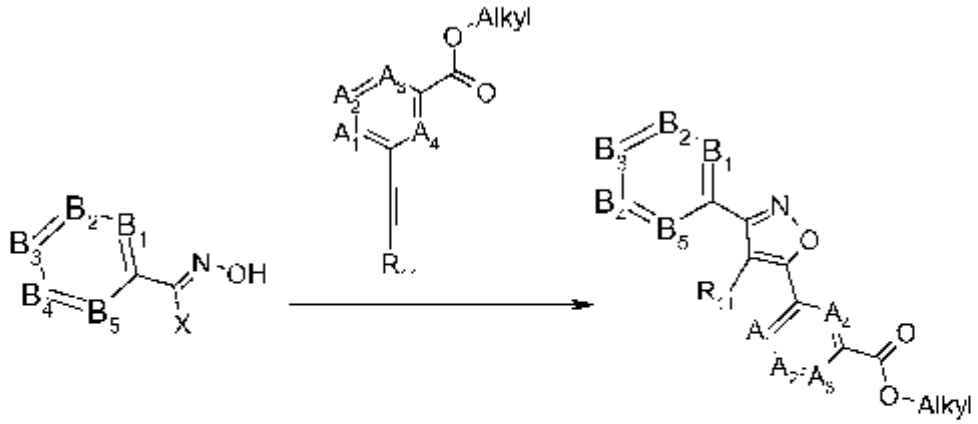
[0397] Als bevorzugtes Verdünnungsmittel kann jedes Lösungsmittel verwendet werden, das die Reaktion nicht beeinträchtigt, wie zum Beispiel Wasser. In Frage kommen aromatische Kohlenwasserstoffe wie Benzol, Toluol, Xylol oder Chlorbenzol; halogenierte Kohlenwasserstoffe wie Dichlormethan, Chloroform, 1,2-Dichlorethan oder Tetrachlorkohlenwasserstoff, offenkettige oder zyklische Ether wie Diethylether, Dioxan, Tetrahydrofuran oder 1,2-Dimethoxyethan; Ester wie Ethylacetat und Butylacetat; Ketone wie zum Beispiel Aceton, Methyl-isobutylketon und Cyclohexanon; Amide wie Dimethylformamid und Dimethylacetamid, N-Methyl-pyrrolidinon; Nitrile wie Acetonitril oder Propionitril; und andere inerte Lösungsmittel wie 1,3-Dimethyl-2- imidazolidinon; die Lösungsmittel können allein oder in Kombination von 2 oder mehr eingesetzt werden.

[0398] Die Reaktion kann in einem weiten Temperaturbereich ausgeführt werden. Gewöhnlich wird sie in einem Temperaturbereich von -78 bis 200 °C, bevorzugt bei Temperaturen zwischen -10 und 150 °C durchgeführt. Die Reaktion kann unter erhöhtem als auch vermindertem Druck ausgeführt werden. Bevorzugt wird sie aber unter Normaldruck durchgeführt. Die Reaktionszeiten liegen zwischen 0,1 und 72 Stunden, bevorzugt zwischen 1 und 24 Stunden.

[0399] Zur Durchführung der Reaktion werden 1 bis 3 Mol, bevorzugt 1 bis 1,5 Mol an Halogenierungsmittel pro Mol der Verbindung der Struktur (**W3**) in einem Lösungsmittel wie z.B. Dimethylformamid (DMF) umgesetzt.

Stufe 4 Ringschluss

[0400] Stufe 4 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (**1-T22**):



(**W4**) (**W8**) (**W5**)

Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**W5**) werden hergestellt indem man die Hydroxamsäurechloride der Struktur (**W4**) mit Acetylenen der Struktur (**W8**) umsetzt.

[0401]

[0402] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, R^1 und Alkyl haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht für Halogen, wie Chlor, Brom, Iod.

[0403] Die Herstellung der Verbindungen der Struktur (**W4**) ist weiter oben beschrieben. Typische Verbindungen der Struktur (**W4**) sind z.B. 2,6-Dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Ethyl-6-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethoxy)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethoxy)-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)-N-hydroxybenzimidoylbromid.

[0404] Die Verbindungen der Struktur (W8) sind bekannt (WO2012107434, S. 103) oder können nach literaturbekannten Methoden (Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Society Reviews (2011), 40(10), 5084-5121, Chinchilla, Rafael; Najera, Carmen, Chemical Reviews (Washington, DC, United States) (2007), 107(3), 874-922) hergestellt werden. Typische Verbindungen der Struktur (W8) sind z.B. 2-Chlor-5-ethinyl-benzoesäuremethylester, 2-Brom-5-ethinyl-benzoesäureethylester, 2-Chlor-5-ethinyl-3-fluor-benzoesäuremethylester, 2-Chlor-5-ethinyl-nicotinsäureethylester, 5-Ethinyl-2-methyl-nicotinsäureethylester

[0405] Zur Durchführung der Reaktion können geeignete Lösungsmittel verwendet werden.

[0406] Als Verdünnungs- bzw. Lösungsmittel zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren kommen grundsätzlich alle unter den spezifischen Reaktionsbedingungen inerten organischen Lösungsmittel in Frage. Als Beispiele sind zu nennen: Halogenkohlenwasserstoffe (z.B. Chlorkohlenwasserstoffe, wie Tetrachlethylen, Tetrachlorethan, Dichlorpropan, Methylenchlorid, Dichlorbutan, Chloroform, Tetrachlorkohlenstoff, Trichlorethan, Trichlorethylen, Pentachlorethan, Difluorbenzol, 1,2-Dichlorethan, Chlorbenzol, Brombenzol, Dichlorbenzol, Chlortoluol, Trichlorbenzol), Alkohole (z.B. Methanol, Ethanol, Isopropanol, Butanol), Ether (z.B. Ethylpropylether, Methyl-tert butylether, n-Butylether, Anisol, Phenetol, Cyclohexylmethylether, Dimethylether, Diethylether, Dipropylether, Diisopropylether, Di-n-butylether, Diisobutylether, Diisoamylether, Ethylenglycoldimethylether, Tetrahydrofuran, Dioxan, Dichlordiethylether und Polyether des Ethylenoxids und/oder Propylenoxids), Amine (z.B. Trimethyl-, Triethyl-, Tripropyl-, Tributylamin, N-Methylmorpholin, Pyridin und Tetramethylendiamin), Nitrokohlenwasserstoffe (z.B. Nitromethan, Nitroethan, Nitropropan, Nitrobenzol, Chlornitrobenzol, o-Nitrotoluol; Nitrile wie Acetonitril, Propionitril, Butyronitril, Isobutyronitril, Benzonitril, m-Chlorbenzonitril), Tetrahydrothiophendioxid, Dimethylsulfoxid, Tetramethylensulfoxid, Dipropylsulfoxid, Benzylmethylsulfoxid, Diisobutylsulfoxid, Dibutylsulfoxid, Diisoamylsulfoxid, Sulfone (z.B. Dimethyl-, Diethyl-, Dipropyl-, Dibutyl-, Diphenyl-, Dihexyl-, Methylethyl-, Ethylpropyl-, Ethylisobutyl- und Pentamethylensulfon), aliphatische, cycloaliphatische oder aromatische Kohlenwasserstoffe (z.B. Pentan, Hexan, Heptan, Oktan, Nonan und technische Kohlenwasserstoffe), ferner sogenannte "White Spirits" mit Komponenten mit Siedepunkten im Bereich von beispielsweise 40 °C bis 250 °C, Cymol, Benzinfraktionen innerhalb eines Siedeintervalles von 70 °C bis 190 °C, Cyclohexan, Methylcyclohexan, Petrolether, Ligroin, Octan, Benzol, Toluol, Chlorbenzol, Brombenzol, Nitrobenzol, Xylol, Ester (z.B. Methyl-, Ethyl-, Butyl-, Isobutylacetat, Dimethyl-, Dibutyl-, Ethylencarbonat); Amide (z.B. Hexamethylenphosphorsäuretriamid, Formamid, N-Methyl-formamid, N,N-Dimethyl-formamid, N,N-Dipropyl-formamid, N,N-Dibutyl-formamid, N-Methyl-pyrrolidin, N-Methyl-caprolactam, 1,3-Dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, Octylpyrrolidon, Octylcaprolactam, 1,3-Dimethyl-2-imidazolindion, N-Formyl-piperidin, N,N'-1,4-Diformyl-piperazin) und Ketone (z.B. Aceton, Acetophenon, Methylethylketon, Methylbutylketon).

[0407] Als bevorzugte Verdünnungsmittel kann jedes Lösungsmittel verwendet werden, das die Reaktion nicht beeinträchtigt, wie zum Beispiel Wasser. In Frage kommen aromatische Kohlenwasserstoffe wie Benzol, Toluol, Xylol oder Chlorbenzol; halogenierte Kohlenwasserstoffe wie Dichlormethan, Chloroform, 1,2-Dichlorethan oder Tetrachlorkohlenwasserstoff, offenkettige oder zyklische Ether wie Diethylether, Dioxan, Tetrahydrofuran oder 1 ,2-Dimethoxyethan; Ester wie Ethylacetat und Butylacetat; Ketone wie zum Beispiel Aceton, Methyl-isobutylketon und Cyclohexanon; Amide wie Dimethylformamid und Dimethylacetamid, N-Methyl-pyrrolidinon; Nitrile wie Acetonitril oder Propionitril; und andere inerte Lösungsmittel wie 1,3-Dimethyl-2- imidazolidinon; die Lösungsmittel können allein oder in Kombination von 2 oder mehr eingesetzt werden.

[0408] Bei den Umsetzungen der Verbindungen der Struktur (**W4**) mit den Acetylenen der Struktur (**W8**) können Basen zugesetzt werden. Als Beispiele sind zu nennen Erdalkali- oder Alkalimetallverbindungen (z.B. Hydroxide, Hydride, Oxide und Carbonate des Lithiums, Natriums, Kaliums, Magnesiums, Calciums und Bariums), Amidinbasen oder Guanidinbasen (z.B. 7-Methyl-1,5,7-triaza-bicyclo(4.4.0)dec-5-en (MTBD); Diazabicyclo(4.3.0)nonen (DBN), Diazabicyclo(2.2.2)octan (DABCO), 1,8-Diazabicyclo(5.4.0)undecen (DBU), Cyclohexyltetra-butyl-guanidin (CyTBG), Cyclohexyltetramethylguanidin (CyTMG), N,N,N,N-Tetramethyl-1,8 naphthalindiamin, Pentamethylpiperidin) und Amine, insbesondere tertiäre Amine, (z.B. Triethylamin, Trimethylamin, Tribenzylamin, Triisopropylamin, Tributylamin, Tricyclohexylamin, Triamylamin, Trihexylamin, N,N-Dimethylanilin, N,N-Dimethyl-toluidin, N,N-Dimethyl-p-aminopyridin, N-Methyl-pyrrolidin, N-Methyl-piperidin, N-Methyl-imidazol, N-Methyl-pyrazol, N-Methyl-morpholin, N-Methyl-hexamethylendiamin, Pyridin, 4-Pyrrolidinopyridin, 4-Dimethyl-amino-pyridin, Chinolin, α-Picolin, β-Picolin, Isochinolin, Pyrimidin, Acridin, N,N,N',N'-Tetra-methylendiamin, N,N,N',N'-Tetraethylendiamin, Chinoxalin, N-Propyl-diisopropylamin, N-Ethyl-diisopropylamin, N,N'-Dimethyl-cyclohexylamin, 2,6-Lutidin, 2,4-Lutidin oder Triethyldiamin).

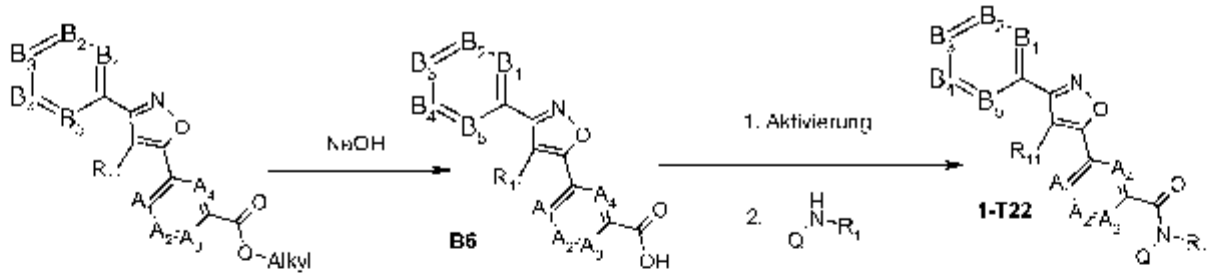
[0409] Als bevorzugtes basisches Reaktionshilfsmittel kann eine organische Base wie Triethylamin, Ethyl-diisopropylamin, Tri-n-butylamin, Pyridin und 4-Dimethylamino-pyridin verwendet werden; Des Weiteren können beispielsweise folgende Basen eingesetzt werden: Alkalimetallhydroxide wie z.B Natriumhydroxid und Kaliumhydroxid; Carbonate wie Natriumhydrogencarbonat und Kaliumcarbonat; Phosphate wie Dikalium-hydrogenphosphat und Tri natriumphosphat.

[0410] Die Reaktion kann in einem weiten Temperaturbereich ausgeführt werden. Gewöhnlich wird sie in einem Temperaturbereich von -78 bis 200 °C, bevorzugt bei Temperaturen zwischen -10 und 150 °C durchgeführt. Die Reaktion kann unter erhöhtem als auch vermindertem Druck ausgeführt werden. Bevorzugt wird sie aber unter Normaldruck durchgeführt. Die Reaktionszeiten liegen zwischen 0,1 und 72 Stunden, bevorzugt zwischen 1 und 24 Stunden.

[0411] Zur Durchführung der Reaktion werden z.B. 1-2 Moläquivalente der Verbindungen der Struktur (**W8**) und 1 Moläquivalent bis zu einem leichten Überschuss an Base pro Mol der Verbindung der Struktur (**W4**) in einem Lösungsmittel wie z.B. Dimethylformamid (DMF) umgesetzt

[0412] Die Stufen 3 und 4 zur Herstellung der Verbindungen der Struktur (**W5**) können in einzelnen Schritten oder auch als Eintopf-Reaktion durchgeführt werden.

Stufen 5, 6 Verseifung, Amidierung



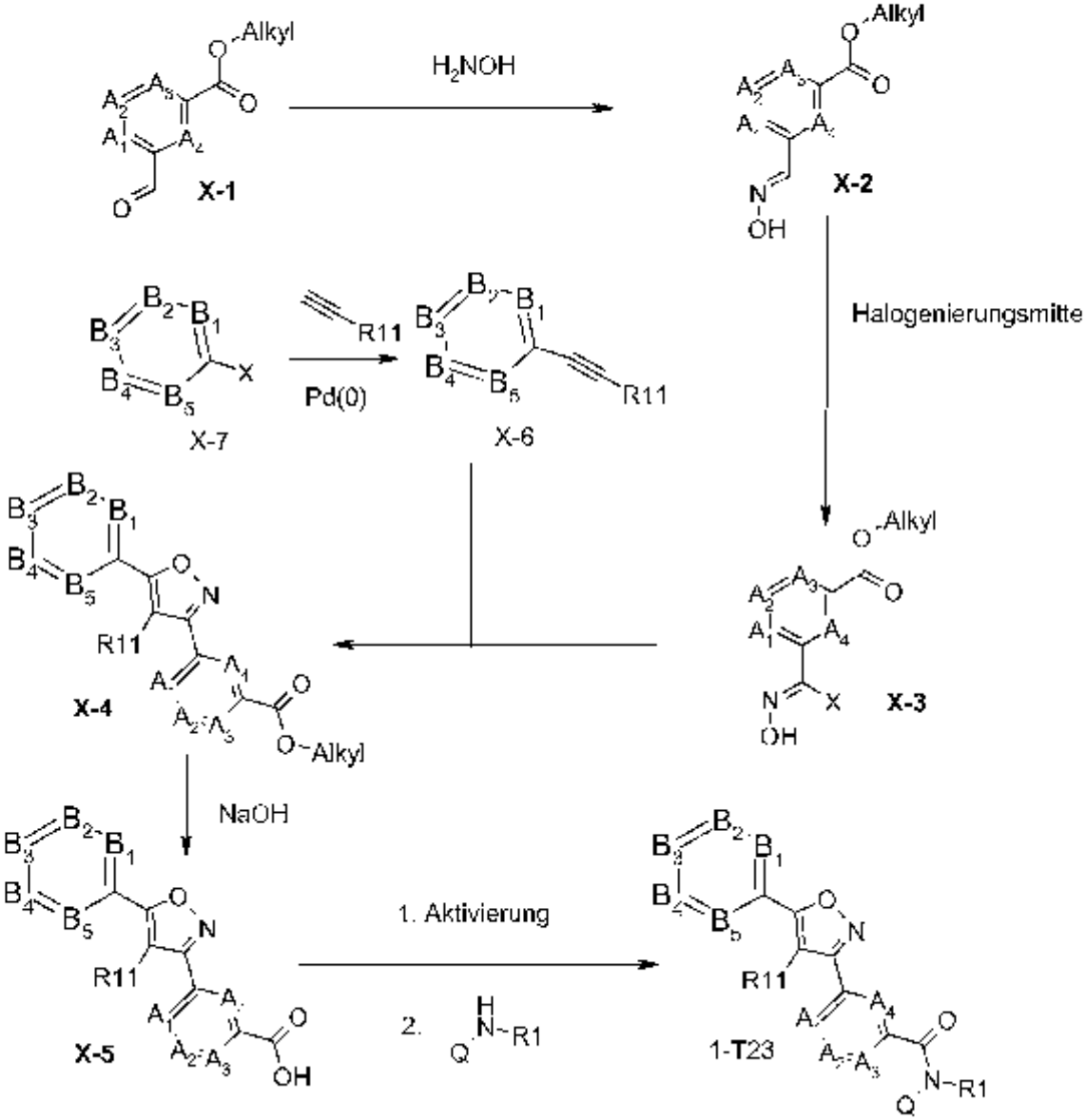
(**W5**) (**W6**) (**B7**) (**1-T22**)

[0413] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**I-T22**) können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien (**W6**) und (**W9**) hergestellt werden (WO2010051926; WO2010133312). Verbindungen der allgemeinen Struktur (**W6**) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur (**W5**) herstellen (WO2010051926; WO2010133312). Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen.

Verfahren I-T23

[0414] Die Verbindungen der Struktur (**I-T23**) können nach dem im Reaktionsschema 8 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

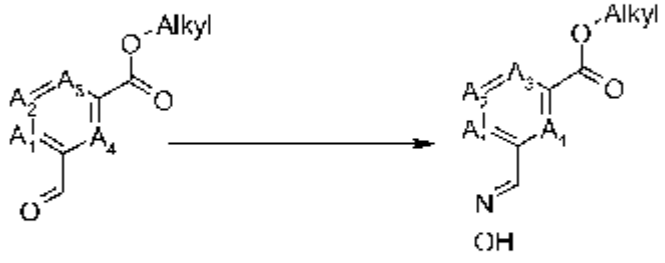
Reaktionsschema 8



[0415] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{-1} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht z. B. für Cl, Br, I.

Stufe 1 Oxim

[0416] Stufe 1 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (1-T23):

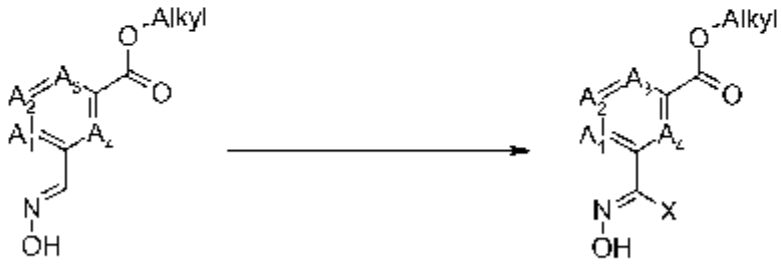


[0417] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(X-2)** können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur **(X-1)** hergestellt werden. Die Reste A^1-A^4 und Alkyl haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Ausgangsverbindungen der Struktur **(X-1)** sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien 3-Carbomethoxy-benzaldehyd, 3-Carbomethoxy-4-chlor-benzaldehyd, 3-Carbomethoxy-4-brom-benzaldehyd,3-Carbomethoxy-4-fluor-benzaldehyd, 3-Carbomethoxy-4-chlor-5-fluor-benzaldehyd bzw. die entsprechenden Ethylester genannt. Sie können z.B. nach den in WO 2010/011584, S. 19-20; Journal of Organic Chemistry, 76 (2011), S. 1062 – 1071; WO 2012/114268, S. 137; Journal of the American Chemical Society, 108 (1986), S. 452-461 beschriebenen Methoden hergestellt werden.

[0418] Die Herstellung der noch unbekannten Verbindungen **(X-2)** kann in Analogie zu den bekannten Verfahren zur Herstellung von Oximen aus Aldehyden erfolgen (H. Metzger in Houben-Weyl, Band X/4, S. 55 ff, Georg Thieme Verlag Stuttgart 1968). Die Verbindungen der Strukturformel **(X-2)** können als reine Stereoisomere, aber auch als Mischungen der Stereoisomere vorliegen.

Stufe 2 Hydroxamsäurechlorid

[0419] Stufe 2 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen **(I-T23)**:



[0420] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(X-3)** werden hergestellt indem man die Oxime der Struktur **(X-2)** mit halogenierenden Mitteln umsetzt.

[0421] Die Reste A_1-A_4 und Alkyl haben die oben beschriebenen Bedeutungen.

[0422] Typische Verbindungen der Struktur **(X-3)** sind z.B. Carbomethoxy-4-chlor-N-hydroxybenzimidoylchlorid, 3-Carbomethoxy-4-fluor- N-hydroxybenzimidoylchlorid, 3-Carbomethoxy-4-chlor-5-fluor- N-hydroxybenzimidoylchlorid, 3-Carbomethoxy-4-brom- N-hydroxybenzimidoylchlorid.

[0423] Geeignete halogenierende Verbindungen sind dem Fachmann bekannt wie z.B. Chlor, Brom, Iod, N-Chlorsuccinimid, N-Bromsuccinimid, N-Iodsuccinimid, 1,3-Dichlor-5,5-dimethylhydantoin, 1,3-

Dibrom-5,5-dimethylhydantoin, Benzyltrimethylammoniumtetrachloroiodat und Natriumhypochlorit. Bevorzugt werden chlorierende Reagenzien eingesetzt.

[0424] Als Verdünnungs- bzw. Lösungsmittel zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren kommen grundsätzlich alle unter den spezifischen Reaktionsbedingungen inerten organischen Lösungsmittel in Frage. Als Beispiele sind zu nennen: Halogenkohlenwasserstoffe (z.B. Chlorkohlenwasserstoffe, wie Tetrachylen, Tetrachlorethan, Dichlorpropan, Methylenchlorid, Dichlorbutan, Chloroform, Tetrachlorkohlenstoff, Trichlorethan, Trichlorethylen, Pentachlorethan, Difluorbenzol, 1,2-Dichlorethan, Chlorbenzol, Brombenzol, Dichlorbenzol, Chlortoluol, Trichlorbenzol), Alkohole (z.B. Methanol, Ethanol, Isopropanol, Butanol), Ether (z.B. Ethylpropylether, Methyl-tert-butylether, n-Butylether, Anisol, Phenetol, Cyclohexylmethylether, Dimethylether, Diethylether, Dipropylether, Diisopropylether, Di-n-butylether, Diisobutylether, Diisoamylether, Ethylenglycoldimethylether, Tetrahydrofuran, Dioxan, Dichlordiethylether und Polyether des Ethylenoxids und/oder Propylenoxids), Amine (z.B. Trimethyl-, Triethyl-, Tripropyl-, Tributylamin, N-Methylmorpholin, Pyridin und Tetramethylendiamin), Nitrokohlenwasserstoffe (z.B. Nitromethan, Nitroethan, Nitropropan, Nitrobenzol, Chlornitrobenzol, o-Nitrotoluol; Nitrile wie Acetonitril, Propionitril, Butyronitril, Isobutyronitril, Benzonitril, m-Chlorbenzonitril, Tetrahydrothiophendioxid, Dimethylsulfoxid, Tetramethylensulfoxid, Dipropylsulfoxid, Benzylmethylsulfoxid, Diisobutylsulfoxid, Dibutylsulfoxid, Diisoamylsulfoxid, Sulfone (z.B. Dimethyl-, Diethyl-, Dipropyl-, Dibutyl-, Diphenyl-, Dihexyl-, Methylethyl-, Ethylpropyl-, Ethylisobutyl- und Pentamethylensulfon), aliphatische, cycloaliphatische oder aromatische Kohlenwasserstoffe (z.B. Pentan, Hexan, Heptan, Oktan, Nonan und technische Kohlenwasserstoffe), ferner sogenannte "White Spirits" mit Komponenten mit Siedepunkten im Bereich von beispielsweise 40 °C bis 250 °C, Cymol, Benzinfraktionen innerhalb eines Siedeintervalles von 70°C bis 190 °C, Cyclohexan, Methylcyclohexan, Petrolether, Ligroin, Octan, Benzol, Toluol, Chlorbenzol, Brombenzol, Nitrobenzol, Xylol, Ester (z.B. Methyl-, Ethyl-, Butyl-, Isobutylacetat, Dimethyl-, Dibutyl-, Ethylencarbonat); Amide (z.B. Hexamethylenphosphorsäuretriamid, Formamid, N-Methyl-formamid, N,N-Dimethyl-formamid, N,N-Dipropyl-formamid, N,N-Dibutyl-formamid, N-Methyl-pyrrolidin, N-Methyl-caprolactam, 1,3-Dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, Octylpyrrolidon, Octylcaprolactam, 1,3-Dimethyl-2-imidazolindion, N-Formyl-piperidin, N,N' 1,4-Diformyl piperazin) und Ketone (z.B. Aceton, Acetophenon, Methylethylketon, Methylbutylketon).

[0425] Als bevorzugtes Verdünnungsmittel kann jedes Lösungsmittel verwendet werden, das die Reaktion nicht beeinträchtigt, wie zum Beispiel Wasser. In Frage kommen aromatische Kohlenwasserstoffe wie Benzol, Toluol, Xylol oder Chlorbenzol; halogenierte Kohlenwasserstoffe wie Dichlormethan, Chloroform, 1,2-Dichlorethan oder Tetrachlorkohlenwasserstoff, offenkettige oder zyklische Ether wie Diethylether, Dioxan, Tetrahydrofuran oder 1 ,2-Dimethoxyethan; Ester wie Ethylacetat und Butylacetat; Ketone wie zum Beispiel Aceton, Methyl-isobutylketon und Cyclohexanon; Amide wie Dimethylformamid und Dimethylacetamid, N-Methyl-pyrrolidinon; Nitrile

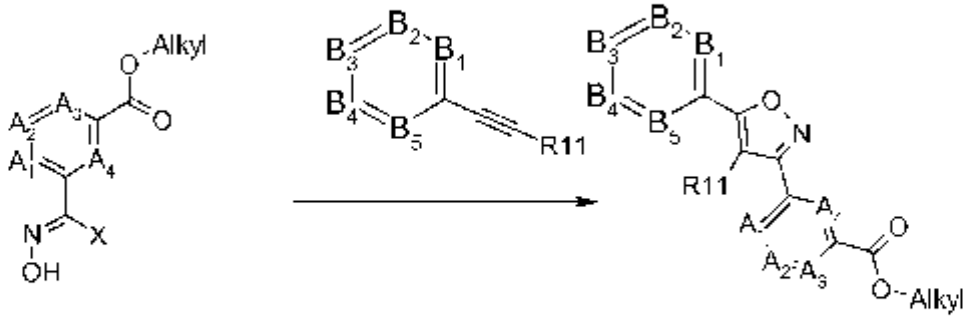
wie Acetonitril oder Propionitril; und andere inerte Lösungsmittel wie 1,3-Dimethyl-2- imidazolidinon; die Lösungsmittel können allein oder in Kombination von 2 oder mehr eingesetzt werden.

[0426] Die Reaktion kann in einem weiten Temperaturbereich ausgeführt werden. Gewöhnlich wird sie in einem Temperaturbereich von -78 bis 200 °C, bevorzugt bei Temperaturen zwischen -10 und 150 °C durchgeführt. Die Reaktion kann unter erhöhtem als auch vermindertem Druck ausgeführt werden. Bevorzugt wird sie aber unter Normaldruck durchgeführt. Die Reaktionszeiten liegen zwischen 0,1 und 72 Stunden, bevorzugt zwischen 1 und 24 Stunden.

[0427] Zur Durchführung der Reaktion werden 1 bis 3 Mol, bevorzugt 1 bis 1,5 Mol an Halogenierungsmittel pro Mol der Verbindung der Struktur **(X-2)** in einem Lösungsmittel wie z.B. Dimethylformamid (DMF) umgesetzt

Stufe 3 Ringschluss

[0428] Stufe 3 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen **(I-T23):**



X-3 X-6 X-4

[0429] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(X-4)** werden hergestellt indem man die Hydroxamsäurechloride der Struktur **(X-3)** mit Acetylenen der Struktur **(X-6)** umsetzt.

[0430] Die Reste A^1-A^4, B^1-B^5, R^{11} und Alkyl haben die oben beschriebenen Bedeutungen.

[0431] Typische Verbindungen der Struktur **(X-3)** sind z.B. Carbomethoxy-4-chlor-N-hydroxy-benzimidoylchlorid, 3 Carbomethoxy 4 fluor N hydroxy benzimidoylchlorid, 3 Carbomethoxy 4 chlor 5-fluor-N-hydroxy-benzimidoylchlorid, 3-Carbomethoxy-4-brom-N-hydroxy-benzimidoylchlorid.

[0432] Als Verdünnungs- bzw. Lösungsmittel zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren kommen grundsätzlich alle unter den spezifischen Reaktionsbedingungen inerten organischen Lösungsmittel in Frage. Als Beispiele sind zu nennen: Halogenkohlenwasserstoffe (z.B. Chlorkohlenwasserstoffe, wie Tetraethylen, Tetrachlorethan, Dichlorpropan, Methylenchlorid, Dichlorbutan, Chloroform, Tetrachlorkohlenstoff, Trichlorethan, Trichlorethylen, Pentachlorethan, Difluorbenzol, 1,2-Dichlorethan, Chlorbenzol, Brombenzol, Dichlorbenzol, Chlortoluol, Trichlorbenzol), Alkohole (z.B. Methanol, Ethanol, Isopropanol, Butanol), Ether (z.B. Ethylpropylether, Methyl-tert-butylether, n-Butylether, Anisol, Phenetol, Cyclohexylmethylether, Dimethylether,

Diethylether, Dipropylether, Diisopropylether, Di-n-butylether, Diisobutylether, Diisoamylether, Ethylenglycoldimethylether, Tetrahydrofuran, Dioxan, Dichlordiethylether und Polyether des Ethylenoxids und/oder Propylenoxids), Amine (z.B. Trimethyl-, Triethyl-, Tripropyl-, Tributylamin, N-Methylmorpholin, Pyridin und Tetramethylendiamin), Nitrokohlenwasserstoffe (z.B. Nitromethan, Nitroethan, Nitropropan, Nitrobenzol, Chlornitrobenzol, o-Nitrotoluol; Nitrile wie Acetonitril, Propionitril, Butyronitril, Isobutyronitril, Benzonitril, m-Chlorbenzonitril, Tetrahydrothiophendioxid, Dimethylsulfoxid, Tetramethylensulfoxid, Dipropylsulfoxid, Benzylmethylsulfoxid, Diisobutylsulfoxid, Dibutylsulfoxid, Diisoamylsulfoxid, Sulfone (z.B. Dimethyl-, Diethyl-, Dipropyl-, Dibutyl-, Diphenyl-, Dihexyl-, Methylethyl-, Ethylpropyl-, Ethylisobutyl- und Pentamethylensulfon), aliphatische, cycloaliphatische oder aromatische Kohlenwasserstoffe (z.B. Pentan, Hexan, Heptan, Oktan, Nonan und technische Kohlenwasserstoffe), ferner sogenannte "White Spirits" mit Komponenten mit Siedepunkten im Bereich von beispielsweise 40 °C bis 250 °C, Cymol, Benzinfraktionen innerhalb eines Siedeintervalles von 70 °C bis 190 °C, Cyclohexan, Methylcyclohexan, Petrolether, Ligroin, Octan, Benzol, Toluol, Chlorbenzol, Brombenzol, Nitrobenzol, Xylol, Ester (z.B. Methyl-, Ethyl-, Butyl-, Isobutylacetat, Dimethyl-, Dibutyl-, Ethylencarbonat); Amide (z.B. Hexamethylenphosphorsäuretriamid, Formamid, N-Methyl-formamid, N,N-Dimethyl-formamid, N,N-Dipropyl-formamid, N,N-Dibutyl-formamid, N-Methyl-pyrrolidin, N-Methyl-caprolactam, 1,3-Dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-2(1H)-pyrimidin, Octylpyrrolidon, Octylcaprolactam, 1,3-Dimethyl-2-imidazolindion, N-Formyl-piperidin, N,N'-1,4-Diformyl-piperazin) und Ketone (z.B. Aceton, Acetophenon, Methylethylketon, Methylbutylketon).

[0433] Als bevorzugtes Verdünnungsmittel kann jedes Lösungsmittel verwendet werden, das die Reaktion nicht beeinträchtigt, wie zum Beispiel Wasser. In Frage kommen aromatische Kohlenwasserstoffe wie Benzol, Toluol, Xylol oder Chlorbenzol; halogenierte Kohlenwasserstoffe wie Dichlormethan, Chloroform, 1,2-Dichlorethan oder Tetrachlorkohlenwasserstoff, offenkettige oder zyklische Ether wie Diethylether, Dioxan, Tetrahydrofuran oder 1,2-Dimethoxyethan; Ester wie Ethylacetat und Butylacetat; Ketone wie zum Beispiel Aceton, Methyl-isobutylketon und Cyclohexanon; Amide wie Dimethylformamid und Dimethylacetamid, N-Methyl-pyrrolidinon; Nitrile wie Acetonitril oder Propionitril; und andere inerte Lösungsmittel wie 1,3-Dimethyl-2- imidazolidinon; die Lösungsmittel können allein oder in Kombination von 2 oder mehr eingesetzt werden.

[0434] Bei den Umsetzungen der Verbindungen der Struktur (X-3) mit den Acetylenen der Struktur (X-6) können Basen zugesetzt werden. Als Beispiele sind zu nennen Erdalkali- oder Alkalimetallverbindungen (z.B. Hydroxide, Hydride, Oxide und Carbonate des Lithiums, Natriums, Kaliums, Magnesiums, Calciums und Bariums), Amidinbasen oder Guanidinbasen (z.B. 7-Methyl-1,5,7-triaza-bicyclo(4.4.0)dec-5-en (MTBD); Diazabicyclo(4.3.0)nonen (DBN), Diazabicyclo(2.2.2)octan (DABCO), 1,8-Diazabicyclo(5.4.0)undecen (DBU), Cyclohexyltetra-butyl-guanidin (CyTBG), Cyclohexyltetramethylguanidin (CyTMG), N,N,N,N-Tetramethyl-1,8-naphthalindiamin, Pentamethylpiperidin) und Amine, insbesondere tertiäre Amine, (z.B. Triethylamin, Trimethylamin,

Tribenzylamin, Triisopropylamin, Tributylamin, Tricyclohexylamin, Triamylamin, Trihexylamin, N,N-Dimethylanilin, N,N-Dimethyl-toluidin, N,N-Dimethyl-p-aminopyridin, N-Methyl-pyrrolidin, N-Methyl-piperidin, N-Methyl-imidazol, N-Methyl-pyrazol, N-Methyl-morpholin, N-Methyl-hexamethylendiamin, Pyridin, 4-Pyrrolidinopyridin, 4-Dimethyl-amino-pyridin, Chinolin, α-Picolin, β-Picolin, Isochinolin, Pyrimidin, Acridin, N,N,N',N'-Tetra-methylendiamin, N,N,N',N'-Tetraethylendiamin, Chinoxalin, N-Propyl-diisopropylamin, N-Ethyl-diisopropylamin, N,N'-Dimethyl-cyclohexylamin, 2,6-Lutidin, 2,4-Lutidin oder Triethyldiamin).

[0435] Als bevorzugtes basisches Reaktionshilfsmittel kann eine organische Base wie Triethylamin, Ethyl-diisopropylamin, Tri-n-butylamin, Pyridin und 4-Dimethylamino-pyridin verwendet werden; Des Weiteren können beispielsweise folgende Basen eingesetzt werden: Alkalimetallhydroxide wie z.B Natriumhydroxid und Kaliumhydroxid; Carbonate wie Natriumhydrogencarbonat und Kaliumcarbonat; Phosphate wie Dikalium-hydrogenphosphat und Tri-natriumphosphat.

[0436] Die Reaktion kann in einem weiten Temperaturbereich ausgeführt werden. Gewöhnlich wird sie in einem Temperaturbereich von -78 bis 200 °C, bevorzugt bei Temperaturen zwischen -10 und 150 °C durchgeführt. Die Reaktion kann unter erhöhtem als auch vermindertem Druck ausgeführt werden. Bevorzugt wird sie aber unter Normaldruck durchgeführt. Die Reaktionszeiten liegen zwischen 0,1 und 72 Stunden, bevorzugt zwischen 1 und 24 Stunden.

[0437] Zur Durchführung der Reaktion werden z.B. 1-2 Moläquivalente der Verbindungen der Struktur **(X-6)** und 1 Moläquivalent bis zu einem leichten Überschuss an Base pro Mol der Verbindung der Struktur **(X-3)** in einem Lösungsmittel wie z.B. Dimethylformamid (DMF) umgesetzt

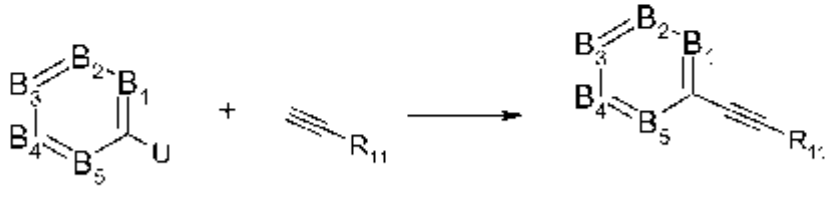
[0438] Die Stufen 2 und 3 zur Herstellung der Verbindungen der Struktur **(X-4)** können in einzelnen Schritten oder auch als Eintopf Reaktion durchgeführt werden.

Stufen 4, 5 Verseifung, Amidierung

[0439] Die letzten Stufen (Stufen 4 und 5) zur Herstellung der erfindungsgemäßen Verbindungen (I-T23), Hydrolyse des Carbonsäureesters **(X-4)** und Amidierung der Carbonsäure X-5, können nach den weiter oben beschriebenen allgemeinen Verfahren (Reaktionsschema) der Ester Hydrolyse und Amidierung der Carbonsäure durchgeführt werden.

Stufe 6 Herstellung der Acetylene

[0440] Stufe 6 Herstellung der Ausgangsverbindungen der Struktur **(X-6)**



X-7 X-8 X-6

[0441] Die Reste B_1-B_5, R^{11} und U haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht z.B. für Brom, Iod oder Triflat.

[0442] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(X-6)** können in Analogie zu literaturbekannten Methoden (Chinchilla, Rafael et al., Chemical Society Reviews (2011), 40(10), S. 5084-5121, Chinchilla, Rafael et al., Chemical Reviews (Washington, DC, United States) (2007), 107(3), S. 874-922) aus den Ausgangsmaterialien der Struktur **(X-7)** unter Katalyse mittels Übergangsmetall Katalysatoren mit Palladium und Kupfer hergestellt werden.

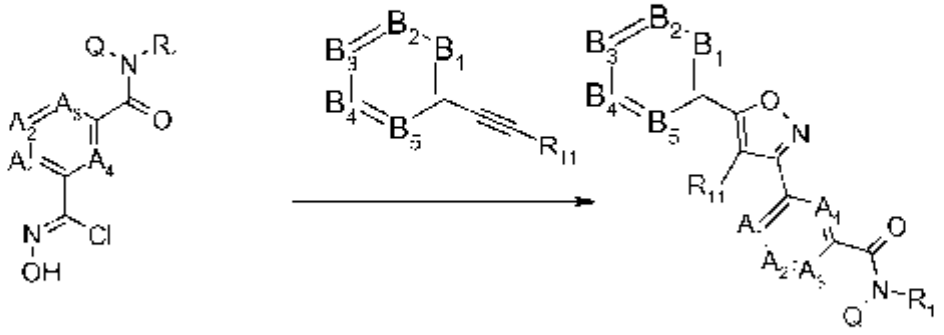
[0443] Ausgangsverbindungen der Struktur **(X-7)** sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele seien 2-Brom-1,3-dichlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1-ethyl-3-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Brom-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Brom-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Brom-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol, 2-Brom-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol genannt. Sie können z.B. nach den in EP 1 253 128, Seiten 8-10 beschriebenen Methoden hergestellt werden.

[0444] Ausgangsverbindungen der Struktur **(X-8)** sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Für den Fall R^5=H kann in diesem Verfahren eine Schutzgruppe statt R^6 verwendet werden. Geeignete Schutzgruppen sind zum Beispiel Trimethylsilyl, Triethylsilyl und Dimethylhydroxymethyl. Weitere geeignete Schutzgruppen und Methoden zum Einbringen und Abspalten sind in der Literatur beschrieben [siehe Auflistungen in Greene's protective groups in organic synthesis, 4. Edition, P. G. M. Wuts, T. W. Greene, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007, Seite 927-933.]

Stufe 3 Alternativ: Kupplung mit Amiden

[0445] Alternativ können die erfindungsgemäßen Verbindungen **(I-T23)** durch das allgemeine Darstellungsverfahren B (Reaktionsschema 9) dargestellt werden.

Reaktionsschema 9



X-9 X-6 X-4

[0446] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen.

[0447] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur **(X-4)** werden hergestellt indem man die Hydroxamsäurechloride der Struktur **(X-9)** mit Acetylenen der Struktur **(X-6)** umsetzt.

[0448] Die Herstellung der Verbindungen der Struktur **(X-6)** ist weiter oben beschrieben. Die Herstellung der Verbindungen der Struktur **(X-9)** erfolgt analog der oben beschriebenen Herstellung der Verbindungen der Struktur **(X-3).**

[0449] Typische Verbindungen der Struktur **(X-3)** sind z.B. 4-Chlor-3-(cyclopropylcarbamoyl)-N-hydroxy-benzimidoyl chlorid, 3-(Cyclopropylcarbamoyl)-4-fluor-N-hydroxy-benzimidoyl chlorid, 4-Chlor-3-(cyclopropylcarbamoyl)- 5-fluor-N-hydroxy-benzimidoyl chlorid, 4-Brom-3-(cyclopropylcarbamoyl)-N-hydroxy-benzimidoyl chlorid.

[0450] (I-T24): Verbindungen der Formel (I-24) können z. B. analog zu Furukawa, Hirotoshi et al. Heterocycles, 79 (2009), S. 303-309; US 6,545,009, S. 34, Example 111 hergestellt werden.

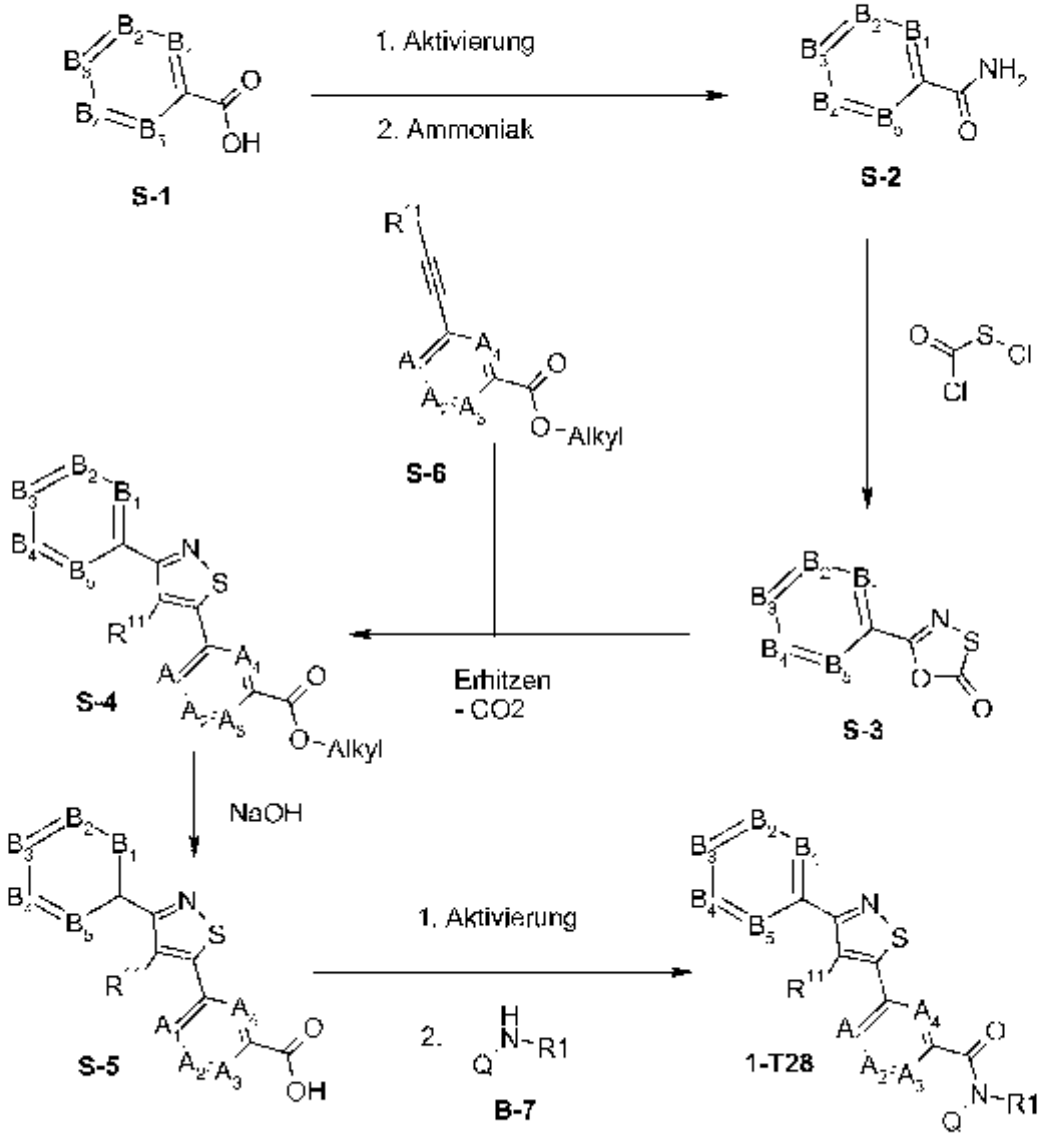
[0451] (I-T25): Verbindungen der Formel (I-25) können z. B. analog zu WO 2004/14366, S. 113 hergestellt werden.

[0452] (I-T26): Verbindungen der Formel (I-26) können z. B. analog zu Chihiro, Masatoshi et al., Journal of Medicinal Chemistry, 38 (1995), S. 353-358 hergestellt werden.

[0453] (I-T27): Verbindungen der Formel (I-27) können z. B. analog zu US 6,545,009, S. 31, Beispiel 74 hergestellt werden.

[0454] Die Verbindungen der Struktur **(I-T28)** können nach dem im Reaktionsschema 10 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 10

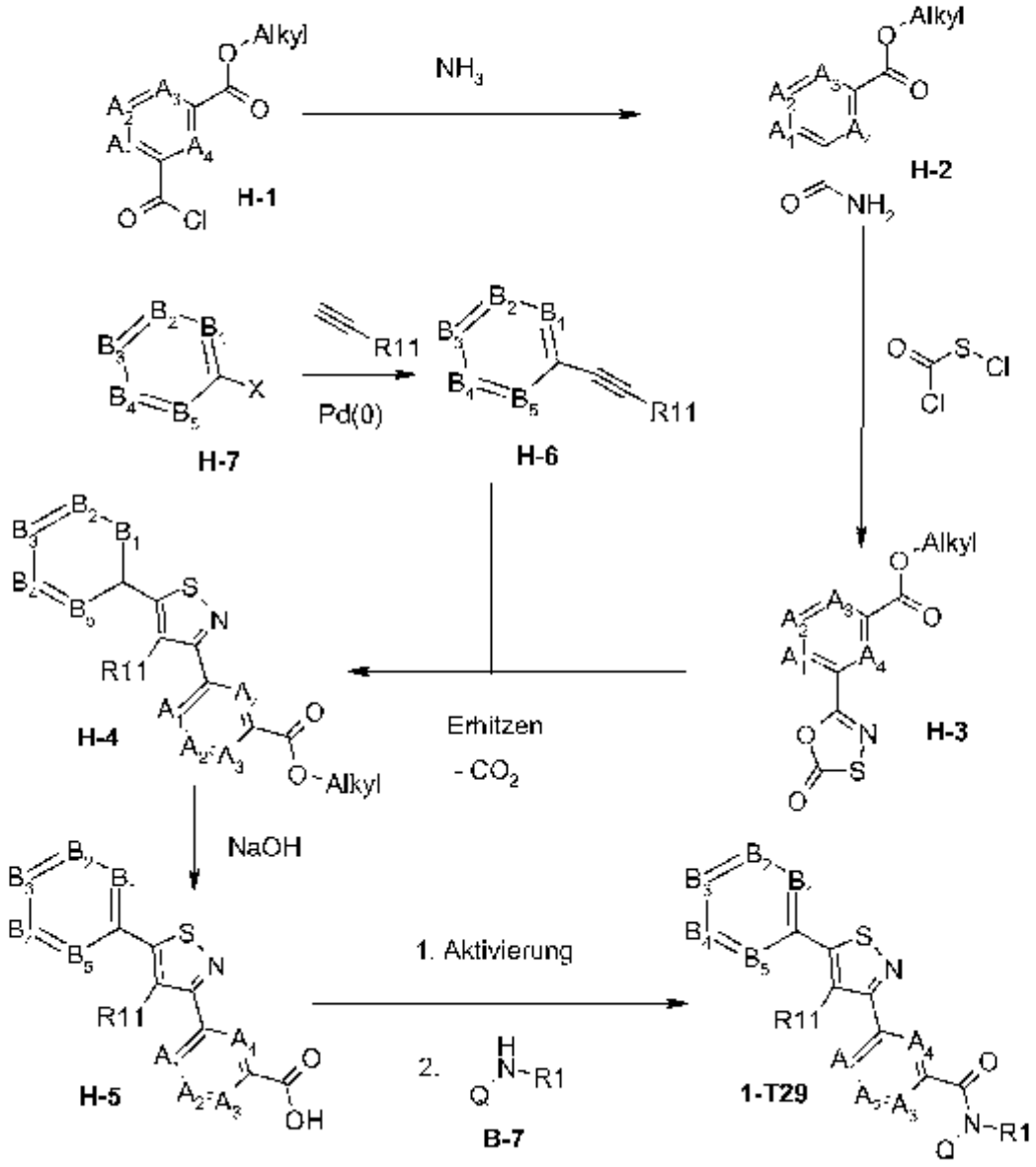


[0455] Die Reste A^1-A^4, B^1-B^5, Alkyl, Q, R^{11} und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Ausgangsverbindungen der Struktur (**S-1**) sind bekannt (z.B. US 5,739,083 S. 10, oder WO 2012/175474, S. 117-118) oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Die Reaktionen werden unter den in der Literatur angegebenen Bedingungen durchgeführt (z.B. Abdelrahman S. Mayhoub et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) S. 2427-2434 oder WO 2009/023372).

Verfahren I-T29

[0456] Die Verbindungen der Struktur (**1-T29**) können nach dem im Reaktionsschema 11 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 3



[0457] Die Reste A^1-A^4, B^1-B^5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Ausgangsverbindungen der Struktur **(II-1)** und **(II-7)** sind bekannt (z.B. US 3,725,417 S. 7 oder WO 2012/175474, S. 117-118) oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden. Die Reaktionen werden unter den in der Literatur angegebenen Bedingungen durchgeführt (z.B. Abdelrahman S. Mayhoub, et al., Bioorg. Med. Chem. 20 (2012) S. 2427-2434 oder WO 2009/023372).

Verfahren I-T30

[0458] (I-T30): Verbindungen der Formel (I-T30) können z. B. analog zu WO 2011/9484, S. 104; oder Gamber, Gabriel G. et al., Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), S. 1447-1451 hergestellt werden.

[0459] (I-T31): Verbindungen der Formel (I-T31) können z. B. analog zu Bishop, Brian C. et al., Synthesis, (2004), S. 43-52; oder Heller, Stephen T. et al., Organic Letters, 8 (2006), S. 2675-2678; oder Baddar, F.G. et al. Journal of Heterocyclic Chemistry, 15 (1978), S. 385-393 hergestellt werden.

[0460] (I-T32): Verbindungen der Formel (I-T32) können z. B. analog zu Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), S. 4911-4920 hergestellt werden.

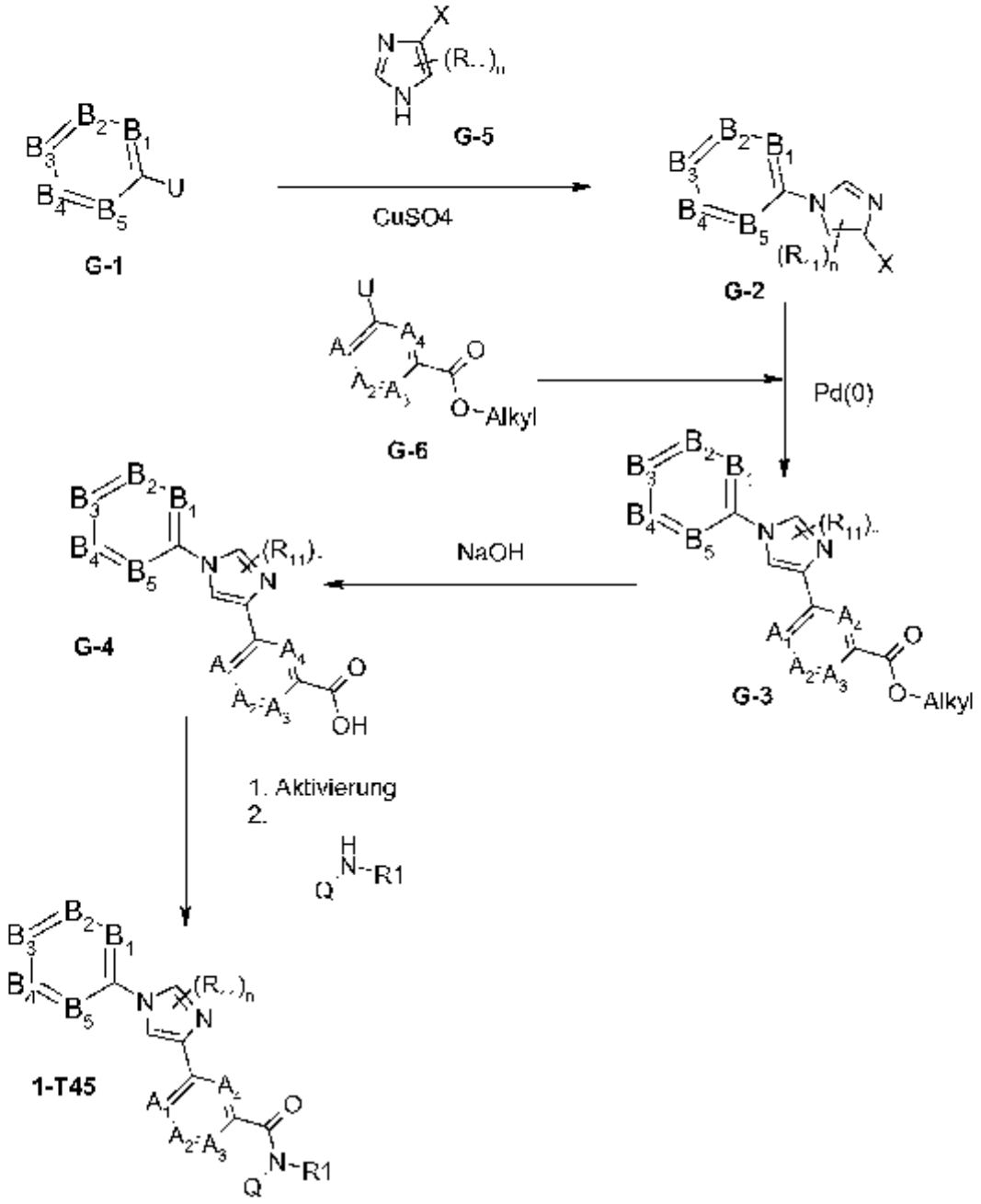
[0461] (I-T33): Verbindungen der Formel (I-T33) können z. B. analog zu Joo, Jung Min et al., Journal of Organic Chemistry, 75 (2010), S. 4911-4920; oder WO 2004/91610, S. 70 hergestellt werden.

[0462] (I-T34): Verbindungen der Formel (I-T34) können z. B. analog zu Al-Tel, Taleb et al., Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), S. 8373-8385 hergestellt werden.

[0463] (I-T35): Verbindungen der Formel (I-T35) können z. B. analog zu Yang, Shu-wie et al., Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, 21 (2011), S. 182-185; oder Kennedy, Andrew J. et al, Journal of Medicinal Chemistry, 54 (2011), S. 3524-3548 hergestellt werden.

[0464] Die Verbindungen der Struktur (I-T45) können nach dem im Reaktionsschema 12 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 12



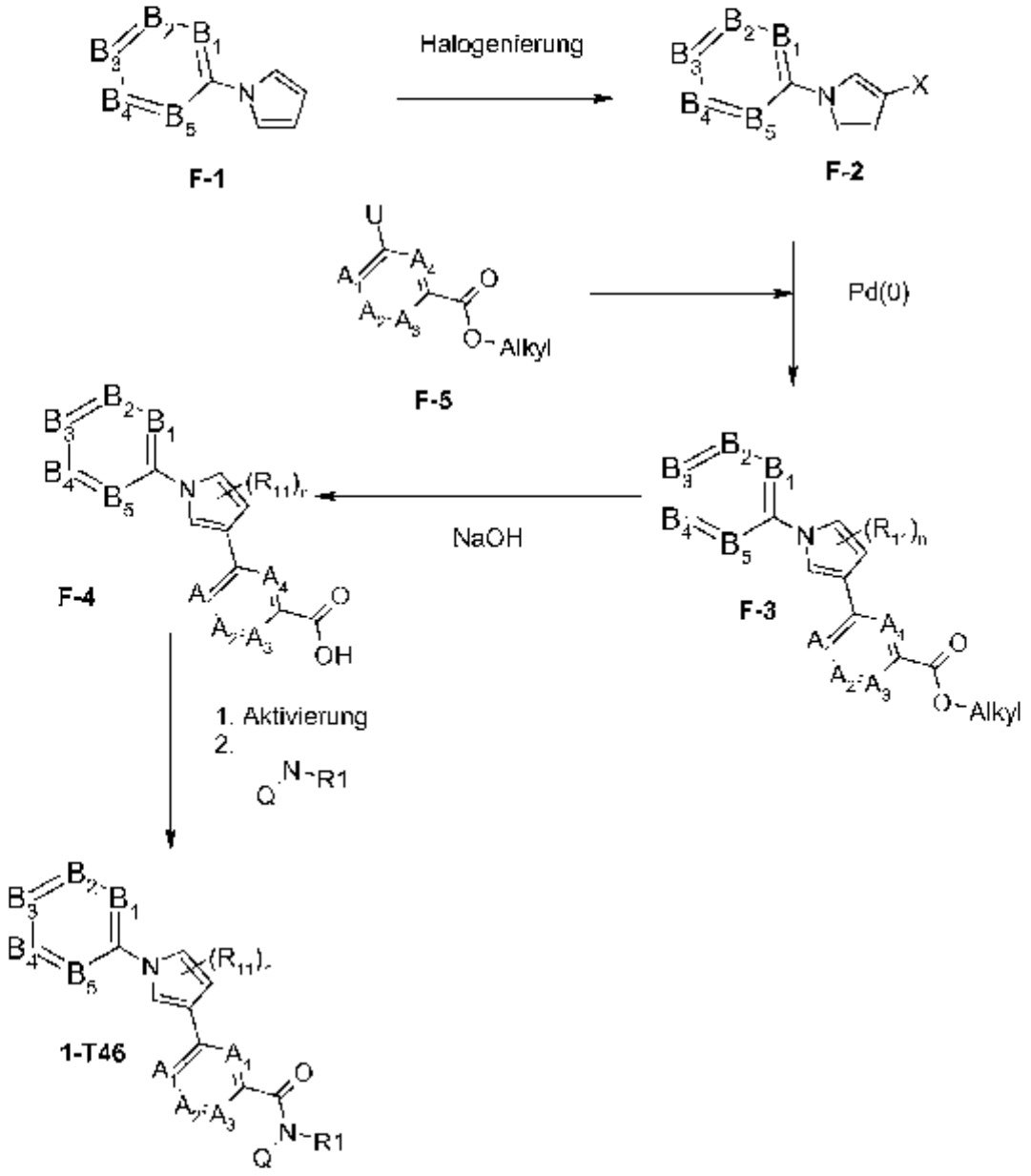
[0465] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat, X steht für Brom, Iod oder Triflat. Ausgangsverbindungen der Struktur (**G-1**), (**G-5**) und (**G6**) sind bekannt oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden.

[0466] Die Durchführung der Reaktionen kann nach den in der Literatur beschriebenen Verfahren erfolgen (siehe z.B. Stufe G1 >G2 US 2013/0012532, S. 29).

Verfahren 1-T46

[0467] Die Verbindungen der Struktur (1-T46) können nach dem im Reaktionsschema 13 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 13



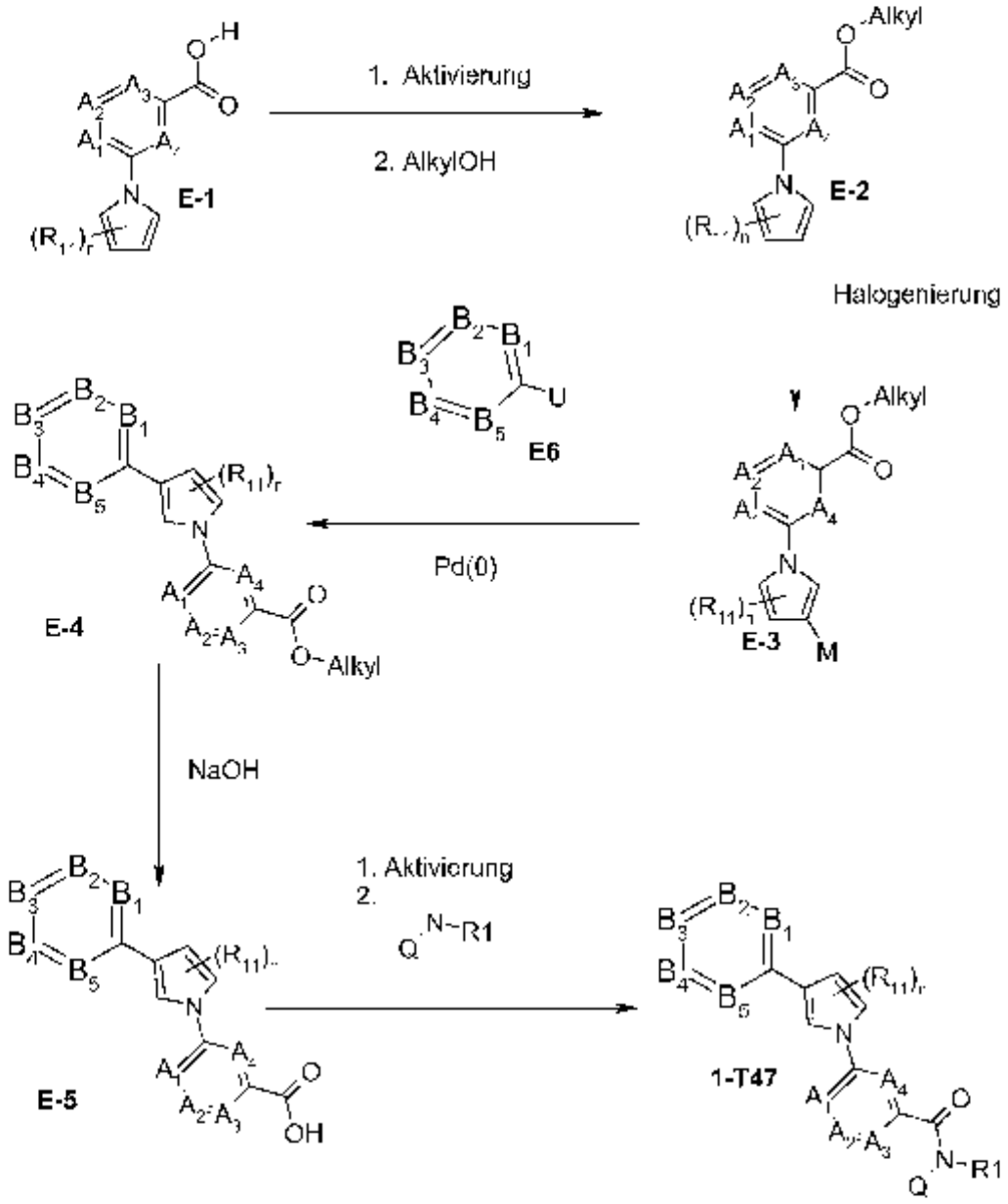
[0468] Die Reste A_1-A_4, B, B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat. X steht für Brom, Iod oder Triflat. Ausgangsverbindungen der Struktur **(F-1)** und **(F-5)** sind bekannt (z.B. F-1: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), S. 1761-1764), oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden.

[0469] Die Durchführung der Reaktionen kann nach den in der Literatur beschriebenen Verfahren erfolgen z.B. US2009/209476, S. 18-19.

Verfahren I-T47

[0470] Die Verbindungen der Struktur (**I-T47**) können nach dem im Reaktionsschema 14 angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 14



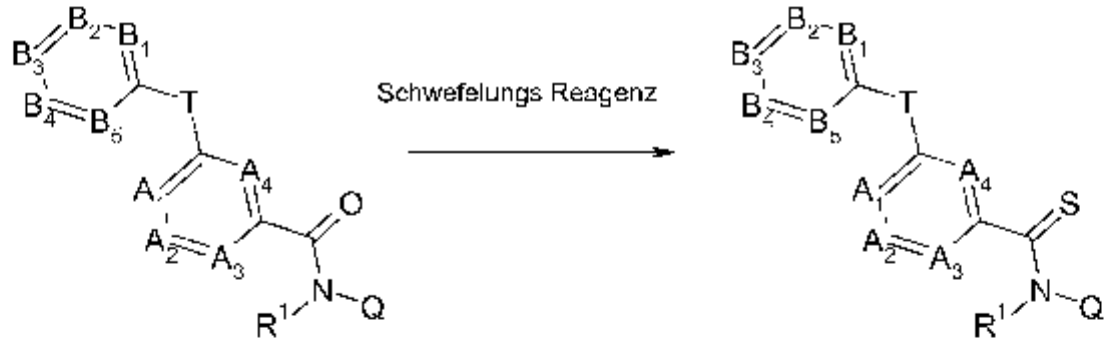
[0471] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht für Brom, Iod oder Triflat, wenn M für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat steht. U steht für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat, wenn M für Brom, Iod oder Triflat steht. Ausgangsverbindungen der Struktur (**E-1**) und (**E-6**) sind bekannt (z.B. Liu, Kun et al., Journal of Medicinal Chemistry, 51 (2008), S. 7843-7854; oder Cornet, Stephanie M. et al., Transactions, (2003), S. 4395-4405), oder können nach bekannten Methoden hergestellt werden.

[0472] Die Durchführung der Reaktionen kann nach den in der Literatur beschriebenen Verfahren erfolgen z.B. US 2009/709476, S. 18-19.

Verfahren zur Herstellung von Thioamiden

[0473] Die Verbindungen der Struktur (**Ii**) können nach dem im Reaktionsschema 15 angegebenen Verfahren aus Verbindungen der Struktur (**Ih**) durch Umsetzung mit Schwefel übertragenden Reagenzien hergestellt werden.

Reaktionsschema 15



(Ih) (2) (Ii)

[0474] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, T, und R^1 haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Als Schwefelungs Reagenz (**2**) kann z. B. P_2S_{10} oder Lawessons Reagenz (2,4-Bis(4-methoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan-2,4-disulfid) verwendet werden.

[0475] Die Herstellung der Verbindungen (**Ih**) ist weiter oben beschrieben.

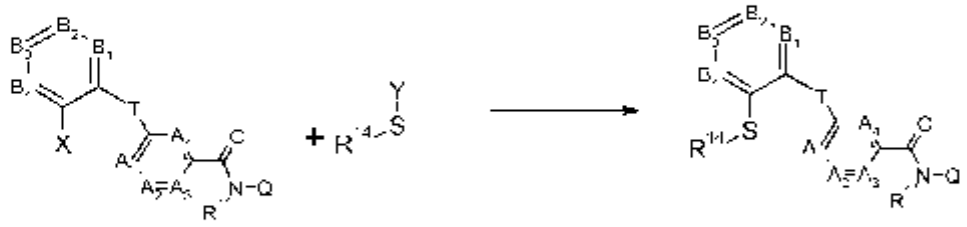
[0476] Die Schwefelungs Reagenzien sind kommerziell erhältlich oder können nach dem Fachmann bekannten Verfahren bzw. in Analogie zu diesen Verfahren hergestellt werden.

[0477] Die Durchführung der Reaktion erfolgt in Analogie zu literaturbekannten Methoden zur Schwefelung von Carbonamiden (*z.B.* WO2012056372, S. 77; WO2003066050, S. 31).

Verfahren zur Darstellung von (Ik)

[0478] Die erfindungsgemäßen Verbindungen (**Ik**) können nach dem im Reaktionsschema 16 angegebenen Verfahren aus den Verbindungen (**Ij**) durch Umsetzung mit Schwefelverbindungen der Struktur (**Y-3**) hergestellt werden.

Reaktionsschema 16



(Ij) (Y-3) **(Ik)**

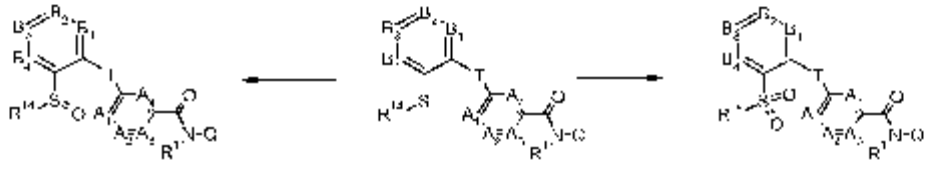
[0479] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_4, Alkyl, Q, R', n und R^{14} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht für eine geeignete Abgangsgruppe wie z.B. Fluor, Chlor, Brom oder Iod. R^{14} steht für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl. Y steht für Wasserstoff oder ein Alkalimetall wie z.B. Natrium oder Lithium.

[0480] Die Durchführung der Reaktion erfolgt in Analogie zu literaturbekannten Methoden zur Einführung von Alkylthioresten in Aromaten [z.B. Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Example 63, S. 97].

Verfahren zur Darstellung von (Ika) und (Ikb)

[0481] Die erfindungsgemäßen Verbindungen (Ika) bzw. (Ikb) können nach dem im Reaktionsschema 17 angegebenen Verfahren aus den Verbindungen der Struktur (Ik) durch Umsetzung mit oxidierenden Reagenzien hergestellt werden.

Reaktionsschema 17



(Ika) **(Ik)** **(Ikb)**

[0482] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_4, Alkyl, Q, R', n und R^{14} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. R^{14} steht für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl.

[0483] Die Herstellung der Verbindungen der Struktur (Ik) ist weiter oben beschrieben.

[0484] Als Oxidationsmittel können die dem Fachmann aus der Literatur bekannten Reagenzien zur Herstellung von Sulfoxiden und Sulfonen verwendet werden. Sie sind kommerziell erhältlich oder können nach dem Fachmann bekannten Verfahren bzw. in Analogie zu diesen Verfahren hergestellt

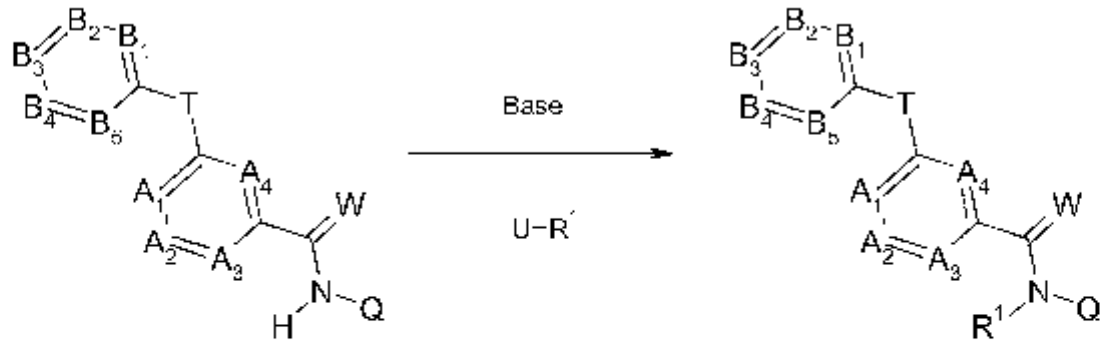
werden. Als Beispiele seien genannt: Wasserstoffperoxid, Peroxiessigsäure, 3-Chlorperbenzoesäure und Trifluorperoxiessigsäure.

[0485] Die Durchführung der Reaktion erfolgt in Analogie zu literaturbekannten Methoden zur Herstellung von Sulfoxiden und Sulfonen [Sulfoxidderivate: WO2006/097766; WO2005/019151; Sulfonderivate: WO2008/125214; WO2005/121087].

Verfahren zur Herstellung von N-Alkyl Verbindungen

[0486] Die Verbindungen der Struktur (I) können nach dem im Reaktionsschema 18 angegebenen Verfahren aus Verbindungen der Struktur (Im) durch Umsetzung mit Alkylierungmitteln hergestellt werden.

Reaktionsschema 18



(Im) (I)

[0487] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, , und Q haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht z. B. für Brom, Iod oder Triflat. R^1 steht für jeweils primäres oder sekundäres, gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Alkenyl, C_3-C_6-Alkinyl, C_4-C_7-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkoxycarbonyl, Aryl(C_1-C_3)-alkyl, Heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl. W steht für Sauerstoff.

[0488] Verbindungen der Struktur U-R´ sind kommerziell erhältlich oder literaturbekannt oder können in Analogie zu literaturbekannten Methoden hergestellt werden. Als Beispiele sind zu nennen: Methylchlorid, Methylbromid, Methyliodid, Dimethylsulfat, Methyltriflat, Ethylbromid, Ethyliodid, Diethylsulfat, und Ethyltriflat.

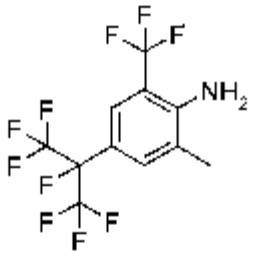
[0489] Die für die Reaktion verwendeten Basen sind kommerziell erhältlich. Als Beispiele sind zu nennen Erdalkali- oder Alkalimetallverbindungen (z.B. Hydroxide, Hydride, Oxide und Carbonate des Lithiums, Natriums, Kaliums, Magnesiums, Calciums und Bariums) wie z.B. Natriumhydrid, Natriumhydroxid und Kaliumhydroxid; Carbonate wie Natriumhydrogencarbonat und Kaliumcarbonat

[0490] Die Durchführung der Reaktion erfolgt in Analogie zu literaturbekannten Methoden zur *N*-Alkylierung sekundärer Amide (z. B. G.L. Gisele, A. Lüttringhaus, Synthesis (1971) S.266, Übersicht

siehe: B.C. Challis, J.A. Challis in: The Chemistry of Functional Groups, The Chemistry of Amides, S. Patai, J. Zabicky, editors, Interscience Publishers, London, 1970, S. 734 ff).

Herstellung des Ausgangsprodukts 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin

[0491] Das Ausgangsprodukt 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin der Struktur (**D-1a**) ist bisher in der Literatur noch nicht beschrieben. Die Herstellung kann nach 2 verschiedenen Verfahren durchgeführt werden.

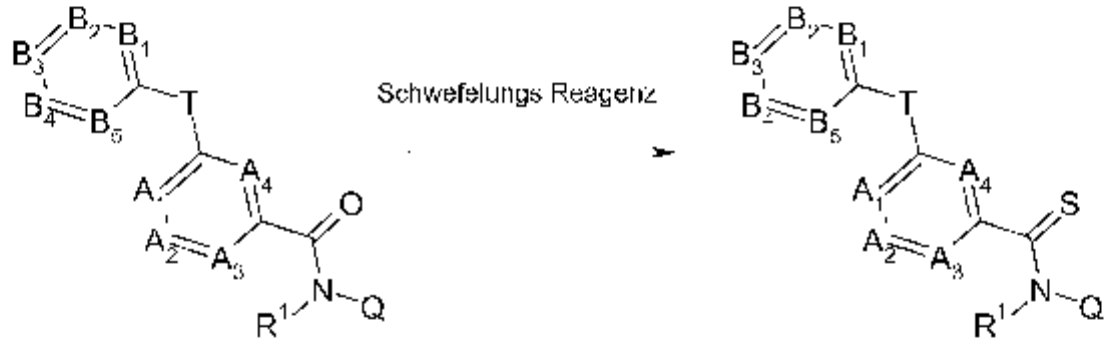


D-1a

Verfahren zur Herstellung von Thioamiden

[0492] Die Verbindungen der Struktur (**Ii**) können nach dem im Reaktionsschema 15 angegebenen Verfahren aus Verbindungen der Struktur (**Ih**) durch Umsetzung mit Schwefel übertragenden Reagenzien hergestellt werden.

Reaktionsschema 15



(Ih) (2) (Ii)

[0493] Die Reste A -A_4, B -B_5, Alkyl, Q, T, und R' haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Als Schwefelungs Reagenz (**2**) kann z. B. P_4S_{10} oder Lawessons Reagenz (2,4-Bis(4-methoxyphenyl) 1,3,2,4-dithiadiphosphetan-2,4-disulfid) verwendet werden.

[0494] Die Herstellung der Verbindungen (**Ih**) ist weiter oben beschrieben.

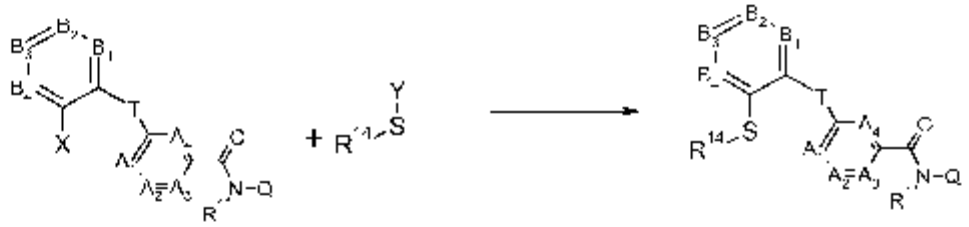
[0495] Die Schwefelungs Reagenzien sind kommerziell erhältlich oder können nach dem Fachmann bekannten Verfahren bzw. in Analogie zu diesen Verfahren hergestellt werden.

[0496] Die Durchführung der Reaktion erfolgt in Analogie zu literaturbekannten Methoden zur Schwefelung von Carbonamiden *(z.B.* WO2012056372, S. 77; WO2003066050, S. 31).

Verfahren zur Darstellung von (Ik)

[0497] Die erfindungsgemäßen Verbindungen (Ik) können nach dem im Reaktionsschema 16 angegebenen Verfahren aus den Verbindungen (Ij) durch Umsetzung mit Schwefelverbindungen der Struktur (Y-3) hergestellt werden.

Reaktionsschema 16



(Ij) (Y-3) (Ik)

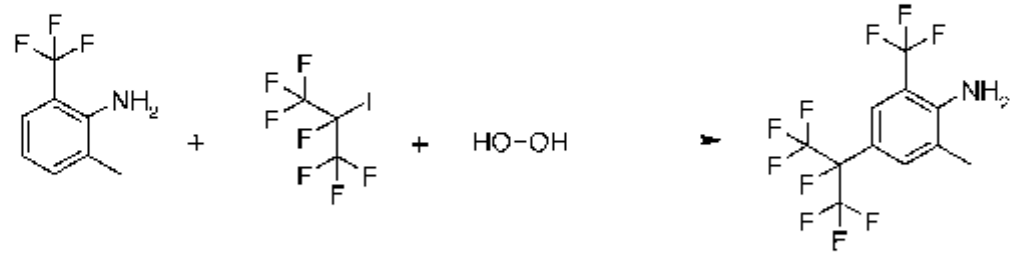
[0498] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_4, Alkyl, Q, R, n und R^{14} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. X steht für eine geeignete Abgangsgruppe wie z.B. Fluor, Chlor, Brom oder Iod. R^{14} steht für gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl. Y steht für Wasserstoff oder ein Alkalimetall wie z.B. Natrium oder Lithium.

[0499] Die Durchführung der Reaktion erfolgt in Analogie zu literaturbekannten Methoden zur Einführung von Alkylthioresten in Aromaten. [z.B. Organometallics 1989, 8(5), 1303-1308; WO1998056761, Example 63, S. 97].

Verfahren I:

[0500] 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin der Struktur (K-1) kann ausgehend von 2-Methyl-6-trifluormethyl-anilin nach dem in Reaktionsschema 1 angegebenen Verfahren durch Umsetzung mit Heptafluorisopropyliodid in Gegenwart von Wasserstoffperoxid hergestellt werden.

Reaktionsschema 4



K-1

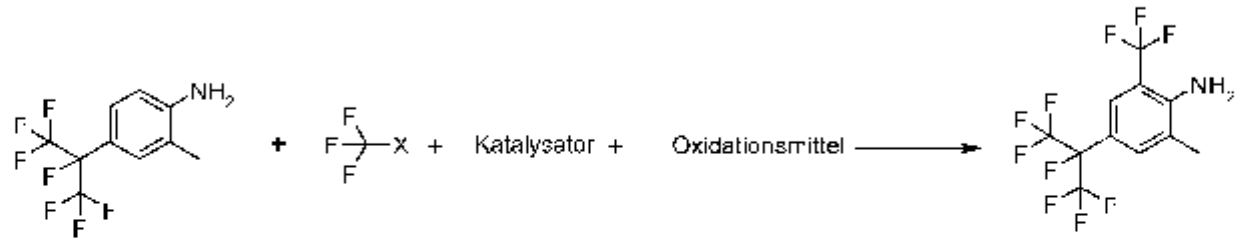
[0501] 2-Methyl-6-trifluormethyl-anilin ist literaturbekannt (John P. Chupp, Terry M. Balthazor, Michael J. Miller, and Mark J. Pozzo, J. Org. Chem. 49 (1984),4711-4716 oder Thomas R. Nickson J. Org. Chem. 51 (1986) 3903-3904) und Heptafluorisopropyliodid ist kommerziell erhältlich.

[0502] Die Reaktion wird in Analogie zu bekannten Verfahren zur Trifluormethylierung von Aromaten durchgeführt (Tatsuhito Kino, Yu Nagase, Yuhki Ohtsuka, Kyoko Yamamoto, Daisuke Uraguchi,Kenji Tokuhisa and Tetsu Yamakawa, Journal of Fluorine Chemistry 131 (2010) 98–105).

Verfahren 2

[0503] Weiterhin kann 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin der Struktur (K-1) ausgehend von 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-anilin nach dem in Schema 2 angegebenen Verfahren durch Umsetzung mit Natrium-trifluormethylsulfinat in Gegenwart von Oxidationsmitteln und Übergangsmetall Katalysatoren hergestellt werden.

Reaktionsschema 5



D-1a

X bedeutet Br, I, $NaSO_2^-$ (Natriumtrifluormethylsulfinat), KSO_2^- (Kaliumtrifluormethylsulfinat). Besonders bevorzugt ist Natriumtrifluormethylsulfinat.

[0504] 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-anilin ist bekannt (US2004/92762).

[0505] Geeignete Katalysatoren sind Übergangsmetalle wie Eisen(II)sulfat, Eisen(III)nitrat, Kupfer(II)triflat oder Ferrocen. Besonders bevorzugt ist Eisen(II)sulfat.

[0506] Geeignete Oxidationsmittel sind vor allem Peroxide wie Wasserstoffperoxid, tert.-Butylhydroperoxid oder Natriumperoxodisulfat, Kaliumperoxodisulfat, Natriumperoxomonosulfat oder Kaliumperoxomonosulfat. Besonders bevorzugt ist tert.-Butylhydroperoxid.

[0507] Bei der Durchführung der Reaktion können geeignete Lösungsmittel verwendet werden.

[0508] Als Verdünnungs- bzw. Lösungsmittel zur Durchführung der erfindungsgemäßen Verfahren kommen grundsätzlich alle unter den spezifischen Reaktionsbedingungen inerten organischen Lösungsmittel in Frage. Als Beispiele sind zu nennen: Nitrile wie Acetonitril, Propionitril, Butyronitril, Isobutyronitril; Wasser, Tetrahydrothiophendioxid, Dimethylsulfoxid, Tetramethylensulfoxid,

Dipropylsulfoxid, Diisobutylsulfoxid, Dibutylsulfoxid, Diisoamylsulfoxid, Sulfone (z.B. Dimethyl-, Diethyl-, Dipropyl-, Dibutyl-, Dihexyl-, Methylethyl-, Ethylpropyl-, Ethylisobutyl- und Pentamethylensulfon); aliphatische, cycloaliphatische (z.B. Pentan, Hexan, Heptan, Oktan, Nonan und technische Kohlenwasserstoffe), ferner sogenannte "White Spirits" mit Komponenten mit Siedepunkten im Bereich von beispielsweise 40 °C bis 250 °C, Benzinfraktionen innerhalb eines Siedeinterwalles von 70°C bis 190 °C, Cyclohexan, Methylcyclohexan, Petrolether, Ligroin, Octan.

[0509] Als bevorzugtes Verdünnungsmittel kann jedes Lösungsmittel verwendet werden, das die Reaktion nicht beeinträchtigt, wie zum Beispiel Wasser; Nitrile wie Acetonitril, Propionitril, Butyronitril, Isobutyronitril. Die Lösungsmittel können allein oder in Kombination von 2 oder mehr eingesetzt werden.

[0510] Bei den Umsetzungen können Basen zugesetzt werden. Als Beispiele sind zu nennen Erdalkali- oder Alkalimetallverbindungen (z.B. Hydroxide, Hydride, Oxide und Carbonate des Lithiums, Natriums, Kaliums, Magnesiums, Calciums und Bariums).

[0511] Als bevorzugtes basisches Reaktionshilfsmittel kann Natriumhydrogencarbonat verwendet werden; des Weiteren können beispielsweise folgende Basen eingesetzt werden: Alkalimetallhydroxide wie z.B Natriumhydroxid und Kaliumhydroxid; Carbonate wie Natriumhydrogencarbonat und Kaliumcarbonat; Phosphate wie Natrium-dihydrogenphosphat, Dikalium-hydrogenphosphat und Tri-natriumphosphat.

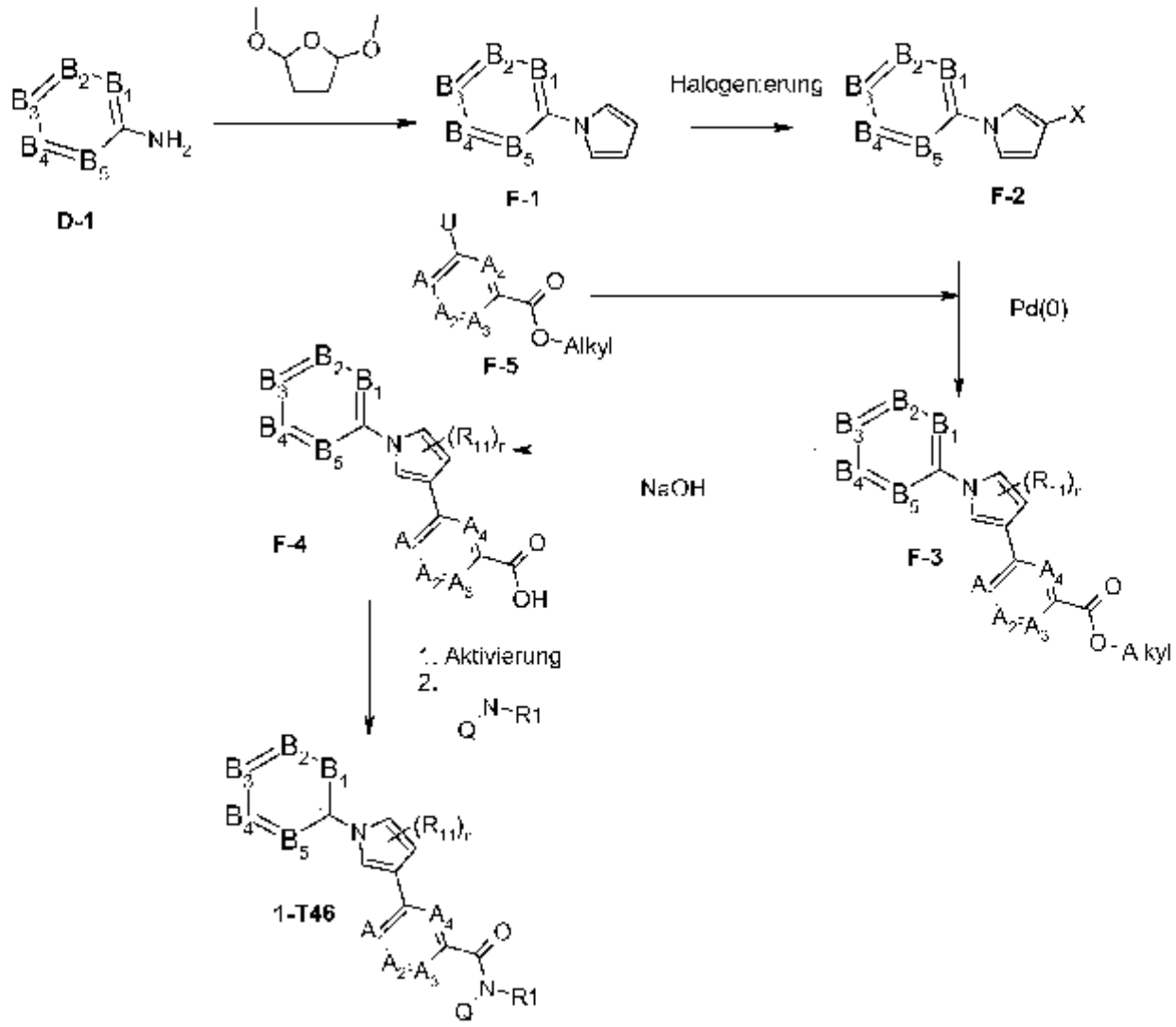
[0512] Die Reaktion kann in einem weiten Temperaturbereich ausgeführt werden. Gewöhnlich wird sie in einem Temperaturbereich von -78 bis 200 °C, bevorzugt bei Temperaturen zwischen -10 und 150 °C durchgeführt. Die Reaktion kann unter erhöhtem als auch vermindertem Druck ausgeführt werden. Bevorzugt wird sie aber unter Normaldruck durchgeführt. Die Reaktionszeiten liegen zwischen 0,1und 72 Stunden, bevorzugt zwischen 1 und 24 Stunden.

[0513] Zur Durchführung der Reaktion werden 1 bis 10 Mol, bevorzugt 1 bis 4 Mol an Trifluormethylierungsmittel; 1 bis 20 Mol, bevorzugt 1 bis 8 Mol Oxidationsmittel und 0,01 bis 1 Mol, bevorzugt 0,05 bis 0,4 Mol Katalysator pro Mol 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin in einem Lösungsmittel oder Lösungsmittelgemisch wie z.B. in einem Gemisch aus Acetonitril und Wasser eingesetzt.

Verfahren I-T46 erweitert

[0514] Die Verbindungen der Struktur (I-T46) können nach dem im Reaktionsschema angegebenen Verfahren hergestellt werden.

Reaktionsschema 6

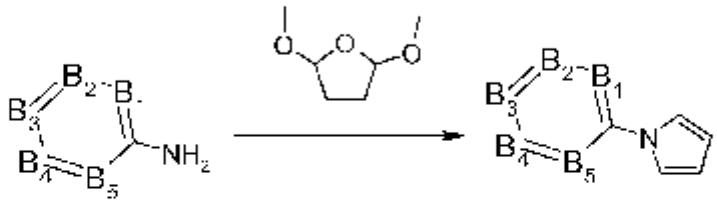


[0515] Die Reste A_1-A_4, B_1-B_5, Alkyl, Q, R^1 und R^{11} haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat. X steht für Brom, Iod oder Triflat. Ausgangsverbindungen der Struktur (**F-1**) und (**F-5**) sind bekannt (z.B. **F-1**: Hulcoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), S. 1761-1764, Supporting information Seite 1 ff), oder können nach bekannten Methoden (z.B. aus **D-1**) hergestellt werden.

[0516] Die Durchführung der Reaktionen kann nach den in der Literatur beschriebenen Verfahren erfolgen z.B. US2009/209476, S. 18-19.

Stufe1 Pyrrol Ringschluss

Stufe 1 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (**I-T46**):



D-1 F-1b F-1

[0517] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**F-1**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**D-1**) und (**F-1b**) hergestellt werden. Die Reste B¹-B⁵ haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Die Verbindungen der Strukture (**D-1**) sind literaturbekannt (z.B. US2002/198399, WO2009/30457, Seite 28) oder können nach literaturbekannten Methoden hergestellt werden. Die Verbindung (**F1-b**) ist komerziell erhältlich. Als typische Vetreter der Verbindungen der Struktur (**D-1**) seien 2-Amino-1,3-dichlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(triflnormethyl)ethyl]benzol, 2-Amino-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Amino-1-ethyl-3-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol, 2-Amino-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Amino-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethyl)benzol, 2-Amino-1-chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol, 2-Amino-1-methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-3-(trifluormethoxy)benzol genannt. Die Reaktion wird unter den in der Literatur für analoge Verbindungen bekannten Bedingungen durchgeführt (z.B. Huleoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), S. 1761-1764, Supporting information Seite 1 ff)

Stufe 2 Halogenierung

Stufe 1 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (**I-T46**):



F-1 F-2

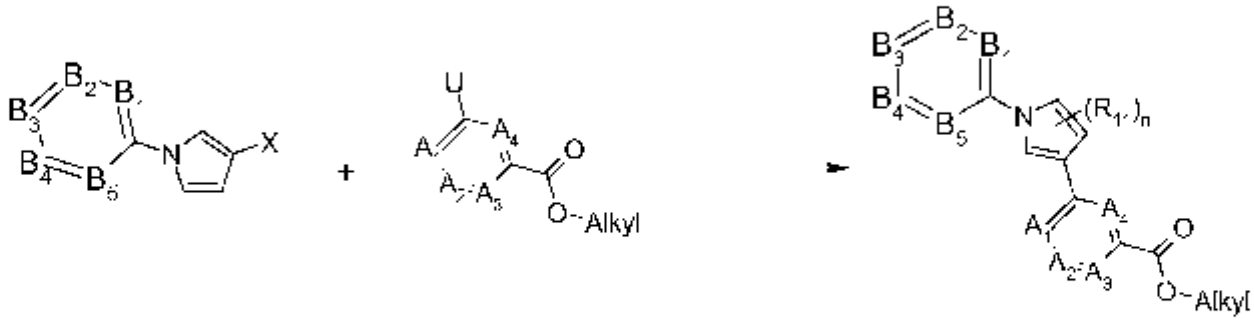
[0518] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**F-2**) können in Analogie zu literaturbekannten Methoden aus den Ausgangsmaterialien der Struktur (**F-1**) durch Halogenierung hergestellt werden. Die Reste B¹-B⁵ haben die oben beschriebenen Bedeutungen. Die Verbindungen der Strukture (**F-1**) sind literaturbekannt (z.B. F-1; Huleoop, David G. et al., Organic Letters, 9 (2007), S. 1761-1764, Supporting information Seite 1 ff) oder können nach der weiter oben beschriebenen Methode hergestellt werden. Als typische Vetreter der Verbindungen der Struktur (**F-1**) seien 1-[2,6-Dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol, 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-

tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol, 1-[2-Ethyl-6-methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol, 1-[2-Chlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]pyrrol, 1-[2-Methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]pyrrol, 1-[1-Chlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethoxy)phenyl]pyrrol, 1-[1-Methyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethoxy)phenyl]pyrrol genannt.

[0519] Geeignete halogenierende Verbindungen sind dem Fachmann bekannt wie z.B. Brom, Iod, N-Bromsuccinimid, N-Iodsuccinimid, 1,3-Dibrom-5,5-dimethylhydantoin und Benzyltrimethylammoniumtetrachloroiodat. Bevorzugt werden Brom, Iod und Iodsuccinimid eingesetzt. Die Umsetzung folgt den aus der Literatur bekannten Bedingungen (z. B. Tatsuta; Itoh Bulletin of the Chemical Society of Japan, 67 (1994) 1449-1455).

Stufe 3 Boronsäure Kupplung

Stufe 3 des Darstellungsverfahrens der erfindungsgemäßen Verbindungen (**I-T46**):

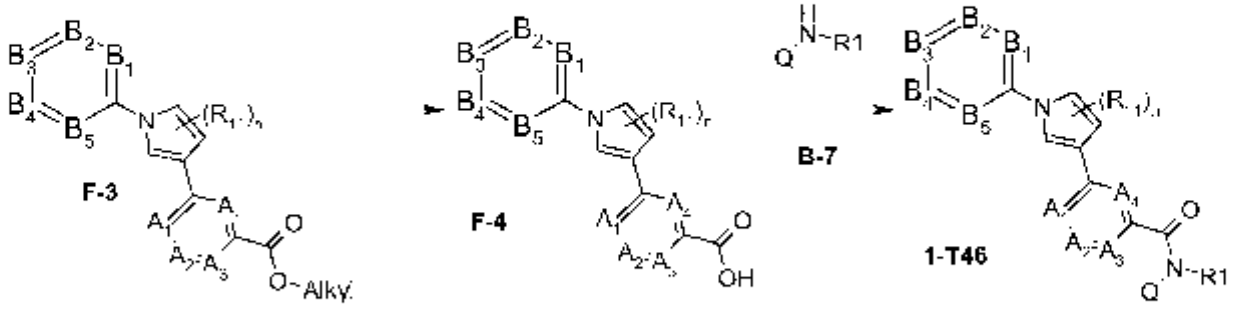


F-2 F-5 F-3

[0520] Die Reste A_1 bis A_4, B_1 bis B_5, Alkyl, n und R_1 haben die oben beschriebenen Bedeutungen. U steht z. B. für eine Boronsäure, Boronsäureester oder Trifluorboronat, X steht für Brom, Iod oder Triflat.

[0521] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (**F-3**) können nach literaturbekannten Verfahren mittels Palladium katalysierten Reaktionen aus den Reaktionspartnern der allgemeinen Struktur (**F-2**) und (**F-5**) hergestellt werden (z. B. WO 2005/040110 oder WO 2009/089508). Die Verbindungen der allgemeinen Struktur (**F-5**) sind entweder kommerziell erhältlich oder können nach dem Fachmann bekannten Verfahren hergestellt werden.

Stufen 4, 5 Verseifung, Amidierung



F-3 F-4 B-7 1-T46

[0522] Erfindungsgemäße Verbindungen der allgemeinen Struktur (I-T46) können in Analogie zu literaturbekannten Peptidkupplungsmethoden aus den Ausgangsmaterialien (F-4) und (B-7) hergestellt werden (z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312). Verbindungen der allgemeinen Struktur (F-4) lassen sich in Analogie zu literaturbekannten Verfahren durch Esterspaltung aus Verbindungen der allgemeinen Struktur (F-3) herstellen (z. B. WO 2010/051926 oder WO 2010/133312). Die Reste A_1 bis A_3, B bis B_2, Alkyl, Q, R^1 und $R^{1'}$ haben die oben beschriebenen Bedeutungen.

Q

[0523] In einer mehr bevorzugten Ausführungsform steht Q in einer Verbindung der Formel (I) oder (Ia'') oder (IT-2) oder (I-T3) oder (I-T4) oder (I-T22) oder (I-T23) oder (I-T46) für C_1-C_4-Alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)-ethyl, mit Fluor oder 1-cyano-propyl oder Pyridin substituiertes C_1-C_2-Alkyl wie 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 3,3,3-Trifluorpropyl, Pyridin-2-ylmethyl oder (1-Cyano-cyclopropyl)methyl; C_3-C_4-Cycloalkyl wie Cyclopropyl oder Cyclobutyl; gegebenenfalls substituiertes C_3-C_5-Cycloalkyl wie mit optional mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl substituiertes Cyclopropyl (z. B. 1-Trifluoromethyl-cyclopropyl, 1-tert.Butyl-cyclopropyl), 1-Thiocarbamoyl-cyclopropyl, 1-Carbamoyl-cyclopropyl, 1-Cyano-cyclopropyl, trans-2-Fluorcyclopropyl, cis-2-Fluorcyclopropyl; C_4-C_6-Heterocycloalkyl wie Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, oder 1,1-Dioxido-thietan-3-yl; oder jeweils gegebenenfalls mit C_1-C_4-Alkyl substituiertes Benzyl; Pyrazol (wie N-methyl-pyrazol-3-yl), Pyridin; Methylsulfonyl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl steht.

[0524] In einer besonders bevorzugten Ausführungsform steht Q in einer Verbindung der Formel (I) oder (Ia'') oder (IT-2) oder (I-T3) oder (I-T4) oder (I-T22) oder (I-T23) oder (I-T46) für mit Fluor substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2,2,2-trifluoroethyl oder 3,3,3-trifluoropropyl; Cyclopropyl; gegebenenfalls mit Cyano, C_1-C_2-Alkyl substituiertes Cyclopropyl wie 1-Cyano-cyclopropyl oder 1-TriFluormethyl-cyclopropyl; Thietan-3-yl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethyl)aminoethyl.

Formel (I)

[0525] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0526] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0527] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T2 oder T4 steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0528] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T3 oder T46 steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0529] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T22 oder T23 steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0530] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0531] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0532] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T2 oder T4 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0533] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T3 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0534] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (I) in der T für T22 oder T23 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind. Hierbei bezieht sich eine besonders bevorzugte Ausführungsform auf Verbindungen in denen R^8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht.

[0535] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für

perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht, in der B_1, B_2, B_4 und B_5 für CR^6, CR^7, CR^9 bzw. CR^{10} stehen worin R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindetens ein Subtituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind. In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} jeweils für Halogen (wie Cl, Br oder F), jeweils für C_1-C_3-alkyl, oder jeweils für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie z. B. perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (Perfluormethyl, perFluorethyl oder Perfluorpropyl).

[0536] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht, in der B_1, B_2 und B_4 für CR^6, CR^7, bzw. CR^9 stehen und B_5 für N steht worin R^6, R^7 und R^9 unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindetens ein Subtituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0537] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht, in der B_1, B_2, B_4 und B_5 für CR^6, CR^7, CR^9 bzw. CR^{10} stehen worin R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindetens ein Subtituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen, R^{11} jeweils unabhängig voneinander für H, Amino (NH_2) oder Cyano, bevorzugt für H, steht, W für O steht, R^1 für H, Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl steht, bevorzugt für H oder Methyl steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind. In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} jeweils für Halogen (wie Cl, Br oder F), jeweils für C_1-C_3-alkyl, oder jeweils für mit Halogen

substituiertes C_1-C_3-alkyl wie z. B. perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (Perfluormethyl, perfluorethyl oder Perfluorpropyl).

[0538] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht in der B_1, B_2 und B_4 für CR^6, CR^7, bzw. CR^9 stehen und B_5 für N steht worin R^6, R^7 und R^9 unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindetens ein Subtituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen, R^1 jeweils unabhängig voneinander für H, Amino (NH_2) oder Cyano, bevorzugt für H, steht, W für O steht, R^5 für H, Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl steht, bevorzugt für H oder Methyl steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0539] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht, in der B_1, B_2, B_4 und B_5 für CR^6, CR^7, CR^9 bzw. CR^{10} stehen worin R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindetens ein Subtituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen, R^{1a} jeweils unabhängig voneinander für H, Amino (NH_2) oder Cyano, bevorzugt für H, steht, W für O steht, R^5 für H, Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl steht, bevorzugt für H oder Methyl steht, Q für C_1-C_4-Alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)-ethyl, mit Fluor oder 1-cyano-propyl oder Pyridin substituiertes C_1-C_4-Alkyl wie 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 3,3,3-Trifluropropyl, Pyridin-2-ylmethyl oder (1-Cyano-cyclopropyl)methyl; C_3-C_6-Cycloalkyl wie Cyclopropyl oder Cyclobutyl; gegebenenfalls substituiertes C_3-C_4-Cycloalkyl wie mit optional mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl substituiertes Cyclopropyl (z. B. 1-Trifluoromethyl-cyclopropyl, 1-tert.Butyl-cyclopropyl), 1-Thiocarbamoyl-cyclopropyl, 1-Carbamoyl-cyclopropyl, 1-Cyano-cyclopropyl, trans-2-Fluorcyclopropyl, cis-2-Fluorcyclopropyl; C_4-C_6-Heterocycloalkyl wie Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, oder 1,1-Dioxido-thietan-3-yl; oder jeweils gegebenenfalls mit C_1-C_4-Alkyl substituiertes Benzyl; Pyrazol (wie N-methyl-pyrazol-3-

yl), Pyridin; Methylsulfonyl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl, bevorzugt für mit Fluor substituiertes C_1-C_2-Alkyl wie 2,2,2-trifluoroethyl oder 3,3,3-trifluoropropyl; Cyclopropyl; gegebenenfalls substituiertes Cyclopropyl wie 1-Cyano-cyclopropyl oder 1-TriFluoromethyl-cyclopropyl, Thietan-3-yl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethyl)aminoethyl, steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind. In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} jeweils für Halogen (wie Cl, Br oder F), jeweils für C -C_3-alkyl, oder jeweils für mit Halogen substituiertes C-C_3-alkyl wie z. B. perfluoriertes C-C_3-alkyl (Perfluormethyl, perFluoroethyl oder Perfluorpropyl).

[0540] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht in der B_1, B_2 und B_3 für CR^6, CR^7, bzw. CR^9 stehen und B_5 für N steht worin R^6, R^7 und R^9 unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindetens ein Subtituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_7-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen, R^1 jeweils unabhängig voneinander für H, Amino (NH_2) oder Cyano, bevorzugt für H, steht, W für O steht, R^5 für H, Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl steht, bevorzugt für H oder Methyl steht, Q für C_1-C_4-Alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)-ethyl, mit Fluor oder 1 cyano-propyl oder Pyridin substituiertes C_1-C_4-Alkyl wie 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 3,3,3-Trifluropropyl, Pyridin-2-ylmethyl oder (1-Cyano-cyclopropyl)methyl; C_3-C_6-Cycloalkyl wie Cyclopropyl oder Cyclobutyl; gegebenenfalls substituiertes C_3-C_6-Cycloalkyl wie mit optional mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl substituiertes Cyclopropyl (z. B. 1-Trifluoromethyl-cyclopropyl, 1-tert.Butyl-cyclopropyl), 1-Thiocarbamoyl-cyclopropyl, 1-Carbamoyl-cyclopropyl, 1-Cyano-cyclopropyl, trans-2-Fluorocyclopropyl, cis-2-Fluorocyclopropyl; C_3-C_6-Heterocycloalkyl wie Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, oder 1,1-Dioxido-thietan-3-yl; oder jeweils gegebenenfalls mit C, C_2-Alkyl substituiertes Benzyl; Pyrazol (wie N-methyl pyrazol 3 yl), Pyridin; Methylsulfonyl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl, bevorzugt für mit Fluor substituiertes C-C_3-Alkyl wie 2,2,2-trifluoroethyl oder 3,3,3-trifluoropropyl; Cyclopropyl; gegebenenfalls substitmiertes Cyclopropyl wie 1-Cyano-cyclopropyl oder 1-TriFluoromethyl-cyclopropyl, Thietan-3-yl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethyl)aminoethyl,, steht und alle weiteren Parameter wie in Paragraph [0009] definiert sind.

[0541] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht, in der B_1, B_2, B_3 und B_5 für CR^6, CR^7, CR^9 bzw. CR^{10} stehen worin R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindetens ein Subtituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_4-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen, R^{11} jeweils unabhängig voneinander für H, Amino (NH_2) oder Cyano, bevorzugt für H, steht, W für O steht, R^1 für H, Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl steht, bevorzugt für H oder Methyl steht, Q für C_1-C_6-Alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)-ethyl, mit Fluor oder 1-cyano-propyl oder Pyridin substituiertes C_1-C_4-Alkyl wie 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 3,3,3-Trifluorpropyl, Pyridin-2-ylmethyl oder (1-Cyano-cyclopropyl)methyl; C_3-C_6-Cycloalkyl wie Cyclopropyl oder Cyclobutyl; gegebenenfalls substituiertes C_3-C_4-Cycloalkyl wie mit optional mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl substituiertes Cyclopropyl (z. B. 1-Trifluoromethyl-cyclopropyl, 1-tert.Butyl-cyclopropyl), 1-Thiocarbamoyl-cyclopropyl, 1-Carbamoyl-cyclopropyl, 1-Cyano-cyclopropyl, trans-2-Fluorcyclopropyl, cis-2-Fluorcyclopropyl; C_4-C_6-Heterocycloalkyl wie Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, oder 1,1-Dioxido-thietan-3-yl; oder jeweils gegebenenfalls mit C_1-C_4-Alkyl substituiertes Benzyl; Pyrazol (wie N-methyl-pyrazol-3-yl), Pyridin; Methylsulfonyl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl, bevorzugt für mit Fluor substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2,2,2-trifluoroethyl oder 3,3,3-trifluoropropyl; Cyclopropyl; gegebenenfalls substituiertes Cyclopropyl wie 1-Cyano-cyclopropyl oder 1-TriFluoromethyl-cyclopropyl, Thietan-3-yl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethyl)aminoethyl, steht, A_1 für CR^5 oder N, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^4 und A_4 für CR^5 oder N steht, wobei R^2 für H, C1-C4-Alkyl oder Halogen (wie Methyl, F, Cl oder H) steht, R^5 für H oder halogeniertes C1-C4-Alkyl (wie H oder $-CF_3$) steht, R^4 für H, C1-C4-Alkyl, C1-C4-Alkylamin (wie $-NH-CH_3$), Cyclopropylamin, C1-C4-Alkoxy (wie $-O-CH_3$), C1-C4-Alkoxy-C1-C4-Alkylamin (wie $NH-CH_2-CH_2-O-CH_3$) oder Halogen (wie F oder Cl), steht. In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} jeweils für Halogen (wie Cl, Br oder F), jeweils für C_1-C_3-alkyl, oder jeweils für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie z. B. perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (Perfluormethyl, perfluorethyl oder Perfluorpropyl).

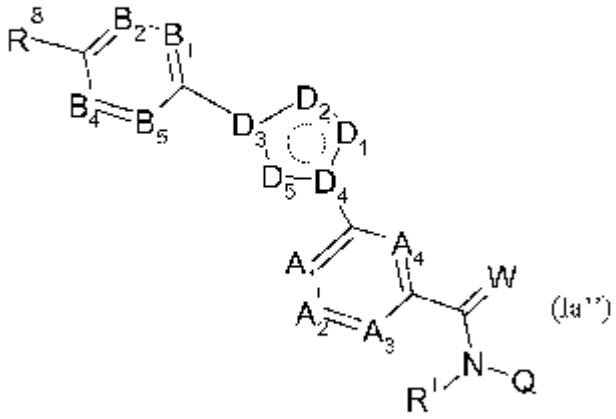
[0542] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der T für T2, T3, T4, T22, T23 oder T46 steht, B3 für C-R8 steht und R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, besonders bevorzugt worin R8 für perfluoriertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, ganz besonders bevorzugt für

perfluoriertes (C1-C4)-Alkyl, (C1-C4)-Alkoxy steht in der B_1, B_3 und B_4 für CR^6, CR^7, bzw. CR^9 stehen und B_2 für N steht worin R^6, R^7 und R^9 unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls mit mindestens einem Substituenten ausgewählt aus Halogen und Hydroxy, wobei mindestens ein Substituent ein Halogen ist, substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N*,*N*-Di-C_1-C_4-alkylamino stehen, R^{10} jeweils unabhängig voneinander für H, Amino (NH_2) oder Cyano, bevorzugt für H, steht, W für O steht, R^5 für H, Methyl, Ethyl, n-Propyl, Isopropyl, n-Butyl, Isobutyl, s-Butyl, t-Butyl steht, bevorzugt für H oder Methyl steht, Q für C_1-C_4-Alkyl, 2-oxo-2-(2,2,2-trifluorethylamino)-ethyl, mit Fluor oder 1-cyano-propyl oder Pyridin substituiertes C_1-C_4-Alkyl wie 2,2,2-Trifluorethyl, 2,2-Difluorethyl, 3,3,3-Trifluropropyl, Pyridin-2-ylmethyl oder (1-Cyano-cyclopropyl)methyl; C_3-C_4-Cycloalkyl wie Cyclopropyl oder Cyclobutyl; gegebenenfalls substituiertes C_3-C_4-Cycloalkyl wie mit optional mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl substituiertes Cyclopropyl (z. B. 1-Trifluoromethyl-cyclopropyl, 1-tert.Butyl-cyclopropyl), 1-Thiocarbamoyl-cyclopropyl, 1-Carbamoyl-cyclopropyl, 1-Cyano-cyclopropyl, trans-2-Fluorcyclopropyl, cis-2-Fluorcyclopropyl; C_3-C_6-Heterocycloalkyl wie Oxetan-3-yl, Thietan-3-yl, 1-Oxido-thietan-3-yl, oder 1,1-Dioxido-thietan-3-yl; oder jeweils gegebenenfalls mit C_1-C_4-Alkyl substituiertes Benzyl; Pyrazol (wie N-methyl pyrazol-3-yl), Pyridin; Methylsulfonyl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)ethyl, bevorzugt für mit Fluor substituiertes C_1-C_3-Alkyl wie 2,2,2-trifluoroethyl oder 3,3,3-trifluoropropyl; Cyclopropyl; gegebenenfalls substituiertes Cyclopropyl wie 1-Cyano-cyclopropyl oder 1-TriFluoromethyl-cyclopropyl, Thietan-3-yl; oder 2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethyl)aminoethyl,, steht, A_1 für CR^3 oder N, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^3 und A_4 für CR^3 oder N steht, wobei R^3 für H, C1-C4-Alkyl oder Halogen (wie Methyl, F, Cl oder H) steht, R^7 für H oder halogeniertes C1-C4-Alkyl (wie H oder CF_3) steht, R^2 für H, C1-C4-Alkyl, C1-C4-Alkylamin (wie NH-CH_3), Cyclopropylamin, C1-C4-Alkoxy (wie O-CH_3), C1-C4-Alkoxy-C1-C4-Alkylamin (wie NH-CH_2-CH_2-O-CH_3) oder Halogen (wie F oder Cl), steht.

[0543] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht R^6 für perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. Perfluormethyl) und R^{10} für Cl, Br oder F, besonders bevorzugt für Cl oder Br.

Formel (Ia'')

Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ia'')



(Ia'')

worin ein D ausgewählt aus D1 und D2 für N steht und das jeweils andere D ausgewählt aus D1 und D2 für O steht; oder D4 für N steht und ein D ausgewählt aus D1 und D5 für N steht; oder D3 für N steht und D1, D2 und D5 für C-R11 stehen und D4 für C steht und ansonsten alle Parameter wie in Paragraph [0012] beschrieben definiert sind.

Eine weitere bevorzugte Ausführungsform betrifft Verbindungen der Formel (Ia'') worin R8 für ein jeweils substituiertes (C1-C6)-Alkyl, (C1-C6)-Alkoxy oder Alkylsulfanyl steht, wobei die Substituenten ausgewählt sind aus Halogen und Hydroxy wobei mindestens ein Substituent Halogen ist, und ein D ausgewählt aus D1 und D2 für N steht und das jeweils andere D ausgewählt aus D1 und D2 für O steht; oder D4 für N steht und ein D ausgewählt aus D1 und D5 für N steht; oder D3 für N steht und D1, D2 und D5 für C-R11 stehen und D4 für C steht und ansonsten alle Parameter wie in Paragraph [0012] beschrieben definiert sind.

[0544] In einer bevorzugten Ausführungsform steht maximal eine (1) Gruppierung B_1 bis B_5 für N (in anderen Worten: ein (1) B_1 bis B_5 steht für N); oder kein (0) B_1 bis B_5 steht für N (B_1 bis B_5 stehen für CR^6, CR^7, CR^8, CR^9 und CR^{10}).

[0545] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6, R^7, R^9 und R^{10} (wenn die entsprechende Gruppierung B für CR steht) unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_4-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, *N*-Alkoxyiminoalkyl, C_1-C_4-Alkylsulfanyl, C_1-C_4-Alkylsulfinyl, C_1-C_4-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N,N* Di-C_1-C_4 alkylamino.

[0546] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Fluormethyl, Difluormethyl, Chlordifluormethyl, Trifluormethyl, 2,2,2-Trifluorethyl, Methoxy, Ethoxy, n-Propoxy, 1-Methylethoxy, Fluormethoxy, Difluormethoxy, Chlor-difluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Pentafluorethoxy, N-Methoxyiminomethyl, 1-(N-

Methoxyimino)-ethyl, Methylsulfanyl, Trifluormethylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl.

[0547] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen (insbesondere Chlor, Brom, Fluor), Cyano, Nitro, Methyl, Ethyl, Difluormethyl, Chlordifluormethyl, Trifluormethyl, Methoxy, Ethoxy, 1-Methylethoxy, Difluormethoxy, Chlordifluormethoxy, Dichlor-fluormethoxy, Trifluormethoxy, 2,2,2-Trifluorethoxy, 2-Chlor-2,2-difluorethoxy, Methylsulfanyl, Trifluormethylsulfanyl, Methylsulfonyl, Methylsulfinyl, Trifluormethylsulfonyl, Trifluormethylsulfinyl.

[0548] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} für die hierin beschriebenen Substituenten, jedoch stehen R^6 und R^{10} nicht gleichzeitig in einer Verbindung für H. Mit anderen Worten, wenn R^6 in einer Verbindung für H steht, steht R^{10} für einen der anderen hierin beschriebenen Substituenten und umgekehrt.

[0549] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Cl, Br oder F), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy.

[0550] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform stehen R^6 und R^{10} jeweils für Halogen (wie Cl, Br oder F), jeweils für C_1-C_3-alkyl, oder jeweils für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl wie z. B. perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (Perfluormethyl, perFluoroethyl oder Perfluorpropyl).

[0551] In einer weiteren bevorzugten Ausführungsform steht R^6 für perfluoriertes C_1-C_3-alkyl (z. B. Perfluormethyl) und R^{10} für Cl, Br oder F, besonders bevorzugt für Cl oder Br.

T46 – Methyl

[0552] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0553] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^4, A_2 für CR^3 oder N, A_3 für CR^2, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0554] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^1, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3

alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0555] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für Methyl steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

T46 - H

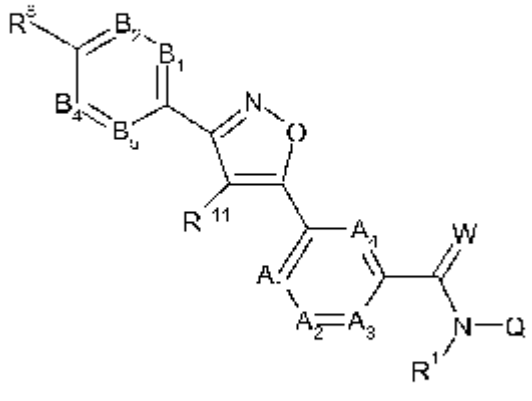
[0556] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0112] definiert sind.

[0557] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht, A_1 für CR^2, A_2 für CR^4 oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CR^5, B_1 für CR^6, B_2 für CR^7, B_3 für CR^8, B_4 für CR^9, B_5 für CR^{10} steht und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0558] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0559] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform bezieht sich auf Verbindungen der Formel (I) in der R^1 für H steht, T für T46 steht, R^{11} in T46 für H steht, W für O steht, A_1 für CH, A_2 für CH oder N, A_3 für CR^4, A_4 für CH, B_1 für CR^6, B_2 für CH, B_3 für CR^8, B_4 für CH, B_5 für CR^{10} steht wobei R^6 und R^{10} jeweils für einen Substituenten ausgewählt aus Halogen (bevorzugt Chlor, Brom oder Fluor), C_1-C_3-alkyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkyl, C_1-C_3-alkoxy oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-alkoxy und alle anderen Parameter wie in Paragraph [0085] und Paragraph [0113] ff. definiert sind.

[0560] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf Verbindungen der Formel (I-T46):



(I-T46)

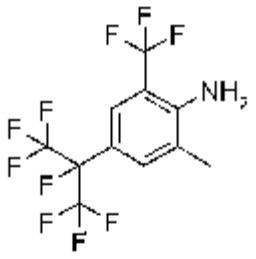
worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, R^8, R^{11} Q und W wie hierin beschrieben beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht; oder wobei eine oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N stehen können und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

[0561] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf Verbindungen der Formel (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) oder (I-T46) worin R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Paragraph [0120] beschrieben sind.

[0562] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf Verbindungen der Formel (I-T2), (I-T3), (I-T4), (I-T22), (I-T23) oder (I-T46) worin R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Paragraph [0121] beschrieben sind.

[0563] Eine weitere bevorzugte Ausführungsform richtet sich auf Verbindung D-1a

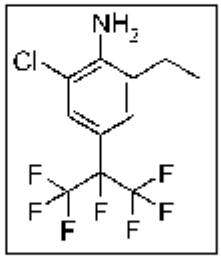


D-1a

[0564] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf die Verwendung der Verbindung D-1a zur Herstellung von Verbindungen der Formel (I).

[0565] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf ein Verfahren zur Herstellung einer Verbindung der Formel (I), bevorzugt worin T = T4 ist, umfassend die Verwendung der Verbindung D-1a, bevorzugt in einer Reaktionsabfolge gemäß Reaktionsschema 4.

[0566] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf Verbindung D-1b

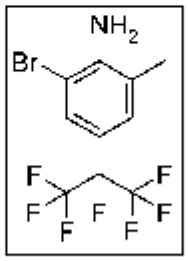


D-1b

[0567] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf die Verwendung der Verbindung D-1b zur Herstellung von Verbindungen der Formel (I).

[0568] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf ein Verfahren zur Herstellung einer Verbindung der Formel (I), bevorzugt worin T = T4 ist, umfassend die Verwendung der Verbindung **D-1b**, bevorzugt in einer Reaktionsabfolge gemäß Reaktionsschema 4.

[0569] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf Verbindung D-1c



D-1c

[0570] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf die Verwendung der Verbindung D-1c zur Herstellung von Verbindungen der Formel (I).

[0571] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf ein Verfahren zur Herstellung einer Verbindung der Formel (I), bevorzugt worin T = T4 ist, umfassend die Verwendung der Verbindung **D-1c**, bevorzugt in einer Reaktionsabfolge gemäß Reaktionsschema 4.

[0572] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf die Verbindung 2-(3,5-Dichlor-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluor-propan-2-ol.

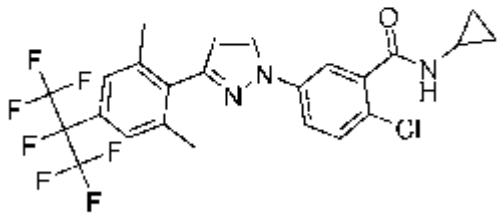
[0573] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf die Verwendung der Verbindung 2-(3,5-Dichlor-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluor-propan-2-ol zur Herstellung von Verbindungen der Formel (I).

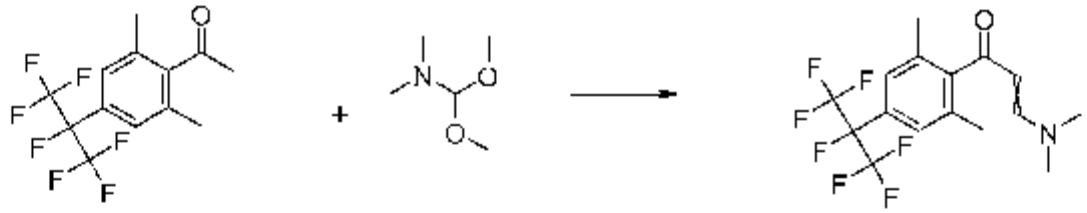
[0574] Eine weitere Ausführungsform richtet sich auf ein Verfahren zur Herstellung einer Verbindung der Formel (I), bevorzugt worin T = T4 ist, umfassend die Verwendung der Verbindung 2-(3,5-Dichlor-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluor-propan-2-ol, bevorzugt in einer Reaktionsabfolge gemäß Reaktionsschema 4.

Experimenteller Teil

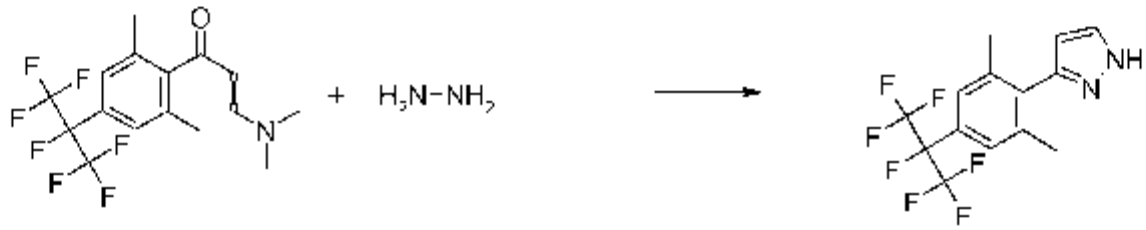
Darstellungsverfahren I-T2

Beispiel I-T2-1

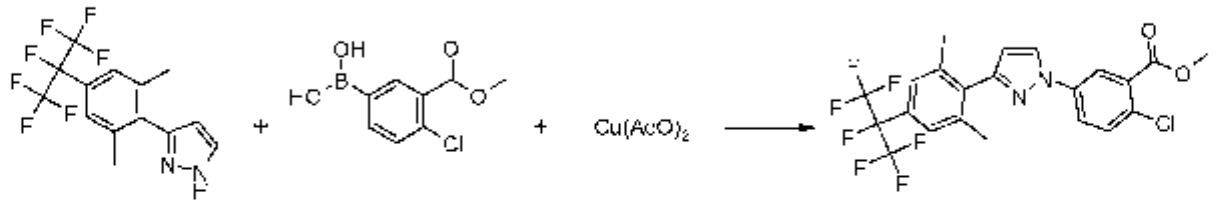




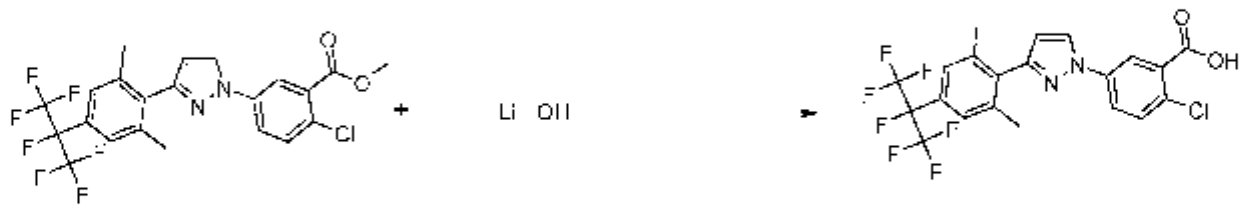
[0575] 710 mg (2,24 mmol) 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]ethanon wurden zu 401 mg (3,36 mmol) N,N-Dimethylformamiddimethylacetal gegeben und 5 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Zur Aufarbeitung wurde etwas abgekühlt und alle flüchtigen Bestandteile am Rotationsverdampfer im Vakuum abgedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 40 g Kieselgel und einem Gradienten in Cyclohexan/Essigester von 90:10 bis 50:50 (v/v) chromatographiert. Es wurden 675 mg 3-(Dimethylamino)-1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]prop-2-en-1-on erhalten.



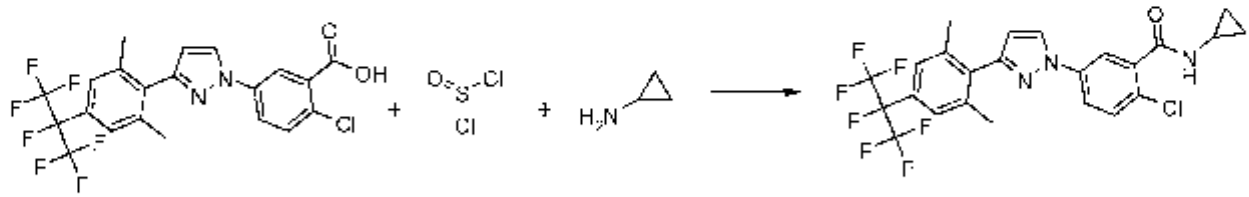
[0576] 1,2 g (3,23 mmol) 3-(Dimethylamino)-1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]prop-2-en-1-on wurden zu 15,5 ml Ethanol gegeben, 170 mg (3,39 mmol) Hydrazinhydrat und 192 mg (3,2 mmol) Eisessig zugegeben. Die Mischung wurde 7 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Dann wurden weitere 170 mg (3,39 mmol) Hydrazinhydrat zugefügt und weitere 4 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Da der Umsatz immer noch nicht vollständig war, wurden noch 190 mg (3,2 mmol) Eisessig zugefügt und 17 Stunden bei 60 °C gerührt. Zur Aufarbeitung wurde am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft und der Rückstand zwischen Essigester und Wasser verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, mit Wasser gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Als Rückstand verblieben 1,04 g (3-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-1H-pyrazol.



[0577] 23 ml Dichlormethan, 353 mg (4.46 mmol) Pyridin, 609 mg (3,35 mmol) Kupfer(II)acetat 958 mg (4,46 mmol) 3-Carboxymethyl-4-chlor-phenylboronsäure und 760 mg (2,23 mmol) (3-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-1H-pyrazol wurden vorgelegt und dann 1,1 g frisch gemahlenes 3 Å Molsieb zugegeben. Der Ansatz wurde dann 20 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde über eine Schicht Kieselgur filtriert und mit Dichlormethan nachgewaschen. Das Filtrat wurde am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Zur Reinigung wurde erst über eine Kartusche mit 40 g Kieselgel und einem Gradienten in Cyclohexan/Essigester von 95:5 bis 75:25 (v/v) chromatographiert. Die Produkt enthaltenden Fraktionen wurden eingedampft und über eine zweite Kartusche mit 40 g Kieselgel mit Toluol als Laufmittel chromatographiert. Nach Eindampfen wurden 628 mg 2-Chlor-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluoromethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoesäuremethylester erhalten.



[0578] 609 mg (1,19 mmol) 2-Chlor-5- 3- 2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluoromethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoesäuremethylester wurden in einer Mischung aus 14 ml Dioxan und 5 ml Wasser vorgelegt und 53 mg (1,25 mmol) Lithiumhydroxid Hydrat zugegeben und bei Raumtemperatur gerührt. Nach 2 Stunden wurden weitere 25 mg (0,6 mmol) Lithiumhydroxyd Hydrat nachgegeben und eine weitere Stunde bei Raumtemperatur gerührt. Danach wurden die flüchtigen Bestandteile am Rotationsverdampfer im Vakuum entfernt. Der Rückstand wurde zwischen verdünnter Salzsäure und Dichlormethan verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt und die wässrige Phase noch zweimal mit Dichlormethan extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden danach mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Als Rückstand wurden 554 mg 2-Chlor-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluoromethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoesäure erhalten.

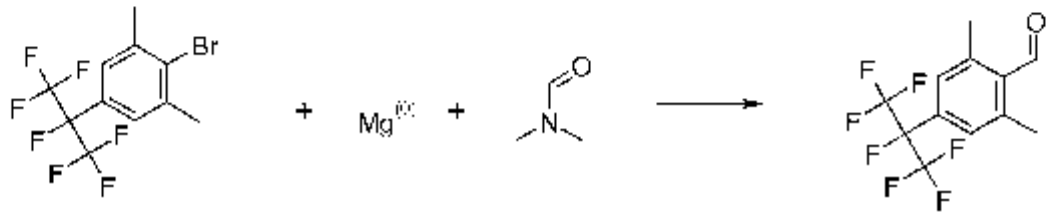


[0579] 100 mg (0,2 mmol) 2-Chlor-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl benzoesäure wurden in 2 ml trockenem Toluol vorgelegt, dann 120 mg (1 mmol) Thionylchlorid (SOCl2) und 1 Tropfen Dimethylformamid (DMF) zugegeben und zum Rückfluss erhitzt. Nach dem Ende der Gasentwicklung wurde noch 30 Minuten unter Rückfluss nachgerührt und dann im Vakuum im Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde in 1 ml trockenem Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 29 mg (0,5 mmol) Cyclopropylamin in 1 ml Dichlormethan bei 0 °C zugetropft. Anschließend wurde 2 Stunden bei Raumtemperatur nachgerührt. Zur Aufarbeitung wurde auf 5 %ige wässrige Natriumhydrogencarbonat-Lösung gegossen, die organische Phase abgetrennt, mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 40 g Kieselgel und einem Gradienten in Cyclohexan/Essigester von 90:10 bis 50:50 (v/v) chromatographiert. Es wurden 159,5 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamid (Verbindung **I-T2-1**) erhalten.

[HPLC-MS$^{9)}$: logP = 4,9, Masse (m/z) = 534 [M+H]+.

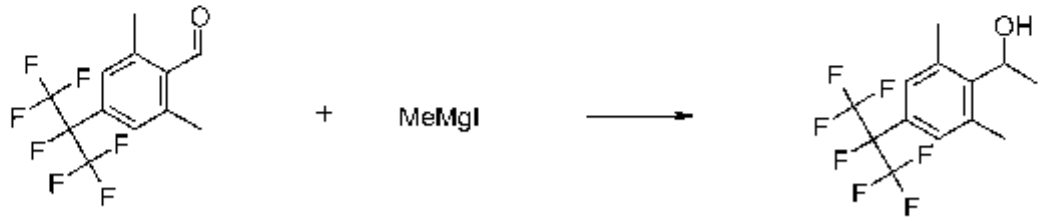
^{1}H-NMR (400 MHz, d_3-Acetonitril): δ (ppm) = 8,29 (d, J=2,5 Hz, 1 H), 7,82-7,85 (m, 2H), 7,52 (d, J=8,8 Hz, 1 H), 7,44 (s, 2 H), 6,97 (s (breit), 1 H (N-H)), 6,54 (d, J=2,5 Hz, 1 H), 2,82-2,86 (m, 1H), 0,74-0,79 (m, 2 H), 0,59-0,61 (m, 2 H).

Herstellung der Ausgangsverbindungen:

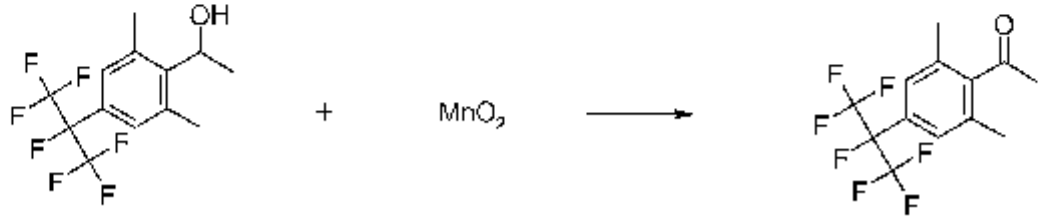


[0580] 271mg (11,1 mg-Atom) Magnesiumspäne wurden vorgelegt, mit etwas trockenem Tetrahydrofuran bedeckt und, nach Zugabe einiger Tropfen einer Lösung von 3 g (8,49 mmol) 2-Brom-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol (hergestellt nach US2003/187233, S. 6, Example 2/4 [0080]) in 10 ml trockenem Tetrahydrofuran, ein Krümel Iod zugefügt. Zum Anstarten wurde die Mischung auf 60 °C erhitzt. Nach dem Anspringen der Reaktion wurde dann der Rest der das 2-Brom-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol enthaltenden Lösung bei 60 °C zugetropft. Die Mischung wurde nach beendeter Zugabe noch eine Stunde bei 60 °C gerührt. Danach wurde mit einem Eisbad auf 0 °C gekühlt und 1,86 g (25,4 mmol) N,N-Dimethylformamid, gelöst in 5 ml trockenem Tetrahydrofuran, zugetropft. Es wurde dann ohne Kühlung gerührt bis die Mischung Raumtemperatur erreicht hatte. Zur Aufarbeitung wurde auf gesättigte wässrige Ammoniumchlorid-Lösung gegossen. Die Phasen wurden getrennt, die wässrige Phase mit Essigester extrahiert. Die

vereinigten organischen Phasen wurden mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Als Rückstand verblieben 2,34 g 2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzaldehyd, der ohne Reinigung in der nächsten Stufe verwendet wurde.



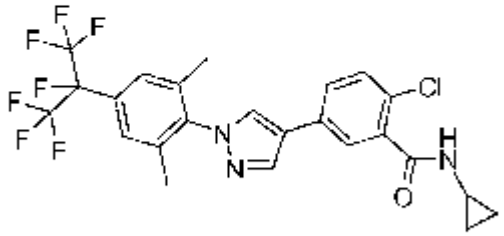
[0581] 2,34 g (7,74 mmol) 2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzaldehyd wurden in 15,5 ml trockenem Tetrahydrofuran vorgelegt und 2,58 ml (7,74 mmol) einer 3 M Lösung von Methylmagnesiumiodid in Diethylether unter Kühlung mit einem Eisbad zugetropft. Anschließend wurde eine Stunde ohne Kühlung weitergerührt. Zur Aufarbeitung wurde die Mischung auf 100 ml gesättigte wässrige Ammoniumchlorid-Lösung gegossen. Es wurde zweimal mit Essigester extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde über eine 40 g Kartusche mit Kieselgel mit einem Gradienten in Cyclohexan/Essigester von 90:10 bis 70:30 (v/v) chromatographiert und ergab 1,0 g 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]ethanol.



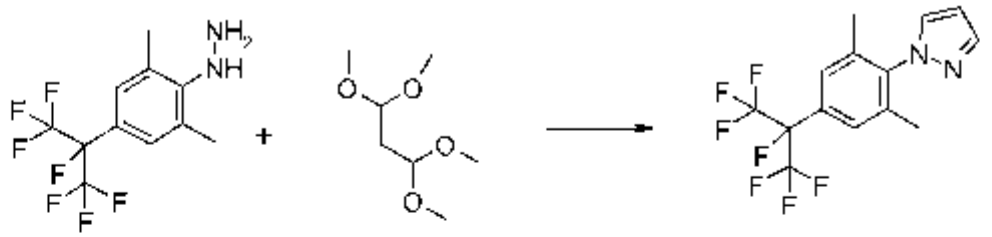
[0582] 1,49 g (4,68 mmol) 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]ethanol wurden in 84 ml Toluol vorgelegt und 10,8 g (124 mmol) Mangan(IV)oxid zugegeben. Die Mischung wurde eine Stunde unter Rühren zum Rückfluss erhitzt. Danach wurde abgekühlt, über eine Schicht Kieselgur filtriert und mit Essigester nachgewaschen. Das Filtrat wurde am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 50 g Kieselgel mit einem Gradienten in Cyclohexan/Essigester von 95:5 bis 70:30 (v/v) chromatographiert. Es wurden 1,03 g 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]ethanon erhalten.

Darstellungsverfahren I-T3

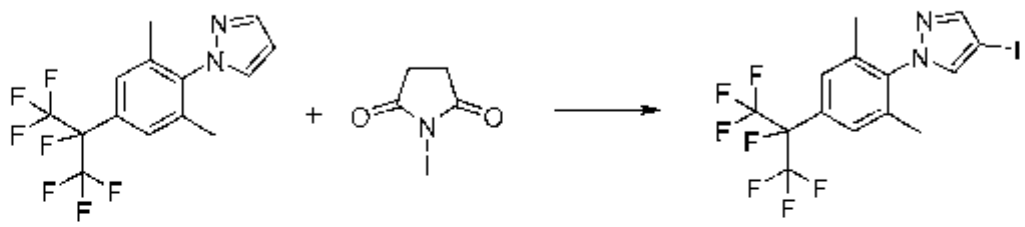
Beispiel I-T3-1:



[0583] Die Herstellung der Vorstufe [2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]hydrazin ist in der Literatur beschrieben (US 2003/187233).

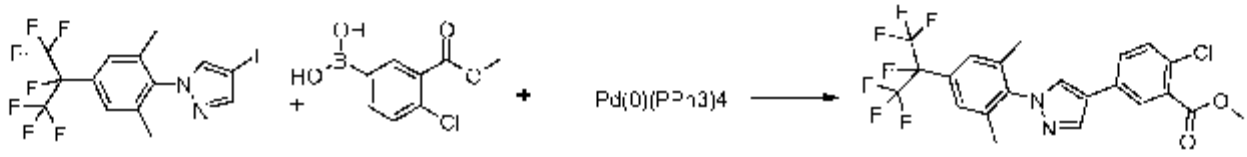


[0584] In einem 25 ml Kolben wurden 3,41 g (11,2 mmol) [2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]hydrazin (freie Base) in 13 ml Ethanol vorgelegt. Dann wurden 1,84 g (11,2 mmol) Tetramethoxypropan und anschliessend 0,55 g (5,6 mmol) 96 %ige Schwefelsäure zugegeben. Der Ansatz wurde 2 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Ethanol wurde an einem Rotationsverdampfer im Vakuum abgedampft. Der Rückstand wurde zwischen Essigester und gesättigter wässriger Natriumhydrogencarbonat-Lösung verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde im Vakuum bei 1 mbar und 150 °C im Kugelrohr destilliert und ergab 2,5 g an 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol.

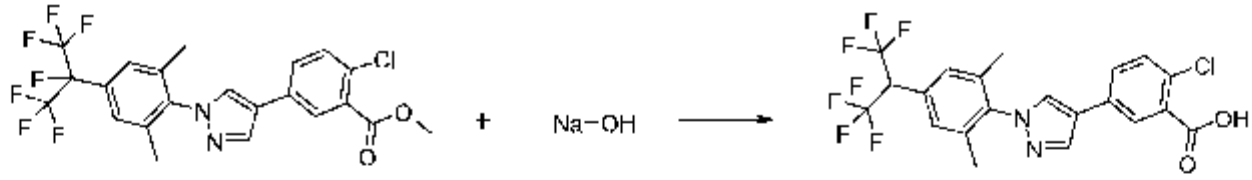


[0585] In einem 250 ml Kolben wurden 2,5 g (7,34 mmol) 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol in 30 ml Acetonitril vorgelegt und 8,3 g (36,9 mmol) N-Jodsuccinimid in 50 ml Acetonitril zugetropft. Anschliessend wurde zum Rückfluss erhitzt. Zur

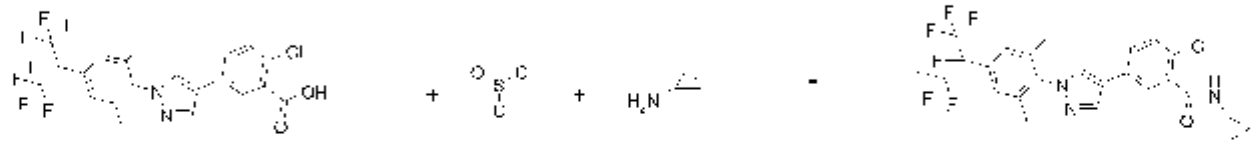
Aufarbeitung wurde eingedampft, der Rückstand zwischen Wasser und Essigester verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, erst mit gesättigter wässriger Natriumhydrogensulfit-Lösung, dann mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und eingedampft. Der Rückstand wurde durch Chromatographie mit Kieselgel mittels eines Gradienten von 90:10 bis 70:30 (v/v) in Cyclohexan/Essigester gereinigt. Nach dem Eindampfen der das Produkt enthaltenden Fraktionen wurden 2,5 g eines Rückstands erhalten der aus 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4-iod-pyrazol und etwas Toluol bestand.



[0586] In einem 100 ml Kolben wurden 280 mg (0,6 mmol) 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4-iod-pyrazol und 0,129 g (0,60 mmol) [4-Chlor-3-(methoxycarbonyl)phenyl]boronsäure in 21 ml Isopropanol vorgelegt und zuletzt 1,84 ml (1,84 mmol) entgaste 1 molare Natriumhydrogencarbonat-Lösung zugegeben. Es wurden 0,035 g (0,03 mmol) Tetrakis(triphenylphosphin)palladium(0) zugefügt. Danach wurde zum Rückfluss erwärmt. Zur Aufarbeitung wurde am Rotationsverdampfer abgedampft und der Rückstand zwischen Wasser und Essigester verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, einmal mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde durch Chromatographie mit Kieselgel mittels eines Gradienten von 90:10 bis 70:30 (v/v) in Cyclohexan/Essigester gereinigt und ergab 151 mg an 2-Chlor-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäuremethylester.



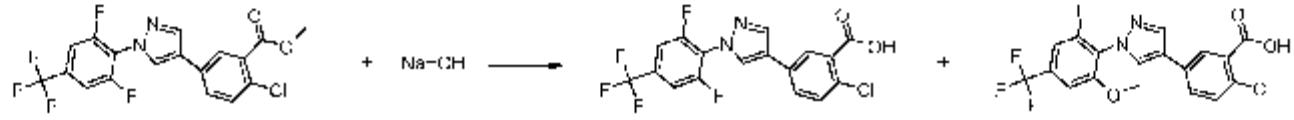
[0587] 0,151 g (0,29 mmol) 2-Chlor-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäuremethylester wurden in 11 ml Methanol vorgelegt und 0,3 ml (0,3 mmol) 1M Natronlauge zugegeben. Anschliessend wurde 6 Stunden zum Rückfluss erhitzt, überschüssiges Lösungsmittel im Vakuum eingedampft, der Rückstand mit verdünnter Salzsäure aufgenommen und dreimal mit Essigester extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet, eingedampft und ergaben 130 mg an 2-Chlor-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäure.



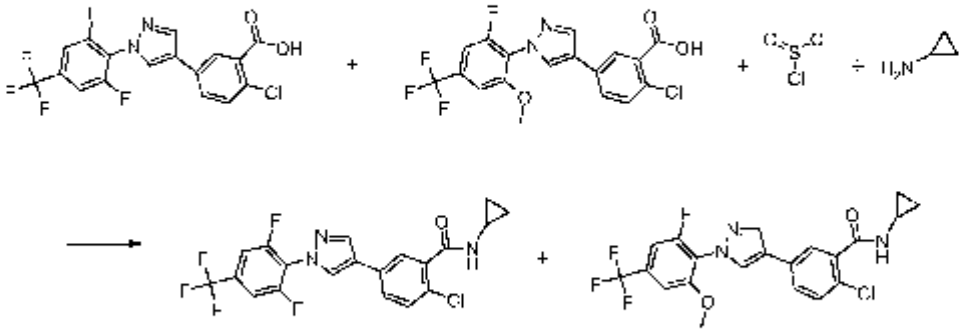
[0588] 0,134 g (0,27 mmol) 2-Chlor-5- [2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäure wurden in 1,26 ml Toluol gelöst und 0,161 g (1,35 mmol) Thionylchlorid zugegeben. Die Mischung wurde 2 Stunden auf 80 °C erhitzt. Danach wurde im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde in 1,26 ml Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 39 mg (0,67 mmol) Cyclopropylamin in 0,63 ml Dichlormethan unter Kühlung bei 0°C zugetropft und die Lösung gekühlt. Zur Aufarbeitung wurde 5 %ige wässrige Natriumdihydrogenphosphat-Lösung zugefügt, die organische Phase abgetrennt, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde mit Kieselgel mit einem Gradienten von Cyclohexan/Essigester 9:1 bis 7:3 (v/v) getrennt und ergab 46 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]benzamid (Verbindung **I-T3-1**).

[HPLC-MS³]: logP 4,36, Masse (m/z) 534 [M+H]⁺.
¹H-NMR (400 MHz, d₃-Acetonitril): δ = 8,11 (s, 1 H), 8,06 (s, 1 H), 7,68 (d, J1=2,2 Hz, 1 H), 7,62-7,65 (dd, J1=8,4 Hz, J2=2,2 Hz, 1H), 7,45 (d, J=8,4 Hz, 1 H), 6,9 (s (breit), 1 H (N-H)), 3,97 (s, 3 H), 2,82-2,88 (m, 1H), 0,76-0,8 (m, 2 H), 0,57-0,61 (m, 2 H).

Beispiele I-T3-48 und I-T3-50



[0589] 2,46 g (5,9 mmol) Methyl-2-chlor-5-[1-[2,6-difluor-4-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoat wurden in 127 ml Methanol vorgelegt und 5,9 mg (5,9 mmol) 1 molare Natronlauge zugegeben. Die Mischung wurde 2 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Danach wurde abgekühlt und der grösste Teil des Methanols am Rotationsverdampfer im Vakuum entfernt. Der wässrige Rückstand wurde mit Dichlormethan extrahiert. Der Extrakt wurde verworfen. Die wässrige Phase wurde mit 33 %iger Salzsäure auf pH 1 gestellt und zweimal mit Dichlormethan extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und eingedampft. Es wurden 1,41 g Rückstand als ein 45:55 (LC/MS-Flächen) Gemisch von 2-Chlor-5-[1-[2,6-difluor-4-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäure und 2-Chlor-5-[1-[2-fluor-6-methoxy-4-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäure erhalten.



[0590] 700 mg (ca. 1,7 mmol) einer 45:55 (LC/MS-Flächen) Mischung von 2-Chlor-5-[1-[2,6-difluor-4-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäure und 2-Chlor-5-[1-[2-fluor-6-methoxy-4-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzoesäure wurden in 6,6 ml Toluol gelöst und 1,34 g (8,7 mmol) Thionylchlorid zugegeben. Die Mischung wurde 2 Stunden auf 80 °C erhitzt. Danach wurden am Rotationsverdampfer im Vakuum alle flüchtigen Bestandteile abgezogen. Der Rückstand wurde in 3,3 ml Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 248 mg (4,34 mmol) Cyclopropylamin in 3,3 ml Dichlormethan bei 0 °C zugetropft. Die Mischung wurde dann 2 Stunden ohne Kühlung gerührt. Danach wurde die Lösung mit 5%iger wässriger Natriumdihydrogenphosphat-Lösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und eingedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 40 g Kieselgel und einem Gradienten in Cyclohexan/Essigester von 90:10 bis 50:50 (v/v) chromatographiert. Es wurden 240 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[1- 2,6-difluor-4-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamid (Beispiel **I-T3-48**)

[HPLC-MS[a]]: logP = 3,2, Masse (m/z) = 442 [M+H]+.

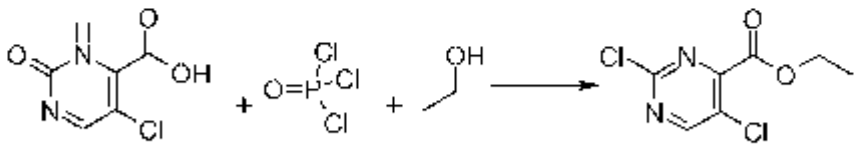
^{1}H-NMR (400 MHz, d_3-Acetonitril): δ (ppm) = 8,26 (s, 1 H), 8,19 (s, 1H), 7,61-7,69 (m, 4H), 7,46 (d, J = 8,3 Hz, 1H), 6,94 (s, 1 H (breit)), 2,82-2,88 (m, 1H), 0,75-0,80 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

und 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[1-[2-fluor-6-methoxy-4-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamid (Beispiel **I-T3-50**) erhalten.

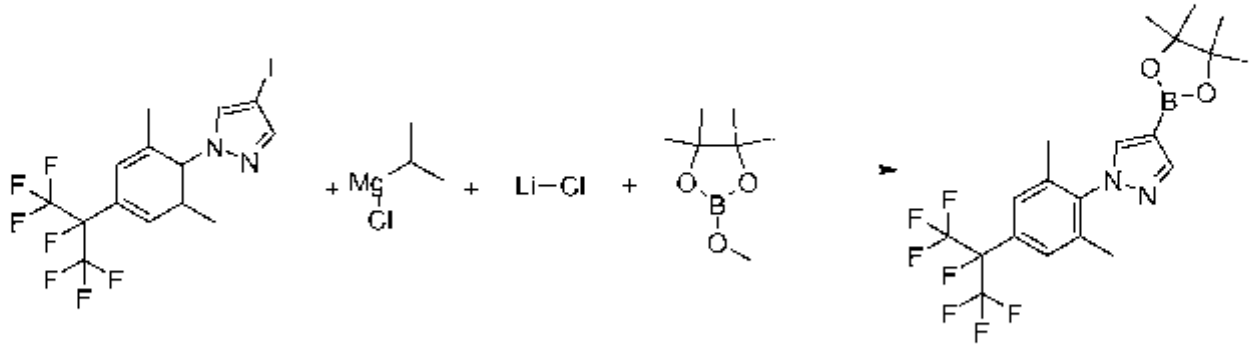
[HPLC-MS[a]]: logP = 3,1, Masse (m/z) = 454 [M+H]+.

^{1}H-NMR (400 MHz, d_3-Acetonitril): δ (ppm) = 8,13 (s, 1 H), 8,11 (s, 1H), 7,67 (d, J = 2,2 Hz, 1 H), 7,62 (dd, J_1 = 8,3 Hz, J_2 = 2,2 Hz, 1 H), 7,45 (d, J = 8,3 Hz, 1H), 7,32 (s, 1 H), 7,30 (s, 1 H), 6,91 (s, 1 H (breit)), 3,90 (s, 3 H), 2,83-2,87 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,57-0,61 (m, 2 H).

Beispiel I-T3-121:

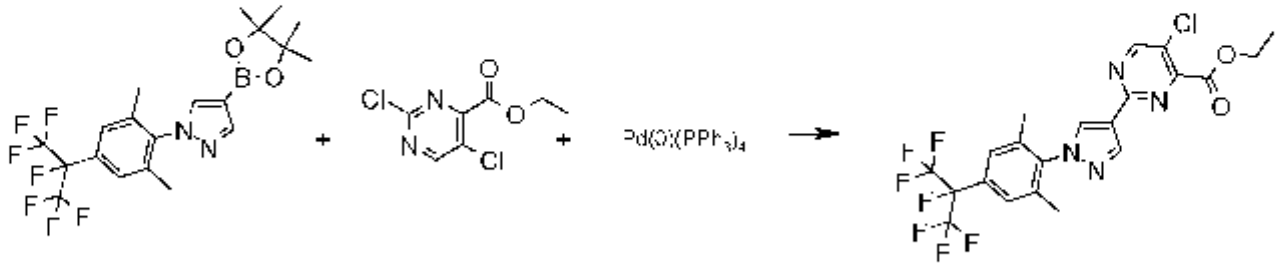


[0591] 4,6 ml (49,6 mmol) Phosphoroxychlorid wurden vorgelegt und 1,3 g (7,44 mmol) 5-Chlor-2-oxo-1H-pyrimidin-6-carbonsäure (kommerziell erhältlich bzw. kann nach literaturbekannten Vorschriften hergestellt werden (z.B. Gacek, Michel; Ongstad, Leif; Undheim, Kjell; Acta Chemica Scandinavica, Series B: Organic Chemistry and Biochemistry B33(2), (1979), S.150-1)) eingetragen. Es wurde langsam hochgeheizt und 2 Stunden unter Rückfluss gehalten. Danach wurde etwas abgekühlt und das überschüssige Phosphoroxychlorid im Vakuum am Rotationsverdampfer abgezogen. Zum Rückstand wurden 20 ml trockenes Ethanol zugegeben und anschliessend über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Danach wurde überschüssiges Ethanol im Vakuum am Rotationsverdampfer abgezogen. Der Rückstand wurde in Dichlormethan aufgenommen und dreimal mit gesättigter wässriger Natriumhydrogencarbonatlösung gewaschen. Die wässrigen Phasen wurden mit Dichlormethan rückextrahiert, die vereinigten organischen Phasen dann mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel mit einem Gradienten von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Ethylacetat 50:50 (v/v) chromatographiert und ergab 115 mg 2,5-Dichloropyrimidin-4-carbonsäureethylester.

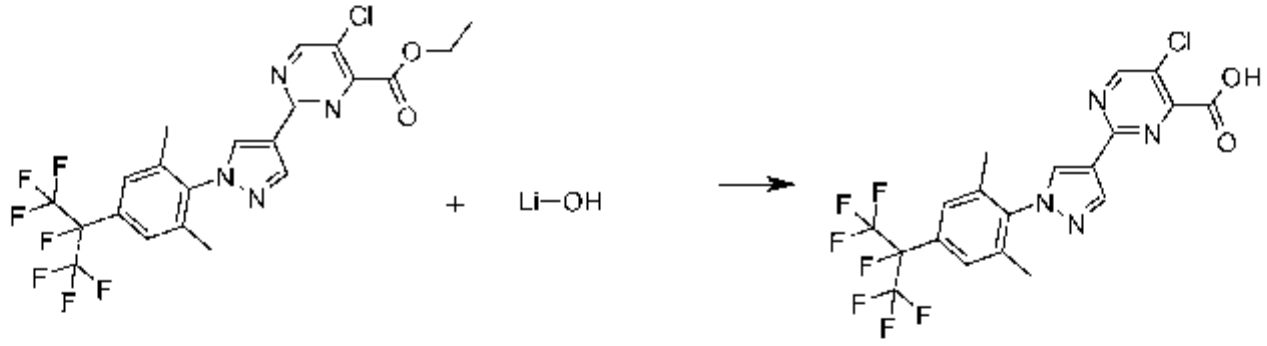


[0592] In einem ausgeheizten 25 ml Dreihalskolben wurden 5,94 ml (7,72 mmol) einer 1,3 molaren Lösung von i-Propyl-magnesium-chlorid/Lithiumchlorid Komplex vorgelegt und eine Lösung von 4-Iod-1-[2-methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]pyrazole (Herstellung siehe Beispiel I-T3-1) in 3,4 ml trockenem Tetrahydrofuran zugetropft. Es wurde über Nacht bei Raumtemperatur nachgerührt, dann auf -20 °C gekühlt und 1,63 g (10,2 mmol) 2-Methoxy-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan zugetropft. Die Mischung wurde noch 1 Stunde bei 0 - 10 °C nachgerührt. Zur Aufarbeitung wurde auf 30 ml gesättigte wässrige Ammoniumchloridlösung gegossen und mit Cyclohexan verdünnt. Die Phasen wurden getrennt, die wässrige Phase mit Cyclohexan nachextrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden erst mit gesättigter wässriger Natriumhydrogencarbonatlösung und dann mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Nach Chromatographie über eine 40 g Kartusche mit Kieselgel mit einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis nach Cyclohexan/Essigester 80:20 (v/v) wurden 0,6 g 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-

tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol erhalten.

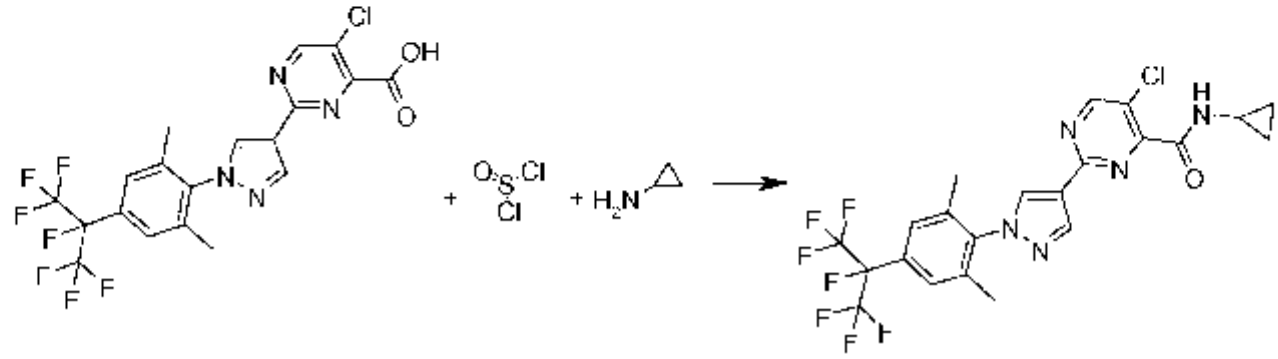


[0593] 155 mg (0,7 mmol) 2,5-Dichloropyrimidin-4-carbonsäureethylester und 327 mg (0,7 mmol) 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol wurden in 25 ml Dioxan vorgelegt und 234 mg (2,2 mmol) Natriumcarbonat und 1,25 ml Wasser wurden zugegeben. Den Ansatz wurde mit Argon entgast und dann 81 mg (0,07 mmol) Tetrakis(triphenylphosphin)palladium(0) zugegeben. Es wurde nochmals mit Argon entgast und über Nacht bei 100°C gerührt. Am nächsten Morgen wurde abgekühlt und das Lösungsmittel im Vakuum am Rotationsverdampfer abgezogen. Der Rückstand wurde zwischen Wasser und Ethylacetat verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, einmal mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen und dann im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis zu einer Mischung von Cyclohexan/Ethylacetat 70:30 (v/v) chromatographiert. Es wurden 120 mg 5-Chlor-2-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carbonsäureethylester erhalten.



[0594] 0.120 g (0,23 mmol) 5-Chlor-2-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carbonsäureethylester wurden in einer Mischung aus 4,1 ml Dioxan und 1,44 ml Wasseer vorgelegt und 31 mg (0,74 mmol) Lithiumhydroxid Monohydrat zugegeben. Anschliessend wurde 4 Stunden bei Raumtemperatur gerührt, danach überschüssiges Lösungsmittel im Vakuum abgedampft, der Rückstand mit verdünnter Salzsäure aufgenommen und dreimal mit Dichlormethan extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden mit

gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet, eingedampft und ergaben 115 mg an roher 5-Chlor-2-[1-2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carbonsäure.

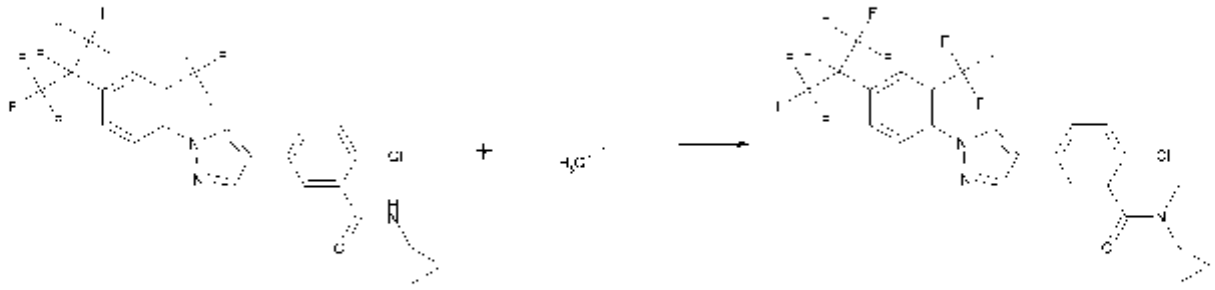


[0595] 0,110 g (0,22 mmol) rohe 5-Chlor-2-[1-2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl]pyrimidin-4-carbonsäure wurden in 2 ml Toluol gelöst, 0,132 g (1,1 mmol) Thionylchlorid zugegeben und ein kleiner Tropfen Dimethylformamid zugefügt. Die Mischung wurde 2 Stunden auf 80 °C erhitzt. Danach wurde im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde in 1 ml Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 32 mg (0,55 mmol) Cyclopropylamin in 1 ml Dichlormethan unter Kühlung bei 0°C zugetropft und anschliessend 2 Stunden ohne Kühlung gerührt. Zur Aufarbeitung wurde 5 %ige wässrige Natriumdihydrogenphosphat-Lösung zugefügt, die organische Phase abgetrennt, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel mit einem Gradienten von Cyclohexan/Essigester 9:1 bis 7:3 (v/v) getrennt und ergab 49 mg 5-Chlor-N-cyclopropyl-2-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-4-yl pyrimidin-4-carboxamid (**Verbindung I-T3-121**).

HPLC-MS[a]: logP = 4,5, Masse (m/z) = 536 [M+H]+.

^{1}H-NMR (400 MHz, d_5-Acetonitril): δ (ppm) = 8,84 (s, 1 H), 8,46 (s, 1 H), 8,44 (s, 1H), 7,87 (s, 1 H (breit)), 7,55 (s, 2 H), 2,84-2,91 (m, 1 H), 2,2 (s, 6 H), 0,79-0,83 (m, 2 H), 0,64-0,68 (m, 2 H).

Beispiel I-T3-134:



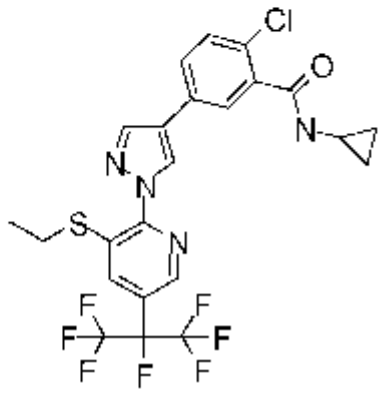
[0596] Zu einem auf 0°C gekühlten Gemisch von 6.5 mg (0.163 mmol) Natriumhydrid (60% in Mineralöl) in 2 ml trockenem Tetrahydrofuran wurden 49,3 mg (0,08 mmol) 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-

{1-[4-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)-2-(trifluormethyl)phenyl]-1H-pyrazol-4-yl}benzamid gegeben. Nach 30 Minuten wurden 35 mg (0,24 mmol) Methyliodid zugegeben und das Gemisch für 1 Stunde bei 0°C und gerührt, anschließend über 1 Stunde auf Raumtemperatur erwärmt und für weitere 14 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Danach wurde das Gemisch auf Wasser gegeben, mit Essigester extrahiert, die organische Phase über Natriumsulfat getrocknet und das Lösungsmittel unter vermindertem Druck entfernt. Der Rückstand wurde durch Chromatographie an Reversed-Phase-Kieselgel (C18) mit Wasser/Acetonitril (Gradient) als Laufmittel gereinigt. Es wurden 40.0 mg (0.068 mmol, 78%) 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[5-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzamid (Verbindung **I-T3-134**) erhalten.

[HPLC-MS[a]: logP = 4.88, Masse (m/z) = 588 [M+H]+.
^{1}H-NMR (400 MHz, d$_6$-DMSO): δ (ppm) = 8,82 (s, 1 H), 8,43 (s, 1 H), 8,25 (d, 1H), 8,11 (d, 1 H), 8,06 (d, 1 H), 7,81 (d, 1 H), 7,75 (m, 1 H), 7,54 (d, 1 H), 3,02 (s, 3 H), 2,72 (m, 1 H), 0,55 (m, 2 H), 0,46 (m, 2 H).

Beispiel I-T3-156:

[0597] 2-Chlor-*N*-cyclopropyl-5-{1-[3-(ethylsulfanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1H-pyrazol-4-yl}benzamid



2-(4-Brom-1H-pyrazol-1-yl)-3-chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin

[0598] 1.0g (3.16 mmol) 2,3-Dichlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin wurden zu einer Suspension von 0,51 g (3,48 mmol) 4-Brom-1H-pyrazol und 2,58 g (7,91 mmol) Cäsiumcarbonat in 10,0 mL Dimethylformamid p.a. getropft. Die Reaktion wurde 3h bei Raumtemperatur gerührt. Das Reaktionsgemisch wurde dann mit Ethylacetat verdünnt und dann mit halbgesättigter wässriger Ammoniumchlorid Lösung gewaschen. Die wässrige Phase wurde dann mehrfach mit Ethylacetat extrahiert und die vereinigten organischen Phasen anschließend mit dest. Wasser und gesättigter Natriumchlorid Lösung gewaschen. Die organische Phase wurde über Magnesiumsulfat getrocknet, filtriert und am Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck eingeengt. Das Rohprodukt wurde an Kieselgel säulenchromatographisch aufgereinigt.

[0599] Man erhält 1,34 g (3,14 mmol) 2-(4-Brom-1*H*-pyrazol-1-yl)-3-chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin als farbloses Öl.

HPLC-MS[3]: logP = 4,74, Masse (m/z) = 428 $[M-H]^-$.
^{1}H-NMR (400 MHz, D6-DMSO): 8,90 (s,1H), 8,67 (s,1H), 8,63 (d,1H), 8,06 (s,1H).

2-Chlor-5-{1-[3-chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-cyclopropylbenzamid

[0600] 150 mg (0,35 mmol) 2-(4-Brom-1*H*-pyrazol-1-yl)-3-chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridine, 136 mg (0,42 mmol) 2-Chlor-*N*-cyclopropyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzamid, 59 mg (0,70 mmol) Natriumhydrogencarbonat und 20 mg Tetrakis(triphenylphosphin)palladium (0,01 mmol) wurden in einer Mischung aus 1,5 mL Dioxan und 0,5 mL dest. Wasser gelöst. Die Lösungsmittel wurden vor der Verwendung ca. 30 Minuten mit Argon gesättigt in dem durch die Lösungsmittel Argongas durchgeleitet wurde. Das Reaktionsgemisch wurde 16 Stunden im Ölbad auf 100°C erhitzt. Nach dem das Reaktionsgemisch auf Raumtemperatur abgekühlt wurde, wurde das Gemisch mit Wasser versetzt und das Rohprodukt mehrfach mit Ethylacetat extrahiert. Die vereinigten org. Phasen wurden über Magnesiumsulfat getrocknet und über Kieselgel filtriert. Die Lösungsmittel wurden am Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck entfernt. Das Rohprodukt wurde an Kiesegel säulenchromatographisch aufgereinigt.

[0601] Man erhielt 25 mg (0,05 mmol) 2-Chlor-5-{1-[3-chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-cyclopropylbenzamid als farblosen Feststoff.

HPLC-MS[3]: logP = 4,08, Masse (m/z) = 541 $[M-H]^-$.
^{1}H-NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,02(s,1H), 8,89(s,1H), 8,61(d,1H), 8,54-8,52(m,1H), 8,50(s,1H), 7,83 7,81(m,2H), 7,52(d,1H), 2,87 2,81(m,1H), 0,74 0,65(m,2H), 0,60 0,50(m,2H)

2-Chlor-*N*-cyclopropyl-5-{1-[3-(ethylsulfanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamid

[0602] 300 mg (0,55 mmol) 2-Chlor-5-{1-[3-chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}-*N*-cyclopropylbenzamid wurden in 5,0 mL DMF abs. gelöst und mit einem Trockeneis/Acetonbad gekühlt. Zu der gekühlten Reaktionsmischung wurde eine Lösung von 81,6 mg (0,97 mmol) Natriumethanthiolat in 5 mL DMF abs. getropft. Nach 3 Stunden wurde die Reaktion auf Raumtemperatur erwärmt und vorsichtig auf Wasser gegossen. Das Rohprodukt wurde mehrfach mit Ethylacetat extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit gesättigter wässriger Natriumchlorid Lösung gewaschen, über Magnesiumsulfat getrocknet, filtriert und am Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck eingeengt. Das Rohprodukt wurde an Kiesegel säulenchromatographisch aufgereinigt.

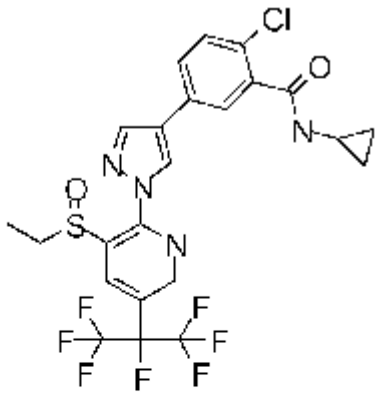
[0603] Man erhält 226 mg (0,40 mmol) 2-Chlor-*N*-cyclopropyl-5-{1-[3-(ethylsulfanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamid als farblosen Feststoff.

HPLC-MS[3]: logP = 4,69, Masse (m/z) = 567 [M−H]⁻.

1H-NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,08 (d, 1H), 8,59 (d, 1H), 8,53 (d, 1H), 8,47 (s, 1H), 8,02 (d, 1H), 7,85-7,82 (m, 2H), 7,53-7,50 (m, 1H), 3,08 (q, 2H), 2,87-2,81 (m, 1H), 1,22 (t, 3H), 0,74-0,69 (m, 2H), 0,58-0,54 (m, 2H).

Beispiel I-T3-157:

2-Chlor-*N*-cyclopropyl-5-{1-[3-(ethylsulfinyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamid



[0604] 100 mg (0,17 mmol) 2-Chlor-*N*-cyclopropyl-5-{1-[3-(ethylsulfanyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamid wurden in 10,0 mL Dichlormethan gelöst und mit einem Eisbad gekühlt. Es wurden portionsweise 43,5 mg 3-Chlorperbenzoesäure hinzugefügt. Das Reaktionsgemisch wurde 2 Stunden unter Eiskühlung gerührt. Das Reaktionsgemisch wurde mit 5mL 1N Natronlauge versetzt. Nach 5 Minuten wurde die wässrige Phase abgetrennt. Die organische Phase wurde nach Prüfung auf Peroxide am Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck eingeengt. Das Rohprodukt wurde an Kieselgel säulenchromatographisch aufgereinigt.

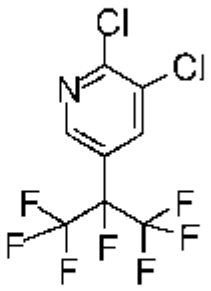
[0605] Man erhielt 61 mg 2-Chlor-*N*-cyclopropyl-5-{1-[3-(ethylsulfinyl)-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-yl]-1*H*-pyrazol-4-yl}benzamid als farblosen Feststoff.

HPLC-MS[3]: logP = 3,79, Masse (m/z) = 583 [M−H]⁻.

1H-NMR (400 MHz, D6-DMSO): 9,36 (s, 1H), 8,96 (d, 1H), 8,63 (s, 1H), 8,58 (s, 1H), 8,53 (d, 1H), 7,91 (s, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,53 (d, 1H), 3,45-3,30 (m, 1H unter Wasser), 2,95-2,88 (m ,1H), 2,86-2,81 (m, 1H), 1,08 (t, 3H), 0,74-0,69 (m, 2H), 0,60-0,50 (m, 2H).

Darstellung der Ausgangsverbindungen

2,3-Dichlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin



1. Stufe: 3-Chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-amin

[0606] 130,6 g (750 mmol) Natriumdithionit wurden zu einer auf 0-5°C temperierten Mischung aus 64,3 g (500 mmol) 3-Chlorpyridin-2-amin, 222 g (750 mmol) 1,1,1,2,3,3,3-Heptafluor-2-iodpropan und 126 g (1500 mmol) Natriumhydrogencarbonat in 2000 mL einer 3:1 Mischung aus Acetonitril/Wasser (v/v) unter Schutzgas hinzugegeben. Das Reaktionsgemisch wurde für 48 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Anschließend wurde am Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck das Acetonitril entfernt. Der Rückstand wurde mit 500 mL Wasser verdünnt. Das Rohprodukt wurde mehrfach mit Ethylacetat aus der wässrigen Phase extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden über Natriumsulfat getrocknet, filtriert und anschließend am Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck eingeengt. Das Rohprodukt wurde an Kieselgel säulenchromatographisch aufgereinigt.

2. Stufe: 3-Chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2(1H)-on

[0607] 5,8 g (19,5 mmol) 3-Chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2-amin wurden in 150 mL Schwefelsäure (20%, w/w) gelöst und auf 0-5°C gekühlt. Die Lösung wurde portionsweise mit 2,7 g (40 mmol) Natriumnitrit versetzt. Das Reaktionsgemisch wurde 16 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Das Rohprodukt wurde mehrfach mit Dichlormethan (DCM) aus dem Reaktionsgemisch extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden über Natriumsulfat getrocknet, filtriert und anschließend am Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck eingeengt. Das Rohprodukt wurde ohne Aufreinigung in der nächsten Stufe eingesetzt.

3. Stufe: 2,3-Dichlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin

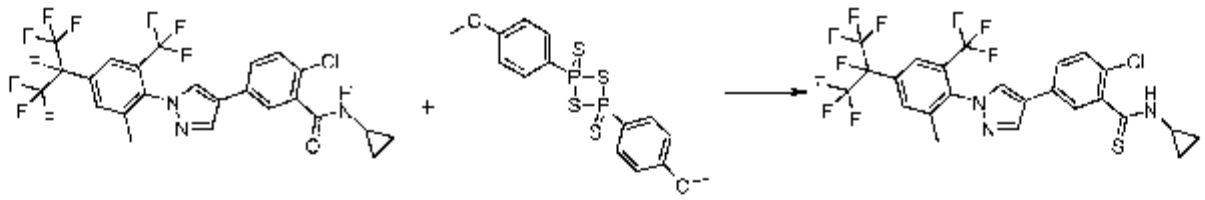
[0608] 15,4 g (51,7 mmol) 3-Chlor-5-(1,1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin-2(1H)-on und 150 mL Phosphorylchlorid wurden 5 Stunden auf 105°C erhitzt. Das Reaktionsgemisch wurde vorsichtig mit Natriumhydrogencarbonat Lösung neutralisiert. Das Rohprodukt wurde mehrfach mit DCM aus dem Reaktionsgemisch extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit gesättigter wässriger Natriumchlorid Lösung gewaschen, über Natriumsulfat getrocknet, filtriert und anschließend am

Rotationsverdampfer unter vermindertem Druck eingeengt. Das Produkt wurde durch Vakuumdestillation (Sdp. 40°C bei 1 mbar) aufgereinigt.

[0609] Man erhielt 14,8 g 2,3-Dichlor-5-(1,1,2,3,3,3-heptafluorpropan-2-yl)pyridin als farblose Flüssigkeit.

MS: Masse (m/z) = 315 [M] .
1H-NMR (400 MHz, d1-Chloroform): 8,48 (s, 1H), 7,95 (s, 1H).

Beispiel I-T3-161:

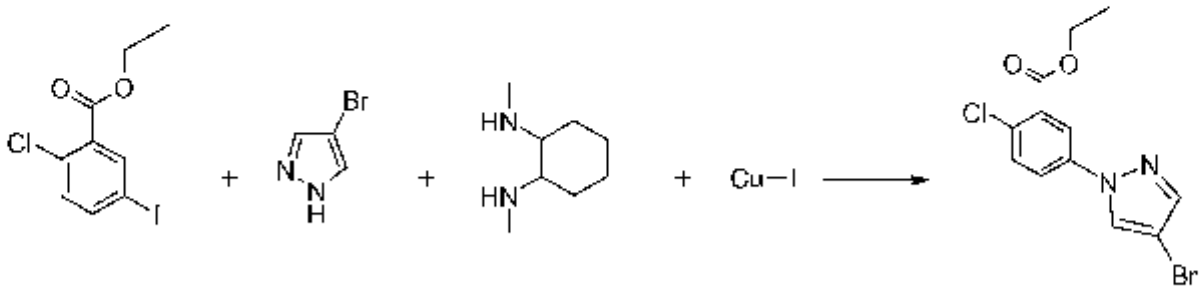


[0610] 294 mg (0,5 mmol) 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[1-[2-methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzamid wurden in einer Mischung aus 0,5 ml ethanolfreiem Trichlormethan und 1,5 ml 1,2-Dimethoxyethan vorgelegt und 101 mg (0,25 mmol) Lawessons-Reagenz (2,4-Bis(4-methoxyphenyl)-1,3,2,4-dithiadiphosphetan-2,4-disulfid) zugefügt. Die Mischung wurde 4 Stunden auf 50°C erwärmt. Danach wurde abgekühlt und das Lösungsmittel im Vakuum am Rotationsverdampfer abgezogen. Der Rückstand wurde zwischen Ethylacetat und gesättigter wässriger Natriumhydrogencarbonat Lösung verteilt, die wässrige Phase einmal mit Ethylacetat nachextrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 40 g Kieselgel und einem Gradienten in Cyclohexan/Essigester von 90:10 bis 50:50 (v/v) chromatographiert. Es wurden 248 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[1-[2-methyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]-6-(trifluormethyl)phenyl]pyrazol-4-yl]benzolcarbothioamid (Verbindung **I-T3-161**) erhalten .

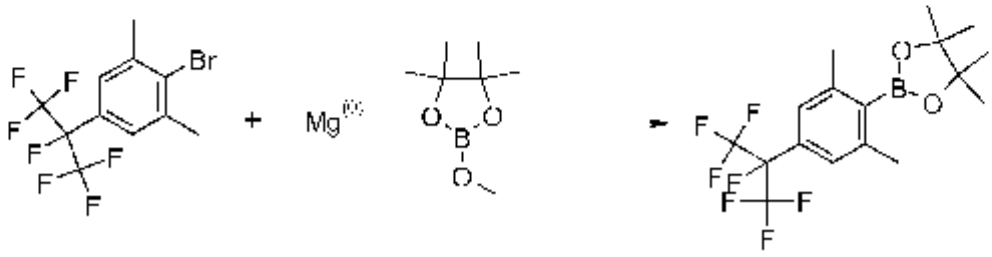
[HPLC-MS[3]: logP = 5,0, Masse (m/z) = 604 [M+H]+.
^{1}H-NMR (400 MHz, d_6-Acetonitril): δ (ppm) = 8,62 (s, 1 H (breit)), 8,14 (s, 1 H), 8,10 (s, 1H), 8,0 (s, 1 H), 7,95 (s, 1 H), 7,63 (d, J=2,2 Hz, 1 H), 7,57-7,60 (m, 1 H), 7,42 (d, J=8,4 Hz, 1 H), 3,02 (s, 3 H), 3,37-3,44 (m, 1 H), 0,92-0,95 (m, 2 H), 0,74-0,78 (m, 2 H).

Darstellungsverfahren I-T4

Beispiel I-T4-1:

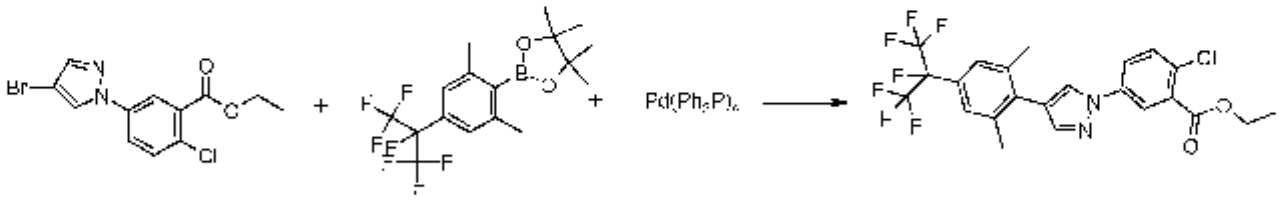


[0611] 3,81 g (12,2 mmol) 2-Chlor-5-iod-benzoesäureethylester wurden in 37 ml Dimethylformamid vorgelegt, 2,885 g (19,6 mmol) 4-Brom-pyrazol, 5,09 g (36,8 mmol) frisch gemahlenes Kaliumcarbonat, 0,349 g (2,4 mmol) 1,2 Bis-(methylamino)-cyclohexan (racemisch,trans) und 0,234 g (1,22 mmol) Kupfer(I)iodid zugegeben. Der Ansatz wurde mit Argon entgast und dann eine Stunde zum Rückfluss erhitzt. Zur Aufarbeitung wurde abgekühlt, auf 100 ml Wasser gegossen und zweimal mit je 100 ml Essigester extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden zweimal mit 100 ml Wasser und anschliessend mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde zur Reinigung über eine 120 g-Kartusche mit Kieselgel mit einem Gradienten, von Cyclohexan/Essigester von 90:10 bis 70:30 (v/v) chromatographiert. Es wurden 1,41 g 5-(4-Brompyrazol-1-yl)-2-chlor-benzoesäureethylester erhalten.



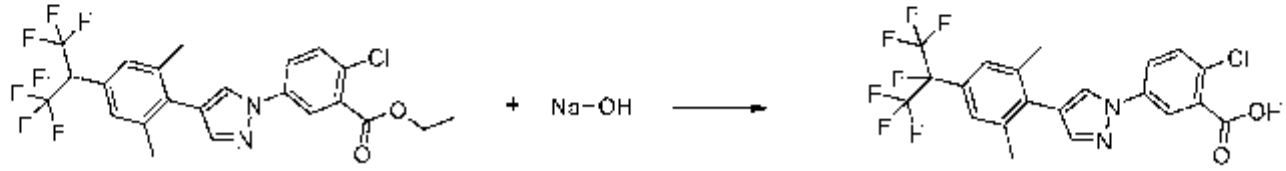
[0612] 0,158 g (6,49 mg) Magnesiumspäne wurden mit 1,5 ml trockenem Tetrahydrofuran bedeckt. Es wurden einige Tropfen einer Lösung von 1,75 g (4,95 mmol) 2-Brom-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol (hergestellt nach US2003/187233, S. 6) in 2,5 ml trockenem Tetrahydrofuran zugegeben. Zum Starten wurde ein Krümel Jod zugegeben und auf ca. 55 °C erwärmt. Nach dem Start der Reaktion wurde die restliche Lösung des 2-Brom-1,3-dimethyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzols bei einer Temperatur von 55 °C zugetropft. Nach beendeter Zugabe wurde noch 1 Stunde bei 55 °C nachgerührt, dann auf 0 °C gekühlt und eine Lösung von 2-Methoxy-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan in 2,5 ml trockenen Tetrahydrofuran zugetropft. Danach liess man auf Raumtemperatur kommen. Zur Aufarbeitung wurde der Ansatz auf gesättigte wässrige Ammoniumchloridlösung gegossen. Die Phasen wurden getrennt, die wässrige Phase mit Essigester nachextrahiert, die vereinigten organischen Phasen dann mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der

Rückstand wurde im Kugelrohr bei einem Vakuum von 1 mbar und 220 °C destilliert. Es wurden 1,85 g 2-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan erhalten.

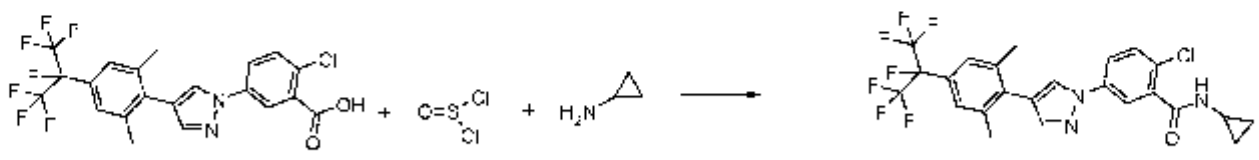


[0613] 0,947 g (2,87 mmol) 5-(4-Brompyrazol-1-yl)-2-chlor-benzoesäureethylester und 1,15 g (2,87 mmol) 2-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan wurden in 62 ml Isopropanol vorgelegt, 8,7 ml (8,7 mmol) entgaste 1 molare wässrige Natriumhydrogencarbonat Lösung zugegeben. Der Ansatz wurde mit Argon entgast und 0,166 g (0,14 mmol) Tetrakis(triphenylphosphin)palladium(0) zugegeben und über Nacht zum Rückfluß erhitzt.

[0614] Zur Aufarbeitung wurde am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft und der Rückstand zwischen Wasser und Essigester verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, die wäßrige Phase mit Essigester nachextrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden dann einmal mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Als Rückstand wurden 1,17 g an rohem 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoesäureethylester erhalten.



[0615] 1,76 g (3,36 mmol) 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl benzoesäureethylester wurden in 72 ml Methanol vorgelegt und 4,03 ml (4,03 mmol) 1 molare Natronlauge zugegeben. Anschliessend wurde 3 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Zur Aufarbeitung wurde am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft, der Rückstand mit verdünnter Salzsäure aufgenommen und dreimal mit Essigester extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet, eingedampft und ergaben 1,36 g rohe 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzoesäure.

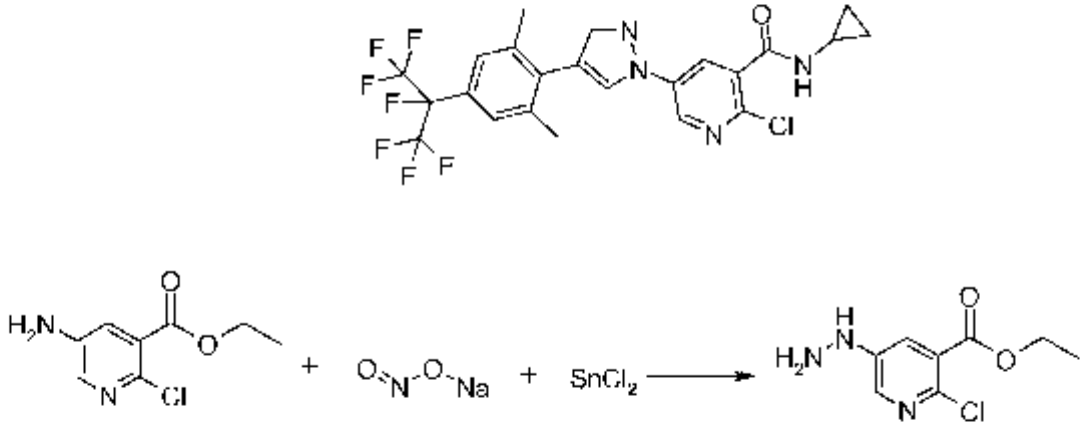


[0616] 1,36 g (2,76 mmol) rohe 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl benzoesäure wurden in 14 ml trockenem Toluol gelöst, 1 ml (13,8 mmol) Thionylchlorid zugegeben und dann 2 Stunden auf 80 °C erhitzt. Danach wurde im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft, 1 ml trockenes Toluol zugefügt und erneut eingedampft. Es wurden 1,4 g rohes Säurechlorid als Rückstand erhalten. 0,7 g des Rückstands wurden in 5 ml Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 0,195 g (3,41 mmol) Cyclopropylamin in 2 ml Dichlormethan bei Raumtemperatur zugetropft. Der Ansatz wurde 2 Stunden bei Raumtemperatur nachgerührt, dann auf 20 ml 5 %ige wässrige Natriumdihydrogenphosphatlösung gegossen. Die organische Phase wurde abgetrennt und mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde durch zweimalige Chromatographie über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel mit einem Gradienten von Cyclohexan/Essigester von 90:10 bis 50:50 (v/v) gereinigt. Es wurden 91 mg (1,36 mmol) N-Cyclopropyl-2-chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]benzamid (Verbindung **I-T4-1**) erhalten.

HPLC-MS$_{a)}$: log$P$ = 4,74, Masse (m/z) = 534 [M−H]+.

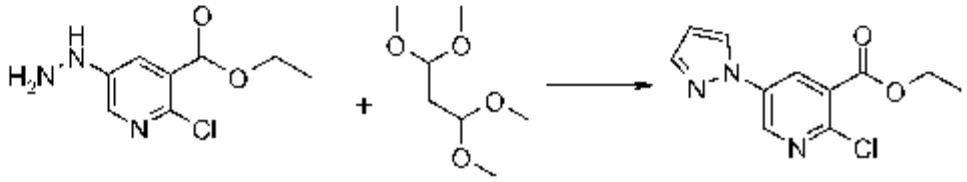
^{1}H-NMR (400 MHz, ds-Acetonitril): δ = (ppm) 8,17 (s, 1 H), 7,86 (s, 1 H), 7,84 (d, J1=2,7 Hz, 1 H), 7,69 (s, 1 H), 7,54(d, J1 8,8 Hz, 1H), 7,44 (s, 2 H), 6,97 (s (breit), 1 H (N-H)), 2,83-2,87 (m, 1H), 2,25 (s, 6 H), 0,76-0,8 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

Beispiel I-T4-3:

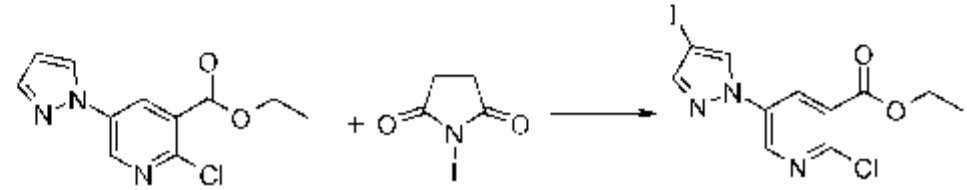


[0617] 2 g (9,96 mmol) 5-Amino-2-chlor-nicotinsäureethylester (kommerziell erhältlich) wurden in 8,6 ml 33 %iger wässriger Salzsäure vorgelegt und 30 Minuten bei Raumtemperatur gerührt. Danach wurden noch 7 ml Wasser zugegeben und mit einem Eisbad auf 0 °C gekühlt. Zu dieser Mischung wurde eine Lösung aus 750 mg (10,8 mmol) Natriumnitrit in 6,92 ml Wasser innerhalb von 30 Minuten zugetropft. Die Temperatur wurde mit einem Eisbad unterhalb von −5 °C gehalten. Es wurde 15 Minuten bei 0 °C nachgerührt.

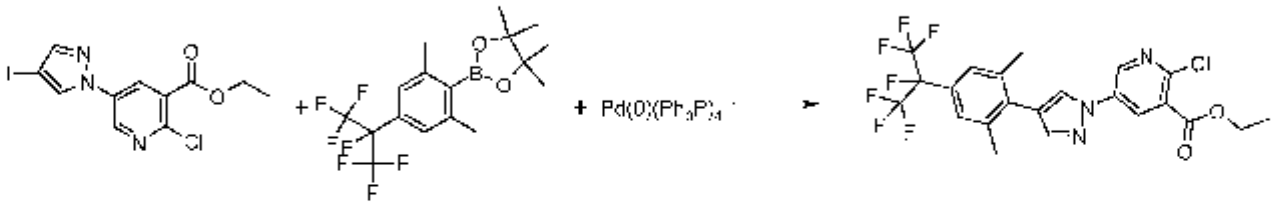
[0618] In einem zweiten Kolben wurden 5,77 g (25,5 mmol) Zinn(II)chlorid Dihydrat in 24 ml 16 %iger wässriger Salzsäure vorgelegt und die oben hergestellte Diazoniumsalz-Suspension langsam, bei 0°C, zugetropft. Es wurde 1 Stunde bei 0 °C nachgerührt. Danach wurden 50 ml Acetonitril und 40 ml gesättigte wässrige Kochsalzlösung zugesetzt. Die gebildeten Phasen wurden getrennt. Die wässrige Phase wurde zweimal mit je 50 ml Acetonitril nachextrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Als Rückstand wurden 10,7 g an rohem 2-Chlor-5-hydrazino-nicotinsäureethylester erhalten.



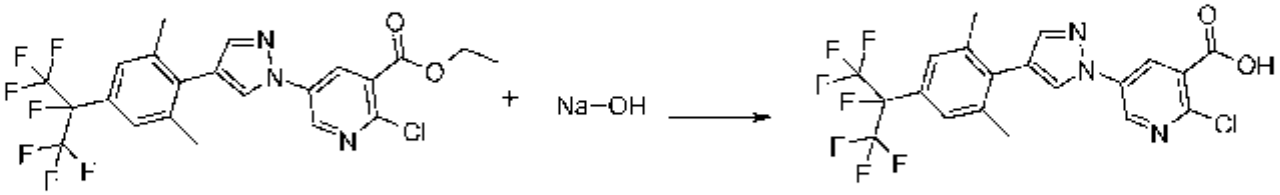
[0619] 10,7 g roher 2-Chlor-5-hydrazino-nicotinsäureethylester wurden in 50 ml Ethanol vorgelegt, danach 1,63 g (9,92 mmol) 1,1,3,3-Tetramethoxypropan und 487 mg 96 %ige Schwefelsäure zugegeben. Die Mischung wurde anschliessend 2 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Der grösste Teil des Ethanols wurde im Vakuum am Rotationsverdampfer entfert und der Rückstand zwischen gesättigter wässriger Natriumhydrogencarbonat Lösung und Ethylacetat verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, über Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Ethylacetat 50:50 (v/v) chromatographiert. Es wurden 396 mg 2-Chlor-5-(pyrazol-1-yl)-nicotinsäureethylester erhalten.



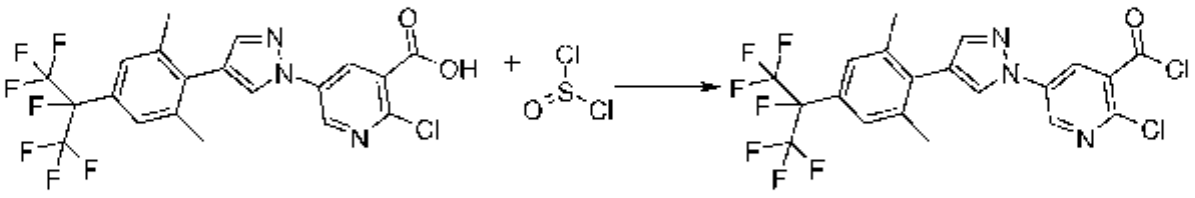
[0620] 396 mg (1,57 mmol) 2-Chlor-5-(pyrazol-1-yl)-nicotinsäureethylester wurden in 10 ml Acetonitril vorgelegt und 1,062 g (4,72 mmol) N-Iodsuccinimid zugegeben. Anschliessend wurde unter Argon 3 Stunden unter Rückfluss erwärmt. Der Ansatz wurde etwas abgekühlt und das Lösungsmittel im Vakuum am Rotationsverdampfer entfernt. Der Rückstand zwischen Wasser und Essigester verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, erst mit gesättigter wässriger Natriumhydrogensulfit-Lösung, danach mit gesättigter wässriger Natriumhydrogencarbonat-Lösung und zuletzt mit gesättigter wässriger Kochsalz-Lösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 15 g Kiesel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Ethylacetat 50:50 (v/v) chromatographiert.



[0621] 401 mg (1,06 mmol) 2-Chloro-5-(4-iodpyrazol-1-yl)pyridin-3-carbonsäureethylester und 425 mg (1,06 mmol) 2-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan wurden in 23 ml Isopropanol vorgelegt, dann 3,24 ml (3,24 mmol) entgaste 1 molare wässrige Natriumhydrogencarbonat-Lösung und 61 mg (0,05 mmol) Tetrakis(triphenylphosphin)palladium(0) zugegeben. Es wurde nochmals mit Argon entgast und über Nacht zum Rückfluss erhitzt. Danach wurde abgekühlt und die flüchtigen Bestandteile im Vakuum am Rotationsverdampfer abgezogen. Der Rückstand wurde zwischen Wasser und Ethylacetat verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, einmal mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Es wurden 415 mg an rohem 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carbonsäureethylester erhalten.

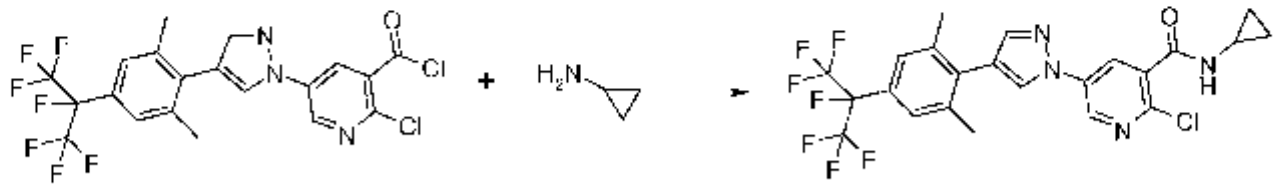


[0622] 416 mg (0,79 mmol) roher 2-Chloro-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carbonsäureethylester wurden in 16,9 ml Methanol gelöst und 0,952 ml (0,95 mmol) 1 M Natronlauge zugegeben. Es wurde 6 Stunden unter Rückfluss erhitzt, danach abgekühlt und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde zwischen Essigester und verdünnter Salzsäure verteilt. Die wässrige Phase wurde zweimal mit Essigester rückextrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Es wurden 380 mg rohe 2-Chloro-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carbonsäure erhalten.



[0623] 380 mg (0,76 mmol) rohe 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carbonsäure wurden in Toluol gelöst und 456 mg

(3,83 mmol) Thionylchlorid zugegeben. Den Ansatz wurde 2 Stunden auf 80 °C erhitzt und dann im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Es wurden 400 mg an rohem 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridine-3-carbonsäurechlorid erhalten.

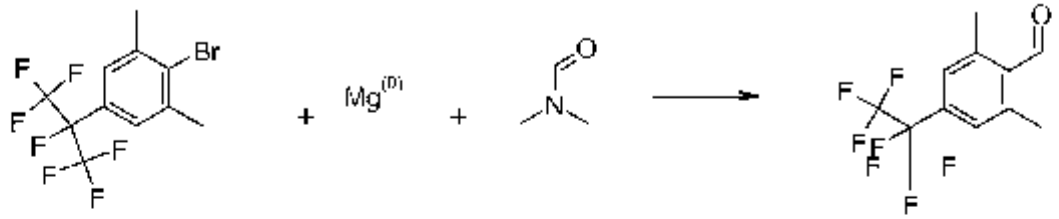


[0624] 138 mg (0,26 mmol) 2-Chlor-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridin-3-carbonsäurechlorid wurden in 1 ml Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 38 mg Cyclopropylamin in 1 ml Dichlormethan bei Raumtemperatur zugetropft. Die Mischung wurde 2 Stunden bei Raumtemperatur nachgerührt. Danach wurde die Mischung mit 5 %iger Natriumdihydrogenphosphatlösung und anschliessend mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel mit einem Gradienten in Cyclohexan/Ethylacetat von 90:10 bis 50:50 (v/v) chromatographiert. Es wurden 30 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[4-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrazol-1-yl]pyridine-3-carboxamid erhalten.

HPLC-MS$_{a)}$: logP = 4,42, Masse (m/z) = 534 [M−H]+.
^{1}H-NMR (400 MHz, d$_3$-Acetonitril): δ (ppm) = 8,92 (d, J = 2,8 Hz, 1 H), 8,22 (d, J1=2,8 Hz, 1 H), 8,20 (s, 1 H), 7,75(s, 1H), 7,44 (s, 2 H), 5,1 (s (breit), 1 H (N-H)), 2,84-2,88 (m, 1H), 2,25 (s, 6 H), 0,78-0,81 (m, 2 H), 0,59 0,63 (m, 2 H).

Darstellungsverfahren I-T22

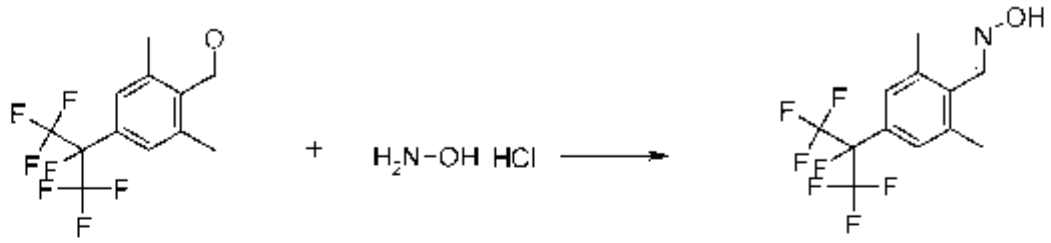
Beispiel I-T22-1:



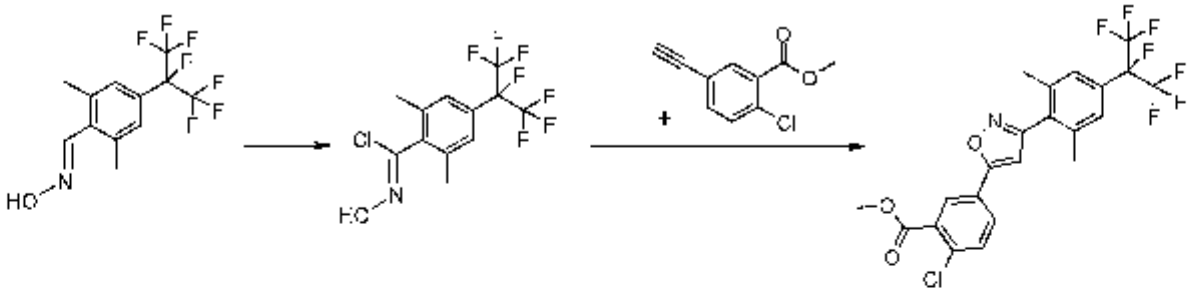
[0625] Die Herstellung von 2,6-Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-brombenzol ist in US2003/187233, S. 6 [0080] beschrieben.

[0626] In einem 25 ml Dreihalskolben wurden 158 mg (6,5 mg-Atom) Magnesiumspäne mit trockenem Tetrahydrofuran (THF) bedeckt. Dann wurden einige Tropfen einer Lösung von 1,75 g (4,95 mmol) 2,6-

Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-brombenzol in 2,5 ml trockenem THF zugegeben. Zum Start der Reaktion wurde ein Krümel Jod zugegeben und auf ca. 60 °C erwärmt. Nach gestarteter Reaktion wurde die restliche Lösung des 2,6-Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-brombenzols bei ca. 60 °C zugetropft. Nach beendeter Zugabe wurde noch eine Stunde bei 60 °C nachgerührt, danach auf 0 °C gekühlt und eine Lösung von 1,09 g (14,8 mmol) Dimethylformamid in 2,5 ml trockenem THF zugetropft. Danach liess man den Ansatz auf Raumtemperatur kommen. Zur Aufarbeitung wurde überschüssige gesättigte wässrige Ammoniumchlorid-Lösung zugefügt, die Phasen getrennt, die wässrige Phase mit Essigester nachextrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Als Rückstand verblieben 1,3 g an rohem 2,6-Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-benzaldehyd (Reinheit ca. 80 %), der ohne Reinigung weiterverwendet wurde.

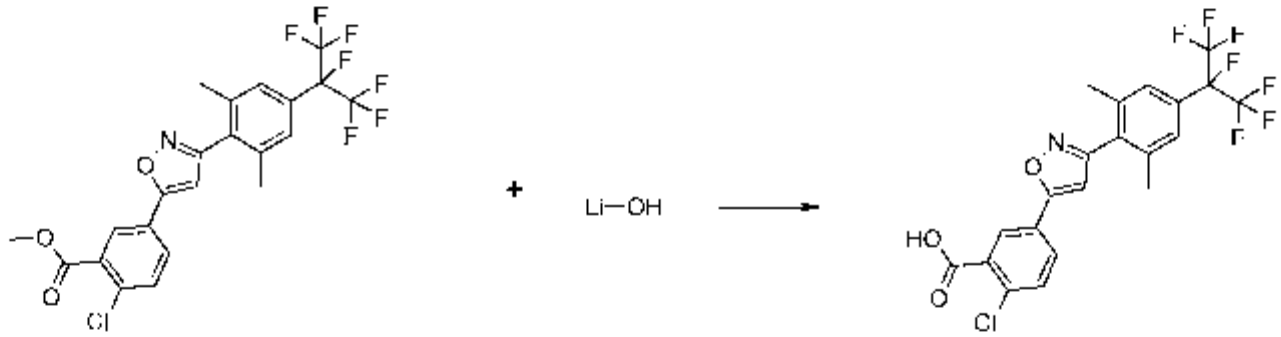


[0627] 1,3 g (ca. 3,44 mmol) roher 2,6-Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-benzaldehyd wurden in 26 ml Methanol gelöst, 361 mg (4,3 mmol) Natriumhydrogencarbonat zugegeben und die Mischung auf 0 °C gekühlt. Danach wurden 1,2 g (17,2 mmol) Hydroxylammoniumchlorid zugegeben und über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde die Mischung am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft und der Rückstand in 100 ml Essigester aufgenommen. Ungelöste Bestandteile wurden abfiltriert und das Filtrat im Vakuum am Rotationsverdampfer eingeengt. Der Rückstand wurde dann durch Chromatographie über eine 40 g Kartusche mit Kiesel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Essigester 70:30 (v/v) gereinigt. Es wurden 0,5 g 2,6-Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-benzaldehydoxim erhalten.

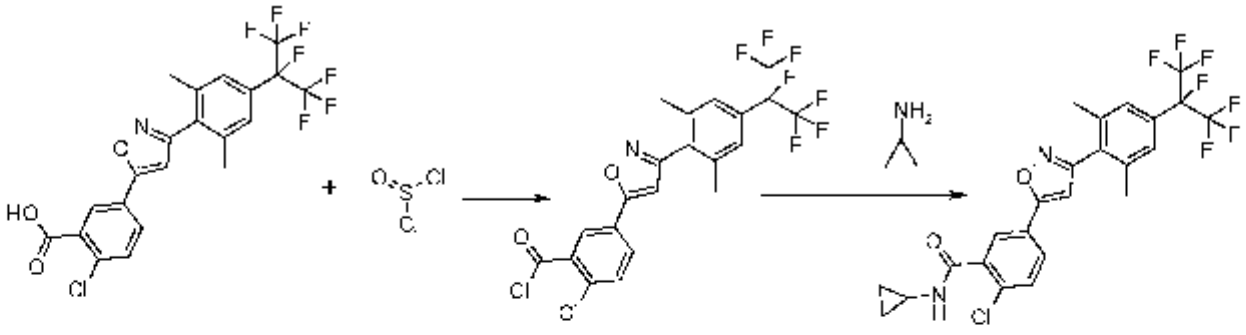


[0628] 505 mg (1,59 mmol) 2,6-Dimethyl-4-heptafluorisopropyl-benzaldehydoxim wurden in 3,5 ml Dimethylformamid (DMF) vorgelegt und 234 mg (1,75 mmol) N-Chlorsuccinimid zugegeben. Es wurde 3,5 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Danach wurde der Ansatz auf 0 °C gekühlt und eine Lösung von 310 mg (1,59 mmol) 2-Chlor-5-ethinyl-benzoesäuremethylester (hergestellt nach WO2012/107434, S. 103) in 1,5 ml DMF zugetropft, gefolgt von 355 mg (3,5 mmol) Triethylamin. Die

Reaktionsmischung wurde dann über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde auf Wasser gegossen, zweimal mit Dichlormethan extrahiert, die vereinigten Extrakte mit Wasser gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine 40 g Kartusche mit Kieselgel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan nach Cyclohexan/Essigester 80:20 (v/v) gereinigt. Es wurden 488 mg 2-Chlor-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoesäuremethylester erhalten.



[0629] 0,8 g (1,56 mmol) 2-Chlor-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoesäuremethylester wurden in einem Gemisch aus 18 ml Dioxan und 6,5 ml Wasser vorgelegt, 86 mg (2,04 mmol) Lithiumhydroxid-Monohydrat zugegeben und über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde im Vakuum eingedampft und der Rückstand zwischen einer Mischung aus verdünnter Salzsäure und Dichlormethan verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, die wässrige Phase erst mit Dichlormethan, dann mit Essigester extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Es wurden 680 mg 2-Chlor-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoesäure erhalten.



[0630] 680 mg (1,37 mmol) 2-Chlor-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzoesäure wurden in 7 ml Toluol gelöst und 0,5 ml (6,89 mmol) Thionylchlorid zugegeben. Die Mischung wurde zwei Stunden auf 80 °C erhitzt und danach im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. 200 mg (0,38 mmol) des so erhaltenen rohen

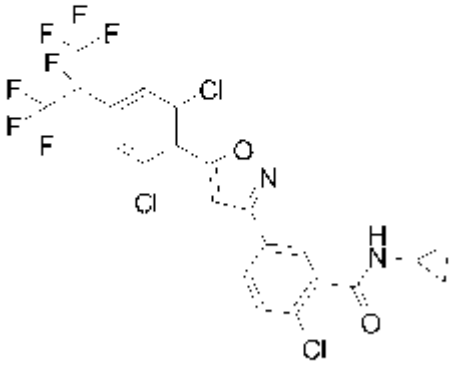
Säurechlorids wurden in 1 ml Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 56 mg (0,97 mmol) Cyclopropylamin in 0,95 ml Dichlormethan bei Raumtemperatur zugetropft. Die Mischung wurde danach über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde die Mischung auf 5 %ige wässrige Natriumdihydrogenphosphatlösung gegossen, die organische Phase abgetrennt, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel und einem Gradienten von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Essigester 80:20 (v/v) chromatographiert. Es wurden 165 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[3-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-5-yl]benzamid (Verbindung **I-T22-1**) erhalten.

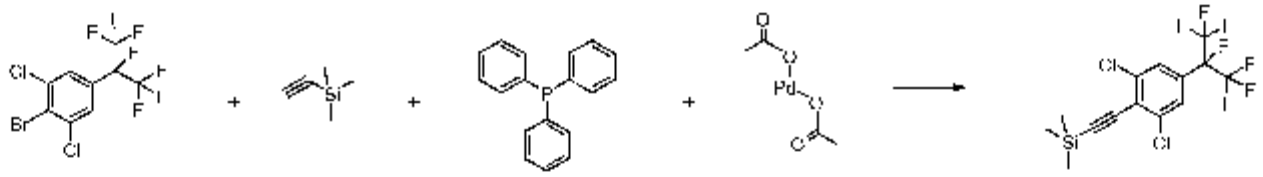
HPLC-MS[a]: logP = 4,75; Masse (m/z) = 535 [M−H]⁻.

^{1}H-NMR (400 MHz, d_6-Acetonitril): δ (ppm) = 7,93 (d, J = 2,2 Hz, 1 H), 7,89 (dd, J1 = 8,4 Hz, J2 = 2,2 Hz, 1H), 7,6 (d, J=8,4 Hz, 1H), 7,49 (s, 2 H), 7,03 (s (breit), 1 H (N-H)), 6,86 (s, 1 H), 2,83-2,88 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,59-0,62 (m, 2 H).

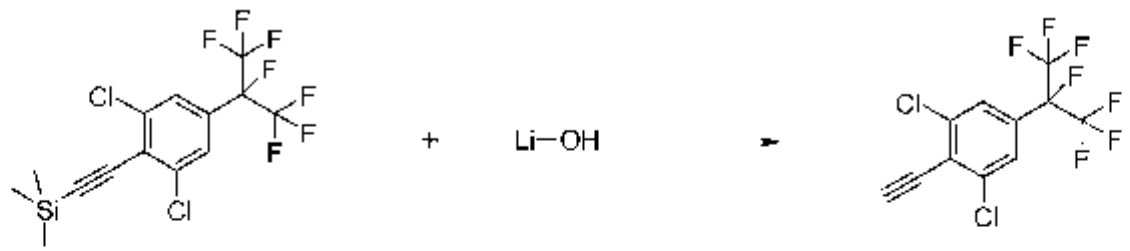
Darstellungsverfahren I-T23

Beispiel I-T23-1:





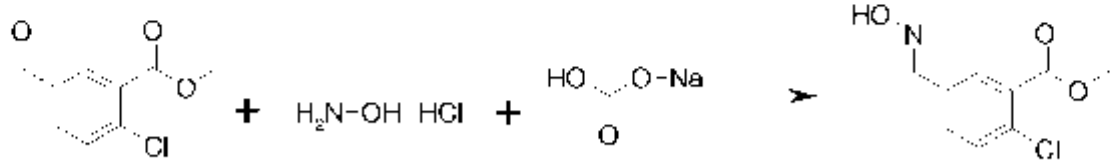
[0631] 3 g (7,61 mmol) 2-Brom-1,3-dichlor-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol (Herstellung siehe EP 1 253 128, Seite 10), 1,21 g (12,3 mmol) Ethinyltrimethylsilan, 86 mg (0,38 mmol) Palladium(II)acetat und 260 mg (1,0 mmol) Triphenylphosphin wurden in 20 ml trockenem Triethylamin vorgelegt und zum Rückfluss erhitzt. Nach Einengen des Volumens am Rotationsverdampfer bei 30 °C wurde der Rückstand mit 20 ml gesättigter Natriumhydrogencarbonatlösung versetzt und dreimal mit Dichlormethan extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden mit 5 %iger wässriger NaH2PO4-Lösung und anschliessend mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen. Nach Trocknung der Lösung mit Natriumsulfat und Einengung des Volumens am Rotationsverdampfer bei 30 °C erfolgte die Reinigung mittels Chromatographie an Kieselgel mit Cyclohexan als Laufmittel. Ausbeute: 1,4 g 2-[2,6-Dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]ethinyl-trimethyl-silan in einer Reinheit von ca. 50 % (LC/MS-Fläche).



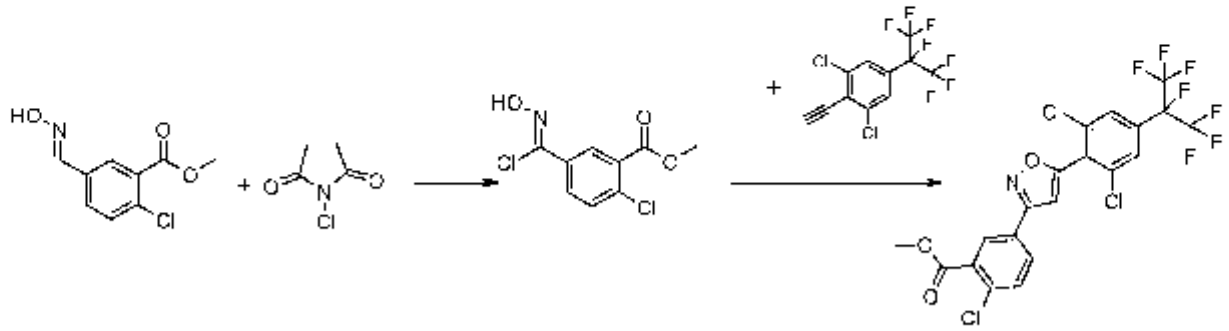
[0632] 1,4 g (3,4 mmol) 2-[2,6-Dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]ethinyl-trimethyl-silan wurden in 7 ml Tetrahydrofuran gelöst und eine Mischung aus 7 ml Methanol und 214 mg (5,1 mmol) Lithiumhydroxidmonohydrat bei Raumtemperatur zugegeben. Die Reaktionslösung am Rotationsverdampfer eingedampft und der Rückstand mit einem Gemisch aus Dichlormethan und Wasser aufgenommen. Die organische Phase wurde abgetrennt, mit Natriumsulfat getrocknet, im

Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft und ergab 880 mg ca. 50 %iges 1,3-Dichlor-2-ethinyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol.

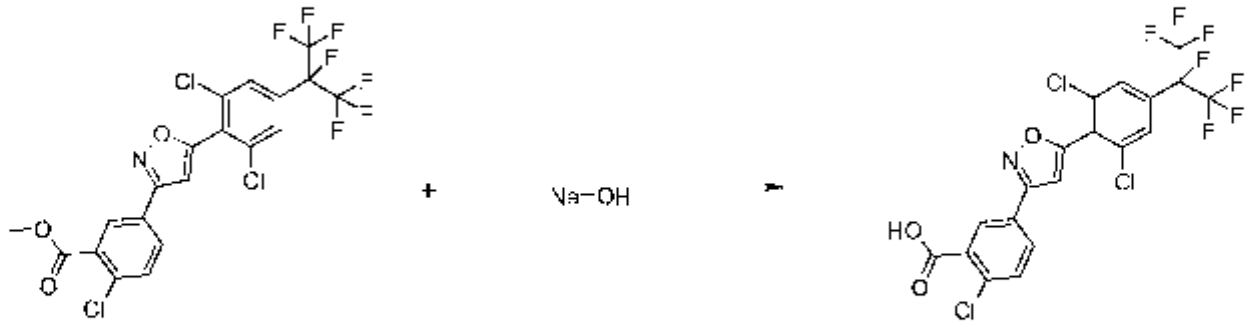
[0633] Die Herstellung von 4-Chlor-3-carbomethoxy-benzaldehyd ist bereits in der Literatur beschrieben (siehe z. B. WO 2010/011584, S. 19-20).



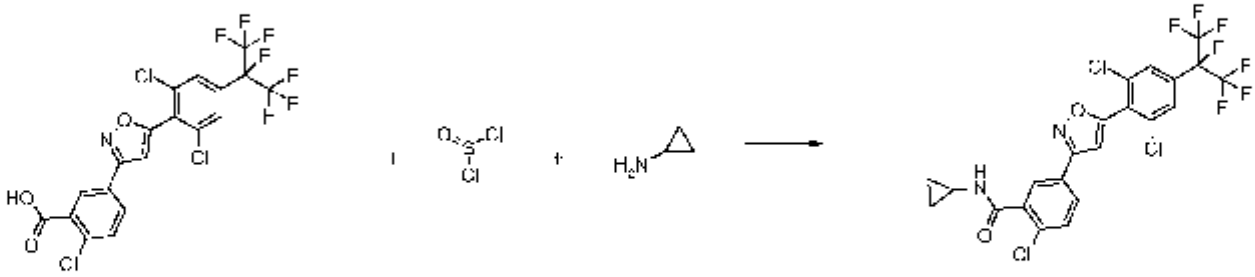
[0634] 4,1 g (20,6 mmol) 4-Chlor-3-carbomethoxy-benzaldehyd wurden in 82 ml Methanol gelöst, 1,734 g (20,6 mmol) Natriumhydrogencarbonat zugegeben und auf 0 °C gekühlt. Dann wurden 5,738 g (82,5 mmol) Hydroxylamin Hydrochlorid zugegeben und gerührt. Zur Aufarbeitung wurde am Rotationsverdampfer eingedampft und Rest in 100 ml Essigester aufgenommen. Der Feststoff wurde abfiltriert und das Filtrat im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde zur Reinigung mit Kieselgel mittels eines Gradienten in Cyclohexan/Essigester 9:1 bis 7:3 (v/v) chromatographiert und ergab 2,68 g 2-Chlor-5-[(E)-hydroxyiminomethyl]benzoesäureethylester.



[0635] 277 mg (1,29 mmol) 2-Chloro-5-[(E)-hydroxyiminomethyl]benzoesäureethylester wurden in 4,6 ml Dimethylformamid vorgelegt und 381 mg (2,84 mmol) N-Chlor-succinimid zugegeben und bei Raumtemperatur gerührt. Der Ansatz wurde dann mit einem Eisbad auf 0 °C gekühlt und eine Lösung von 880 mg (ca. 50 %ig, 1,29 mmol) 1,3-Dichlor-2-ethinyl-5-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]benzol in 1,5 ml Dimethylformamid zugetropft, gefolgt von 289 mg (2,85 mmol) Triethylamin. Der Ansatz wurde bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde mit Wasser verdünnt und zweimal mit Dichlormethan extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden mit Wasser gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde durch zweimalige Chromatographie an Kiesel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Essigester 80:20 (v/v) als Laufmittel gereinigt und ergab 410 mg 2-Chlor-5-[5-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoesäuremethylester.



[0636] 410 mg (0,74 mmol) 2-Chlor-5-[5-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoesäuremethylester wurden in 21 ml Methanol vorgelegt 0,74 ml (0,74 mmol) 1M Natronlauge zugegeben und unter Rückfluss gerührt. Anschließend wurde das Methanol am Rotationsverdampfer entfernt. Der Rückstand wurde mit verdünnter Salzsäure versetzt und dreimal mit Essigester extrahiert. Die vereinigten Extrakte trocknete man mit Natriumsulfat und dampfte im Vakuum am Rotationsverdampfer ein. Es wurden 405 mg 2-Chlor-5-[5-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoesäure als Rückstand erhalten.

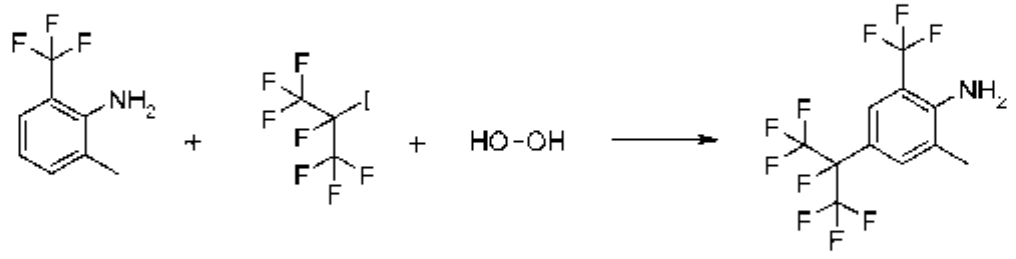


[0637] 125 mg (0,23 mmol) 2-Chlor-5-[5-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzoesäure wurden in 1,1 ml trockenem Toluol gelöst und 0,14 g (1,16 mmol) Thionylchlorid zugegeben. Der Ansatz wurde auf 80 °C erhitzt und danach am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde in 0,25 ml Dichlormethan gelöst und zu einer Lösung von 33 mg (0,58 mmol) Cyclopropylamin in 0,75 ml Dichlormethan bei 0 °C zugetropft und 2 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde 5 %ige wässrige Natriumdihydrogenphosphatlösung zugegeben und anschließend die organische Phase abgetrennt. Die organische Phase wurde mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer eingedampft. Der Rückstand wurde durch Chromatographie mit Kieselgel und Cyclohexan/Essigester 70:30 (v/v) als Laufmittel gereinigt. Es wurden 49 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[5-[2,6-dichlor-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]isoxazol-3-yl]benzamid (Verbindung **I-T23-1**) erhalten.

HPLC-MS[3]: logP = 4,96, Masse (m/z) = 575 [M+H]+.

^{1}H-NMR (400 MHz, d6-Acetonitril): δ = 7,96 (s, 1 H), 7,94-7,96 (dd, J1 = 8,4 Hz, J2 = 2,2 Hz, 1H), 7,86 (s, 2 H), 7,6 (d, J1=7,6 Hz, J2=1,2, 1 H), 7,15 (s, 1 H), 6,9 (s (breit), 1 H (N-H)), 3,97 (s, 3 H), 2,83-2,88 (m, 1H), 0,75-0,79 (m, 2 H), 0,58-0,62 (m, 2 H).

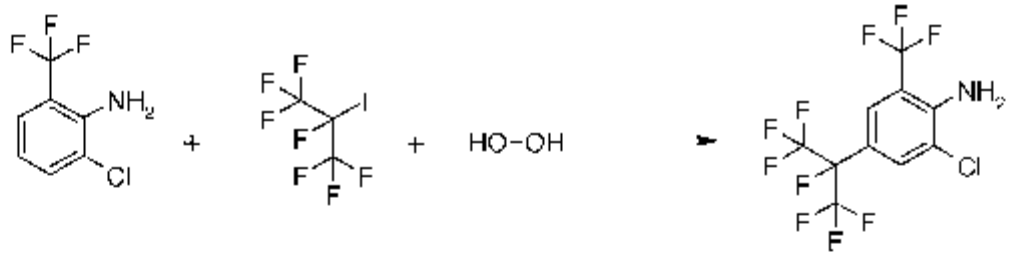
Verfahren 1 Beispiel 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin



D-1a

[0638] In einem Dreihalskolben wurden 17,48 g (100 mmol) 2-Methyl-6-trifluormethyl-anilin in 498 ml Dimethylsulfoxid vorgelegt und dann 44,3g (21,095 ml, 150 mmol) 2-Iodheptafluorpropan, 29,9 ml (29,9 mmol) 1 molare Eisen(II)-sulfatlösung in Wasser und 5,43 ml (104 mmol) 96 %ige Schwefelsäure zugegeben. Die Mischung wurde dann mit Argon entgast und dann mittels einer Spritzenpumpe 20,4 ml 30 %ige wässrige Wasserstoffperoxid Lösung innerhalb von 15 Minuten zugetropft. Die Temperatur stieg auf 54°C. Gegen Ende des Zutropfens wurde noch kurzzeitig auf 60°C erwärmt. Der Ansatz wurde 20 Minuten ohne Heizung nachgerührt, dabei sank die Temperatur auf 36 °C. Zur Aufarbeitung wurde der Ansatz auf gesättigte wässrige Natriumhydrogencarbonatlösung gegossen und das Produkt mit Essigester extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden erst mit Wasser und danach mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Zur Reinigung wurde in zwei Portionen über eine Säule mit 120 g Kieselgel und einem Gradienten von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Essigester 95:5 (v/v) chromatographiert. Es wurden 18,9 g 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin erhalten.

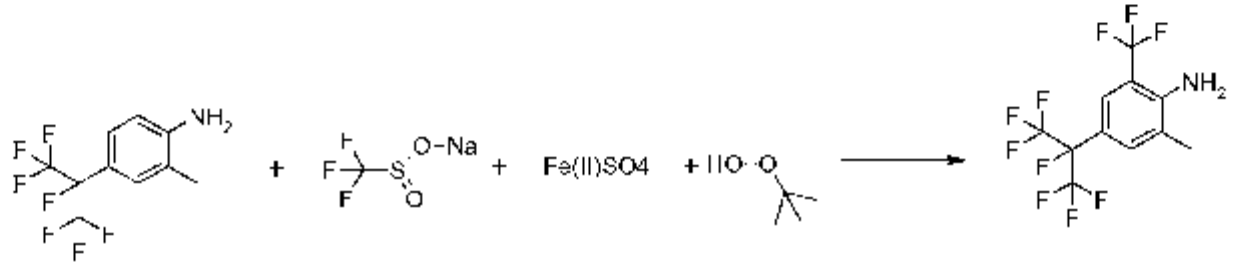
[0639] Analog wurde auch 2-Chlor-4-heptafluorisopropyl-6-trifluormethyl-anilin ausgehend von 2-Chlor-6-trifluormethyl-anilin und 2-Iodheptafluorpropan erhalten:



[0640] In einem Dreihalskolben wurden 30 g (0,153 mol) 2-Chlor-6-trifluormethylanilin (kommerziell erhältlich) in 765 ml Dimethylsulfoxid (DMSO) vorgelegt und dann 68,1 g (0,23 mol) 2-Iodheptafluorpropan, 46 ml einer 1 molaren wässrigen Eisen(II)-sulfatlösung und 15,4 g 98%ige Schwefelsäure zugegeben. Die Mischung wurde mit Argon entgast und dann mit einer Spritzenpumpe 34,8 g 30 %ige wässrige Wasserstoffperoxid Lösung innerhalb von 30 Minuten zugetropft. Dabei stieg die Temperatur auf 70°C. Der Ansatz wurde 20 Minuten nachgerührt, dabei sank die Temperatur auf 30 °C. Die Reaktionsmischung wurde dann auf gesättigte wässrige Natriumhydrogencarbonatlösung gegossen und mit Ethylacetat extrahiert. Die vereinigten Extrakte wurden zuerst mit Wasser, dann mit

gesättigter wässriger Bisulfitlösung und gesättigter wässriger Kochsalz Lösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 330 g Kieselgel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Ethylacetat 90:10 (v/v) chromatographiert. Es wurden 46,1 g 2-Chlor-4-heptafluorisopropyl-6-trifluormethyl-anilin erhalten.

Verfahren 2 Beispiel 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin



D-1a

[0641] In einem 1000 ml Dreihalskolben wurden 25 g (91 mmol) 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-anilin zu einer Mischung aus 363,4 ml Wasser und 181,7 ml Acetonitril gegeben. Dann wurden 27,3 ml (27,3 mmol) wässrige 1 molare Eisen(II) sulfat Lösung und 31,19g (200 mmol) Natrium trifluormethylsulfinat zugefügt. Die Mischung wurde mit Argon entlüftet und anschließend 35,1 g (273 mmol) einer 70%igen wässrigen tert.-Butylhydroperoxid Lösung mit einer Spritzenpumpe innerhalb von 4,5 Stunden ohne Kühlung zudosiert. Die Temperatur stieg bis auf 34°C an. Nach beendeter Zugabe wurde 1 Stunde nachgerührt. Zur Aufarbeitung wurde der Ansatz auf 425 ml gesättigte wässrige Natriumhydrogensulfit-Lösung gegossen und 15 Minuten gerührt. Dann wurden 425 ml gesättigte Natriumhydrogencarbonat-Lösung zugegeben und dreimal mit Essigester extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden zuerst mit Wasser und dann mit gesättigter wässriger Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Das Rohprodukt wurde in zwei Portionen über eine Kartusche mit 120 g Kieselgel und einem Gradienten mit Cyclohexan/Essigester von 95:5 bis 85:15 (v/v) chromatographiert. Es wurden 19,5 g 4-Heptafluorisopropyl-2-methyl-6-trifluormethyl-anilin erhalten.

HPLC-MS[3]: logP = 4,67

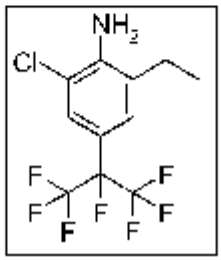
GC/MS: Masse (m/z) = 343, Retentionszeit: 2,98 min, Kovats Index: 1089

(Agilent 6890 GC, HP5979 MSD, 10m DB-1, ID=0,18mm, Fil.M=0,4µm, Inj.:250°C, const. flow: 1,6mm/min He, Det.:MSD:280°C, FID: 320°C, Oven:50°C(1 min) - 40°C/min - 320°C (3,25 min))

^{1}H-NMR (AV400, 400 Mllz. d_3-Acetonitril): δ (ppm) = 7,50 (s, 1 H), 7,48 (s, 1H), 5,03 (s, 2H, breit), 2,23 (s, 3 H).

Herstellung des Ausgangsprodukts 2-Chlor-6-ethyl-4-heptafluorisopropyl-anilin

[0642] Das Ausgangsprodukt 2-Chlor-6-ethyl-4-heptafluorisopropyl-anilin der Struktur (**D-1b**) ist bisher in der Literatur noch nicht beschrieben. Die Herstellung kann aus literaturbekanntem 2-Ethyl-4-heptafluorisopropyl-anilin (z.B. US2002/198399) mittels bekannter chlorierender Verfahren erfolgen.



D-1b

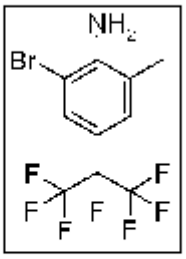
[0643] 4,9 g (16,9 mmol) 2-Ethyl-4-heptafluorisopropyl-anilin (hergestellt nach US2002/198399) wurden in 100ml Chloroform vorgelegt, auf 45 - 50 °C erwärmt und dann 2,18 ml (26,7 mmol) Sulfurylchlorid, gelöst in in 400 ml Chloroform, langsam zugetropft. Den Ansatz wurde über Nacht bei 50°C gerührt danach wurden weitere 0,34 ml (4,2 mmol) Sulfurylchlorid gelöst in 2 ml Chloroform zugetropft und weitere 3 Stunden bei 50 °C gerührt. Danach wurde abgekühlt und das Lösungsmittel im Vakuum am Rotationsverdampfer abgezogen. Der Rückstand in Dichlormethan aufgenommen, erst mit Natriumhydrogensulfit und dann mit verdünnter Natronlauge gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und das Lösungmittel im Vakuum am Rotationsverdampfer abdestilliert. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 120g Kieselgel mit einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Ethylacetat 90:10 (v/v) chromatographiert. Es wurden 4,25 g 2-Chlor-6-ethyl-4-heptafluorisopropyl-anilin erhalten.

HPLC-MS[a]: logP = 4,67, Masse (m/z) = 324 [M+H]+.

^{1}H-NMR (AV400, 400 MHz, d$_3$-Acetonitril): δ (ppm) = 7,84 (s, 1 H), 7,82 (s, 1H), 7,53-7,56 (s, 2H, breit), 2,37 (q, J = 7,6 Hz, 2 H), 1,06 (t, J = 7,6 Hz, 3 H).

Herstellung des Ausgangsprodukts 2-Brom-6-methyl-4-heptafluorisopropyl-anilin

[0644] Das Ausgangsprodukt 2-Brom-6-methyl-4-heptafluorisopropyl-anilin der Struktur (**D-1c**) ist bisher in der Literatur noch nicht beschrieben. Die Herstellung kann aus literaturbekanntem 2-Methyl-4-heptafluorisopropyl-anilin (z.B. US2004/92762) mittels bekannter bromierender Verfahren (z.B. EP2319830, S. 327) erfolgen.



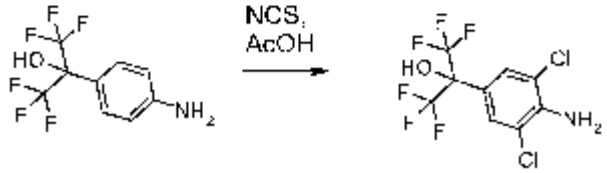
D-1c

[0645] 3,4g (12,356 mmol) 2-Methyl-4-heptafluorisopropyl-anilin wurden in 27 ml Dimethylformamid gelöst,dann 2.44g (13,6 mmol) N-Bromsuccinimid zugegeben und 1 Stunde bei 60°C gerührt. Der Ansatz wurde abgekühlt, mit Wasser versetzt und dreimal mit je 15 ml n-Hexan extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden mit Wasser gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Chromatographie über eine 120g Kartusche mit Kieselgel mit einen Gradienten beginnend mit reinem Cyclohexan nach Cyclohexan/Ethylacetat 90:10 (v/v) liefert 2,44 g 2-Brom-6-ethyl-4-heptafluorisopropyl-anilin.

HPLC-MS[a]: logP = 4,38, Masse (m/z) = 354 [M−H]+.

^{1}H-NMR (AV400, 400 MHz, d_3-Acetonitril): δ (ppm) = 7,51 (s, 1 H), 7,23 (s, 1H), 4.86 (s, 2H, breit), 2,23 (s, 3 H).

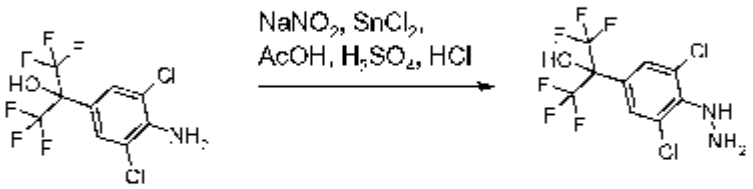
Herstellung der Ausgangsverbindung 2-(3,5-Dichlor-4-hydrazino-phenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluor-propan-2-ol



[0646] Zu einer Lösung von 2-(4-Aminophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluorpropan-2-ol (2.50 g, 9.64 mmol) (Herstellung z.B. W. A. Sheppard, *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, *87*, 2410–2420) in Eisessig (40 mL) wurde bei RT *N*-Chlorsuccinimid (2,71 g, 20,2 mmol) gegeben. Das Gemisch wurde 3 h bei 75°C und anschließend 14 h bei RT gerührt. Anschließend wurde bei das Gemisch auf Wasser gegeben und mit EtOAc extrahiert. Die organischen Phase wurde mit Wasser und gesättigter wässriger $NaHCO_3$-Lösung gewaschen und über Magnesiumsulfat getrocknet. Nach entfernen des Lösungsmittels wurde der Rückstand in MTBE aufgenommen und vom Feststoff abfiltriert. Das Filtrat wurde unter vermindertem Druck eingeengt und das Rohprodukt mittels Säulenchromatographie an SiO2 (*n*-Hexan/EtOAc-Gradient) aufgereinigt. Es wurden 2.89 g (91%) von 2-(4-Amino-3,5-dichlorphenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluorpropan-2-ol erhalten.

HPLC-MS[a]: logP = 3,04, Masse (m/z) = 328 [M−H] .

^{1}H-NMR (400 MHz, d_3-Acetonitril): δ = 5.13 (br s, 2 H), 6.02 (br s, 1 H), 7.51 (s, 2 H).

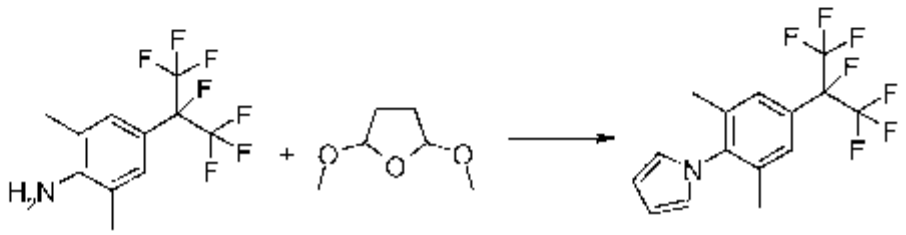


[0647] Zu einer auf 55°C erhitzen Lösung von 2-(4-Amino-3,5-dichlorphenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluorpropan-2-ol (1.88 g, 5.73 mmol) in 5 mL Eisessig wurde eine Lösung von Natriumnitrit (455 mg, 6.59 mmol) in 2,5 mL Schwefelsäure getropft und das Gemisch für eine weitere Stunde bei dieser Temperatur gerührt. Anschließend wurde das Gemisch auf 0°C gekühlt und tropfenweise mit einer Lösung von Zinn(II)chlorid (3.37 g, 17.7 mmol) in konz. HCl (10 mL) versetzt. Das Gemisch rührte für eine weitere Stunde bei 0°C, wurde danach auf Eis gegeben, mit Natronlauge alkalisch gestellt und mit EtOAc extrahiert. Die organische Phase wurde mit gesättigter Natriumchloridlösung gewaschen, über Magnesiumsulfat getrocknet und das Lösungsmittel unter vermindertem Druck entfernt. Es wurden 1.41 g (90%ig, 64% d. Th.) 2-(3,5-Dichlor-4-hydrazinophenyl)-1,1,1,3,3,3-hexafluorpropan-2-ol erhalten.

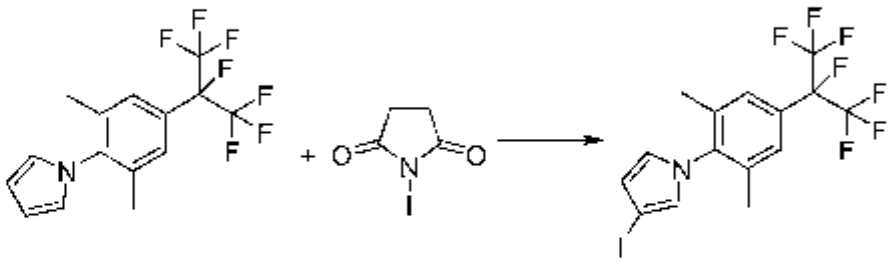
HPLC-MS[a]: logP = 1.92, Masse (m/z) = 343 $[M-H]^-$.

^{1}H-NMR (600 MHz, d$_3$-Acetonitril): δ = 4.14 (br s, 2 H), 5.90 (br s, 1 H), 6.50 (br s, 1 H), 7.58 (s, 2 H).

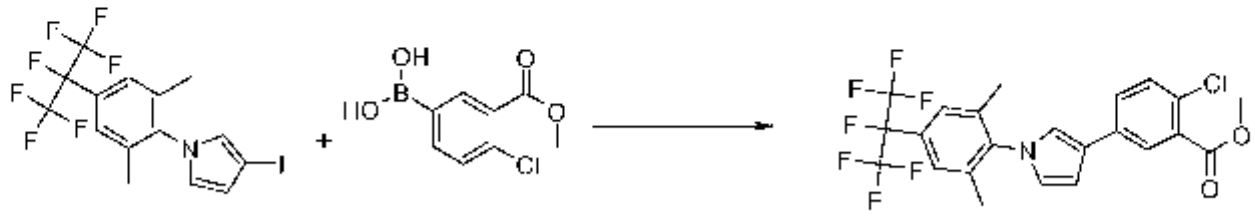
Beispiele I-T46-1



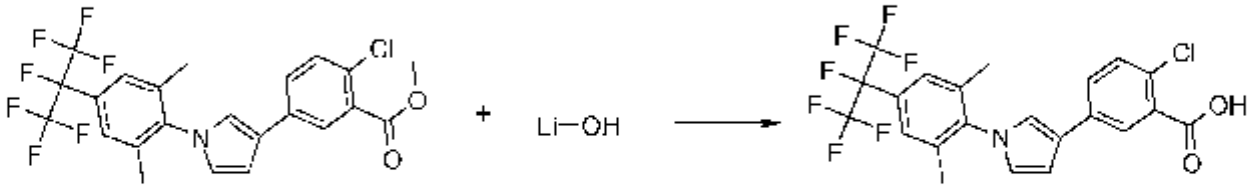
[0648] 10 g (34,6mmol) 2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]anilin wurden in 60 ml Eisessig vorgelegt und 5,02 g (38,04 mmol) 2,6-Dimethoxy-tetrahydrofuran zugegeben. Die entstandene Lösung wurde für zwei Stunden bei 120 °C erhitzt. Anschliessend wurde etwas abgekühlt und die flüchtigen Bestandteile am Rotationsverdampfer im Vakuum abgedampft. Der Rückstand wurde mit Wasser verrührt und der Feststoff abgesaugt. Der Filterkuchen wurde dann in Dichlormethan gelöst, die Lösung mit Natriumsulfat getrocknet und am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Es wurden 10,38 g 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol erhalten.



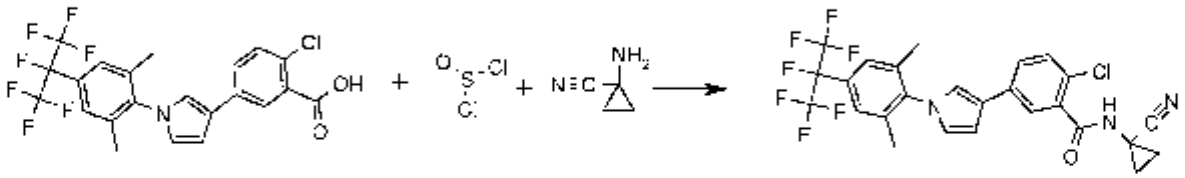
[0649] 1,5 g (4,293mmol) 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol wurden in 60 ml n-Hexan gelöst und 966 mg (4,3 mmol) N-Iodsuccinimid zugegeben. Anschliessend wurde die Mischung auf Raumtemperatur kommen gelassen und 6 Tage bei Raumtemperatur gerührt. Danach wurden weitere 242 mg (1,1 mmol) N-Iodsuccinimid zugegeben und über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Anschliessend wurde überschüssige wässrige Natriumhydrogensulfit-Lösung und etwas Essigester zugegeben. Die organische Phase wurde abgetrennt und erst zweimal mit wässriger Natriumhydrogensulfit-Lösung, dann mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und eingedampft. Zur Reinigung wurde über eine Kartusche mit 120 g Kieselgel und einem Gradienten ausgehend von reinem Cyclohexan bis Cyclohexan/Essigester 95:5 (v/v) chromatographiert. Es wurden 453 mg eines Gemischs aus 80 % 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-3-iod-pyrrol und 16 % 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-2-iod-pyrrol erhalten.



[0650] 998 mg (1,696 mmol) eines Gemischs aus 80 % 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-3-iod-pyrrol und 16 % 1-[2,6-Dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]-2-iod-pyrrol und 364 mg (1,7 mmol) 4-Chloro-3-(methoxycarbonyl)phenylboronsäure wurden in 10 ml 2-Propanol vorgelegt. Danach wurde die Luft durch Argon verdrängt und 5,2 ml 1 molare wässrige Natriumhydrogencarbonat-Lösung und 98 mg (0,085 mmol) Tetrakis-triphenylphospin-palladium(0) zugegeben unter Argon zugegeben. Anschliessend wurde 3 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Zur Aufarbeitung wurde etwas abgekühlt, dann die Mischung am Rotationsverdampfer im Vakuum eingedampft. Der Rückstand wurde zwischen Essigester und Wasser verteilt. Die organische Phase wurde abgetrennt, mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen und im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft. Es wurden 1,57 g an rohem 2-Chlor-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol-3-yl benzoesäuremethylester.



[0651] 416 mg (0,33 mmol, ca. 40 %ig) roher 2-Chlor-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol-3-yl]benzoesäuremethylester werden in einem Gemisch aus 18 ml Dioxan und 6 ml Wasser vorgelegt und 61 mg (1,46 mmol) Lithiumhydroxid Hydrat zugefügt. Es wurde bis zur vollständigen Lösung bei Raumtemperatur gerührt, dann 2 Stunden unter Rückfluss erhitzt, anschliessend wurde im Vakuum am Rotationsverdampfer eingedampft, der Rückstand mit etwas Wasser versetzt und mit konzentrierter Salzsäure auf pH 1 gestellt. Es wurde dann zweimal mit Essigester extrahiert, die vereinigten Extrakte mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, mit Natriumsulfat getrocknet und eingedampft. Als Rückstand verblieben 207 mg rohe 2-Chlor-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol-3-yl]benzoesäure.

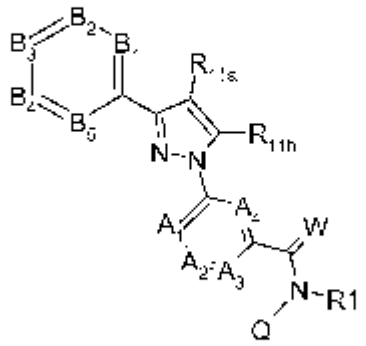


[0652] 137 mg (0,11 mmol, Reinheit ca. 38 %) rohe 2-Chlor-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol-3-yl]benzoesäure wurden in 15 ml Toluol gelöst und 230 mg (1,93 mmol) Thionylchlorid zugegeben.Die Mischung wurde 3 Stunden zum Rückfluss erhitzt. Danach wurden alle flüchtigen Anteile am Rotationsverdampfer im Vakuum abgezogen. Der Rückstand wurde in 4 ml Dichlormethan aufgenommen und zu einer Mischung aus 82 mg (0,69 mmol) 1-Cyan-cyclopropylamin Hydrochlorid und 98 mg (0,96 mmol) Triethylamin in 2 ml Dichlormethan bei 0 °C zugetropft. Anschliessend wurde über Nacht bei Raumtemperatur gerührt. Zur Aufarbeitung wurde mit 5 %iger wässriger Natriumdihydrogenphosphat-Lösung, danach mit gesättigter Kochsalzlösung gewaschen, die organische Phase mit Natriumsulfat getrocknet und eingedampft. Der Rückstand wurde über eine Kartusche mit 15 g Kieselgel und Cyclohexan/Essigester 85:15 (v/v) chromatographiert. Die das Produkt enthaltenden Fraktionen wurden eingedampft und über präparative HPLC (Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 µm, 50x4,6mm in einem Gradienten in Acetonitril/0,1%ige wässrige H_3PO_4 gereinigt. Es wurden 13 mg 2-Chlor-N-cyclopropyl-5-[1-[2,6-dimethyl-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluormethyl)ethyl]phenyl]pyrrol-3-yl]benzamid (Verbindung **I-T46-1**) erhalten.

HPLC-MS[a]: logP = 4,90; Masse (m/z) = 558 [M−H]⁻.

^{1}H-NMR (400 MHz, d$_6$-Acetonitril): δ = 7,63-7,67 (m, 2 H), 7,56 (s (breit), 1 H (N-H)), 7,51 (s, 2H), 7,41 (d, J=8,3 Hz, 1 H), 7,16-7,17 (m, 1 H), 6,75-6,77 (m, 1 H), 6,72-6,73 (m, 1 H), 2,14 (s, 6H), 1,55-1,59 (m, 2 H), 1,32-1,39 (m, 2 H).

Tabelle I-T2



I-T2

B_3 und B_4 = C-H, W = O

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_5	R_1	R_{11a}	R_{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a)]
I-T2-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	F	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	cyclopropyl	4,9	534
I-T2-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	F	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(cyano)cyclopropyl	4,8	559

Bsp.-Nr.	B_1	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] a)1)
I-T3-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	534
I-T3-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	577
I-T3-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4.2	559
I-T3-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,7	566
I-T3-5	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(trifluoromethyl)-cyclopropyl	4,6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)-ethyl	4,1	633
I-T3-7	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,4	501
I-T3-8	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	cyclopropyl	4,3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	CF	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4.2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	cyclopropyl	4,9	552
I-T3-12	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,7	577
I-T3-13	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	518
I-T3-14	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	552
I-T3-15	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	4,9	568
I-T3-16	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	514
I-T3-17	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	CF	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4.3	543
I-T3-20	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,8	535
I-T3-21	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,7	560

I-T3-22	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	616
I-T3-26	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_3CH_2CF_3$	4,7	630
I-T3-27	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	499
I-T3-28	C-CH_3	C-CF_3	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	H	O	H	cyclopropyl	3,5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,2	566
I-T3-31	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	540
I-T3-32	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	582
I-T3-33	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_3CH_2CF_3$	4,7	596
I-T3-34	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	615
I-T3-35	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	632
I-T3-37	C-OCF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,9	622
I-T3-38	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	534
I-T3-40	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,9	576
I-T3-41	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,9	566
I-T3-42	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,8	575
I-T3-43	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	600

I-T3-44	C-C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	548
I-T3-45	C C$_2$H$_5$	C i C$_3$H$_7$	C CH$_3$	H	H	C H	C H	C Cl	C-H	O	H	CH$_3$CF$_3$	5,0	590
I-T3-46	C-C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	573
I-T3-47	C-C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	5,0	580
I-T3-48	C-F	C-CF3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,2	442
I-T3-49	C-F	C-CF3	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,2	467
I-T3-50	C-F	C-CF3	C-OCH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,1	454
I-T3-51	C-F	C-CF3	C-OCH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	479
I-T3-52	C-CF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	574
I-T3-53	C-CF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	599
I-T3-54	C-CH$_3$	C-i-C$_3$H$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	588
I-T3-55	C-CF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	613
I-T3-56	C-CF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	608
I-T3-57	C-CF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	633
I-T3-58	C-CF$_3$	C i C$_3$H$_7$	C-Cl	H	H	C H	C H	C Cl	C-H	O	H	CH$_3$CF$_3$	4,7	650
I-T3-59	C-Cl	C-CF$_3$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	466
I-T3-60	C-Cl	C-CF3	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,2	441
I-T3-61	C-F	C i C$_3$H$_7$	C-F	H	H	C H	C H	C Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	542
I-T3-62	C-F	C i C$_3$H$_7$	C-F	H	H	C H	C H	C Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,9	567
I-T3-63	C-CH$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,1	551
I-T3-64	C-CH$_3$	C-i-C$_3$H$_7$	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,2	579
I-T3-65	C-CH$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	577
I-T3-66	C-C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	591
I-T3-67	C-CH$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	cyclopropyl	4,4	552
I-T3-68	C C$_2$H$_5$	C i C$_3$H$_7$	C CH$_3$	H	H	C H	C H	C Cl	C F	O	H	cyclopropyl	4,6	566

I-T3-69	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-H	C-**F**	O	H	1-(cyanocyclopropyl cyclopropyl	4,3	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-i-C_3H_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-H	C-F	O	H		4,3	532
I-T3-71	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyanocyclopropyl cyclopropyl	4,5	593
I-T3-72	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H		4,6	568
I-T3-73	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-F	O	H		4,5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-i-C_3H_7	C-H	H	H	C-H	C-**H**	C-H	C-F	O	H	1-(cyanocyclopropyl cyclopropyl	4,1	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-**H**	C-H	C-F	O	H		4,2	518
I-T3-76	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyanocyclopropyl	3,4	540
I-T3-77	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,4	515
I-T3-78	C-C_2H_5	C-i-C_3H_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyanocyclopropyl cyclopropyl	3,2	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H		3,3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyanocyclopropyl	4,2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-C_2H_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	498
I-T3-82	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,0	540
I-T3-83	C-C_2H_5	C-C_2F_5	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,6	530
I-T3-84	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	630
I-T3-85	C-C_2H_5	C-i-C_3H_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,7	620
I-T3-86	C-CH_3	C-i-C_3H_7	C-Br	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	598
I-T3-87	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyanocyclopropyl	3,6	515
I-T3-88	C-Cl	C-OCF_3	C-Cl	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	490
I-T3-89	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyanocyclopropyl	3,5	481
I-T3-90	C-Cl	C-OCF_3	C-H	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	456
I-T3-91	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	555
I-T3-92	C-Cl	C-i-C_3H_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyanocyclopropyl	3,4	580
I-T3-93	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)cyclopropyl	4,7	588
I-T3-94	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	C-**H**	C-Cl	C-H	O	H		4,7	602

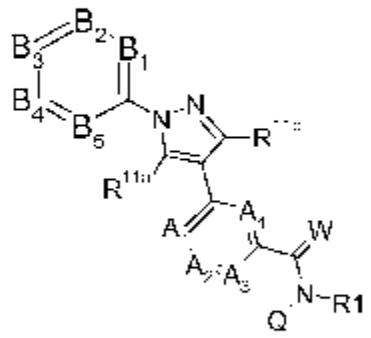
												(tert.butyl)cyclopropyl		
I-T3-95	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	500
I-T3-96	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	540
I-T3-98	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,1	475
I-T3-99	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,5	489
I-T3-100	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,4	549
I-T3-102	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	614
I-T3-103	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	574
I-T3-104	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,0	614
I-T3-109	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	574
I-T3-111	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	628
I-T3-112	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,0	623
I-T3-114	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,0	634
I-T3-115	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	554
I-T3-116	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,8	583

I-T3-119	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,6	594
I-T3-120	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,6	579
I-T3-121	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	cyclopropyl	4,5	536
I-T3-122	C-Cl	C-CF_3	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	3,9	608
I-T3-124	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	614
I-T3-126	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	639
I-T3-127	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	2,5	455
I-T3-128	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	2,8	469
I-T3-129	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	2,6	480
I-T3-130	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,8	605
I-T3-131	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	3,9	628
I-T3-132	C-Cl	C-CH_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	2,9	494
I-T3-133	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,7	569
I-T3-134	C-CF_3	C-i-C_3F_7	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,9	588
I-T3-135	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pyrrolidinyl)	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	610
I-T3-136	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	570

I-T3-137	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-cyclopropyl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,4	596
I-T3-138	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-$CH_2CH_2OCH_3$	C-H	O	H	cyclopropyl	4,1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-cyclopropyl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	566
I-T3-140	C-CH_2	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-cyclopropyl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	541
I-T3-141	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3 C-cyclopropyl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	556
I-T3-142	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-cyclopropyl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,6	555
I-T3-143	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	531
I-T3-144	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,4	545
I-T3-145	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	cyclopropyl	3,8	503
I-T3-146	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-methyl-pyrazole-3-yl	2,8	515
I-T3-147	C-Cl	C-CF_3	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4,0	443

I-T3-148	C-CH$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	652
I-T3-149	C-CF$_3$	C-CF$_3$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,5	500
I-T3-150	C-Cl$_3$	C-Cl$_3$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	475
I-T3-151	C-Cl	C-i-C$_3$F$_7$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,0	566
I-T3-152	C-Cl	C-i-C$_3$F$_7$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,1	541
I-T3-153	C-S(O)C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,7	608
I-T3-154	C-S(O)$_2$C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	624
I-T3-155	C-CH$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	677
I-T3-156	C-SC$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	567
I-T3-157	C-S(O)C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,8	583
I-T3-158	C-S(O$_2$)C$_2$H$_5$	C-i-C$_3$F$_7$	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,9	599
I-T3-159	C-CF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(thiocarbamoyl)-cyclopropyl	3,8	668
I-T3-160	C-Cl$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	653
I-T3-161	C-CH$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-CH$_3$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	cyclopropyl	5,0	604
I-T3-162	C-OCF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	624
I-T3-163	C-OCF$_3$	C-i-C$_3$F$_7$	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	649

Tabelle I-T3



I-T3

B_2 und B_5 = C-H

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a),b)]
I-T3-1	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	534
I-T3-2	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	577
I-T3-3	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,2	559
I-T3-4	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,7	566
I-T3-5	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1(trifluoromethyl)cyclopropyl	4,6	602
I-T3-6	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	2-oxo-2-(2,2,2-trifluoroethylamino)-ethyl	4,1	633
I-T3-7	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,4	501

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a1)]
I-T3-8	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	526
I-T3-9	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	cyclopropyl	4.3	518
I-T3-10	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,2	543
I-T3-11	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	cyclopropyl	4,9	552
I-T3-12	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-Cl	C-H	C-F	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,7	577
I-T3-13	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	518
I-T3-14	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	552
I-T3-15	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	4,9	568
I-T3-16	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-CH_3	C-H	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	514
I-T3-17	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	577
I-T3-18	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-CF_3	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,7	593
I-T3-19	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-F	C-H	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	543
I-T3-20	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,8	535
I-T3-21	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1(cyano)cyclopropyl	3,7	560

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [ad)]
I-T3-22	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	583
I-T3-23	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,2	599
I-T3-24	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	574
I-T3-25	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	616
I-T3-26	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	630
I-T3-27	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3.4	499
I-T3-28	C-CH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	474
I-T3-29	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	541
I-T3-30	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,2	566
I-T3-31	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	540
I-T3-32	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	582
I-T3-33	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	$CH_2CH_2CF_3$	4,7	596
I-T3-34	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4.6	615
I-T3-35	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	590
I-T3-36	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	632
I-T3-37	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thiolan-3-yl	4,9	622

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a1)]
I-T3-38	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	559
I-T3-39	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	534
I-T3-40	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,9	576
I-T3-41	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,9	566
I-T3-42	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,8	575
I-T3-43	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	600
I-T3-44	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	548
I-T3-45	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	5,0	590
I-T3-46	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	573
I-T3-47	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	5,0	580
I-T3-48	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,2	442
I-T3-49	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,2	467
I-T3-50	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,1	454
I-T3-51	C-F	C-H	C-CF3	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	479
I-T3-52	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	574

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a]	Masse [m/z] [a,b]
I-T3-53	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	599
I-T3-54	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	588
I-T3-55	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	613
I-T3-56	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	608
I-T3-57	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	633
I-T3-58	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	650
I-T3-59	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	466
I-T3-60	C-Cl	C-H	C-CF3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,2	441
I-T3-61	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	542
I-T3-62	C-F	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,9	567
I-T3-63	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	554
I-T3-64	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,2	579
I-T3-65	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	577
I-T3-66	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	591
I-T3-67	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	cyclopropyl	4,4	552

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a1)]
I-T3-68	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	cyclopropyl	4,8	566
I-T3-69	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	557
I-T3-70	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	cyclopropyl	4,7	532
I-T3-71	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	593
I-T3-72	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	568
I-T3-73	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-F	O	H	cyclopropyl	4,5	592
I-T3-74	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	543
I-T3-75	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-H	C-F	O	H	cyclopropyl	4,7	518
I-T3-76	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	540
I-T3-77	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,4	515
I-T3-78	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	526
I-T3-79	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	501
I-T3-80	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,2	523
I-T3-81	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	498
I-T3-82	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,0	540
I-T3-83	C-C_2H_5	C-H	C-C_2F_5	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,6	530
I-T3-84	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	CH_2CF_3	4,7	630
I-T3-85	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	Thietan-3-yl	4,7	620

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a]	Masse [m/z] [b]
I-T3-86	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	598
I-T3-87	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,6	515
I-T3-88	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	490
I-T3-89	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,5	481
I-T3-90	C-Cl	C-H	C-OCF_3	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	456
I-T3-91	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	555
I-T3-92	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	580
I-T3-93	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)cyclopropyl	4,7	588
I-T3-94	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(tert.butyl)cyclopropyl	4,7	602
I-T3-95	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	500
I-T3-96	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	515
I-T3-97	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	540
I-T3-98	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,1	475
I-T3-99	C-Cl	C-H	C-CH_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,5	489
I-T3-100	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,4	589
I-T3-101	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,4	549

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a)]
I-T3-102	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	614
I-T3-103	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	574
I-T3-104	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,2	535
I-T3-105	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	560
I-T3-106	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	589
I-T3-107	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,5	603
I-T3-108	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,0	614
I-T3-109	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,2	549
I-T3-110	C-C_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	574
I-T3-111	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	628
I-T3-112	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	609
I-T3-113	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,0	623
I-T3-114	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,0	634
I-T3-115	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	554

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a]	Masse [m/z] [a),1)]
I-T3-116	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	648
I-T3-117	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	569
I-T3-118	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,8	583
I-T3-119	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,6	594
I-T3-120	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,6	529
I-T3-121	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	N	C-H	C-Cl	N	O	H	cyclopropyl	4,5	536
I-T3-122	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-H	C-H	O	H	cyclopropyl	3,0	407
I-T3-123	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	3,9	608
I-T3-124	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	589
I-T3-125	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	614
I-T3-126	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	CN	NH_2	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	639
I-T3-127	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	2,5	455
I-T3-128	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	2,8	469
I-T3-129	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	2,6	480
I-T3-130	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,8	603
I-T3-131	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	3,9	628

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a1)]
I-T3-132	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	2,9	494
I-T3-133	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,7	569
I-T3-134	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,9	588
I-T3-135	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-(1-pyrrolidinyl)	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	610
I-T3-136	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-$NHCH_3$	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	570
I-T3-137	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-cyclopropyl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,4	596
I-T3-138	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-NH-CH_2-CH_2-OCH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	4,1	614
I-T3-139	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-cyclopropyl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	566
I-T3-140	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-cyclopropyl	C-H	O	H	cyclopropyl	4.2	541
I-T3-141	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	556
I-T3-142	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-cyclopropyl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,6	555
I-T3-143	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	531
I-T3-144	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,4	545
I-T3-145	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	C_2H_5	cyclopropyl	3,8	503

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a1)]
I-T3-146	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	N-methyl-pyrazol-3-yl	2,8	515
I-T3-147	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-CH_3	C-H	O	H	C_2H_5	4,0	443
I-T3-148	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	652
I-T3-149	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,5	500
I-T3-150	C-CF_3	C-H	C-CF_3	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	475
I-T3-151	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,0	566
I-T3-152	C-Cl	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,1	541
I-T3-153	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,7	608
I-T3-154	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	624
I-T3-155	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	677
I-T3-156	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	567
I-T3-157	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,8	583
I-T3-158	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,9	599
I-T3-159	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(thiocarbamoyl)-cyclopropyl	3,8	668
I-T3-160	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,0	653

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a]	Masse [m/z] [b]
I-T3-161	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	S	H	cyclopropyl	5,0	604
I-T3-162	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	624
I-T3-163	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	649
I-T3-164	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	490
I-T3-165	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Br	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,9	678
I-T3-166	C-SCH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	578
I-T3-167	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	592
I-T3-168	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,3	485
I-T3-169	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-NO_2	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,2	510
I-T3-170	C-SCH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,7	525
I-T3-171	C-SCH_2CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	N	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	646
I-T3-172	C-SCH_3	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,9	500
I-T3-173	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-OCH_3	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,4	585
I-T3-174	C-Cl	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,1	465
I-T3-175	C-CH_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	646

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [ad)]
I-T3-176	C-CH$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	671
I-T3-177	C-SC$_2$H$_5$	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	516
I-T3-178	C-S(O$_2$)C$_2$H$_5$	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,2	532
I-T3-179	C-S(O)C$_2$H$_5$	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,0	516
I-T3-180	C-S(O$_2$)C$_2$H$_5$	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	2,8	523
I-T3-181	C-S(O)C$_2$H$_5$	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	2,7	507
I-T3-182	C-S(O)C$_2$H$_5$	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,0	541
I-T3-183	C-S(O$_2$)C$_2$H$_5$	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,1	557
I-T3-184	C-Cl	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	492
I-T3-185	C-Cl	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,6	517
I-T3-186	C-Cl	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,6	458
I-T3-187	C-Cl	C-H	C-CF$_3$	C-H	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,3	483
I-T3-188	C-F	C-F	C-CF$_3$	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,4	503

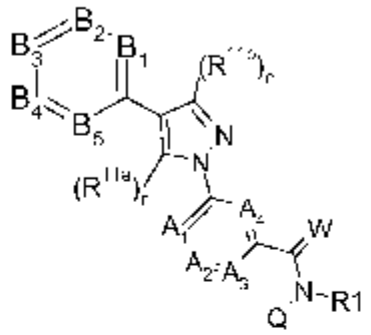
Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a]	Masse [m/z] [a,b]
I-T3-189	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	625
I-T3-190	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-CF_3	C-H	C-CN	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	2,9	548
I-T3-191	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-SC_2H_5	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,7	651
I-T3-192	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	625
I-T3-193	C-CHF_2	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	590
I-T3-194	C-F	C-F	C-CF_3	C-F	C-F	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(carbamoyl)-cyclopropyl	2,8	521
I-T3-195	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	641
I-T3-196	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,9	607
I-T3-197	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-cyano-cyclopropyl)methyl	4,0	628
I-T3-198	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-$S(O_2)C_2H_5$	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,7	715
I-T3-199	C-CF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	(1-cyano-cyclopropyl)methyl	1,17 min[b]	648
I-T3-200	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	650
I-T3-201	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,0	657

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	$logP^{a)}$	Masse [m/z] $^{a),b)}$
I-T3-202	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,5	605
I-T3-203	C-SC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,6	580
I-T3-204	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	3,9	580
I-T3-205	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,5	566
I-T3-206	C-$S(O)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,6	671
I-T3-207	C-CN	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,5	591
I-T3-208	C-OCF_3	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,6	639
I-T3-209	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,8	637
I-T3-210	C-$S(O_2)C_2H_5$	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-CH_3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,9	612
I-T3-211	C-OC_2H_5	C-H	C-i-C_3F_8	C-H	C-OCH_3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,7	609
I-T3-212	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	691
I-T3-213	C-I	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	666
I-T3-214	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,3	606
I-T3-215	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,1	631
I-T3-216	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,7	620
I-T3-217	C-$OCHF_2$	C-H	C-i-C_3F_7	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	4,2	621

Bsp.-Nr.	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a)1)]
I-T3-218	C-OCHF$_2$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,7	632
I-T3-219	C-OCF$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH$_3$	cyclopropyl	5,1	638
I-T3-220	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH$_3$	cyclopropyl	3,4	587
I-T3-221	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	3,0	573
I-T3-222	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	3,0	598
I-T3-223	C-Cl	C-H	C-C(CF$_3$)$_2$OH	C-H	C-Cl	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH$_3$	1-(cyano)cyclopropyl	3,3	612
I-T3-224	C-OCF$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	716
I-T3-225	C-OCF$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH$_3$	cyclopropyl	5,2	729
I-T3-226	C-OCF$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	740
I-T3-227	C-CF$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	700
I-T3-228	C-CF$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	725
I-T3-229	C-CF$_3$	C-H	C-i-C$_3$F$_7$	C-H	C-I	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	CH$_3$	cyclopropyl	5,1	714

[a)] Retentionszeit gemessen mit:
Instrument: Waters ACQUITY SQD UPLC System; Säule: Waters Acquity UPLC HSS T3 1.8 µ 50 x 1 mm; Eluent A: 1 l Wasser + 0.25 ml 99%ige Ameisensäure , Eluent B: 1 l Acetonitril + 0.25 ml 99%ige Ameisensäure; Gradient: 0.0 min 90% A → 1.2 min 5% A → 2.0 min 5% A Ofen: 50°C; Fluss: 0.40 ml/min; UV-Detektion: 208 – 400 nm.

Tabelle I-T4

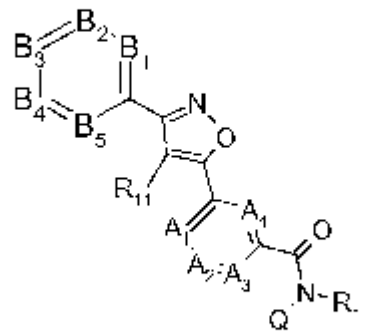


I-T4

B_2 und B_6 = C-H

Bsp.-Nr.	B_1	B_3	B_4	R_1	R^{11a}	R^{11b}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	log P[a)]	Masse [m/z] [a)1)]
I-T4-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,7	534
I-T4-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	559
I-T4-3	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,4	535
I-T4-4	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	H	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,3	560

Tabelle I-T22

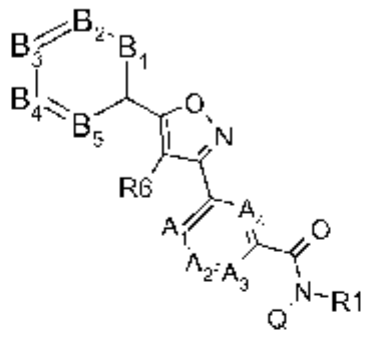


I-T22

B$_4$ und B$_5$ C-H, W O

Bsp.-Nr.	B_1	B_3	B_5	R_1	R_{11}	A_1	A_2	A_3	A_4	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a)]
I-T22-1	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	cyclopropyl	4,8	535
I-T22-2	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(cyano)cyclopropyl	4,6	560
I-T22-3	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	CH2CF3	5	577
I-T22-4	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	615
I-T22-5	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	cyclopropyl	4,9	589
I-T22-6	C-CH3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	N	C-Cl	C-H	cyclopropyl	4,5	590
I-T22-7	C-CF3	C-i-C_3F_7	C-CH3	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	1-(cyano)cyclopropyl	4,7	614

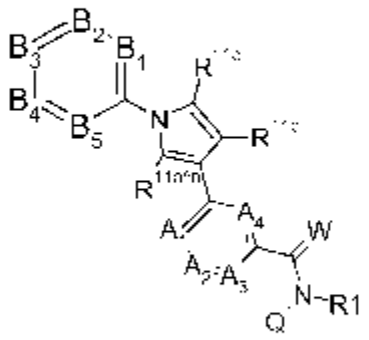
Tabelle I-T23



B_2 und B_4 = C-H

Bsp.-Nr.	B_1	B_3	B_5	R^1	R^{11}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	Q	logP[a)]	Masse (m/z)[a),1)]
I-T23-1	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	cyclopropyl	5,0	575
I-T23-2	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	H	H	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	1-(cyano)cyclopropyl	4,8	600

Tabelle I-T46



I-T46

B_2 und B_1 = C-H

Bsp.-Nr.	B_4	B_3	B_5	R^{11a}	R^{11b}	R^{11c}	A_1	A_2	A_3	A_4	W	R_1	Q	logP[a)]	Masse [m/z] [a)]
I-T46-1	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_2	**H**	H	**H**	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,9	558
I-T46-2	C-CH_3	C-i-C_3F_7	C-CH_3	**H**	H	**H**	C-H	C-H	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	5,0	533
I-T46-3	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	**H**	H	**H**	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	cyclopropyl	5,0	588
I-T46-4	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	**H**	H	**H**	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	cyclopropyl	4,5	574
I-T46-5	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	**H**	H	**H**	C-H	N	C-Cl	C-H	O	H	1-(cyano)cyclopropyl	4,4	599
I-T46-6	C-Cl	C-i-C_3F_7	C-Cl	**H**	H	**H**	C-H	N	C-Cl	C-H	O	CH_3	1-(cyano)cyclopropyl	4,8	613

NMR-Daten ausgewählter Beispiele

[0653] Die ^{1}H-NMR-Daten ausgewählter Beispiele werden in Form von ^{1}H-NMR-Peaklisten notiert. Zu jedem Signalpeak wird erst der δ-Wert in ppm und dann die Signalintensität in runden Klammern aufgeführt. Die δ-Wert – Signalintensitäts- Zahlenpaare von verschiedenen Signalpeaks werden durch Semikolons voneinander getrennt aufgelistet.

[0654] Die Peakliste eines Beispieles hat daher die Form:

δ_1 (Intensität$_1$); δ_2 (Intensität$_2$);.....; δ_i (Intensität$_i$);.....; δ_n (Intensität$_n$)

[0655] Die Intensität scharfer Signale korreliert mit der Höhe der Signale in einem gedruckten Beispiel eines NMR-Spektrums in cm und zeigt die wirklichen Verhältnisse der Signalintensitäten. Bei breiten Signalen können mehrere Peaks oder die Mitte des Signals und ihre relative Intensität im Vergleich zum intensivsten Signal im Spektrum gezeigt werden.

[0656] Zur Kalibrierung der chemischen Verschiebung von ^{1}H NMR-Spektren benutzen wir Tetramethylsilan und/oder die chemische Verschiebung des Lösungsmittels, besondern im Falle von Spektren, die in DMSO gemessen werden. Daher kann in NMR-Peaklisten der Tetramethylsilan-Peak vorkommen, muss es aber nicht.

[0657] Die Listen der ^{1}H-NMR-Peaks sind ähnlich den klassischen ^{1}H-NMR-Ausdrucken und enthalten somit gewöhnlich alle Peaks, die bei einer klassischen NMR-Interpretation aufgeführt werden.

[0658] Darüber hinaus können sie wie klassische ^{1}H-NMR-Ausdrucke Lösungsmittelsignale, Signale von Stereoisomeren der Zielverbindungen, die ebenfalls Gegenstand der Erfindung sind, und/oder Peaks von Verunreinigungen zeigen.

[0659] Bei der Angabe von Verbindungssignalen im Delta-Bereich von Lösungsmitteln und/oder Wasser sind in unseren Listen von ^{1}H-NMR-Peaks die gewöhnlichen Lösungsmittelpeaks, zum Beispiel Peaks von DMSO in DMSO-D6 und der Peak von Wasser, gezeigt, die gewöhnlich im Durchschnitt eine hohe Intensität aufweisen.

[0660] Die Peaks von Stereoisomeren der Targetverbindungen und/oder Peaks von Verunreinigungen haben gewöhnlich im Durchschnitt eine geringere Intensität als die Peaks der Zielverbindungen (zum Beispiel mit einer Reinheit von >90%).

[0661] Solche Stereoisomere und/oder Verunreinigungen können typisch für das jeweilige Herstellungsverfahren sein. Ihre Peaks können somit dabei helfen, die Reproduktion unseres Herstellungsverfahrens anhand von "Nebenprodukt-Fingerabdrücken" zu erkennen.

[0662] Einem Experten, der die Peaks der Zielverbindungen mit bekannten Verfahren (MestreC, ACD-Simulation, aber auch mit empirisch ausgewerteten Erwartungswerten) berechnet, kann je nach Bedarf die Peaks der Zielverbindungen isolieren, wobei gegebenenfalls zusätzliche Intensitätsfilter eingesetzt werden. Diese Isolierung wäre ähnlich dem betreffenden Peak-Picking bei der klassischen 1H-NMR-Interpretation.

[0663] Weitere Details zu 1H-NMR-Peaklisten können der Research Disclosure Database Number 564025 entnommen werden.

Beispiel -T2-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,287 (5,2); 8,281 (5,1); 7,646 (9,6); 7,625 (3,3); 7,578 (2,0); 7,545 (3,5); 7,525 (2,9); 7,523 (2,8); 7,443 (9,1); 6,977 (1,2); 6,544 (5,1); 6,538 (4,9); 4,085 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,410 (0,4); 3,374 (0,4); 2,862 (0,8); 2,853 (1,2); 2,844 (1,9); 2,834 (1,8); 2,826 (1,3); 2,816 (0,9); 2,240 (41,5); 2,150 (23,6); 2,086 (3,7); 1,972 (6,1); 1,965 (1,2); 1,958 (2,9); 1,953 (13,9); 1,947 (24,8); 1,941 (32,9); 1,934 (22,7); 1,928 (11,7); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (1,6); 1,204 (3,1); 1,186 (1,5); 0,790 (1,0); 0,778 (3,2); 0,773 (4,1); 0,760 (4,2); 0,755 (3,2); 0,743 (1,4); 0,614 (1,3); 0,604 (3,7); 0,597 (3,9); 0,593 (3,4); 0,586 (3,3); 0,575 (1,0); 0,000 (3,0)
Beispiel -T2-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,311 (4,9); 8,304 (5,0); 7,898 (10,0); 7,879 (3,3); 7,872 (2,0); 7,624 (2,0); 7,583 (3,2); 7,561 (2,8); 7,444 (9,7); 6,555 (4,9); 6,549 (4,9); 5,447 (0,7); 4,086 (0,5); 4,068 (1,6); 4,050 (1,6); 4,032 (0,6); 2,240 (45,7); 2,146 (80,1); 2,114 (0,7); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (7,1); 1,964 (3,1); 1,958 (8,0); 1,953 (36,5); 1,946 (65,9); 1,940 (87,5); 1,934 (62,1); 1,928 (33,1); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,591 (2,0); 1,576 (5,7); 1,569 (5,7); 1,556 (2,8); 1,516 (0,4); 1,437 (16,0); 1,410 (0,4); 1,369 (2,8); 1,356 (5,7); 1,349 (6,0); 1,334 (2,1); 1,296 (0,3); 1,269 (1,9); 1,222 (1,9); 1,204 (3,6); 1,186 (1,8); 0,000 (4,5)
Beispiel T3-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,118 (11,7); 8,061 (12,6); 7,389 (7,9); 7,683 (8,6); 7,667 (0,7); 7,657 (4,9); 7,646 (3,5); 7,631 (5,5); 7,625 (4,3); 7,535 (16,0); 7,463 (7,6); 7,442 (6,2); 6,895 (2,5); 4,068 (0,8); 4,050 (0,8); 3,912 (0,7); 2,881 (0,5); 2,871 (1,5); 2,862 (2,1); 2,853 (3,2); 2,844 (3,2); 2,835 (2,2); 2,826 (1,5); 2,816 (0,5); 2,270 (0,5); 2,261 (0,3); 2,143 (107,9); 2,138 (145,5); 2,111 (71,2); 1,972 (5,1); 1,964 (10,3); 1,958 (27,0); 1,952 (94,0); 1,946 (160,4); 1,940 (199,1); 1,934 (136,5); 1,928 (68,3); 1,780 (0,5); 1,774 (0,9); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,437 (13,0); 1,271 (1,0); 1,222 (1,0); 1,204 (1,9); 1,186 (0,9); 0,794 (1,7); 0,792 (6,4); 0,777 (7,2); 0,764 (7,9); 0,759 (5,7); 0,747 (2,4); 0,725 (0,3); 0,610 (2,4); 0,600 (7,1); 0,592 (7,5); 0,586 (6,7); 0,584 (5,9); 0,571 (1,7); 0,146 (0,4); 0,000 (86,0); -0,008 (5,2); -0,150 (0,4)
Beispiel -T3-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,131 (12,6); 8,084 (13,3); 7,735 (7,6); 7,729 (9,9); 7,710 (5,2); 7,704 (3,5); 7,689 (5,8); 7,683 (4,6); 7,537 (16,0); 7,514 (8,9); 7,493 (7,4); 7,458 (1,9); 4,140 (1,8); 4,124 (2,1); 4,117 (5,8); 4,100 (5,9); 4,093 (6,2); 4,077 (5,9); 4,069 (2,6); 4,053 (2,1); 3,914 (0,6); 2,891 (0,7); 2,773 (0,6); 2,480 (0,7); 2,475 (1,3); 2,470 (1,8); 2,466 (1,3); 2,461 (0,7); 2,325 (0,4); 2,273 (1,9); 2,221 (979,0); 2,115 (79,7); 2,097 (1,4); 1,973 (3,4); 1,966 (10,4); 1,960 (22,6); 1,954 (102,7); 1,948 (182,7); 1,942 (241,3); 1,936 (167,3); 1,930 (87,0); 1,783 (0,7); 1,777 (1,1); 1,770 (1,5); 1,764 (1,1); 1,758 (0,6); 1,437 (15,2); 1,296 (0,5); 1,270 (1,7); 1,222 (0,7); 1,204 (1,3); 1,186 (0,6); 0,146 (0,3); 0,008 (2,7); 0,000 (69,9); -0,008 (3,3)
Beispiel -T3-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,129 (2,6); 8,075 (2,6); 7,738 (1,6); 7,732 (2,3); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,681 (1,2); 7,675 (1,1); 7,572 (0,5); 7,536 (3,2); 7,496 (1,8); 7,475 (1,5); 2,148 (33,8); 2,113 (16,5); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (5,8); 1,953 (29,5); 1,946 (53,8); 1,940 (72,5); 1,934 (50,1); 1,928 (25,8); 1,768 (0,4); 1,599 (0,8); 1,585 (1,6); 1,578 (2,0); 1,564 (1,1); 1,437 (16,0); 1,359 (1,1); 1,345 (2,0); 1,338 (2,0); 1,324 (0,8); 1,269 (0,6); 0,008 (1,9); 0,000 (51,3); -0,009 (2,0)
Beispiel -T3-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,132 (3,7); 8,077 (8,7); 7,719 (3,4); 7,714 (4,3); 7,678 (2,2); 7,673 (1,8); 7,657 (2,6); 7,652 (2,3); 7,537 (7,8); 7,515 (1,0); 7,495 (1,0); 7,486 (4,3); 7,465 (3,3); 5,338 (0,9); 5,316 (1,8); 5,296 (1,8); 5,274 (1,0); 3,544 (2,3); 3,521 (4,7); 3,499 (3,1); 3,370 (3,0); 3,349 (4,6); 3,346 (4,3); 3,325 (2,4); 2,469 (0,4); 2,274 (0,4); 2,206 (300,4); 2,154 (0,5); 2,115 (36,2); 1,973 (1,3); 1,966 (3,0); 1,960 (8,3); 1,954 (30,3); 1,948 (55,1); 1,942 (73,7); 1,935 (52,5); 1,929 (28,5); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,764 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (1,6); 1,222 (0,3); 1,204 (0,6); 0,008 (0,7); 0,000 (20,6)
Beispiel -T3-5: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,125 (8,3); 8,124 (8,5); 8,072 (9,3); 8,071 (9,2); 7,680 (16,0); 7,677 (5,7); 7,668 (5,3); 7,664 (3,0); 7,537 (9,4); 7,485 (4,7); 7,482 (2,1); 7,473 (1,9); 7,470 (4,3); 7,461 (2,3); 2,146 (139,0); 2,113 (53,4); 2,060 (0,5); 2,056 (0,9); 2,052 (1,3); 2,048 (0,9); 2,044 (0,4); 1,966 (5,4); 1,958 (14,4); 1,953 (76,2); 1,950 (93,5); 1,945 (166,6); 1,941 (244,5); 1,937 (162,8); 1,933 (81,9); 1,924 (1,3); 1,835 (0,5); 1,831 (0,9); 1,827 (1,4); 1,822 (0,9); 1,818 (0,5); 1,393 (2,4); 1,389 (5,5); 1,386 (5,9); 1,370 (3,2); 1,343 (0,4); 1,269 (0,6); 1,251 (1,3); 1,248 (1,4); 1,238 (4,5); 1,228 (1,0); 1,225 (1,0); 0,096 (0,4); 0,005 (3,0); 0,000 (105,8); -0,006 (3,3); -0,100 (0,4)
Beispiel -T3-6: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN): δ= 8,130 (11,9); 8,129 (12,8); 8,082 (13,1); 8,081 (13,4); 7,809 (8,6); 7,805 (9,0); 7,697 (5,1); 7,693 (4,8); 7,683 (5,9); 7,679 (5,7); 7,538 (13,6); 7,508 (9,3); 7,494 (8,0); 7,304 (1,1); 7,295 (1,9); 7,286 (1,1); 7,069 (1,2); 4,045 (16,0); 4,036 (15,9); 3,973 (1,6); 3,962 (1,8); 3,957 (5,2); 3,946 (5,2); 3,941 (5,5); 3,930 (5,3); 3,926 (2,0); 3,915 (1,8); 2,220 (0,4); 2,153 (19,3); 2,115 (73,8); 2,104 (1,0); 2,052 (0,4); 2,006 (0,4); 1,863 (1,4); 1,958 (3,8); 1,953 (4,5); 1,950 (25,7); 1,945 (45,5); 1,941 (67,9); 1,937 (46,1); 1,933 (22,7); 1,827 (0,4); 1,268 (1,1); 0,005 (0,8); 0,000 (28,7); -0,006 (0,9)
Beispiel -T3-7: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 9,043 (1,2); 9,038 (1,2); 8,803 (1,3); 8,798 (1,3); 8,672 (3,2); 8,648 (0,9); 8,638 (0,9); 8,405 (3,2); 8,390 (1,1); 8,384 (1,9); 8,379 (1,0); 8,318 (0,3); 7,802 (3,5); 3,902 (9,7); 3,330 (83,7); 3,243 (0,6); 3,169 (0,4); 2,903 (0,3); 2,893 (0,5); 2,885 (0,7); 2,875 (0,7); 2,867 (0,4);

2 857 (0,3);; 2,676 (0,4); 2,672 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,4) 2,512 (30,7); 2,507 (61,4). 2,503 (80,2); 2,498 (57,8);; 2,494 (27,6); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0,3); 2 131 (16,0); 1,909 (0,3); 0,783 (0,4); 0,750 (1,1); 0 745 (1,6); 0,733 (1,5); 0,727 (1,3); 0,716 (0,8); 0,619 (0,6); 0,608 (1,7); 0,602 (1,4). 0,598 (1,4); 0,593 (1,2); 0,580 (0,4). 0,000 (9,2)

Beispiel -T3-8: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 9,538 (2,0); 9,102 (1,4); 9,097 (1,4); 8 827 (1,4); 8,823 (1,5); 8,695 (3,2); 8,444 (1,1); 8,439 (1,9); 8,434 (1,2); 8,424 (3,3); 7,605 (3,8); 3 902 (5,0); 3,374 (0,4); 3,330 (80,4);; 3,243 (0,4). 3,169 (2,1); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,5); 2 507 (75,8) 2,503 (97,5); 2 498 (74,7); 2,334 (0,4); 2,329 (0 6); 2,325 (0,5); 2,132 (16,0); 1,628 (0,7); 1,614 (2,0); 1,607 (2,1); 1,594 (0,9); 1,347 (0,9); 1 334 (2,1); 1,327 (2,1); 1,313 (0,7); 0,000 (8,2)

Beispiel -T3-9: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 8,508 (2,0); 8,506 (2,0); 8,473 (1,0); 8,463 (1,0); 8,276 (2,2); 7,695 (0,5); 7,676 (1,0); 7,661 (0,5); 7,592 (4,1); 7,389 (0,5); 7,383 (1,0); 7,368 (0,7); 7,305 (1,1); 7,286 (1,7); 7,266 (0,7); 3,902 (5,7); 3,330 (72,5); 3,243 (0,4); 3,175 (0,4); 3,162 (0,3); 2,875 (0,4); 2,835 (0,5); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,5); 2,828 (0,3);; 2,672 (0,5). 2,507 (63,9); 2,503 (80,2); 2,329 (0,5); 2,114 (16,0); 0,725 (0,4); 0,707 (1,8); 0 695 (1,7); 0,689 (1,5); 0,678 (0,6); 0,556 (0,6); 0,545 (1,8); 0,539 (1,8); 0,530 (1,6). 0,518 (0,5); 0,000 (6,1)

Beispiel -T3-10: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 9,369 (2,0); 8,535 (1,6); 8,532 (1,9); 8,290 (2,0); 7,968 (0,4); 7,965 (0,5); 7,949 (0,9); 7,946 (0,9); 7,931 (0,5); 7,927 (0,5); 7,595 (3,9); 7,479 (0,4); 7,475 (0,4); 7,459 (0,9); 7,443 (0,6); 7,440 (0,5); 7,352 (1,0); 7,333 (1,7); 7,314 (0,8); 3,903 (8,2); 3,372 (0,4); 3,329 (104,6); 3,243 (0,6); 3,175 (0,3); 2,675 (0,4); 2,671 (0,5);; 2,667 (0,4). 2,541 (0,5); 2,507 (73,8); 2,502 (89,6); 2,498 (56,7); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2 324 (0,4); 2,115 (16,0); 1,598 (0,8); 1,584 (2,0); 1,577 (2,1);; 1,564 (0,9); 1,292 (0,9); 1,278 (2,1); 1,272 (2,2); 1,257 (0,8); 1,189 (0,3);; 1,068 (0,4); 0,007 (0,4); 0,000 (7,5); -0,008 (0,4)

Beispiel -T3-11: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 8,522 (0,3);; 8,512 (0,9); 8,500 (3,3);; 8,211 (3,2); 7,816 (1,8); 7,799 (1,8); 7,646 (1,8); 7,621 (1,8); 7,590 (3,5); 3,902 (3,1); 3,330 (117,7); 3,304 (0,3); 2,861 (0,3); 2,851 (0,4); 2,842 (0,7); 2,832 (0,7); 2,824 (0,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,3); 2,525 (1,5); 2,511 (29,4); 2,507 (58,1); 2,502 (75,7); 2,498 (54,9); 2,493 (26,6); 2,334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 2,127 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0 715 (1,7); 0,703 (1,6); 0,697 (1,3); 0,685 (0,3); 0,575 (0,6); 0,564 (1,7); 0,558 (1,5); 0,554 (1,4); 0,548 (1,3); 0,538 (0,4). 0,000 (7,9)

Beispiel -T3-12: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 9,396 (1,8); 8,522 (3,2); 8,223 (3,2);; 7,906 (1,6); 7,887 (1,6); 7,712 (1,6);; 7,687 (1,6); 7,593 (3,7); 3,903 (2,7);; 3,332 (96,2); 2,672 (0,5);; 2 542 (0,4);; 2,507 (67,0); 2,503 (83,7); 2,498 (62,0); 2,334 (0,4); 2,329 (0 5); 2,325 (0,4); 2,129 (16,0); 1,604 (0,8); 1,590 (2,0); 1 583 (2,1); 1,570 (0,9);; 1,312 (0,9); 1,299 (2,0); 1,292 (2,3); 1,278 (0,8); 0,000 (7,1)

Beispiel -T3-13: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 8,514 (1,3); 8,510 (1,9); 8,480 (0,9); 8 470 (0,9); 8,265 (2,1); 8,226 (0,8); 8,220 (0,8); 8,207 (0,8); 8,202 (0,8); 7,767 (0,4); 7,762 (0,5); 7 755 (0,5);; 7,749 (0,6); 7,746 (0,6); 7,740 (0,5). 7,734 (0,5) 7,728 (0,4); 7,595 (3,7); 7,402 (0,9); 7,380 (0,9); 7,375 (1,0); 7,354 (0,8);; 3,902 (1,5); 3,444 (0,4) 3,425 (0,6); 3,405 (1,1); 3,353 (438,8); 3,292 (0,5); 3,273 (0,3); 2,864 (0,5); 2,855 (0,7); 2,846 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3);; 2,676 (0,4); 2,673 (0,5); 2,669 (0,4); 2,509 (61,5); 2,504 (78,6); 2,500 (57,5); 2,335 (0,4); 2,331 (0,5); 2,327 (0,4); 2,121 (16,0); 0,746 (0,4);; 0,733 (1,7); 0,728 (1,7); 0,716 (1,8); 0,710 (1,3); 0,699 (0,6); 0,602 (0,6); 0,592 (1,7); 0,585 (1,6); 0,576 (1,3); 0,564 (0,4)

Beispiel -T3-14: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 8,600 (1,8); 8,596 (1,8); 8,536 (1,1); 8 525 (1,1); 8,352 (1,9); 7,977 (1,6); 7,960 (1,6); 7,594 (3,7); 7,437 (1,7); 7,411 (1,7); 3,902 (4,8); 3 332 (129,0); 2 826 (0,4);; 2,817 (0,7); 2,807 (0,7); 2,799 (0,4); 2,789 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,5). 2,667 (0,4); 2,511 (32,0); 2,507 (61,8); 2 503 (79,3); 2,498 (57,8); 2,494 (28,2); 2 334 (0,3); 2,329 (0,5); 2,325 (0 4); 2,115 (16,0); 0,733 (0,4); 0,720 (1,2); 0,715 (1,8); 0 703 (1,5); 0,697 (1,3);; 0,685 (0,5); 0,567 (0,5); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,541 (1,3); 0,529 (0,4); 0,000 (6,1)

Beispiel -T3-15: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 8,711 (3,3); 8,694 (1,1). 8,684 (1,0); 8,450 (3,3); 8,369 (1,8); 8,174 (1,8); 7,971 (1,6); 7,601 (3,9); 3,903 (1,0); 3,331 (150,2); 2,910 (0,3); 2,901 (0,5); 2,892 (0,7); 2,882 (0,7); 2,874 (0,5); 2,865 (0,4); 2,672 (0,5); 2,507 (59 3); 2,503 (74,7); 2,499 (55,2); 2,334 (0,4); 2,330 (0,5); 2,133 (16,0); 0,769 (0,4); 0,755 (1,3); 0,751 (1,7); 0,738 (1,6); 0,733 (1,4); 0 721 (0,6); 0,630 (0,6); 0,620 (1,8); 0,613 (1,7); 0,604 (1,4); 0,592 (0,4)

Beispiel -T3-16: 1H-NMR (301,6 MHz, d6-DMSO):;
δ= 8,439 (0,8); 8,433 (0,9); 8,344 (3,1); 8,343 (3,2); 8,082 (3,2); 8,081 (3,3); 7,912 (1,7); 7,908 (1,7); 7,670 (0,9); 7,667 (0,8); 7,657 (1,0); 7 654 (1,0); 7,600 (3,4) 7,368 (1,3); 7,354 (1,2); 3 376 (0,5); 3,367 (1,1) 3,351 (401,9); 3,328 (0,5); 3,324 (0,5); 2,997 (3,2); 2 856 (0,4); 2,850 (0,7);; 2,844 (0,7); 2,838 (0,4); 2,831 (0,3). 2,618 (0,4). 2,615 (0,6); 2,612 (0,4); 2,543 (5,5); 2,524 (1,0); 2,521 (1,3); 2,518 (1,2);; 2 909 (30,4); 2,906 (67,4); 2,903 (93,3); 2,900 (68,5); 2,497 (31,3); 2,438 (7,5); 2,390 (0,4); 2,387 (0,6); 2,384 (0,4); 2,146 (16,0); 0,715 (0,4); 0,707 (1,2); 0,703 (1,6); 0,695 (1,5); 0,692 (1,3); 0,684 (0,5); 0,590 (0,6); 0,583 (1,5); 0,579 (1,4); 0,576 (1,3); 0,572 (1,3); 0,564 (0,4); 0,000 (2,6)

Beispiel -T3-17: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 9,576 (0,4); 9,437 (2,3); 8,736 (0,7); 8 625 (1,7); 8,621 (1,8); 8,472 (0,7); 8,41 (0,4); 8,375 (1,8); 8,372 (1,9); 8,316 (0,5); 8,243 (0,4); 8 030 (1,7);; 8,013 (1,6); 7,993 (0,3); 7,597 (3,3) 7,547 (1,7) 7,521 (1,9); 4,036 (1,1); 3,903 (8,7); 3,630 (0,4); 3,623 (0,4); 3,614 (0,4);; 3,608 (0,3); 3,597 (0,3); 3,392 (0,7); 3,332 (259,8); 3,287 (0,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,5); 3,155 (0,4); 3,145 (0,5); 3,138 (0,4); 3,127 (0,5); 3 056 (0,4); 3 022 (4 3); 2 757 (0,4); 2,690 (1,7); 2,676 (0,6); 2 672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,525 (3,7); 2,511 (72,5); 2,507 (143,5); 2,503 (187,7); 2,498 (136,4);; 2,494 (66,3); 2,338 (0,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,8); 2,134 (3,5); 2,116 (16,0); 1,614 (0,5); 1,607 (1,1); 1 593 (1,9);; 1,586 (2,0); 1,573 (0,8); 1,344 (0,5). 1,337 (0,5) 1,310 (0,9); 1,296 (1,8); 1,289 (2,1); 1,274 (3,8); 1,259 (6,5); 1,244 (6,0);; 1,225 (1,2);; 0,008 (0,5); 0,000 (16,5); -0,009 (0,5)

Beispiel -T3-18: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 9,576 (2,0); 8,736 (3,2); 8,472 (3,3); 8,411 (1,7); 8,316 (0,3); 8,243 (1,6); 7,994 (1,3); 7,305 (3,3); 3,903 (10,2); 3,372 (0,7); 3,333 (152,1); 3,243 (1,3); 3,175 (0,4); 3,162 (0,4); 2,690 (0,4); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6);; 2,667 (0,4). 2,542 (0,6); 2,525 (1,9); 2,512 (39,2); 2,507 (77,8); 2,503 (101,6); 2,498 (73,7); 2,494 (35,7); 2,334 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,4); 2,134 (16,0); 2,116 (0,5); 1,629 (0,7); 1,614 (1,6); 1 607 (2,0);; 1,594 (0,9); 1,358 (0,9); 1,345 (1,9); 1,338 (2,0); 1,323 (0,7); 1,259 (0,5). 1,244 (0,4); 1,017 (0,6); 1,001 (0,6). 0,000 (9,1)

Beispiel -T3-19: 1H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):;
δ= 9,367 (1,9); 8,537 (1,8); 8,534 (1,9); 8,300 (2,2); 8,277 (0,8); 8,271 (0,9); 8,259 (0,9); 8,253 (0,8); 7,796 (0,4); 7,791 (0,5); 7,784 (0,5);

7.778 (0,6);; 7,775 (0,6); 7,769 (0,6); 7,763 (0,5); 7,757 (0,5) 7,598 (3,8); 7,457 (0,8); 7,435 (0,6); 7,430 (1,0); 7,409 (0,7); 3,903 (4,8);; 3.335 (104,3); 2,672 (0,4); 2,542 (0,3);; 2,507 (54,0); 2,503 (69,3);; 2,499 (52,7); 2,330 (0,4); 2,122 (16,0); 1,609 (0,8); 1,595 (2,0); 1,588 (2,1); 1,575 (0,9); 1.323 (0,9). 1.309 (2,0); 1.303 (2,1); 1,288 (0,8). 0.000 (5,6)
Beispiel 1-T3-20: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO);:
δ= 8,816 (2,3);; 8,810 (2,3); 8,695 (3,4);; 8,681 (1,1); 8,670 (1,1); 8,451 (3,4); 8,184 (2,3); 8,178 (2,2); 7,601 (3,8); 3,903 (7,0); 3,333 (173,9);; 3,289 (0,4); 3,242 (0,9); 3,175 (0,6); 3,162 (0,5);; 2,899 (0,4); 2,850 (0,7); 2,840 (0,7); 2,832 (0,4);; 2,822 (0,3); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,542 (0,4); 2,511 (34,1);; 2,507 (96,3); 2,502 (85,9); 2,498 (63,0); 2,494 (31,0); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,325 (0,4);; 2,132 (0,7); 2,117 (16,0); 1,618 (0,4); 1,001 (0,4); 0,755 (0,5);; 0,742 (1,3); 0,737 (1,7); 0,725 (1,6); 0,719 (1,4); 0,707 (0,5); 0,584 (0,6);; 0,553 (1,7);; 0,547 (1,6); 0,543 (1,5); 0,536 (1,4); 0,526 (0,4); 0,000 (7,1)
Beispiel 1-T3-21: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, d6-DMSO);:
δ= 9,593 (1,8); 8,868 (2,3); 8,864 (2,3); 8,709 (3,3);; 8,456 (3,4); 8,262 (2,3); 8,258 (2,2); 7,903 (3,7); 3,388 (0,4); 3,383 (0,4); 3,381 (0,5); 3,369 (0,8);; 3,340 (1164,0); 2,994 (0,7); 2,617 (0,6);; 2,615 (0,8); 2,612 (0,6); 2,542 (39,9); 2,523 (1,4); 2,520 (1,7); 2,517 (1,8); 2,508 (48,7); 2,505 (103,1); 2,502 (140,8); 2,499 (100,9); 2,497 (46,2); 2,389 (0,6); 2,386 (0,8); 2,383 (0,6); 2,117 (16,0); 1,638 (0,8); 1,627 (2,0); 1,622 (2,1); 1,613 (0,8); 1,288 (0,9); 1,278 (1,3); 1,274 (2,1); 1,264 (0,8); 0.005 (0,8); 0.000 (21,9);; -0,006 (0,7)
Beispiel 1-T3-22: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d6-DMSO);:
δ= 9,397 (6,5); 8,682 (5,3); 8,677 (5,1); 8,405 (7,5); 8,365 (0,3); 8,087 (16,0); 8,060 (0,3); 8,041 (0,7);; 7,981 (1,7); 7,966 (2,6); 7,963 (2,7); 7,948 (1,5);; 7,944 (1,4); 7,763 (0,3); 7,505 (1,2); 7,501 (1,3). 7,486 (2,7); 7,470 (1,8); 7,466 (1,6); 7,384 (0,6); 7,374 (3,1); 7,365 (1,1);; 7,355 (5,1); 7,345 (0,8); 7,336 (2,3); 5,761 (0,8);; 3,348 (68,6); 3,028 (1,2); 2,875 (1,0); 2,712 (0,4); 2,671 (0,3); 2,542 (99,6) 2,507 (38,4); 2,502 (50,3); 2,498 (36,2); 2,368 (0,4); 2,087 (0,3); 1,601 (2,4); 1,587 (6,3); 1,580 (6,5);; 1,567 (2,8); 1,289 (3,1); 1,275 (6,2); 1,268 (5,6); 1,254 (2,5);; 1,234 (0,8); 1,169 (0,9); 0,146 (0,3); 0,000 (72,5); -0,008 (4,9); -0,150 (0,4)
Beispiel 1-T3-23: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,202 (5,5); 8,187 (6,5); 8,161 (5,9); 8,146 (6,5);; 7,931 (6,4); 7,900 (9,0); 7,886 (6,8); 7,739 (3,5); 7,734 (4,4); 7,720 (6,5); 7,707 (2,6); 7,701 (1,9);; 7,686 (3,0); 7,680 (2,5); 7,648 (1,5). 7,507 (4,1). 7,486 (3,4); 4,360 (6,5); 4,342 (6,5); 4,086 (1,0); 4,068 (2,9); 4,050 (3,0);; 4,032 (1,1); 2,162 (61,1); 2,149 (10,3); 2,120 (6,4); 2,114 (6,4); 2,108 (6,5); 2,102 (6,4); 1,972 (13,4); 1,965 (4,8);; 1,959 (8,2); 1,953 (30,5); 1,947 (52,3); 1,940 (68,1); 1,934 (48,2); 1,928 (27,3); 1,769 (6,4); 1,598 (1,8); 1,581 (4,5); 1,574 (4,4); 1,561 (2,9);; 1,437 (16,0); 1,422 (1,2); 1,401 (6,5); 1,371 (6,6); 1,331 (2,6); 1,353 (1,9); 1,347 (1,6); 1,341 (1,6); 1,336 (1,5); 1,326 (2,3); 1,268 (1,6); 1,222 (3,7); 1,204 (7,2); 1,186 (3,8); 0,000 (2,2)
Beispiel 1-T3-24: ^{1}H-NMR (600,1 MHz, CD3CN):
δ= 8,189 (8,2). 8,144 (6,7); 7,897 (10,1). 7,890 (3,8); 7,887 (4,5); 7,852 (2,6); 7,848 (2,1); 7,838 (2,8);; 7,834 (2,4); 7,471 (4,4); 7,457 (3,7); 6,891 (1,0);; 5,446 (2,0); 4,077 (2,0); 4,065 (6,2). 4,053 (6,2) 4,041 (2,1); 2,864 (0,8); 2,857 (1,1); 2,852 (1,7); 2,845 (1,7); 2,839 (1,1);; 2,833 (0,8); 2,129 (55,4) 2,054 (0,5); 2,050 (0,7); 2,046 (0,5) 1,971 (27,5); 1,963 (6,3); 1,955 (3,8); 1,951 (10,1); 1,947 (46,9); 1,943 (78,2); 1,939 (115,2); 1,935 (77,9); 1,931 (39,3); 1,922 (0,5); 1,828 (0,4); 1,824 (0,6); 1,820 (0,4); 1,437 (16,0); 1,270 (0,4); 1,216 (7,4); 1,204 (14,6); 1,192 (7,3); 0,786 (1,0); 0,777 (2,8); 0,774 (3,6);; 0,765 (3,6); 0,762 (2,7); 0,754 (1,2); 0,606 (1,1); 0,599 (2,9); 0,596 (2,9);; 0,595 (3,0);; 0,591 (2,8); 0,588 (2,8); 0,580 (3,9); 0,005 (2,1); 0,000 (69,9); -0,006 (2,2)
Beispiel -T3-25: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,201 (9,9); 8,163 (10,8); 7,899 (16,0);; 7,736 (5,9); 7,734 (7,4); 7,710 (4,2); 7,706 (3,3); 7,696 (4,6); 7,693 (4,0); 7,522 (6,8); 7,508 (5,8); 7,328 (1,4); 7,265 (0,6); 7,257 (1,5); 7,239 (1,1); 7,195 (1,4); 7,183 (1,0); 7,162 (0,5); 7,150 (0,7); 5,446 (1,0); 4,127 (1,3); 4,116 (1,5); 4,111 (4,2); 4,100 (4,3); 4,095 (4,5); 4,085 (4,3); 4,080 (1,7); 4,069 (1,4); 2,328 (5,9); 2,134 (32,5); 2,132 (53,6); 2,056 (0,4); 2,054 (0,6); 2,050 (1,0); 2,046 (0,7); 1,971 (1,2); 1,964 (7,9);; 1,955 (12,2); 1,951 (13,8); 1,947 (97,1); 1,943 (113,1); 1,939 (165,4); 1,935 (111,4); 1,931 (56,0); 1,833 (0,5); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,437 (5,7); 1,269 (0,8); 1,204 (0,6);; 1,192 (0,3); 0,000 (1,4)
Beispiel -T3-26: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,222 (8,5). 8,184 (9,2); 8,183 (8,4);; 7,933 (13,8); 7,743 (5,6); 7,739 (6,7). 7,712 (3,6); 7,709 (3,0); 7,699 (4,2). 7,695 (3,6); 7,530 (6,3); 7,516 (5,4);; 7,228 (0,3); 7,216 (0,4); 7,172 (1,1); 5,481 (0,5); 4,022 (0,9); 3,653 (2,8); 3,641 (6,5); 3,631 (6,6); 3,620 (2,9); 2,605 (0,6);; 2,594 (1,2);; 2,586 (2,0); 2,582 (0,9); 2,575 (3,7); 2,568 (2,2); 2,564 (2,1); 2,556 (3,8); 2,549 (0,9); 2,545 (2,0); 2,538 (1,3); 2,527 (0,6);; 2,505 (0,6);; 2,502 (1,0); 2,499 (1,4); 2,496 (1,0). 2,361 (1,2); 2,216 (233,1); 2,214 (233,8); 2,213 (216,8); 2,211 (239,7); 2,210 (216,4);; 2,208 (358,9); 2,092 (0,7); 2,088 (1,2); 2,084 (1,6); 2,080 (1,2); 2,076 (0,6); 2,005 (1,3). 1,998 (14,1); 1,990 (21,9);; 1,985 (28,7); 1,982 (121,7); 1,978 (205,2); 1,973 (304,1); 1,969 (210,4); 1,965 (107,9); 1,867 (0,7); 1,863 (1,2); 1,859 (1,7); 1,855 (1,2); 1,850 (0,6); 1,470 (16,0); 1,303 (0,4); 1,237 (0,6); 0,033 (1,8)
Beispiel -T3-27: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO);:
δ= 9,439 (6,6) 8,693 (9,5); 8,441 (9,4);; 8,317 (0,9) 8,274 (16,0); 7,807 (2,2) 7,802 (3,8); 7,792 (5,8);; 7,786 (9,9); 7,569 (5,1); 7,553 (1,2); 7,548 (4,2); 4,020 (0,3); 3,568 (10,9); 3,328 (401,1); 2,675 (2,2); 2,671 (2,9);; 2,666 (2,2); 2,506 (372,0); 2,502 (469,0); 2,497 (338,4);; 2,333 (2,3);; 2,328 (2,9); 2,324 (2,1); 1,989 (1,3); 1,615 (2,4); 1,601 (6,2); 1,594 (6,2); 1,581 (2,5); 1,398 (5,4); 1,287 (2,8); 1,274 (6,1);; 1,267 (6,2);; 1,253 (2,2); 1,235 (0,4); 1,192 (0,4); 1,175 (0,7); 1,157 (0,4); 0,146 (0,7); 0,000 (164,4) -0,008 (7,8); -0,150 (0,8)
Beispiel -T3-28: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO);:
δ= 8,684 (0,4); 8,672 (9,5). 8,535 (3,2); 8,524 (3,2); 8,453 (0,3); 8,427 (9,5); 8,271 (16,0);; 7,749 (2,3); 7,744 (3,3); 7,723 (12,2); 7,519 (4,6); 7,498 (3,6); 4,056 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,568 (7,8); 3,329 (74,2); 2,857 (0,9); 2,848 (1,3); 2,839 (1,9); 2,829 (2,0); 2,820 (1,3); 2,811 (0,9); 2,801 (0,3); 2,675 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,4); 2,524 (1,5); 2,511 (34,6). 2,507 (88,9); 2,502 (89,7); 2,498 (64,3); 2,493 (30,8); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 1,989 (6,1); 1,397 (13,9); 1,193 (1,6); 1,175 (3,1); 1,157 (1,6); 0,728 (1,3); 0,716 (3,7); 0,711 (4,9); 0,698 (4,7); 0,693 (3,9); 0,681 (1,6); 0,561 (1,7); 0,551 (5,1); 0,544 (4,7); 0,535 (4,1); 0,523 (1,2); 0.009 (1,4); 0.000 (37,7); -0,008 (1,4)
Beispiel 1-T3-29: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d6-DMSO);:
δ= 9,042 (6,2); 9,036 (6,0); 8,962 (0,4); 8,831 (6,4); 8,826 (6,3); 8,607 (5,6); 8,678 (3,3); 8,668 (3,2); 8,507 (9,6); 8,478 (0,5); 8,385 (3,9); 8,379 (6,4); 8,374 (3,5); 8,111 (16,0); 3,368 (0,3); 3,357 (0,3);; 3,365 (0,4); 3,362 (0,5); 3,361 (0,6); 3,360 (0,6); 3,357 (0,7); 3,356 (0,8);; 3,350 (1,8); 3,330 (278,8); 3,313 (3,5); 3,309 (2,7) 3,308 (2,6); 3,306 (2,5); 3,297 (1,0); 3,295 (1,0) 3,294 (0,9); 3,287 (0,8); 3,284 (0,5); 3,281 (0,4);; 3,279 (0,4); 3,277 (0,4); 2,915 (0,4); 2,905 (1,0); 2,896 (1,5); 2,887 (2,2); 2,877 (2,3); 2,869 (1,5); 2,859 (1,1); 2,849 (0,4);; 2,711 (0,4);; 2,671 (0,3); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,8); 2,558 (0,9); 2,557 (1,1); 2,555 (1,4);; 2,542 (109,1); 2,533 (2,6);; 2,532 (2,3), 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,8); 2,525 (1,9); 2,524 (2,0);; 2,523 (2,0). 2,511 (15,9);

2,507 (30,0); 2,502 (38,9);; 2,498 (28,5); 2,494 (14,2); 2,368 (0,4); 2,130 (0,7); 1,234 (0,5); 0,765 (1,4); 0,752 (4,2); 0,747 (5,5); 0,735 (5,4); 0,729 (4,4);; 0,717 (2,0); 0,896 (0,3); 0,878 (2,1); 0,608 (3,9); 0,602 (5,4); 0,592 (4,5); 0,580 (1,5); 0,146 (0,5); 0,022 (0,4); 0,021 (0,5);; 0,020 (0,6);; 0,019 (0,7); 0,017 (0,7); 0,016 (0,9); 0,008 (6,5); 0,000 (210,7); -0,009 (5,4); -0,013 (2,0); -0,014 (1,7); -0,015 (1,6); -0,016 (1,4); -0,018 (1,3); -0,019 (1,2); -0,020 (1,1); -0,021 (1,0); -0,023 (1,0); -0,024 (0,9); -0,025 (0,9); -0,026 (0,8); -0,027 (0,7); -0,029 (0,7); -0,031 (0,5);; -0,034 (0,5); -0,035 (0,4); -0,036 (0,4);; -0,150 (0,5)

Beispiel -T3-30: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,562 (3,5); 9,101 (6,1); 9,095 (6,1); 8,989 (0,4); 8,855 (6,3); 8,850 (6,4); 8,829 (8,9); 8,5253 (9,7); 8,5245 (9,7); 8,486 (0,5); 8,438 (3,7); 8,432 (6,4); 8,427 (3,6); 8,115 (16,0); 5,759 (0,5); 3,361 (0,8); 3,329 (283,9); 2,712 (0,5); 2,671 (0,4); 2,568 (0,3); 2,567 (0,4); 2,565 (0,4); 2,564 (0,5); 2,563 (0,5); 2,562 (0,6); 2,560 (0,7); 2,559 (0,7); 2,558 (0,9); 2,557 (1,0); 2,555 (1,2); 2,554 (1,5); 2,542 (137,6); 2,533 (2,7); 2,532 (2,2); 2,530 (2,0); 2,529 (1,9); 2,528 (1,8); 2,527 (1,7); 2,525 (1,8); 2,524 (1,8); 2,523 (1,9); 2,511 (16,2);; 2,507 (31,6); 2,502 (41,8); 2,498 (30,6); 2,493 (15,2); 2,368 (0,5); 1,631 (2,6); 1,617 (6,5);; 1,610 (6,6); 1,597 (3,0); 1,348 (3,1); 1,334 (9,6); 1,328 (6,6); 1,313 (2,5); 1,234 (0,4); 0,146 (0,5); 0,026 (0,3); 0,025 (0,4); 0,024 (0,4); 0,022 (0,5); 0,021 (0,5); 0,020 (0,6); 0,019 (0,7); 0,018 (0,9); 0,008 (5,8); 0,000 (139,7); -0,008 (4,9); -0,014 (1,3); -0,015 (1,2); -0,016 (1,1); -0,018 (1,0);; -0,019 (0,9); -0,020 (0,8); -0,023 (0,7); -0,024 (0,6); -0,025 (0,6);; -0,027 (0,5); -0,029 (0,4); -0,030 (0,4);; -0,031 (0,4); -0,150 (0,5)

Beispiel -T3-31: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD_3CN):

δ= 19,953 (0,4); 8,476 (0,6); 8,467 (15,0); 8,193 (0,3); 8,170 (0,6); 8,158 (14,9); 8,148 (0,5); 8,052 (0,3); 7,934 (7,1); 7,931 (7,2); 7,901 (0,6); 7,868 (5,7); 7,852 (8,0); 7,779 (4,3); 7,765 (3,1); 7,707 (9,8); 7,703 (11,5); 7,639 (0,7); 7,569 (3,5); 7,565 (5,3); 7,555 (7,3); 7,551 (6,3); 7,509 (0,4); 7,477 (11,0); 7,463 (9,5); 6,905 (2,4); 3,912 (2,1); 2,873 (0,6); 2,866 (1,9); 2,860 (2,7); 2,854 (4,1); 2,848 (4,3); 2,842 (2,7); 2,836 (2,0); 2,830 (0,7); 2,145 (513,7); 2,068 (0,3); 2,064 (0,6); 2,060 (3,3); 2,056 (5,5); 2,052 (8,1); 2,048 (5,6); 2,044 (2,9); 1,966 (31,6); 1,958 (83,8); 1,953 (98,4); 1,950 (560,5); 1,945 (964,6); 1,941 (1429,4); 1,937 (989,8); 1,933 (503,8); 1,925 (8,1); 1,843 (0,3); 1,838 (3,0);; 1,831 (5,4); 1,827 (7,9); 1,823 (5,4); 1,818 (2,7); 1,340 (0,3); 1,285 (0,7); 1,269 (2,9); 1,123 (0,4); 0,882 (0,7); 0,790 (2,5);; 0,782 (6,8);; 0,779 (9,4); 0,770 (9,0); 0,767 (7,4); 0,759 (3,0); 0,744 (0,4); 0,732 (0,4); 0,636 (0,4); 0,609 (2,9); 0,601 (7,4); 0,598 (7,8);; 0,595 (7,3);; 0,592 (7,5); 0,583 (2,4); 0,097 (2,5); 0,005 (17,5); 0,000 (588,4); -0,006 (20,1); -0,100 (2,5)

Beispiel T3-32: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD_3CN):

δ= 19,978 (0,8); 8,505 (16,0); 8,234 (0,7); 8,187 (15,1); 7,962 (7,3); 7,933 (1,0); 7,901 (6,3);; 7,887 (8,2); 7,812 (4,3); 7,798 (3,2); 7,785 (8,1); 7,781 (11,3); 7,755 (6,0); 7,752 (4,8); 7,742 (6,5); 7,738 (5,8); 7,557 (10,5); 7,543 (9,3); 7,451 (1,3);; 7,284 (1,2); 7,272 (0,9); 7,228 (1,1); 7,215 (0,9); 7,183 (0,6); 5,487 (0,6); 4,162 (2,0); 4,151 (2,3); 4,147 (6,6); 4,136 (6,5); 4,131 (7,2); 4,120 (6,5); 4,115 (3,0); 4,104 (2,2); 3,948 (0,8); 2,497 (1,3); 2,361 (4,7); 2,211 (114,1); 2,208 (135,0); 2,203 (158,6); 2,200 (140,9); 2,198 (164,0); 2,092 (0,8); 2,088 (1,1); 2,084 (1,6); 2,080 (1,1); 1,997 (12,7); 1,989 (19,6); 1,985 (22,3); 1,981 (108,3); 1,977 (181,4); 1,973 (268,0); 1,969 (184,4); 1,965 (84,6); 1,862 (1,0); 1,858 (1,5); 1,854 (1,1); 1,303 (1,1); 0,033 (2,1)

Beispiel -T3-33: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD_3CN):

δ= 8,489 (10,8); 8,221 (0,7); 8,184 (10,0);; 7,986 (4,8); 7,932 (1,1); 7,902 (4,3); 7,888 (5,4); 7,813 (3,0); 7,799 (2,1); 7,759 (6,4); 7,755 (7,3); 7,725 (4,1); 7,722 (3,2); 7,712 (4,4); 7,708 (3,5); 7,533 (7,0); 7,519 (5,9); 7,111 (1,4); 3,859 (3,4); 3,848 (7,7); 3,837 (7,6); 3,828 (3,3); 2,609 (0,8); 2,598 (1,4); 2,591 (2,3); 2,579 (4,4); 2,572 (2,5); 2,568 (2,5); 2,561 (4,4); 2,549 (2,4); 2,542 (1,5); 2,531 (0,8); 2,184 (375,5); 2,162 (324,4); 2,161 (324,2); 2,177 (394,7); 2,173 (444,9); 2,092 (1,2); 2,088 (2,1); 2,084 (3,3); 2,080 (2,2); 2,076 (1,1); 1,998 (27,5); 1,990 (42,2); 1,985 (47,1);; 1,981 (234,7); 1,977 (393,2); 1,973 (581,0); 1,969 (400,8); 1,965 (207,8); 1,867 (1,2); 1,863 (2,2); 1,859 (3,3); 1,855 (2,2); 1,850 (1,2); 1,471 (16,0); 1,303 (1,3); 0,033 (3,4)

Beispiel -T3-34: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD_3CN):

δ= 8,493 (16,0); 8,193 (15,4); 8,099 (0,4); 8,087 (6,7); 8,065 (8,0); 7,850 (4,4); 7,827 (4,3); 7,815 (7,2); 7,752 (9,3);; 7,747 (11,6); 7,720 (8,3); 7,715 (4,4); 7,699 (7,2); 7,694 (5,8); 7,569 (4,2); 7,514 (10,8); 7,493 (8,8); 4,012 (0,8); 3,991 (0,5); 3,458 (0,5); 3,452 (0,5); 3,236 (1,6); 3,067 (0,5); 3,056 (0,5); 2,848 (0,4); 2,140 (115,1); 2,120 (1,0); 2,114 (1,4); 2,108 (1,6); 2,102 (1,2); 2,095 (0,6); 1,972 (1,7); 1,965 (8,4); 1,958 (21,0); 1,953 (103,6); 1,947 (185,9); 1,940 (245,9);; 1,934 (166,9); 1,928 (84,5); 1,781 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,756 (0,6); 1,605 (4,6); 1,591 (11,9); 1,584 (17,8); 1,570 (8,0); 1,530 (0,8);; 1,437 (6,2); 1,407 (0,7); 1,367 (6,3); 1,353 (11,8); 1,346 (12,0); 1,332 (4,7); 1,294 (0,6); 1,269 (5,1);; 1,204 (0,6); 0,882 (0,6); 0,146 (1,2); 0,008 (1,5); 0,000 (282,0); -0,009 (9,7); -0,150 (1,3)

Beispiel -T3-35: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD_3CN):

δ= 8,496 (0,7); 8,490 (16,0); 8,192 (15,3); 8,181 (14,6); 8,087 (6,6); 8,065 (7,9); 7,846 (4,7);; 7,825 (4,8); 7,812 (7,7); 7,702 (9,8); 7,697 (11,9); 7,670 (6,9); 7,664 (4,9); 7,649 (7,8); 7,643 (6,3); 7,481 (10,8); 7,460 (8,6); 6,929 (2,9); 2,887 (0,7); 2,877 (2,1); 2,868 (2,9); 2,859 (4,5); 2,849 (4,5); 2,841 (2,9); 2,831 (2,1); 2,822 (0,7); 2,467 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,153 (188,6); 2,120 (0,8); 2,114 (1,1); 2,108 (1,3); 2,102 (0,9); 2,096 (0,5); 1,972 (2,2); 1,965 (8,7);; 1,959 (23,3); 1,953 (95,7); 1,947 (167,7);; 1,941 (215,6);; 1,934 (146,4);; 1,928 (73,1); 1,781 (0,5);; 1,775 (0,9);; 1,769 (1,2); 1,763 (0,8);; 1,757 (0,4); 1,437 (6,9); 1,269 (0,6); 1,204 (0,5); 0,800 (2,4); 0,786 (7,7); 0,783 (9,7);; 0,770 (10,2); 0,765 (7,3); 0,753 (3,1); 0,731 (0,4); 0,713 (0,4);; 0,656 (0,4); 0,646 (0,4); 0,617 (3,3); 0,605 (8,7); 0,599 (9,2); 0,595 (8,3);; 0,590 (7,3);; 0,577 (2,7); 0,572 (0,3); 0,146 (1,0); 0,000 (733,4); -0,009 (9,6); -0,150 (1,0)

Beispiel -T3-36: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD_3CN):

δ= 8,496 (16,0); 8,192 (15,3); 8,093 (5,4); 8,071 (7,7); 7,850 (4,3); 7,827 (4,3); 7,814 (7,1); 7,749 (9,1); 7,743 (11,5); 7,726 (6,8); 7,721 (4,7);; 7,706 (7,6); 7,700 (5,6); 7,532 (10,3); 7,511 (8,3); 7,340 (2,4); 4,149 (2,3); 4,132 (2,8); 4,125 (7,1); 4,109 (7,4); 4,102 (7,4); 4,085 (7,2); 4,078 (2,6); 4,061 (2,3);; 2,137 (51,6); 2,120 (0,6); 2,114 (0,9); 2,108 (1,0); 2,102 (0,7); 2,095 (0,4); 1,965 (5,7);; 1,958 (16,2); 1,953 (74,7);; 1,946 (129,6); 1,940 (165,8); 1,934 (111,8); 1,928 (55,4);; 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,437 (3,7); 1,270 (0,3); 0,146 (0,8);; 0,008 (11,2); 0,000 (188,1); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)

Beispiel -T3-37: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD_3CN):

δ= 8,518 (0,5); 8,490 (16,0); 8,228 (0,5); 8,193 (14,9); 8,090 (6,7); 8,069 (7,7); 7,850 (4,2); 7,827 (4,0); 7,814 (6,7); 7,735 (9,2); 7,729 (11,3); 7,717 (0,4); 7,696 (6,1); 7,690 (4,5); 7,675 (7,0); 7,669 (5,9); 7,587 (0,4); 7,536 (0,3); 7,514 (0,6); 7,504 (11,0); 7,494 (0,6); 7,483 (9,1); 7,459 (1,7); 7,445 (1,6); 6,694 (0,4); 6,666 (0,3); 5,364 (0,6); 5,343 (2,4); 5,322 (4,7); 5,301 (4,6); 5,280 (2,4); 5,259 (0,7); 4,006 (0,5); 3,589 (0,4); 3,567 (0,4); 3,549 (6,1); 3,545 (3,8); 3,525 (11,4); 3,507 (4,3); 3,503 (7,9); 3,379 (8,1); 3,375 (5,1); 3,358 (11,5); 3,355 (10,8); 3,338 (3,6); 3,334 (5,2); 3,067 (0,5); 2,848 (0,5); 2,472 (0,5); 2,468 (1,0); 2,463 (1,3); 2,458 (1,0); 2,453 (0,5); 2,264 (0,3); 2,245 (0,4); 2,151 (335,9); 2,120 (1,6); 2,114 (2,3); 2,107 (2,8); 2,101 (2,0);; 2,095 (1,0); 2,022 (1,9); 2,003 (3,5); 1,984 (14,6); 1,958 (33,8); 1,952 (185,3); 1,946 (333,6); 1,940 (449,3); 1,934 (307,4); 1,928 (157,3); 1,915 (1,9); 1,781 (1,0); 1,775 (1,8); 1,768 (2,5); 1,762 (1,7); 1,756 (0,8); 1,269 (2,1); 0,146 (3,1); 0,025 (0,7); 0,008 (22,9); 0,000 (696,9); -0,008 (23,3); -0,150 (3,1)

Beispiel -T3-38: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,238 (7,9); 8,219 (7,5); 7,748 (4,6); 7,742 (5,7); 7,729 (4,0); 7,711 (3,1); 7,706 (2,3); 7,690 (3,5); 7,685 (2,8); 7,663 (1,4); 7,644 (2,6); 7,595 (5,4); 7,574 (4,0); 7,500 (5,1); 7,479 (4,2); 4,068 (1,0); 4,050 (1,0); 4,032 (0,3); 2,800 (1,9); 2,781 (6,9); 2,762 (6,0); 2,744 (2,0); 2,136 (27,7); 2,120 (0,5); 2,113 (0,5); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 1,972 (4,3); 1,964 (2,8); 1,958 (7,5); 1,952 (33,5); 1,946 (58,9); 1,940 (77,3); 1,933 (53,2); 1,927 (27,2); 1,774 (0,4); 1,768 (0,5); 1,762 (0,3); 1,601 (2,2); 1,587 (6,0); 1,580 (6,0); 1,566 (3,0); 1,526 (0,4); 1,402 (0,3); 1,382 (3,0); 1,348 (8,0); 1,342 (8,1); 1,327 (2,3); 1,270 (1,6); 1,221 (1,2); 1,204 (2,3); 1,186 (1,1); 1,113 (7,7); 1,095 (16,0); 1,076 (7,4); 0,146 (1,1); 0,008 (13,7); 0,000 (231,5); -0,009 (10,7); -0,150 (1,1)

Beispiel -T3-39: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,226 (8,7); 8,220 (8,4); 8,108 (8,2); 7,726 (4,1); 7,700 (4,7); 7,694 (5,9); 7,680 (5,5); 7,663 (4,5); 7,657 (3,5); 7,642 (6,1); 7,637 (5,3); 7,593 (5,2); 7,572 (2,8); 7,467 (5,6); 7,447 (4,6); 6,927 (1,4); 3,874 (0,7); 3,051 (0,4); 2,938 (0,4); 2,875 (0,9); 2,855 (1,4); 2,837 (2,1); 2,847 (2,1); 2,838 (1,4); 2,829 (1,0); 2,819 (0,3); 2,798 (2,0); 2,780 (6,2); 2,761 (6,4); 2,742 (2,2); 2,483 (0,4); 2,160 (108,1); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9); 2,108 (1,0); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,972 (0,3); 1,964 (3,4); 1,958 (8,7); 1,952 (47,6); 1,946 (86,2); 1,940 (115,8); 1,934 (80,2); 1,928 (41,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,437 (6,6); 1,270 (1,4); 1,112 (7,8); 1,102 (1,0); 1,093 (16,0); 1,074 (7,6); 0,797 (1,2); 0,784 (3,7); 0,779 (4,7); 0,766 (4,9); 0,761 (3,7); 0,749 (1,7); 0,614 (1,5); 0,602 (4,5); 0,586 (4,5); 0,592 (4,0); 0,587 (4,0); 0,574 (1,2); 0,146 (1,3); 0,008 (10,2); 0,007 (10,2); 0,000 (266,8); -0,008 (11,5); -0,150 (1,3)

Beispiel -T3-40: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,241 (8,2); 8,240 (8,6); 8,117 (8,2); 7,746 (4,3); 7,741 (6,2); 7,727 (4,2); 7,718 (3,5); 7,712 (2,4); 7,697 (3,6); 7,691 (3,1); 7,684 (1,4); 7,642 (2,6); 7,597 (5,2); 7,576 (2,7); 7,576 (3,5); 7,495 (4,5); 7,352 (0,9); 4,144 (1,2); 4,128 (1,3); 4,121 (3,6); 4,104 (3,6); 4,097 (3,8); 4,087 (3,6); 4,074 (1,4); 4,057 (1,2); 2,800 (2,0); 2,781 (6,2); 2,763 (6,3); 2,744 (2,1); 2,153 (11,7); 2,149 (14,3); 1,971 (0,5); 1,964 (1,3); 1,958 (3,1); 1,952 (16,8); 1,946 (33,8); 1,940 (41,6); 1,934 (28,7); 1,927 (14,8); 1,436 (10,4); 1,268 (0,4); 1,114 (7,8); 1,095 (16,0); 1,076 (7,6); 0,146 (0,6); 0,008 (4,4); 0,000 (116,7); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)

Beispiel -T3-41: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,239 (7,9); 8,222 (7,5); 7,732 (8,1); 7,727 (9,3); 7,689 (3,0); 7,684 (2,4); 7,668 (4,6); 7,663 (4,2); 7,644 (2,6); 7,598 (4,8); 7,577 (2,6); 7,491 (5,3); 7,470 (4,9); 5,342 (1,2); 5,320 (2,4); 5,300 (2,4); 5,279 (1,2); 3,548 (3,0); 3,524 (6,0); 3,502 (4,1); 3,374 (4,1); 3,371 (2,6); 3,354 (6,0); 3,351 (5,6); 3,330 (3,2); 2,803 (1,9); 2,784 (5,9); 2,765 (6,3); 2,746 (2,1); 2,468 (0,8); 2,464 (0,9); 2,456 (0,7); 2,156 (338,8); 2,120 (1,8); 2,114 (2,0); 2,107 (2,3); 2,101 (1,6); 2,095 (1,0); 1,964 (10,5); 1,958 (27,4); 1,952 (132,9); 1,946 (238,9); 1,940 (318,6); 1,934 (221,8); 1,928 (114,5); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,762 (1,3); 1,756 (0,7); 1,437 (0,8); 1,269 (2,2); 1,115 (7,6); 1,096 (16,0); 1,078 (7,4); 0,146 (3,6); 0,008 (39,2); 0,000 (832,6); -0,008 (44,8); -0,150 (4,0)

Beispiel -T3-42: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,830 (5,8); 8,821 (4,0); 8,815 (4,0); 8,694 (1,8); 8,683 (1,8); 8,548 (5,3); 8,547 (5,5); 8,315 (3,6); 8,192 (4,1); 8,186 (3,9); 8,137 (8,4); 3,907 (16,0); 3,333 (334,0); 3,243 (1,4); 3,175 (0,9); 3,162 (0,9); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,842 (1,1); 2,833 (0,7); 2,824 (0,5); 2,680 (0,3); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,662 (0,3); 2,542 (0,6); 2,525 (2,7); 2,511 (58,6); 2,507 (116,6); 2,502 (152,6); 2,498 (110,8); 2,493 (53,8); 2,338 (0,3); 2,334 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,909 (0,5); 1,016 (0,6); 1,001 (0,6); 0,757 (0,7); 0,744 (2,0); 0,739 (2,8); 0,727 (2,6); 0,721 (2,2); 0,709 (0,9); 0,566 (0,9); 0,555 (2,6); 0,549 (2,4); 0,545 (2,3); 0,540 (2,2); 0,528 (0,7); 0,009 (0,5); 0,000 (16,2); -0,009 (0,5)

Beispiel -T3-43: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 9,603 (7,1); 8,876 (6,9); 8,870 (6,9); 8,843 (10,4); 8,833 (9,4); 8,554 (10,3); 8,315 (0,8); 8,280 (7,0); 8,274 (6,8); 8,110 (16,0); 3,903 (14,5); 3,434 (0,4); 3,333 (565,4); 3,245 (0,5); 2,869 (0,5); 2,676 (1,3); 2,671 (1,7); 2,667 (1,3); 2,662 (0,7); 2,542 (1,5); 2,524 (5,6); 2,511 (106,6); 2,507 (206,8); 2,502 (286,2); 2,498 (191,5); 2,493 (91,5); 2,338 (0,5); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,643 (2,4); 1,629 (5,7); 1,622 (6,3); 1,609 (2,6); 1,298 (2,9); 1,284 (5,7); 1,277 (6,1); 1,263 (2,3); 1,249 (0,4); 1,236 (0,4); 0,008 (0,8); 0,000 (22,4); -0,009 (0,7)

Beispiel -T3-44: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,115 (9,4); 8,071 (10,0); 7,690 (6,4); 7,685 (6,3); 7,668 (11,1); 7,653 (3,9); 7,632 (4,2); 7,586 (0,3); 7,549 (8,1); 7,509 (0,4); 7,463 (5,6); 7,442 (4,5); 6,896 (2,5); 4,068 (0,5); 4,051 (0,5); 2,871 (1,3); 2,862 (1,9); 2,853 (2,6); 2,844 (2,5); 2,835 (1,9); 2,826 (1,2); 2,816 (0,5); 2,452 (2,7); 2,434 (7,4); 2,415 (7,5); 2,396 (2,8); 2,251 (0,5); 2,143 (127,4); 2,113 (3,7); 2,092 (29,0); 1,971 (7,1); 1,952 (73,0); 1,946 (111,8); 1,943 (112,2); 1,940 (130,1); 1,937 (90,9); 1,934 (90,5); 1,928 (48,4); 1,774 (0,6); 1,768 (0,7); 1,437 (3,1); 1,221 (0,7); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 1,082 (8,3); 1,063 (16,0); 1,044 (7,9); 0,784 (1,7); 0,780 (6,1); 0,777 (6,2); 0,764 (6,6); 0,747 (2,1); 0,726 (0,4); 0,610 (2,4); 0,600 (6,7); 0,592 (7,0); 0,572 (1,7); 0,535 (0,4); 0,528 (0,3); 0,524 (0,3); 0,147 (1,4); 0,000 (240,4); -0,148 (1,3)

Beispiel -T3-45: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,126 (9,0); 8,092 (9,4); 7,735 (4,9); 7,730 (8,5); 7,710 (3,2); 7,705 (2,4); 7,689 (3,6); 7,684 (3,1); 7,549 (5,9); 7,542 (5,8); 7,513 (5,6); 7,492 (4,6); 7,422 (1,5); 4,140 (1,2); 4,123 (1,5); 4,116 (3,7); 4,100 (3,9); 4,093 (4,1); 4,076 (3,7); 4,069 (1,6); 4,052 (1,2); 3,548 (1,6); 2,484 (1,4); 2,455 (2,7); 2,436 (6,7); 2,417 (6,9); 2,398 (2,4); 2,378 (0,9); 2,253 (0,5); 2,221 (1,4); 2,176 (389,0); 2,126 (0,6); 2,120 (0,7); 2,114 (1,0); 2,108 (1,5); 2,094 (27,0); 1,953 (71,9); 1,947 (129,9); 1,941 (173,4); 1,935 (125,6); 1,928 (67,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,768 (1,1); 1,763 (0,7); 1,757 (0,4); 1,436 (8,9); 1,269 (0,4); 1,102 (0,5); 1,084 (8,0); 1,065 (16,0); 1,046 (7,7); 1,025 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (393,0); -0,150 (2,0)

Beispiel -T3-46: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,127 (4,1); 8,085 (4,4); 7,738 (2,5); 7,732 (3,1); 7,702 (1,6); 7,697 (1,2); 7,681 (1,8); 7,676 (1,5); 7,625 (0,9); 7,551 (2,4); 7,543 (2,3); 7,495 (2,9); 7,474 (2,3); 2,453 (1,1); 2,435 (3,1); 2,416 (3,2); 2,397 (1,1); 2,158 (61,0); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,082 (12,6); 1,964 (2,0); 1,958 (4,9); 1,953 (25,4); 1,946 (45,6); 1,940 (61,1); 1,934 (42,3); 1,928 (21,8); 1,769 (0,4); 1,598 (1,2); 1,583 (3,1); 1,576 (3,1); 1,563 (1,6); 1,437 (16,0); 1,358 (1,6); 1,345 (3,1); 1,338 (3,2); 1,323 (1,3); 1,299 (1,8); 1,083 (4,2); 1,064 (8,8); 1,045 (4,0); 0,146 (0,7); 0,017 (0,4); 0,008 (5,9); 0,000 (150,8); -0,009 (6,1); -0,150 (0,7)

Beispiel -T3-47: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,128 (3,6); 8,084 (3,6); 7,721 (2,0); 7,715 (2,5); 7,678 (1,2); 7,673 (1,0); 7,657 (1,4); 7,552 (1,2); 7,551 (2,1); 7,544 (2,1); 7,495 (2,4); 7,494 (2,2); 5,338 (0,6); 5,316 (1,1); 5,296 (1,1); 5,275 (0,6); 3,541 (1,4); 3,520 (2,8); 3,498 (1,8); 3,370 (1,7); 3,349 (2,6); 3,316 (2,4); 3,375 (1,4); 2,456 (0,9); 2,437 (2,6); 2,418 (2,7); 2,399 (0,9); 2,166 (9,4); 2,153 (19,8); 2,107 (0,4); 2,095 (10,7); 1,964 (1,2); 1,958 (3,1); 1,952 (15,2); 1,946 (27,1); 1,940 (36,2); 1,934 (25,2); 1,928 (13,1); 1,437 (16,0); 1,085 (3,2); 1,066 (6,7); 1,047 (3,1); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (88,8); -0,008 (4,3); -0,150 (0,5)

Beispiel -T3-48: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,261 (10,8); 8,206 (0,8); 8,193 (16,0); 7,692 (9,7); 7,686 (12,3); 7,375 (1,0); 7,657 (6,5); 7,652 (4,9); 7,637 (9,5); 7,630 (13,3); 7,608 (11,0); 7,475 (11,5); 7,455 (9,1); 6,940 (2,5); 3,911 (0,6); 2,882 (0,7); 2,872 (2,0); 2,863 (2,8); 2,854 (4,1); 2,845 (4,3); 2,836 (2,9); 2,827 (2,0); 2,817 (0,7); 2,437 (0,3); 2,463 (0,4); 2,163 (117,4); 2,120 (0,3); 2,114 (0,5); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,972 (4,7); 1,965 (3,3); 1,959 (8,5); 1,953 (43,3); 1,947 (77,6); 1,941 (103,6); 1,934 (71,4); 1,928 (36,7); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,437 (2,0); 1,269 (0,7); 1,221 (0,4); 1,204 (0,7); 1,186 (0,3); 0,795 (2,4); 0,783 (7,5); 0,778 (9,7); 0,765 (10,2); 0,760 (7,3); 0,748 (3,3); 0,726 (0,4); 0,708 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,314 (3,3); 0,304 (8,6); 0,597 (9,0); 0,593 (7,8); 0,588 (7,7); 0,575 (2,3); 0,514 (0,4); 0,146 (1,3); 0,026 (0,4); 0,008 (10,5); 0,000 (259,4); -0,009 (10,3); -0,150 (1,2)

Beispiel -T3-49: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,277 (10,6); 8,206 (16,0); 7,740 (9,1); 7,735 (12,1); 7,709 (8,2); 7,704 (4,7); 7,686 (7,8); 7,683 (7,1); 7,669 (3,6); 7,645 (1,5); 7,631 (10,9); 7,611 (10,7); 7,574 (0,5); 7,510 (1,0); 7,500 (0,6); 7,489 (9,0); 7,475 (0,4); 7,221 (0,4); 5,448 (8,3); 4,034 (0,3); 3,914 (1,0); 3,906 (0,7); 3,897 (0,5); 2,469 (1,1); 2,464 (1,5); 2,460 (1,1); 2,243 (0,4); 2,175 (509,2); 2,120 (1,2); 2,114 (1,7); 2,108 (2,0); 2,102 (1,5); 2,096 (0,9); 1,965 (8,1); 1,959 (21,5); 1,953 (116,7); 1,947 (211,5); 1,941 (284,4); 1,934 (197,6); 1,928 (103,4); 1,781 (0,6); 1,775 (1,3); 1,769 (1,8); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,635 (0,4); 1,598 (4,6); 1,584 (12,3); 1,577 (12,3); 1,563 (6,3); 1,523 (0,8); 1,437 (0,7); 1,403 (0,8); 1,363 (6,4); 1,349 (12,1); 1,342 (12,8); 1,328 (4,9); 1,290 (0,6); 1,270 (2,7); 1,206 (1,3); 1,190 (1,2); 0,882 (0,3); 0,146 (3,5); 0,008 (26,4); 0,000 (693,0); -0,008 (31,4); -0,048 (0,4); -0,150 (3,5)

Beispiel -T3-50: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,131 (3,8); 8,120 (0,3); 8,108 (3,8); 7,670 (2,4); 7,664 (2,8); 7,636 (1,7); 7,630 (1,2); 7,615 (1,3); 7,609 (1,6); 7,462 (2,8); 7,447 (2,1); 7,320 (3,0); 7,300 (1,2); 6,909 (0,6); 4,085 (0,5); 4,068 (1,4); 4,050 (1,4); 4,032 (0,5); 3,901 (16,0); 2,870 (0,5); 2,861 (0,7); 2,852 (1,1); 2,843 (1,1); 2,834 (0,7); 2,825 (0,5); 2,147 (64,0); 2,114 (0,3); 2,107 (0,4); 1,972 (6,8); 1,964 (3,1); 1,958 (6,8); 1,952 (27,1); 1,946 (46,5); 1,940 (60,6); 1,934 (41,2); 1,928 (20,8); 1,788 (0,3); 1,437 (1,1); 1,221 (1,7); 1,204 (3,2); 1,186 (1,6); 0,793 (0,6); 0,781 (1,8); 0,776 (2,3); 0,763 (2,4); 0,758 (1,7); 0,746 (0,8); 0,510 (0,9); 0,599 (2,1); 0,593 (2,1); 0,589 (1,9); 0,584 (1,8); 0,571 (0,5); 0,146 (0,7); 0,008 (9,0); 0,000 (144,6); -0,009 (5,4); -0,150 (0,7)

Beispiel -T3-51: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,206 (0,4); 8,147 (3,5); 8,120 (3,6); 7,717 (2,2); 7,702 (2,8); 7,686 (1,6); 7,680 (1,3); 7,675 (3,4); 7,665 (2,0); 7,659 (1,9); 7,654 (0,6); 7,644 (0,5); 7,630 (0,5); 7,510 (0,3); 7,503 (0,4); 7,495 (2,8); 7,482 (0,3); 7,474 (2,1); 7,321 (2,8); 7,302 (1,1); 4,068 (0,9); 4,050 (0,9); 3,902 (16,0); 2,170 (60,8); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,972 (4,1); 1,965 (2,3); 1,959 (5,7); 1,953 (31,1); 1,947 (56,0); 1,940 (74,9); 1,934 (51,0); 1,928 (25,9); 1,775 (0,3); 1,769 (0,4); 1,595 (1,1); 1,581 (2,7); 1,574 (2,7); 1,560 (1,5); 1,437 (1,0); 1,359 (1,5); 1,346 (2,7); 1,339 (2,8); 1,324 (1,1); 1,222 (1,1); 1,204 (2,1); 1,186 (1,0); 1,140 (0,5); 1,132 (0,3); 0,928 (0,6); 0,921 (0,6); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (187,7); -0,009 (6,3); -0,150 (0,8)

Beispiel -T3-52: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,278 (6,4); 8,163 (0,3); 8,151 (8,6); 8,149 (7,3); 8,128 (3,5); 8,104 (1,6); 8,092 (1,8); 7,863 (2,9); 7,842 (2,4); 7,694 (4,0); 7,689 (5,1); 7,680 (0,5); 7,660 (3,0); 7,654 (2,2); 7,639 (3,3); 7,633 (2,8); 7,474 (4,9); 7,454 (3,9); 6,935 (1,1); 4,086 (0,7); 4,068 (2,0); 4,050 (2,1); 4,032 (0,7); 2,873 (0,8); 2,863 (1,2); 2,855 (1,8); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,165 (66,0); 2,163 (75,8); 1,972 (9,5); 1,965 (1,3); 1,959 (3,0); 1,953 (16,9); 1,947 (30,5); 1,941 (41,0); 1,935 (28,3); 1,928 (14,5); 1,436 (16,0); 1,269 (0,5); 1,221 (2,5); 1,204 (4,8); 1,186 (2,4); 0,795 (1,0); 0,784 (2,5); 0,778 (3,9); 0,766 (4,1); 0,761 (3,0); 0,748 (1,4); 0,613 (1,4); 0,602 (3,5); 0,596 (3,5); 0,592 (3,2); 0,587 (3,2); 0,574 (1,0); 0,008 (2,1); 0,000 (62,9); -0,009 (2,3)

Beispiel -T3-53: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,291 (3,8); 8,162 (4,2); 8,130 (2,0); 8,108 (0,9); 8,086 (1,0); 7,866 (1,8); 7,844 (1,5); 7,742 (2,5); 7,736 (3,2); 7,709 (2,0); 7,703 (1,5); 7,688 (2,7); 7,582 (2,4); 7,506 (2,0); 7,485 (2,4); 2,196 (8,5); 2,183 (24,4); 1,972 (1,1); 1,965 (3,6); 1,959 (1,4); 1,954 (7,8); 1,947 (14,2); 1,941 (19,1); 1,935 (13,1); 1,929 (6,7); 1,599 (1,3); 1,585 (3,1); 1,578 (3,1); 1,564 (1,7); 1,436 (16,0); 1,362 (1,7); 1,349 (3,0); 1,342 (3,1); 1,327 (1,3); 1,204 (0,6); 0,008 (1,6); 0,000 (44,8); -0,009 (1,6)

Beispiel -T3-54: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,162 (0,3); 8,153 (15,7); 8,108 (12,1); 7,996 (6,8); 7,952 (7,0); 7,683 (9,7); 7,678 (12,2); 7,666 (0,8); 7,650 (6,7); 7,641 (4,9); 7,629 (7,9); 7,624 (6,4); 7,513 (0,4); 7,469 (11,7); 7,448 (9,3); 6,931 (2,4); 5,448 (0,6); 4,235 (0,4); 4,218 (0,4); 4,086 (0,6); 4,068 (1,8); 4,057 (0,4); 4,050 (1,8); 4,032 (0,6); 2,879 (0,8); 2,870 (2,2); 2,860 (2,8); 2,852 (4,7); 2,842 (4,7); 2,834 (2,9); 2,824 (2,2); 2,814 (0,7); 2,473 (0,6); 2,468 (1,0); 2,463 (1,4); 2,459 (1,0); 2,454 (0,5); 2,276 (0,4); 2,264 (0,4); 2,245 (0,6); 2,226 (0,8); 2,159 (388,9); 2,116 (47,5); 2,108 (3,9); 2,101 (1,9); 2,095 (1,0); 2,050 (0,8); 2,035 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,0); 1,972 (9,4); 1,964 (12,6); 1,958 (30,5); 1,953 (165,9); 1,946 (298,2); 1,940 (398,5); 1,934 (272,4); 1,928 (139,0); 1,915 (1,9); 1,781 (0,9); 1,775 (1,6); 1,769 (2,3); 1,762 (1,6); 1,756 (0,8); 1,599 (0,3); 1,437 (13,5); 1,341 (0,4); 1,307 (1,0); 1,289 (1,9); 1,269 (16,0); 1,222 (2,4); 1,204 (4,5); 1,186 (2,2); 0,898 (0,7); 0,881 (2,2); 0,864 (1,0); 0,793 (2,4); 0,780 (7,3); 0,775 (9,5); 0,762 (10,1); 0,757 (6,9); 0,745 (3,2); 0,723 (0,5); 0,705 (0,5); 0,653 (0,4); 0,640 (0,5); 0,637 (0,5); 0,626 (0,6); 0,610 (3,5); 0,600 (7,9); 0,598 (7,8); 0,593 (8,2); 0,588 (7,1); 0,583 (7,7); 0,571 (2,4); 0,523 (0,3); 0,393 (0,5); 0,385 (0,5); 0,381 (0,5); 0,376 (0,5); 0,146 (3,4); 0,008 (28,7); 0,000 (825,3); -0,009 (28,8); -0,030 (0,5); -0,150 (3,4)

Beispiel -T3-55: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN):
δ= 8,166 (3,1); 8,165 (3,2); 8,124 (2,4); 8,000 (1,2); 7,954 (1,2); 7,732 (2,0); 7,729 (2,3); 7,697 (1,3); 7,693 (1,1); 7,683 (1,5); 7,679 (1,3); 7,499 (2,3); 7,485 (2,0); 2,180 (8,0); 2,177 (8,1); 2,175 (8,7); 2,172 (9,3); 2,169 (10,1); 2,137 (8,6); 2,163 (12,2); 2,117 (8,6); 1,973 (0,6); 1,966 (0,7); 1,956 (1,9); 1,954 (2,1); 1,950 (12,7); 1,946 (22,2); 1,942 (32,1); 1,938 (21,1); 1,934 (10,5); 1,591 (1,0); 1,581 (2,2); 1,577 (2,2); 1,568 (1,1); 1,436 (16,0); 1,354 (1,2); 1,345 (2,2); 1,341 (2,3); 1,331 (1,0); 1,204 (0,4); 0,005 (1,3); 0,000 (42,8); -0,006 (1,2)

Beispiel -T3-56: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,210 (7,6); 8,194 (0,9); 8,186 (15,9); 8,185 (16,0); 8,161 (0,7); 8,149 (14,1); 8,059 (7,8); 7,686 (9,6); 7,681 (12,3); 7,653 (6,8); 7,647 (5,0); 7,632 (7,9); 7,626 (6,5); 7,517 (0,3); 7,473 (11,6); 7,452 (9,1); 6,930 (2,7); 2,878 (0,7); 2,869 (2,1); 2,859 (2,9); 2,851 (4,6); 2,841 (4,6); 2,832 (2,9); 2,823 (2,2); 2,813 (0,7); 2,136 (41,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,6); 2,107 (0,8); 2,101 (0,5); 2,086 (0,4); 1,964 (15,3); 1,958 (9,2); 1,952 (49,0); 1,946 (86,5); 1,940 (118,3); 1,934 (80,8); 1,927 (41,2); 1,915 (0,5); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,270 (0,4); 0,792 (2,4); 0,780 (7,2); 0,775 (9,6); 0,762 (10,1); 0,757 (7,0); 0,745 (3,3); 0,723 (0,4); 0,705 (0,4); 0,653 (0,4); 0,640 (0,4); 0,610 (3,3); 0,600 (8,0); 0,599 (8,0); 0,593 (8,4); 0,589 (7,4); 0,584 (7,5); 0,571 (2,4); 0,520 (0,4); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (218,3); -0,009 (7,6); 0,150 (0,9)

Beispiel -T3-57: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,211 (2,2); 8,197 (4,2); 8,183 (3,5); 8,080 (2,1); 7,735 (2,4); 7,730 (3,0); 7,704 (1,6); 7,699 (1,1); 7,683 (1,8); 7,678 (1,5); 7,553 (1,2); 7,508 (2,8); 7,487 (2,3); 2,133 (81,2); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,984 (4,3); 1,958 (11,3); 1,952 (55,3); 1,948 (59,8); 1,910 (134,0); 1,934 (93,4); 1,927 (48,7); 1,771 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,596 (1,1); 1,582 (3,0); 1,575 (3,1); 1,561 (1,6); 1,437 (16,0); 1,361 (1,3); 1,346 (3,0); 1,341 (3,1); 1,326 (1,2); 1,269 (0,3); 0,146 (1,1); 0,008 (9,0); 0,000 (233,2); -0,009 (12,0); -0,150 (1,0)

Beispiel -T3-58: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,212 (1,1); 8,196 (2,4); 8,168 (2,0); 8,062 (1,1); 7,732 (1,4); 7,727 (2,0); 7,710 (1,1); 7,704 (0,7); 7,689 (1,2); 7,683 (1,0); 7,523 (1,8); 7,502 (1,4); 4,139 (0,4); 4,123 (0,4); 4,116 (1,2); 4,099 (1,2); 4,092 (1,3); 4,076 (1,2); 4,068 (0,5); 4,052 (0,4); 2,154 (2,8); 2,152 (3,0); 1,958 (0,3); 1,952 (3,2); 1,946 (5,8); 1,940 (7,8); 1,934 (5,3); 1,928 (2,7); 1,436 (16,0); 0,008 (0,5); 0,000 (14,4); -0,009 (0,5)

Beispiel -T3-59: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, c_6-DMSO):

δ= 10,876 (2,1); 9,451 (11,5); 9,045 (16,0); 8,978 (7,7); 8,792 (7,9); 8,789 (7,6); 8,502 (16,0); 8,320 (7,2); 7,918 (8,4); 7,914 (11,9); 7,904 (7,1); 7,900 (4,5); 7,890 (6,8); 7,886 (5,6); 7,573 (10,3); 7,560 (9,7); 4,034 (1,6); 4,022 (1,5); 3,338 (576,9); 2,615 (4,0); 2,524 (5,6); 2,521 (7,1); 2,518 (6,3); 2,509 (220,0); 2,506 (474,2); 2,503 (654,0); 2,500 (473,2); 2,497 (216,3); 2,387 (3,5); 1,990 (4,8); 1,615 (4,4); 1,606 (10,1); 1,602 (10,7); 1,593 (4,6); 1,398 (2,2); 1,300 (4,9); 1,291 (9,5); 1,286 (10,1); 1,277 (4,3); 1,175 (3,1); 0,098 (2,5); 0,005 (23,7); 0,000 (635,1); -0,006 (20,4); -0,100 (2,7)

Beispiel -T3-60: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, $CDCl_3$):

δ= 8,687 (8,6); 8,685 (8,5); 8,596 (15,9); 8,577 (0,6); 8,573 (8,6); 8,168 (8,5); 8,114 (16,0); 7,901 (10,7); 7,896 (11,0); 7,367 (5,3); 7,361 (5,3); 7,555 (1,2); 7,546 (7,0); 7,540 (6,9); 7,483 (0,4); 7,426 (11,9); 7,406 (8,9); 7,264 (25,7); 6,415 (3,4); 5,301 (12,8); 2,991 (0,6); 2,982 (1,7); 2,973 (3,0); 2,964 (4,1); 2,955 (4,1); 2,946 (3,1); 2,937 (1,8); 2,928 (0,7); 1,601 (5,8); 1,378 (1,1); 1,333 (0,6); 1,327 (0,4); 1,285 (1,1); 1,255 (5,4); 0,938 (2,5); 0,921 (10,0); 0,907 (9,8); 0,903 (8,2); 0,890 (3,5); 0,880 (1,2); 0,868 (3,9); 0,862 (0,7); 0,850 (0,9); 0,836 (0,6); 0,742 (0,4); 0,733 (0,4); 0,703 (3,0); 0,689 (8,1); 0,685 (8,5); 0,680 (8,2); 0,676 (7,8); 0,662 (2,4); 0,557 (0,5); 0,551 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (19,7); -0,008 (1,0)

Beispiel -T3-61: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,266 (6,2); 8,208 (0,5); 8,195 (8,9); 7,692 (5,7); 7,687 (6,8); 7,678 (0,7); 7,658 (3,7); 7,652 (2,8); 7,637 (4,3); 7,632 (3,5); 7,593 (5,8); 7,572 (5,8); 7,479 (8,2); 7,454 (4,9); 6,962 (1,7); 5,449 (0,9); 4,086 (0,3); 4,068 (1,1); 4,050 (1,1); 4,032 (0,4); 2,882 (0,4); 2,873 (1,2); 2,863 (1,6); 2,855 (2,6); 2,845 (2,6); 2,837 (1,7); 2,827 (1,2); 2,817 (0,4); 2,181 (57,5); 1,972 (4,8); 1,965 (1,5); 1,959 (3,8); 1,953 (16,3); 1,947 (29,0); 1,941 (37,8); 1,935 (26,4); 1,929 (13,7); 1,436 (16,0); 1,268 (0,8); 1,221 (1,3); 1,204 (2,5); 1,186 (1,2); 0,795 (7,3); 0,783 (4,5); 0,777 (5,6); 0,765 (5,5); 0,730 (4,4); 0,747 (1,8); 0,615 (1,8); 0,605 (5,0); 0,603 (5,3); 0,588 (5,5); 0,583 (4,9); 0,568 (4,6); 0,576 (1,4); 0,000 (58,7); -0,009 (3,0)

Beispiel -T3-62: ^{1}H-NMR (601,6 MHz, CD3CN):

δ= 8,282 (3,8); 8,209 (9,7); 7,742 (5,2); 7,738 (6,1); 7,705 (3,5); 7,702 (2,9); 7,692 (4,0); 7,688 (3,5); 7,644 (0,8); 7,594 (5,2); 7,590 (5,1); 7,506 (6,4); 7,483 (5,6); 2,197 (13,4); 2,194 (14,8); 2,191 (16,6); 2,189 (16,2); 2,186 (16,6); 2,184 (16,2); 2,181 (15,5); 2,179 (16,7); 1,973 (1,0); 1,967 (1,1); 1,959 (2,7); 1,954 (3,0); 1,951 (19,5); 1,947 (31,7); 1,942 (46,4); 1,938 (30,9); 1,931 (15,5); 1,594 (2,6); 1,584 (6,6); 1,580 (6,4); 1,571 (3,2); 1,544 (0,3); 1,436 (16,0); 1,359 (3,7); 1,350 (6,7); 1,345 (6,8); 1,336 (2,7); 1,268 (0,4); 1,204 (0,5); 0,005 (1,7); 0,000 (39,8); -0,006 (1,3)

Beispiel -T3-63: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 8,666 (5,1); 8,523 (1,9); 8,512 (2,0); 8,386 (5,2); 7,850 (2,9); 7,844 (2,7); 7,736 (1,2); 7,730 (1,3); 7,710 (7,1); 7,511 (2,5); 7,490 (2,1); 3,327 (42,2); 2,856 (0,5); 2,846 (0,8); 2,838 (1,2); 2,828 (1,2); 2,818 (0,9); 2,810 (0,5); 2,671 (0,4); 2,506 (46,0); 2,502 (59,6); 2,498 (46,8); 2,438 (0,6); 2,329 (0,4); 2,203 (0,6); 2,188 (12,3); 1,398 (16,0); 0,727 (0,7); 0,714 (2,3); 0,709 (3,0); 0,697 (2,8); 0,691 (2,5); 0,680 (0,9); 0,560 (0,9); 0,549 (3,0); 0,543 (3,1); 0,534 (2,7); 0,522 (0,7); 0,000 (42,2)

Beispiel -T3-64: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,432 (2,1); 8,689 (2,8); 8,404 (2,9); 7,853 (1,5); 7,846 (1,5); 7,795 (0,6); 7,789 (1,2); 7,780 (1,7); 7,775 (2,6); 7,560 (1,6); 7,552 (0,4); 7,538 (1,4); 3,327 (22,2); 2,507 (17,7); 2,502 (23,3); 2,498 (17,9); 2,436 (0,3); 2,189 (6,9); 1,989 (0,4); 1,615 (0,7); 1,600 (1,8); 1,594 (1,9); 1,581 (0,8); 1,398 (16,0); 1,284 (0,8); 1,270 (1,8); 1,264 (2,0); 1,249 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (19,4)

Beispiel -T3-65: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,726 (2,4); 8,559 (1,7); 8,556 (1,8); 8,306 (2,2); 7,930 (0,7); 7,914 (1,5); 7,897 (0,8); 7,588 (3,9); 7,467 (1,5); 7,450 (1,4); 3,305 (13,5); 2,508 (2,9); 2,504 (5,0); 2,501 (8,2); 2,497 (6,1); 2,494 (3,0); 2,106 (16,0); 1,645 (0,8); 1,634 (2,0); 1,628 (2,1); 1,617 (0,8); 1,239 (1,1); 1,228 (2,3); 1,222 (2,1); 1,211 (0,8); 0,000 (5,4)

Beispiel -T3-66: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,726 (4,5); 8,587 (3,6); 8,583 (3,6); 8,305 (4,5); 7,934 (1,5); 7,913 (3,1); 7,892 (1,7); 7,597 (3,1); 7,562 (3,1); 7,468 (3,1); 7,447 (2,9); 5,753 (0,4); 3,427 (0,5); 3,307 (130,4); 3,283 (0,9); 3,236 (0,8); 2,869 (0,5); 2,504 (61,2); 2,500 (82,9); 2,496 (61,6); 2,431 (1,7); 2,412 (3,4); 2,394 (3,5); 2,375 (1,2); 2,327 (0,5); 2,322 (0,4); 2,087 (16,0); 1,987 (0,6); 1,648 (1,6); 1,634 (4,0); 1,628 (4,2); 1,614 (1,7); 1,463 (0,4); 1,240 (2,1); 1,227 (4,0); 1,220 (4,2); 1,206 (1,5); 1,174 (0,4); 1,031 (5,0); 1,012 (10,6); 0,993 (4,8); 0,146 (0,6); 0,008 (5,8); 0,000 (126,9); -0,150 (0,8)

Beispiel -T3-67: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 8,778 (1,2); 8,767 (1,2); 8,544 (1,7); 8,538 (1,8); 8,297 (2,1); 7,878 (0,8); 7,855 (1,5); 7,834 (0,8); 7,593 (3,9); 7,418 (1,5); 7,397 (1,4); 3,903 (3,9); 3,331 (120,3); 2,855 (0,5); 2,846 (0,7); 2,836 (0,7); 2,827 (0,5); 2,816 (0,3); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,6); 2,524 (2,0); 2,511 (45,1); 2,507 (67,8); 2,502 (113,1); 2,498 (83,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,120 (0,9); 2,105 (16,0); 0,752 (0,4); 0,739 (1,3); 0,734 (1,7); 0,721 (1,7); 0,716 (1,4); 0,704 (0,5); 0,522 (0,6); 0,511 (1,6); 0,505 (1,5); 0,501 (1,5); 0,496 (1,5); 0,483 (0,5); 0,000 (6,3)

Beispiel -T3-68: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, c_6-DMSO):

δ= 8,752 (2,4); 8,743 (2,4); 8,561 (3,4); 8,558 (3,7); 8,269 (4,4); 7,668 (1,5); 7,851 (3,0); 7,834 (1,6); 7,597 (3,0); 7,563 (3,0); 7,411 (3,0); 7,394 (2,9); 3,304 (38,0); 2,861 (0,6); 2,854 (0,9); 2,847 (1,4); 2,839 (1,4); 2,831 (0,9); 2,824 (0,7); 2,507 (6,9); 2,504 (14,1); 2,500 (19,4); 2,497 (14,5); 2,493 (7,7); 2,426 (1,2); 2,411 (3,5); 2,396 (3,6); 2,381 (1,2); 2,101 (1,1); 2,089 (16,0); 1,029 (5,5); 1,013 (11,1); 0,998 (5,0); 0,746 (0,9); 0,736 (2,7); 0,732 (3,5); 0,722 (3,4); 0,718 (2,8); 0,708 (1,0); 0,521 (1,1); 0,512 (3,3); 0,508 (3,3); 0,505 (3,1); 0,500 (3,1); 0,490 (0,9); 0,006 (0,7); 0,000 (14,7); -0,007 (0,8)

Beispiel -T3-69: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,352 (4,3); 8,553 (4,2); 8,288 (4,4); 7,985 (1,0); 7,946 (2,0); 7,927 (1,1); 7,601 (3,3); 7,587 (3,5); 7,478 (0,9); 7,460 (2,0); 7,444 (1,3); 7,350 (2,0); 7,331 (3,4); 7,312 (1,5); 3,342 (0,4); 3,308 (118,1); 3,290 (0,8); 2,969 (0,3); 2,504 (47,2); 2,500 (55,9); 2,496 (39,1); 2,443 (1,2); 2,425 (3,6); 2,406 (3,6); 2,387 (1,2); 2,327 (0,3); 2,097 (16,0); 1,595 (1,7); 1,581 (1,8); 1,574 (4,3); 1,561 (1,8); 1,293 (2,0); 1,279 (4,6); 1,273 (4,3); 1,258 (1,6); 1,236 (0,6); 1,041 (4,9); 1,022 (10,0); 1,003 (4,6); 0,000 (32,0); -0,006 (1,3)

Beispiel -T3-70: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, d6-DMSO):

δ= 8,528 (3,4); 8,524 (3,6); 8,456 (1,7); 8,445 (1,7); 8,270 (4,0); 7,896 (0,9); 7,891 (0,9); 7,877 (1,7); 7,873 (1,8); 7,858 (1,0); 7,854 (0,9); 7,598 (2,8); 7,595 (2,8); 7,403 (0,8); 7,399 (0,8); 7,384 (1,7); 7,368 (1,2); 7,364 (1,1); 7,303 (2,5); 7,284 (3,9); 7,265 (1,7); 3,309 (77,4); 2,875 (0,6); 2,866 (0,8); 2,857 (1,3); 2,847 (1,4); 2,839 (0,8); 2,829 (0,6); 2,509 (11,1); 2,505 (23,7); 2,500 (33,3); 2,496 (24,3); 2,491 (11,5); 2,442 (1,1); 2,423 (3,4); 2,404 (3,5); 2,386 (1,2); 2,096 (16,0); 1,236 (0,6); 1,040 (5,1); 1,021 (11,2); 1,002 (5,0); 0,725 (0,9); 0,712 (2,5); 0,707 (3,5); 0,695 (3,3); 0,689 (2,7); 0,677 (1,2); 0,557 (1,2); 0,546 (3,4); 0,540 (3,3); 0,536 (2,8); 0,530 (2,8); 0,518 (0,9); 0,008 (0,7); 0,000 (21,2); -0,009 (0,8)

Beispiel -T3-71: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,160 (3,6); 8,139 (3,7); 7,764 (2,0); 7,739 (2,0); 7,733 (2,7); 7,701 (1,3); 7,699 (1,2); 7,683 (3,1); 7,678 (2,3); 7,553 (1,2); 7,502 (2,4); 7,481 (1,9); 3,360 (0,5); 2,851 (0,5); 2,520 (0,8); 2,501 (2,5); 2,482 (2,5); 2,463 (0,9); 2,134 (30,8); 2,114 (0,4); 2,107 (0,5); 2,101 (0,4); 1,964 (2,0); 1,956 (4,9); 1,952 (26,1); 1,946 (52,7); 1,940 (72,6); 1,934 (52,6); 1,928 (26,4); 1,768 (0,4); 1,762 (0,3); 1,598 (1,0); 1,583 (2,5); 1,577 (2,7); 1,563 (1,4); 1,437 (16,0); 1,361 (1,3); 1,347 (2,7); 1,340 (2,9); 1,326 (1,1); 1,102 (3,5); 1,083 (7,4); 1,064 (3,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,1); 0,000 (97,3); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-72: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,150 (5,4); 8,130 (5,6); 7,764 (2,7); 7,685 (4,2); 7,684 (6,5); 7,655 (1,9); 7,650 (1,5); 7,634 (2,2); 7,629 (1,9); 7,469 (3,6); 7,448 (2,9); 6,936 (0,9); 2,871 (0,6); 2,862 (0,9); 2,853 (1,4); 2,843 (1,4); 2,834 (1,0); 2,825 (0,6); 2,518 (1,2); 2,499 (3,7); 2,480 (3,8); 2,462 (1,4); 2,168 (77,5); 2,114 (0,3); 2,108 (0,4); 1,965 (1,9); 1,958 (4,8); 1,953 (25,8); 1,947 (47,0); 1,941 (63,4); 1,935 (44,6); 1,929 (23,7); 1,769 (0,4); 1,437 (18,0); 1,100 (5,0); 1,081 (10,2); 1,062 (4,8); 0,794 (0,8); 0,781 (2,3); 0,776 (3,1); 0,769 (3,2); 0,758 (2,4); 0,746 (1,1); 0,611 (1,0); 0,600 (2,8); 0,594 (2,9); 0,590 (2,6); 0,585 (2,6); 0,572 (0,8); 0,146 (0,3); 0,008 (2,5); 0,000 (69,9); -0,008 (4,3); -0,149 (0,3)

Beispiel -T3-73: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d6-DMSO):

δ= 8,77 (0,0325); 8,76 (0,0329); 8,67 (0,0447); 8,40 (0,0688); 8,07 (0,1398); 7,89 (0,0039); 7,88 (0,0202); 7,87 (0,0405); 7,43 (0,0406); 7,42 (0,0383); 3,78 (0,0026); 3,59 (0,0071); 3,30 (1,0000); 3,17 (0,0044); 3,16 (0,0042); 2,85 (0,0123); 2,84 (0,0187); 2,83 (0,0088); 2,64 (0,0025); 2,50 (0,4720); 2,37 (0,0016); 1,74 (0,0054); 0,73 (0,0487); 0,72 (0,0467); 0,71 (0,0149); 0,52 (0,0154); 0,50 (0,0420); 0,49 (0,0128); 0,12 (0,0012); 0,00 (0,2836); -0,12 (0,0012)

Beispiel -T3-74: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,381 (5,5); 8,653 (5,5); 8,317 (0,7); 8,293 (5,6); 7,988 (1,2); 7,984 (1,3); 7,969 (2,4); 7,965 (2,4); 7,950 (1,4); 7,946 (1,3); 7,747 (4,4); 7,734 (1,5); 7,713 (7,2); 7,706 (4,3); 7,683 (0,7); 7,493 (1,1); 7,489 (1,2); 7,474 (2,5); 7,458 (1,6); 7,454 (1,5); 7,362 (3,0); 7,343 (5,1); 7,324 (2,2); 3,903 (11,7); 3,333 (264,8); 3,287 (0,3); 3,174 (0,5); 3,162 (0,6); 2,802 (1,7); 2,783 (3,4); 2,765 (3,5); 2,746 (1,8); 2,676 (1,4); 2,672 (1,9); 2,667 (1,4); 2,542 (1,1); 2,525 (3,8); 2,511 (121,2); 2,507 (238,9); 2,503 (309,3); 2,498 (228,3); 2,494 (115,5); 2,334 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,909 (2,2); 1,589 (3,6); 1,582 (6,0); 1,569 (2,6); 1,298 (2,8); 1,285 (6,7); 1,278 (6,1); 1,264 (2,3); 1,237 (0,5); 1,060 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,2); 0,008 (0,6); 0,000 (17,3); -0,008 (0,7)

Beispiel -T3-75: ^{1}H-NMR (400,2 MHz, d6-DMSO):

δ= 8,621 (4,9); 8,618 (5,3); 8,463 (2,4); 8,452 (2,4); 8,277 (3,0); 8,274 (3,4); 7,913 (1,3); 7,909 (1,4); 7,894 (2,4); 7,890 (2,5); 7,875 (1,4); 7,871 (1,3); 7,742 (4,3); 7,730 (1,5); 7,709 (7,2); 7,702 (4,2); 7,679 (0,7); 7,416 (1,1); 7,412 (1,2); 7,397 (2,4); 7,381 (1,7); 7,377 (1,6); 7,313 (3,4); 7,294 (5,4); 7,275 (2,3); 3,333 (0,6); 3,324 (0,5); 3,307 (125,1); 3,285 (0,5); 2,879 (0,8); 2,870 (1,2); 2,861 (1,9); 2,851 (1,9); 2,842 (1,2); 2,833 (0,9); 2,822 (0,4); 2,798 (1,7); 2,780 (5,2); 2,761 (5,5); 2,742 (1,8); 2,509 (17,8); 2,505 (38,4); 2,500 (54,1); 2,496 (39,8); 2,491 (19,1); 2,327 (0,3); 1,235 (0,5); 1,061 (7,3); 1,042 (16,0); 1,023 (7,1); 0,729 (1,2); 0,716 (3,4); 0,711 (4,8); 0,698 (4,5); 0,693 (3,7); 0,682 (1,6); 0,562 (1,6); 0,552 (4,7); 0,546 (4,2); 0,542 (4,0); 0,536 (3,9); 0,524 (1,2); 0,008 (1,4); 0,000 (45,5); -0,009 (1,9)

Beispiel -T3-76: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,531 (3,2); 9,502 (3,2); 9,096 (3,3); 8,822 (3,2); 8,817 (3,3); 8,727 (5,1); 8,442 (1,9); 8,436 (3,4); 8,428 (5,4); 7,817 (2,1); 7,582 (2,1); 5,759 (16,0); 3,568 (2,8); 3,437 (0,3); 3,424 (0,4); 3,328 (355,3); 3,303 (1,2); 2,711 (0,5); 2,675 (0,6); 2,670 (0,7); 2,667 (0,5); 2,557 (0,4); 2,554 (0,7); 2,552 (0,9); 2,551 (1,1); 2,541 (159,1); 2,530 (1,2); 2,528 (1,0); 2,527 (1,0); 2,524 (1,3); 2,510 (33,8); 2,506 (67,9); 2,502 (90,5); 2,497 (63,3); 2,493 (29,5); 2,458 (0,9); 2,440 (2,5); 2,421 (2,5); 2,402 (0,9); 2,368 (0,6); 2,333 (0,6); 2,329 (0,7); 2,324 (0,6); 2,111 (12,0); 2,086 (1,1); 1,629 (1,2); 1,615 (2,9); 1,608 (3,2); 1,595 (1,5); 1,346 (1,4); 1,332 (2,9); 1,325 (3,2); 1,311 (1,1); 1,072 (0,6); 1,055 (1,3); 1,048 (4,1); 1,037 (0,9); 1,029 (8,8); 1,010 (3,8); 0,008 (2,0); 0,000 (66,6); -0,008 (2,4); -0,014 (0,4)

Beispiel -T3-77: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,043 (4,2); 9,036 (4,3); 8,798 (4,2); 8,793 (4,4); 8,705 (6,6); 8,645 (1,9); 8,635 (2,0); 8,408 (3,8); 8,389 (2,6); 8,384 (4,6); 8,379 (2,6); 7,613 (2,8); 7,580 (2,9); 5,759 (4,7); 3,327 (158,6); 2,902 (0,6); 2,892 (1,0); 2,884 (1,5); 2,874 (1,5); 2,863 (1,0); 2,856 (0,7); 2,671 (0,4); 2,541 (65,9); 2,511 (20,9); 2,506 (42,9); 2,502 (59,0); 2,498 (43,4); 2,493 (22,4); 2,458 (2,1); 2,438 (3,5); 2,419 (3,4); 2,401 (1,3); 2,367 (0,3); 2,329 (0,4); 2,110 (16,0); 2,088 (1,2); 1,989 (0,4); 1,072 (0,4); 1,055 (1,0); 1,048 (5,3); 1,029 (11,8); 1,010 (5,3); 0,763 (0,9); 0,750 (2,3); 0,745 (3,4); 0,733 (3,3); 0,727 (2,8); 0,716 (1,4); 0,617 (1,2); 0,607 (3,5); 0,600 (3,1); 0,591 (2,8); 0,579 (1,0); 0,008 (1,3); 0,000 (40,7); -0,008 (2,2)

Beispiel -T3-78: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,542 (5,5); 9,527 (5,7); 9,122 (5,9); 8,857 (8,8); 8,834 (5,6); 8,829 (5,9); 8,472 (3,3); 8,467 (5,7); 8,461 (3,2); 8,434 (8,5); 7,757 (4,0); 7,724 (7,7); 7,399 (0,6); 5,759 (5,9); 4,020 (0,4); 3,617 (3,6); 3,568 (1,5); 3,426 (0,9); 3,326 (384,4); 3,303 (1,4); 3,235 (1,3); 2,821 (1,6); 2,802 (5,1); 2,783 (5,1); 2,765 (1,7); 2,711 (0,6); 2,670 (0,9); 2,666 (0,7); 2,541 (164,7); 2,510 (48,8); 2,506 (100,5); 2,502 (137,3); 2,497 (98,8); 2,493 (47,9); 2,367 (0,6); 2,329 (0,8); 1,989 (1,5); 1,633 (2,1); 1,619 (5,2); 1,612 (5,6); 1,599 (2,4); 1,350 (2,6); 1,337 (5,3); 1,330 (5,5); 1,316 (2,0); 1,234 (0,4); 1,192 (0,4); 1,171 (0,8); 1,156 (0,5); 1,143 (0,5); 1,069 (7,2); 1,050 (16,0); 1,032 (7,1); 0,146 (0,4); 0,008 (7,9); 0,000 (90,5); -0,008 (3,5)

Beispiel -T3-79: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,064 (5,0); 9,059 (5,1); 8,821 (8,9); 8,811 (5,2); 8,807 (5,3); 8,630 (2,5); 8,622 (2,5); 8,413 (3,8); 8,408 (13,3); 7,748 (4,3); 7,738 (1,8); 7,721 (6,6); 7,712 (3,8); 7,695 (0,9); 5,752 (1,0); 3,305 (76,3); 3,281 (0,4); 2,910 (0,4); 2,902 (0,9); 2,895 (1,3); 2,888 (2,0); 2,880 (2,0); 2,873 (1,3); 2,865 (1,0); 2,858 (0,4); 2,813 (1,7); 2,798 (5,5); 2,783 (5,6); 2,768 (1,9); 2,508 (13,7); 2,504 (28,5); 2,501 (39,3); 2,497 (29,3);

2.494 (14,5); 1,908 (2,7); 1,236 (0,5); 1,068 (7,4); 1,053 (16,0); 1,038 (7,3); 0,761 (1,2); 0,751 (3,5) 0,747 (4,6); 0,737 (4,6); 0,733 (3,8); 0,723 (1,8); 0,620 (1,6); 0,612 (4,7); 0,607 (4,4); 0,604 (4,2); 0,599 (4,0); 0,589 (1,2) 0,008 (1,3); 0,000 (30,8); -0,007 (1,4)

Beispiel T3-80: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,128 (2,6); 8,082 (2,8); 7,736 (1,6); 7,731 (2,1); 7,701 (1,1); 7,696 (0,8); 7,680 (1,2); 7,675 (1,1); 7,608 (0,4); 7,562 (1,4); 7,549 (1,4); 7,494 (1,9); 7,473 (1,5); 2,448 (0,6); 7,479 (1,9); 2,410 (2,0); 2,391 (0,7); 2,164 (9,6); 2,155 (20,0); 2,088 (7,6); 1,965 (1,0); 1,959 (2,5); 1,953 (13,9); 1,946 (25,4); 1,940 (34,2); 1,934 (24,1); 1,928 (12,6); 1,598 (0,8); 1,583 (2,0); 1,577 (2,0); 1,563 (1,1); 1,437 (16,0); 1,358 (1,0); 1,345 (2,0); 1,338 (2,1) 1,323 (0,8); 1,288 (0,7); 1,092 (2,7); 1,073 (5,7); 1,054 (2,8); 0,008 (1,1); 0,000 (34,6); -0,009 (1,5)

Beispiel -T3-81: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,115 (7,2); 8,067 (7,4); 7,688 (4,4); 7,683 (5,6); 7,367 (0,5); 7,652 (3,0); 7,646 (2,4); 7,631 (3,5); 7,625 (3,0); 7,560 (4,1); 7,546 (4,1); 7,462 (5,2); 7,441 (4,2); 6,903 (1,2); 2,860 (0,3); 2,871 (0,9); 2,861 (1,3); 2,853 (2,1); 2,843 (2,1); 2,835 (1,3); 2,825 (1,0); 2,815 (0,4); 2,447 (1,8); 2,428 (5,5); 2,409 (5,7); 2,390 (1,9); 2,141 (55,3); 2,120 (1,0); 2,113 (0,9); 2,107 (1,0); 2,101 (0,9); 2,086 (21,5); 1,964 (4,2); 1,958 (10,5); 1,952 (54,5); 1,946 (98,5); 1,940 (132,1); 1,934 (92,1); 1,927 (48,4); 1,774 (0,5); 1,768 (0,8); 1,762 (0,5); 1,437 (1,3); 1,270 (1,0); 1,090 (7,7); 1,074 (16,0); 1,052 (7,4); 0,794 (1,1); 0,781 (3,3); 0,776 (4,4); 0,763 (4,7); 0,758 (3,4); 0,746 (1,6); 0,610 (1,5); 0,598 (3,8); 0,592 (4,0); 0,586 (3,6); 0,583 (3,6); 0,571 (1,1); 0,146 (1,8); 0,031 (0,4); 0,030 (0,4); 0,0272 (0,4); 0,0265 (0,4); 0,026 (0,4); 0,022 (0,6); 0,008 (16,0); 0,000 (381,4); -0,009 (18,6); -0,150 (1,8)

Beispiel -T3-82: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,127 (7,5); 8,085 (7,7); 7,734 (4,3); 7,729 (5,7); 7,708 (3,2); 7,703 (2,2); 7,688 (3,6); 7,682 (2,9); 7,561 (3,9); 7,548 (3,8); 7,512 (5,3); 7,491 (4,4); 7,365 (0,9); 4,141 (1,1); 4,124 (1,2); 4,117 (3,5) 4,100 (3,5); 4,093 (3,7); 4,077 (3,5); 4,070 (1,3); 4,053 (1,2); 2,462 (0,4); 2,457 (0,4); 2,450 (1,8); 2,431 (5,5); 2,412 (5,7); 2,393 (1,9); 2,150 (76,9); 2,120 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,8); 2,101 (0,8); 2,090 (21,3); 1,964 (3,5); 1,958 (8,4); 1,952 (45,7); 1,946 (82,9); 1,940 (111,8); 1,934 (77,5); 1,927 (40,4); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437 (1,0); 1,269 (1,0); 1,093 (7,7); 1,074 (16,0); 1,055 (7,4); 0,146 (1,4); 0,008 (11,1); 0,000 (291,0); -0,009 (12,7); -0,150 (1,4)

Beispiel -T3-83: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,128 (7,9); 8,079 (8,4); 7,719 (4,9); 7,713 (6,1); 7,677 (3,1); 7,671 (2,5); 7,656 (3,5); 7,650 (3,1); 7,562 (4,8); 7,548 (4,7); 7,484 (5,6); 7,463 (5,1); 7,436 (1,2); 5,447 (1,2); 5,337 (1,3); 5,316 (2,5) 5,295 (2,5); 5,274 (1,3); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,543 (3,2); 3,540 (2,1); 3,520 (6,4); 3,498 (4,2); 3,370 (4,2); 3,367 (2,8); 3,350 (6,2); 3,346 (5,9); 3,326 (3,3); 2,462 (0,3); 2,451 (2,0); 2,432 (6,0); 2,413 (6,2); 2,394 (2,1); 2,150 (115,6); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,107 (0,8); 2,091 (23,5); 1,972 (1,3); 1,964 (3,0); 1,958 (7,9); 1,952 (38,4); 1,946 (71,5); 1,940 (96,0); 1,934 (68,4); 1,928 (36,7); 1,774 (0,4); 1,768 (0,6); 1,762 (0,4); 1,437 (2,7); 1,268 (1,0); 1,227 (0,4); 1,204 (0,8); 1,186 (0,4); 1,094 (7,8); 1,075 (16,0); 1,056 (7,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,8); 0,000 (220,9); -0,150 (1,1)

Beispiel -T3-84: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,162 (9,4); 8,125 (7,5); 7,997 (4,3); 7,952 (4,4); 7,729 (4,8); 7,724 (6,8); 7,707 (3,5); 7,701 (2,3); 7,686 (3,9); 7,680 (3,2); 7,519 (6,1); 7,498 (4,9); 7,348 (1,3); 4,140 (1,3); 4,123 (1,4); 4,116 (3,9); 4,100 (3,9); 4,092 (4,2); 4,076 (3,9); 4,069 (1,7); 4,052 (1,4); 2,148 (92,5); 2,120 (27,2); 2,108 (1,6); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,971 (0,9); 1,964 (3,5); 1,958 (9,1); 1,952 (47,9); 1,946 (87,4); 1,940 (116,0); 1,934 (83,5); 1,928 (44,7); 1,774 (0,5); 1,768 (0,7); 1,762 (0,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,6); 0,146 (0,9); 0,008 (6,8); 0,000 (179,6); -0,008 (10,9); -0,150 (0,9)

Beispiel -T3-85: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,163 (8,2); 8,118 (4,2); 7,898 (2,6); 7,953 (2,5); 7,716 (3,0); 7,710 (3,7); 7,675 (1,9); 7,668 (1,5); 7,661 (2,2); 7,648 (1,8); 7,490 (3,5); 7,469 (2,8); 7,418 (0,8); 7,400 (0,8); 5,335 (0,8); 5,314 (1,6); 5,293 (1,6); 5,272 (0,8); 3,542 (2,0); 3,538 (1,3); 3,518 (4,0); 3,496 (2,6); 3,370 (2,6); 3,367 (1,7); 3,349 (3,6); 3,346 (3,6); 3,326 (2,0); 2,133 (15,0); 2,120 (15,4); 2,101 (0,5); 1,971 (1,1); 1,964 (1,7); 1,958 (4,3); 1,952 (19,7); 1,946 (35,3); 1,940 (47,2); 1,934 (33,6); 1,927 (18,1); 1,437 (16,0) 1,204 (0,4); 0,146 (0,4); 0,008 (3,9); 0,000 (78,7); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-86: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,252 (0,3); 8,246 (2,7); 8,110 (0,4); 8,102 (2,3); 7,899 (1,3); 7,708 (1,4); 7,690 (1,7); 7,685 (2,2); 7,655 (1,2); 7,649 (0,9); 7,634 (1,5); 7,628 (1,4); 7,468 (2,2); 7,447 (1,8); 6,891 (0,5); 2,871 (0,4); 2,862 (0,5); 2,853 (0,8); 2,843 (0,8); 2,835 (0,5); 2,825 (0,4); 2,415 (1,0); 2,171 (8,3); 2,132 (10,6); 1,971 (0,5); 1,964 (1,1); 1,958 (2,6); 1,952 (13,9); 1,946 (25,2); 1,940 (34,0); 1,933 (23,7); 1,927 (12,5); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,794 (0,4); 0,781 (1,3); 0,776 (1,7); 0,764 (1,8); 0,758 (1,3); 0,746 (0,6); 0,611 (0,6); 0,599 (1,5); 0,593 (1,6); 0,589 (1,4); 0,584 (1,4); 0,571 (0,5); 0,008 (2,3); 0,000 (63,9); -0,009 (3,1)

Beispiel -T3-87: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,171 (11,0); 8,170 (11,0); 8,122 (12,2); 8,120 (11,4); 7,729 (6,8); 7,724 (6,7); 7,697 (4,9); 7,691 (3,7); 7,676 (5,6); 7,670 (4,6); 7,606 (16,0); 7,604 (15,8); 7,551 (3,2); 7,500 (8,3); 7,479 (6,7); 5,446 (0,7); 4,085 (0,6); 4,068 (2,0); 4,050 (2,0); 4,032 (0,7); 3,240 (0,6); 2,132 (42,8); 2,119 (0,5); 2,113 (0,7); 2,107 (0,9); 2,101 (0,6); 2,095 (0,3). 1,971 (9,0). 1,964 (4,0); 1,958 (10,1); 1,952 (56,8). 1,946 (103,2); 1,940 (138,6); 1,933 (95,2) 1,927 (49,0); 1,914 (0,7); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,598 (3,6); 1,581 (8,5); 1,574 (8,5); 1,560 (4,6); 1,520 (0,5); 1,437 (11,1); 1,400 (0,6); 1,350 (4,7); 1,346 (8,6); 1,340 (8,8); 1,325 (3,6); 1,317 (0,8); 1,287 (0,4); 1,269 (1,4); 1,221 (2,5); 1,204 (4,7); 1,186 (2,3); 0,146 (1,8); 0,008 (14,1); 0,000 (400,9); -0,009 (15,1); -0,150 (1,8)

Beispiel -T3-88: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,160 (10,6); 8,111 (11,3); 7,681 (8,2); 7,675 (7,9); 7,647 (3,9); 7,642 (5,1); 7,627 (4,5); 7,621 (4,0); 7,605 (16,0); 7,467 (7,2); 7,447 (5,7); 6,838 (2,0); 5,448 (0,4); 4,067 (0,5); 4,049 (0,5); 2,879 (0,4); 2,869 (1,3); 2,860 (2,3); 2,851 (2,8); 2,842 (2,9); 2,833 (2,0); 2,824 (1,4); 2,814 (0,5); 2,487 (1,2); 2,462 (1,7). 2,458 (1,3); 2,253 (0,6); 2,226 (0,4); 2,158 (239,6); 2,120 (1,0); 2,113 (1,3); 2,107 (1,6); 2,101 (1,2); 2,095 (0,7); 1,971 (3,4) 1,964 (8,0); 1,958 (20,3) 1,952 (98,7); 1,946 (178,8); 1,940 (240,6); 1,934 (170,9); 1,928 (91,2); 1,781 (0,5); 1,774 (1,0); 1,768 (1,3); 1,762 (1,0); 1,756 (0,5). 1,437 (3,0). 1,269 (0,9); 1,221 (0,5); 1,203 (1,0); 1,185 (0,5); 0,792 (1,7); 0,779 (4,8); 0,774 (6,6); 0,761 (3,5); 0,756 (5,1); 0,744 (2,2); 0,610 (2,2); 0,599 (6,0); 0,592 (6,3); 0,583 (5,4); 0,571 (1,6); 0,146 (3,3); 0,007 (29,1); 0,000 (640,2); -0,150 (3,3)

Beispiel -T3-89: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, ca-DMSO):

δ= 9,437 (11,1); 8,788 (15,9); 8,367 (16,0); 8,317 (0,8); 7,986 (0,4); 7,903 (8,6); 7,897 (6,7); 7,824 (9,1) 7,810 (13,0); 7,805 (11,4); 7,802 (13,2); 7,797 (8,0); 7,791 (3,7); 7,814 (3,7); 7,610 (3,5); 7,591 (2,9); 7,588 (2,9); 7,580 (9,0); 7,551 (1,7); 7,548 (1,5); 7,537 (7,7); 3,903 (8,5); 3,332 (418,5); 3,174 (0,7); 3,162 (0,3); 2,676 (2,0); 2,671 (2,7); 2,667 (2,1); 2,541 (1,6); 2,507 (359,7); 2,502 (464,1); 2,498 (346,7); 2,333 (2,1); 2,329 (2,9); 2,325 (2,2); 1,978 (3,7); 1,604 (9,3); 1,597 (9,9); 1,584 (4,2); 1,543 (0,4); 1,327 (0,4); 1,287 (4,3); 1,274 (9,4); 1,267 (9,9); 1,253 (3,8); 1,234 (1,5); 1,215 (0,5); 1,181 (0,4). 1,177 (0,4); 0,861 (0,4); 0,853 (0,4); 0,843 (0,4); 0,834 (0,4); 0,824 (0,4);

0.813 (0,3); 0,008 (0,9); 0,000 (24,6); -0,008 (1,1)

Beispiel -T3-90: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,565 (0,4); 8,349 (0,8); 8,333 (14,0); 8,123 (0,6); 8,109 (13,1); 8,095 (0,8); 7,904 (0,4); 7,881 (0,4); 7,712 (8,7); 7,689 (16,0); 7,683 (10,7); 7,672 (1,0); 7,654 (5,5); 7,648 (4,2); 7,633 (6,1); 7,627 (5,3); 7,617 (5,0); 7,611 (5,5); 7,475 (0,5); 7,467 (9,7); 7,454 (0,7); 7,448 (9,4); 7,438 (3,3); 7,422 (2,4); 7,419 (2,6); 7,416 (2,5); 6,891 (2,1); 5,446 (0,4); 3,899 (0,3); 2,881 (0,6); 2,872 (1,7); 2,862 (2,4); 2,851 (3,6); 2,844 (3,8); 2,835 (2,5); 2,826 (1,8); 2,816 (0,6); 2,132 (62,2); 2,113 (1,1); 2,107 (1,3); 2,101 (0,9); 2,095 (0,5); 1,996 (0,3); 1,971 (0,9); 1,964 (5,7); 1,958 (14,2); 1,952 (81,0); 1,946 (147,9); 1,940 (200,1); 1,933 (139,4); 1,927 (72,6); 1,780 (0,5); 1,774 (0,8); 1,768 (1,1); 1,762 (0,8); 1,756 (0,4); 1,268 (2,3); 0,861 (0,3); 0,798 (2,0); 0,783 (5,8); 0,778 (7,9); 0,765 (8,2); 0,760 (6,0); 0,748 (2,8); 0,726 (0,4); 0,709 (0,4); 0,353 (0,3); 0,643 (0,3); 0,613 (2,8); 0,601 (6,7); 0,595 (7,1); 0,591 (6,3); 0,586 (5,3); 0,574 (2,0); 0,146 (2,4); 0,009 (17,6); 0,000 (508,1); -0,009 (24,9); -0,150 (2,4)

Beispiel -T3-91: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 8,837 (3,4); 8,831 (3,6); 8,747 (8,3); 8,532 (1,9); 8,521 (2,0); 8,474 (8,2); 8,100 (9,7); 7,954 (3,3); 7,949 (3,5); 4,109 (0,4); 4,095 (0,4); 3,904 (16,0); 3,335 (287,0); 3,267 (0,5); 3,243 (0,4); 3,174 (2,4); 3,162 (2,5); 2,877 (0,6); 2,868 (0,9); 2,859 (1,3); 2,849 (1,3); 2,840 (0,9); 2,831 (0,6); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,507 (156,9); 2,502 (206,2); 2,498 (158,4); 2,334 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 1,258 (0,4); 1,002 (1,3); 0,986 (1,2); 0,740 (0,8); 0,727 (2,3); 0,722 (3,1); 0,710 (2,9); 0,704 (2,4); 0,693 (1,0); 0,568 (1,0); 0,559 (3,1); 0,552 (2,9); 0,548 (2,7); 0,542 (2,5); 0,530 (0,7); 0,000 (1,8)

Beispiel -T3-92: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 9,415 (4,9); 8,892 (4,2); 8,886 (4,4); 8,765 (7,6); 8,488 (7,3); 8,104 (11,7); 8,044 (4,2); 8,039 (4,3); 3,904 (16,0); 3,593 (0,4); 3,336 (427,9); 3,173 (1,6); 3,163 (1,6); 2,876 (1,4); 2,872 (1,7); 2,867 (1,3); 2,518 (32,9); 2,511 (114,6); 2,507 (211,5); 2,503 (266,8); 2,498 (196,7); 2,334 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,1); 1,613 (1,8); 1,599 (4,5); 1,592 (4,8); 1,579 (2,0); 1,315 (2,1); 1,301 (4,6); 1,295 (4,7); 1,280 (1,7); 1,236 (0,3); 0,000 (2,1)

Beispiel -T3-93: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,187 (3,1); 8,146 (3,3); 7,899 (4,8); 7,653 (1,3); 7,648 (2,7); 7,639 (0,5); 7,624 (1,5); 7,618 (1,0); 7,462 (1,9); 7,441 (1,5); 7,115 (0,7); 5,448 (1,2); 4,068 (0,5); 4,050 (0,5); 2,174 (33,4); 1,972 (2,4); 1,965 (0,8); 1,959 (1,9); 1,953 (10,3); 1,947 (18,3); 1,941 (24,8); 1,934 (16,9); 1,928 (8,7); 1,448 (9,5); 1,437 (16,0); 1,270 (0,5); 1,221 (0,6); 1,204 (1,2); 1,186 (0,6); 0,837 (0,7); 0,824 (2,1); 0,820 (2,2); 0,808 (0,9); 0,673 (1,1); 0,861 (2,4); 0,658 (2,5); 0,644 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (10,3); -0,009 (0,3)

Beispiel -T3-94: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,149 (5,3); 8,106 (4,3); 7,896 (2,3); 7,951 (2,4); 7,645 (2,3); 7,639 (5,5); 7,632 (0,8); 7,618 (2,7); 7,612 (1,8); 7,457 (3,0); 7,436 (2,4); 7,098 (1,2); 2,468 (0,4); 2,464 (0,5); 2,459 (0,4); 2,165 (184,2); 2,116 (15,3); 2,102 (0,5); 1,972 (1,1); 1,965 (3,0); 1,959 (7,6); 1,953 (41,5); 1,947 (74,8); 1,940 (100,0); 1,934 (66,4); 1,928 (35,2); 1,775 (0,4); 1,769 (0,6); 1,763 (0,4); 1,447 (16,0); 1,437 (3,0); 1,270 (2,2); 1,204 (0,3); 0,835 (1,1); 0,822 (3,7); 0,818 (3,9); 0,807 (1,5); 0,673 (1,8); 0,662 (4,3); 0,656 (4,3); 0,644 (1,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,1); -0,009 (1,4)

Beispiel T3-95: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 9,596 (2,3); 8,893 (2,0); 8,887 (2,0); 8,791 (3,3); 8,545 (3,3); 8,315 (0,5); 8,300 (2,2); 8,294 (2,3); 8,263 (5,7); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,327 (38,3); 7,671 (0,6); 2,507 (83,6); 2,328 (0,6); 1,989 (1,8); 1,643 (0,8); 1,628 (2,2); 1,621 (2,3); 1,609 (0,9); 1,388 (16,0); 1,288 (1,0); 1,285 (2,2); 1,278 (2,3); 1,264 (0,8); 1,193 (0,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 0,146 (0,4); 0,000 (75,9); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-96: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 8,838 (2,0); 8,833 (2,0); 8,618 (3,2); 8,513 (1,0); 8,502 (1,0); 8,377 (3,3); 7,954 (1,9); 7,949 (1,9); 7,596 (3,6); 4,104 (0,3); 3,903 (10,1); 3,409 (0,5); 3,350 (316,6); 3,302 (0,5); 3,175 (1,8); 3,162 (1,8); 2,855 (0,4); 2,857 (0,7); 2,847 (0,7); 2,838 (0,4); 2,677 (0,4); 2,672 (0,6); 2,668 (0,4); 2,526 (1,8); 2,512 (37,4); 2,508 (74,7); 2,503 (97,3); 2,499 (71,2); 2,494 (35,6); 2,489 (12,6); 2,335 (0,4); 2,330 (0,6); 2,325 (0,5); 2,117 (16,0); 1,303 (0,6); 0,987 (0,6); 0,739 (0,5); 0,725 (1,2); 0,721 (1,7); 0,709 (1,6); 0,703 (1,3); 0,692 (0,6); 0,568 (0,6); 0,557 (1,7); 0,551 (1,5); 0,547 (1,4); 0,542 (1,4); 0,529 (0,4); 0,000 (0,7)

Beispiel -T3-97: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 9,395 (2,2); 8,892 (2,0); 8,886 (2,0); 8,640 (3,3); 8,391 (3,4); 8,040 (1,9); 8,035 (1,9); 7,599 (3,7); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,901 (10,2); 3,332 (130,8); 3,174 (2,4); 3,161 (2,4); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,5); 2,541 (0,4); 2,525 (1,8); 2,511 (39,6); 2,507 (81,0); 2,502 (65,3); 2,498 (69,0); 2,493 (34,2); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,324 (0,4); 2,118 (16,0); 1,613 (0,8); 1,599 (1,9); 1,592 (2,1); 1,579 (0,9); 1,311 (0,9); 1,297 (2,0); 1,291 (2,1); 1,276 (0,8); 1,002 (0,5); 0,987 (0,5); 0,000 (1,2)

Beispiel -T3-98: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 8,839 (6,0); 8,833 (6,2); 8,791 (0,5); 8,781 (9,8); 8,692 (3,1); 8,681 (3,2); 8,549 (0,5); 8,540 (9,6); 8,282 (16,0); 8,217 (6,2); 8,210 (6,1); 5,758 (1,1); 3,328 (37,2); 2,871 (0,8); 2,861 (1,2); 2,852 (1,8); 2,842 (1,9); 2,833 (1,2); 2,824 (0,9); 2,814 (0,3); 2,671 (0,4); 2,525 (0,9); 2,511 (20,9); 2,507 (43,2); 2,502 (58,6); 2,498 (44,1); 2,494 (22,5); 2,329 (0,4); 1,989 (0,4); 1,397 (0,4); 0,757 (1,2); 0,744 (3,4); 0,739 (4,7); 0,725 (4,5); 0,721 (3,6); 0,709 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,2); 0,548 (4,1); 0,542 (3,9); 0,530 (1,2); 0,146 (0,5); 0,008 (3,4); 0,000 (97,3); -0,008 (4,2); -0,150 (0,5)

Beispiel -T3-99: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 8,851 (0,6); 8,845 (0,8); 8,840 (3,5); 8,834 (3,6); 8,770 (6,0); 8,525 (5,8); 8,337 (3,6); 8,331 (3,5); 8,283 (11,0); 8,226 (0,6); 8,220 (0,6); 3,328 (25,7); 3,030 (16,0); 2,798 (0,7); 2,790 (0,8); 2,781 (1,3); 2,771 (0,9); 2,758 (2,9); 2,543 (55,4); 2,525 (0,6); 2,508 (28,1); 2,503 (37,2); 2,498 (27,6); 0,814 (0,3); 0,773 (0,4); 0,604 (0,5); 0,585 (2,1); 0,576 (2,8); 0,566 (1,0); 0,543 (1,2); 0,532 (2,2); 0,514 (2,0); 0,501 (0,4); 0,495 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (28,2); -0,008 (1,0)

Beispiel -T3-100: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 8,826 (5,3); 8,817 (2,9); 8,811 (2,8); 8,531 (4,2); 8,520 (2,7); 8,314 (2,7); 8,206 (0,4); 8,200 (0,4); 8,111 (7,7); 3,904 (16,0); 3,395 (0,6); 3,337 (288,8); 3,257 (0,4); 3,243 (0,4); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,029 (12,3); 2,795 (0,5); 2,788 (0,6); 2,778 (1,0); 2,768 (0,8); 2,757 (2,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,668 (0,8); 2,512 (73,1); 2,507 (138,1); 2,503 (175,3); 2,499 (129,8); 2,334 (0,7); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 1,002 (1,0); 0,987 (1,0); 0,833 (0,4); 0,815 (0,3); 0,603 (0,4); 0,584 (1,7); 0,574 (2,2); 0,565 (0,9); 0,542 (0,9); 0,531 (1,7); 0,513 (1,5); 0,000 (1,8)

Beispiel -T3-101: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):
δ= 8,828 (0,4); 8,823 (0,4); 8,815 (2,1); 8,809 (2,2); 8,690 (3,8); 8,442 (0,7); 8,435 (3,3); 8,293 (2,2); 8,287 (2,1); 8,190 (0,4); 8,184 (0,3);

7.603 (4,3); 3,904 (8,8); 3,339 (233,4); 3,175 (0,6); 3,162 (0,6); 3,027 (9,9); 2,795 (0,4); 2,787 (0,5); 2,778 (0,6); 2,758 (0,6); 2,756 (1,8); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,8); 2,512 (51,7); 2,507 (99,0); 2,503 (126,8); 2,498 (93,4); 2,494 (47,1); 2,334 (0,8); 2,330 (0,8); 2,325 (0,6); 2,130 (16,0); 2,122 (3,6); 1,002 (0,4); 0,987 (0,4); 0,583 (1,3); 0,574 (1,7); 0,565 (0,6); 0,543 (0,7); 0,531 (1,3); 0,514 (1,1); 0,000 (0,9)
Beispiel -T3-102: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,908 (0,7); 8,879 (2,4); 8,874 (2,4); 8,839 (4,2); 8,820 (1,2); 8,538 (2,8); 8,496 (1,0); 8,431 (0,7); 8,427 (0,7); 8,288 (2,4); 8,283 (2,4); 8,111 (9,5); 3,904 (16,0); 3,591 (0,4); 3,341 (514,4); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,136 (2,9); 2,914 (11,4); 2,676 (1,1); 2,672 (1,5); 2,668 (1,1); 2,507 (189,0); 2,503 (242,9); 2,499 (186,3); 2,334 (1,1); 2,330 (1,5); 2,326 (1,1); 1,713 (2,7); 1,489 (2,0); 0,000 (2,0)
Beispiel -T3-103: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,907 (0,4); 8,878 (1,3); 8,872 (1,3); 8,702 (7,2); 8,685 (0,6); 8,443 (2,1); 8,406 (0,9); 8,270 (1,3); 8,264 (1,3); 7,804 (4,3); 3,904 (12,6); 3,395 (0,4); 3,336 (210,6); 3,270 (0,4); 3,256 (0,3); 3,175 (0,6); 3,162 (0,9); 3,133 (1,5); 2,915 (6,3); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,668 (0,6); 2,525 (2,1); 2,507 (102,9); 2,503 (131,5); 2,498 (97,5); 2,334 (0,7); 2,330 (0,9); 2,325 (0,6); 2,122 (16,0); 1,718 (1,3); 1,713 (1,4); 1,484 (1,0); 1,002 (0,8); 0,987 (0,8); 0,000 (1,9)
Beispiel -T3-104: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,865 (9,7); 8,857 (6,5); 8,845 (6,3); 8,838 (6,4); 8,694 (3,1); 8,683 (3,1); 8,470 (0,5); 8,458 (3,4); 8,229 (6,5); 8,223 (6,4); 7,751 (4,6); 7,726 (0,3); 7,710 (11,3); 4,457 (0,4); 4,403 (0,4); 4,392 (0,4); 4,121 (0,3); 4,108 (1,0); 4,085 (1,0); 4,062 (0,4); 3,904 (75,4); 3,395 (0,4); 3,334 (355,6); 3,243 (0,4); 3,175 (4,8); 3,161 (4,8); 2,883 (0,3); 2,873 (0,9); 2,864 (1,2); 2,855 (1,9); 2,845 (1,9); 2,836 (1,2); 2,827 (0,9); 2,818 (0,5); 2,807 (1,7); 2,788 (3,3); 2,769 (3,4); 2,751 (1,8); 2,680 (0,8); 2,676 (1,1); 2,671 (1,4); 2,667 (1,1); 2,542 (1,0); 2,525 (4,5); 2,511 (90,6); 2,507 (178,4); 2,502 (231,0); 2,498 (169,2); 2,494 (82,9); 2,334 (1,0); 2,329 (1,4); 2,325 (1,0); 1,056 (7,2); 1,038 (16,0); 1,018 (7,1); 1,002 (1,6); 0,987 (1,5); 0,759 (1,2); 0,746 (3,5); 0,741 (4,8); 0,729 (4,5); 0,723 (3,7); 0,711 (1,5); 0,568 (1,5); 0,557 (4,5); 0,551 (4,3); 0,547 (4,0); 0,542 (3,9); 0,529 (1,2); 0,000 (3,5)
Beispiel -T3-105: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 9,606 (5,9); 8,899 (6,1); 8,893 (6,2); 8,882 (8,7); 8,466 (9,0); 8,308 (8,0); 8,302 (5,8); 7,753 (4,8); 7,730 (0,3); 7,712 (11,2); 3,904 (12,3); 3,332 (328,2); 3,175 (1,4); 3,161 (1,4); 3,047 (0,5); 2,866 (0,5); 2,807 (1,7); 2,789 (5,3); 2,770 (5,4); 2,751 (1,8); 2,676 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,8); 2,511 (97,8); 2,507 (190,1); 2,502 (244,3); 2,498 (178,1); 2,493 (87,7); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,650 (2,1); 1,636 (5,3); 1,629 (5,6); 1,616 (2,3); 1,295 (2,5); 1,281 (5,3); 1,276 (5,7); 1,260 (2,1); 1,065 (7,3); 1,037 (16,0); 1,018 (7,1); 0,000 (3,7)
Beispiel -T3-106: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,824 (4,0); 8,818 (4,1); 8,781 (4,7); 8,694 (1,9); 8,683 (1,9); 8,315 (6,0); 8,223 (2,4); 8,196 (4,1); 8,190 (4,0); 7,937 (2,5); 4,456 (0,3); 4,402 (0,4); 4,391 (0,4); 4,107 (0,7); 4,094 (0,8); 3,904 (16,0); 3,332 (223,1); 3,243 (0,4); 3,174 (4,3); 3,161 (4,4); 2,868 (0,5); 2,859 (0,8); 2,850 (1,2); 2,840 (1,2); 2,831 (0,8); 2,822 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (3,7); 2,525 (3,7); 2,511 (78,4); 2,507 (154,9); 2,502 (201,4); 2,498 (148,3); 2,493 (74,4); 2,334 (0,3); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,147 (13,7); 1,002 (1,6); 0,987 (1,6); 0,755 (0,8); 0,742 (2,2); 0,737 (3,1); 0,725 (2,8); 0,719 (2,4); 0,708 (1,0); 0,563 (1,0); 0,552 (2,9); 0,546 (2,7); 0,542 (2,6); 0,536 (2,5); 0,524 (0,8); 0,000 (2,7)
Beispiel -T3-107: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,833 (0,5); 8,826 (0,6); 8,819 (2,8); 8,813 (2,8); 8,770 (3,5); 8,503 (0,9); 8,495 (1,3); 8,312 (2,8); 8,306 (2,6); 8,223 (2,0); 8,207 (0,5); 8,201 (0,4); 7,939 (2,1); 3,904 (16,0); 3,332 (177,8); 3,175 (1,5); 3,162 (1,6); 3,027 (12,7); 2,794 (0,5); 2,787 (0,6); 2,778 (1,0); 2,767 (0,8); 2,760 (2,8); 2,751 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (67,3); 2,507 (128,5); 2,503 (163,4); 2,498 (116,9); 2,494 (59,0); 2,334 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,158 (9,9); 1,002 (1,1); 0,987 (1,1); 0,830 (0,3); 0,813 (0,3); 0,606 (0,4); 0,586 (1,6); 0,577 (2,2); 0,568 (0,8); 0,545 (1,0); 0,534 (1,7); 0,516 (1,5); 0,000 (2,1)
Beispiel -T3-108: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 9,604 (5,0); 8,878 (4,1); 8,872 (4,2); 8,793 (5,7); 8,519 (7,0); 8,277 (4,3); 8,271 (4,2); 8,225 (3,2); 7,938 (3,2); 4,458 (0,3); 4,404 (0,4); 4,393 (0,4); 4,123 (0,4); 4,110 (1,1); 4,097 (1,1); 4,083 (0,4); 3,904 (16,0); 3,433 (0,4); 3,337 (510,1); 3,270 (0,6); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (4,2); 3,162 (4,3); 3,043 (0,4); 2,872 (0,4); 2,672 (1,4); 2,506 (184,9); 2,503 (232,7); 2,498 (161,4); 2,329 (1,4); 2,146 (15,6); 1,643 (1,6); 1,629 (4,1); 1,622 (4,4); 1,609 (1,8); 1,293 (1,8); 1,280 (4,1); 1,273 (4,3); 1,259 (1,8); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,000 (3,9)
Beispiel -T3-109: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,821 (4,5); 8,815 (4,5); 8,727 (6,7); 8,683 (2,3); 8,672 (2,3); 8,456 (6,9); 8,191 (4,6); 8,185 (4,4); 7,611 (3,0); 7,577 (3,0); 4,112 (0,4); 4,098 (0,5); 3,904 (16,0); 3,433 (0,3); 3,422 (0,4); 3,341 (478,8); 3,283 (0,5); 3,272 (0,4); 3,269 (0,4); 3,257 (0,4); 3,243 (0,3); 3,175 (2,2); 3,162 (2,3); 2,866 (0,6); 2,858 (0,9); 2,850 (1,4); 2,840 (1,4); 2,831 (0,9); 2,821 (0,7); 2,676 (0,9); 2,672 (1,2); 2,667 (0,9); 2,542 (0,7); 2,525 (3,9); 2,511 (83,9); 2,507 (159,5); 2,503 (202,9); 2,498 (149,6); 2,443 (1,3); 2,424 (3,5); 2,405 (3,5); 2,387 (1,2); 2,334 (0,9); 2,330 (1,2); 2,325 (0,9); 2,096 (16,0); 1,169 (1,4); 1,038 (5,1); 1,018 (10,9); 1,002 (2,2); 0,997 (3,0); 0,987 (1,4); 0,755 (0,9); 0,742 (2,7); 0,737 (3,5); 0,725 (3,4); 0,719 (2,8); 0,708 (1,1); 0,563 (1,1); 0,553 (3,4); 0,547 (3,3); 0,543 (3,1); 0,537 (3,0); 0,525 (0,9); 0,000 (2,0)
Beispiel -T3-110: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 9,594 (4,6); 8,875 (3,6); 8,869 (3,9); 8,742 (6,3); 8,462 (6,5); 8,272 (3,9); 8,266 (3,9); 7,613 (3,3); 7,578 (3,3); 4,108 (0,5); 4,095 (0,5); 3,904 (12,4); 3,405 (0,3); 3,334 (307,0); 3,269 (0,5); 3,256 (0,4); 3,242 (0,4); 3,175 (2,2); 3,161 (2,3); 3,043 (0,4); 2,871 (0,4); 2,671 (1,3); 2,507 (210,6); 2,445 (1,6); 2,426 (3,6); 2,407 (3,7); 2,388 (1,4); 2,328 (1,3); 2,087 (16,0); 1,645 (1,5); 1,630 (4,1); 1,624 (4,4); 1,610 (1,8); 1,291 (1,8); 1,277 (4,2); 1,271 (4,6); 1,256 (1,7); 1,235 (0,5); 1,169 (1,0); 1,038 (4,8); 1,018 (10,0); 0,999 (5,0); 0,987 (1,2); 0,000 (2,4)
Beispiel -T3-111: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,917 (0,5); 8,913 (0,5); 8,882 (1,9); 8,876 (1,9); 8,782 (2,6); 8,753 (0,7); 8,503 (3,1); 8,481 (0,8); 8,419 (0,5); 8,414 (0,5); 8,294 (1,9); 8,276 (1,8); 8,223 (2,2); 7,938 (2,3); 3,904 (16,0); 3,334 (271,2); 3,175 (0,9); 3,162 (1,0); 3,131 (2,1); 2,919 (9,2); 2,676 (0,8); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,525 (3,1); 2,511 (66,1); 2,507 (129,1); 2,503 (166,9); 2,498 (121,9); 2,494 (60,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 2,149 (11,9); 1,718 (1,7); 1,712 (1,8); 1,487 (1,3); 0,000 (2,6)
Beispiel -T3-112: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO): δ= 8,843 (3,5); 8,825 (4,0); 8,819 (4,0); 8,701 (2,1); 8,690 (2,0); 8,561 (6,3); 8,513 (3,0); 8,198 (3,9); 8,192 (3,8); 8,094 (2,9); 4,109 (0,4); 4,096 (0,5); 3,904 (16,0); 3,333 (216,4); 3,287 (0,4); 3,174 (2,5); 3,162 (2,6); 2,870 (0,6); 2,860 (0,9); 2,851 (1,3); 2,841 (1,3); 2,833 (0,9); 2,823 (0,6); 2,676 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,524 (3,8); 2,507 (149,9); 2,502 (194,0); 2,498 (144,0); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,325

(0,9); 1,002 (1,2); 0,987 (1,2); 0,756 (0,8); 0,743 (2,5); 0,738 (3,3); 0,726 (3,1); 0,720 (2,5); 0,709 (1,0); 0,564 (1,0); 0,553 (3,2); 0,547 (3,1); 0,544 (2,9); 0,538 (2,8); 0,526 (0,8); 0,000 (2,3)

Beispiel T3 113: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6 DMSO):

δ= 8,831 (3,5); 8,818 (2,5); 8,812 (2,5); 8,547 (0,8); 8,540 (3,7); 8,512 (1,9); 8,325 (2,4); 8,318 (2,4); 8,213 (0,4); 8,207 (0,4); 8,096 (1,8); 3,904 (16,0); 3,381 (0,4); 3,337 (195,5); 3,175 (1,3); 3,161 (1,4); 3,028 (11,1); 2,784 (0,5); 2,787 (0,5); 2,777 (0,9); 2,767 (0,7); 2,760 (2,4); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,667 (0,7); 2,525 (2,8); 2,511 (58,6); 2,507 (114,3); 2,502 (147,1); 2,498 (107,3); 2,494 (52,8); 2,334 (0,6); 2,329 (0,9); 2,325 (0,6); 1,002 (1,0); 0,987 (0,9); 0,585 (1,4); 0,577 (1,9); 0,568 (0,7); 0,545 (0,8); 0,534 (1,4); 0,516 (1,3); 0,000 (2,0)

Beispiel -T3-114: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,607 (2,1); 8,880 (2,1); 8,874 (2,1); 8,854 (3,1); 8,566 (3,7); 8,515 (1,6); 8,282 (2,1); 8,276 (2,1); 8,095 (1,6); 4,109 (0,1); 1,035 (0,1); 3,904 (16,0); 3,334 (175,5); 3,175 (2,1); 3,161 (2,1); 3,044 (0,5); 2,872 (0,5); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,541 (0,5); 2,525 (2,4); 2,511 (50,8); 2,507 (99,8); 2,502 (129,1); 2,498 (94,3); 2,494 (47,4); 2,334 (0,6); 2,329 (0,7); 2,325 (0,6); 1,643 (0,8); 1,629 (2,0); 1,622 (2,2); 1,608 (0,9); 1,298 (1,0); 1,284 (2,0); 1,278 (2,2); 1,263 (0,8); 1,002 (0,9); 0,987 (0,8); 0,000 (1,0)

Beispiel -T3-115: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,898 (1,1); 8,330 (1,1); 8,376 (0,7); 7,972 (0,4); 7,595 (4,0); 3,903 (4,3); 3,328 (177,7); 2,876 (1,2); 2,675 (0,9); 2,671 (1,2); 2,667 (0,9); 2,541 (0,9); 2,506 (159,0); 2,502 (205,8); 2,498 (157,5); 2,385 (2,8); 2,333 (1,0); 2,329 (1,3); 2,324 (1,0); 2,122 (16,0); 1,686 (0,6); 1,487 (0,8); 0,000 (1,2)

Beispiel -T3-116: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,911 (1,0); 8,880 (3,4); 8,874 (3,4); 8,842 (5,1); 8,810 (1,3); 8,548 (5,6); 8,512 (4,5); 8,423 (3,9); 8,292 (3,4); 8,286 (3,4); 8,093 (4,3); 3,904 (4,9); 3,327 (229,2); 3,133 (3,9); 2,918 (16,0); 2,675 (1,2); 2,671 (1,6); 2,667 (1,3); 2,541 (1,5); 2,536 (202,4); 2,502 (257,5); 2,498 (200,6); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,325 (1,2); 1,711 (3,8); 1,488 (2,6); -0,001 (1,3)

Beispiel -T3-117: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,837 (3,9); 8,832 (3,9); 8,696 (5,5); 8,528 (2,3); 8,517 (2,3); 8,440 (6,7); 8,213 (3,3); 7,955 (3,9); 7,949 (3,9); 7,929 (3,4); 3,904 (3,6); 3,328 (223,0); 2,875 (0,7); 2,865 (1,0); 2,857 (1,5); 2,847 (1,5); 2,838 (1,1); 2,828 (0,7); 2,671 (1,5); 2,502 (230,7); 2,329 (1,4); 2,145 (16,0); 0,738 (0,9); 0,720 (3,6); 0,708 (3,4); 0,702 (3,0); 0,691 (1,1); 0,586 (1,2); 0,555 (3,7); 0,549 (3,6); 0,540 (3,2); 0,527 (0,9); 0,000 (1,2)

Beispiel -T3-118: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,825 (3,2); 8,820 (3,1); 8,700 (5,9); 8,438 (7,3); 8,213 (3,4); 8,037 (3,0); 8,031 (3,0); 7,930 (3,5); 7,908 (0,5); 3,904 (11,1); 3,330 (239,1); 3,022 (14,7); 2,779 (0,4); 2,764 (0,9); 2,753 (1,3); 2,743 (1,0); 2,737 (1,0); 2,723 (2,0); 2,676 (1,0); 2,671 (1,3); 2,667 (1,0); 2,542 (1,0); 2,524 (4,1); 2,511 (78,7); 2,507 (153,6); 2,502 (199,9); 2,498 (148,4); 2,382 (13,3); 2,364 (1,8); 2,333 (0,8); 2,329 (1,2); 2,325 (0,9); 2,154 (16,0); 0,817 (0,5); 0,802 (0,5); 0,755 (0,6); 0,484 (4,8); 0,466 (2,5); 0,000 (1,4)

Beispiel -T3-119: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,408 (4,7); 8,892 (3,9); 8,886 (3,9); 8,716 (5,6); 8,452 (7,3); 8,217 (2,9); 8,041 (3,8); 8,035 (3,8); 7,932 (3,0); 3,904 (9,3); 3,330 (168,1); 3,175 (1,2); 3,162 (1,1); 2,876 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,8); 2,541 (0,9); 2,511 (82,5); 2,507 (129,7); 2,502 (165,2); 2,498 (122,9); 2,333 (0,7); 2,329 (1,0); 2,325 (0,7); 2,147 (16,0); 1,612 (1,5); 1,598 (1,0); 1,581 (1,3); 1,578 (1,8); 1,312 (1,8); 1,299 (1,1); 1,292 (4,2); 1,278 (1,5); 0,000 (1,1)

Beispiel -T3-120: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,826 (1,6); 8,821 (1,6); 8,621 (4,1); 8,375 (3,7); 8,025 (1,5); 8,020 (1,6); 7,593 (4,6); 3,903 (7,8); 3,331 (239,6); 3,022 (7,6); 2,798 (0,7); 2,743 (0,9); 2,720 (1,0); 2,671 (1,1); 2,541 (0,9); 2,507 (130,2); 2,502 (168,8); 2,498 (127,0); 2,386 (6,8); 2,359 (0,9); 2,329 (1,0); 2,129 (16,0); 0,482 (2,7); 0,465 (1,4); 0,000 (1,0)

Beispiel -T3-121: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,836 (16,0); 8,460 (13,4); 8,441 (12,5); 7,871 (1,5); 7,561 (14,8); 2,909 (0,5); 2,899 (1,4); 2,890 (2,1); 2,881 (3,1); 2,871 (3,2); 2,862 (2,1); 2,853 (1,6); 2,843 (0,5); 2,469 (0,5); 2,464 (0,6); 2,460 (0,5); 2,287 (0,5); 2,263 (0,4); 2,245 (0,8); 2,226 (0,6); 2,164 (134,4); 2,128 (74,2); 2,106 (1,2); 2,102 (0,8); 2,096 (0,5); 1,976 (0,8); 1,965 (34,8); 1,959 (10,4); 1,953 (53,7); 1,947 (37,8); 1,941 (132,8); 1,935 (92,8); 1,928 (48,6); 1,829 (0,7); 1,781 (0,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,5); 1,540 (0,4); 1,470 (0,3); 1,429 (0,3); 1,320 (1,0); 1,299 (9,8); 1,135 (0,4); 0,897 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,834 (1,8); 0,821 (4,8); 0,816 (6,9); 0,803 (6,8); 0,798 (5,3); 0,786 (2,4); 0,784 (0,4); 0,746 (0,4); 0,721 (0,4); 0,710 (0,4); 0,681 (2,4); 0,669 (6,3); 0,663 (6,5); 0,659 (5,7); 0,653 (5,3); 0,641 (1,6); 0,000 (1,3)

Beispiel -T3-122: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,795 (7,1); 8,792 (7,1); 8,712 (16,0); 8,398 (7,3); 8,393 (7,2); 8,249 (14,8); 8,230 (0,4); 8,035 (5,4); 8,031 (10,0); 8,027 (5,8); 7,832 (3,6); 7,830 (4,9); 7,826 (3,7); 7,821 (2,0); 7,814 (5,0); 7,810 (5,4); 7,716 (5,3); 7,700 (3,9); 7,697 (5,2); 7,585 (0,4); 7,579 (5,8); 7,500 (9,9); 7,480 (4,3); 7,146 (1,9); 4,086 (0,4); 4,068 (1,3); 4,050 (1,3); 4,033 (0,5); 2,907 (0,8); 2,897 (1,9); 2,888 (2,8); 2,879 (4,2); 2,869 (4,1); 2,861 (2,8); 2,851 (2,0); 2,842 (0,7); 2,468 (0,7); 2,463 (0,9); 2,459 (0,7); 2,266 (0,3); 2,250 (0,4); 2,144 (668,5); 2,120 (3,2); 2,114 (4,0); 2,108 (5,1); 2,102 (3,3); 2,095 (1,7); 2,076 (0,5); 2,014 (0,5); 1,972 (7,8); 1,964 (22,3); 1,958 (55,1); 1,952 (312,9); 1,946 (568,6); 1,940 (766,2); 1,934 (526,3); 1,928 (270,3); 1,787 (0,4); 1,781 (1,7); 1,775 (3,2); 1,769 (4,4); 1,762 (3,0); 1,756 (1,5); 1,437 (5,8); 1,356 (0,3); 1,338 (0,8); 1,319 (0,4); 1,285 (0,5); 1,270 (2,2); 1,222 (1,6); 1,204 (3,0); 1,186 (1,3); 1,089 (0,9); 0,881 (0,4); 0,793 (2,2); 0,781 (6,2); 0,775 (6,7); 0,763 (8,9); 0,757 (8,5); 0,746 (3,2); 0,724 (0,5); 0,707 (0,5); 0,687 (0,5); 0,677 (0,4); 0,647 (3,3); 0,637 (6,3); 0,630 (6,0); 0,626 (7,0); 0,320 (6,8); 0,608 (2,2); 0,008 (1,7); 0,000 (60,4); -0,009 (2,1)

Beispiel -T3-123: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,894 (2,1); 8,708 (1,4); 8,439 (1,2); 8,213 (2,5); 7,984 (0,8); 7,930 (3,0); 3,904 (15,2); 3,331 (445,1); 3,174 (0,5); 3,161 (0,5); 3,121 (0,5); 2,877 (2,5); 2,675 (1,3); 2,671 (1,8); 2,667 (1,4); 2,542 (1,7); 2,506 (224,4); 2,502 (292,1); 2,498 (219,8); 2,389 (5,1); 2,333 (1,3); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 2,148 (16,0); 1,667 (1,2); 1,492 (1,5); 1,416 (0,6); 1,249 (0,4); 1,235 (0,4); 0,000 (1,8)

Beispiel -T3-124: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,836 (5,2); 8,831 (5,2); 8,756 (7,5); 8,544 (2,8); 8,534 (2,9); 8,502 (4,3); 8,488 (8,8); 8,087 (4,0); 7,952 (5,0); 7,946 (5,0); 4,467 (0,8); 4,454 (2,0); 4,440 (0,8); 4,113 (0,5); 4,100 (0,5); 3,904 (16,0); 3,507 (0,4); 3,482 (0,5); 3,468 (0,5); 3,455 (0,5); 3,395 (5,7); 3,388 (4,9); 3,381 (5,3); 3,340 (838,4); 3,174 (2,4); 3,161 (2,3); 2,886 (0,3); 2,876 (0,9); 2,867 (1,2); 2,858 (1,9); 2,848 (1,9); 2,840 (1,3); 2,830 (0,9); 2,820 (0,4); 2,676 (1,6); 2,672 (2,1); 2,667 (1,7); 2,507 (264,8); 2,503 (344,8); 2,498 (274,4); 2,334 (1,5); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 1,273 (0,4); 1,259 (0,8); 1,242 (0,8); 0,873 (0,4); 0,799 (1,2); 0,726 (3,4); 0,721 (4,8); 0,709 (4,3); 0,703 (3,7); 0,692 (1,5); 0,567 (1,5); 0,556

(4,6); 0,550 (4,3); 0,546 (4,1); 0,540 (3,8); 0,528 (1,1);; 0,008 (2,2); 0,000 (60,2); -0,008 (2,5)

Beispiel -T3-125: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 9,41 (0,0144); 8,89 (0,0123); 8,83 (0,0014); 8,77 (0,0184); 8,49 (0,0301); 8,23 (0,0012); 8,09 (0,0103); 8,03 (0,0119); 3,31 (1,0000); 2,54 (0,6709); 2,50 (0,2387); 1,59 (0,0138); 1,30 (0,0136); 0,15 (0,0007); 0,00 (0,1822); -0,006 (0,0004)

Beispiel -T3-126: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 9,406 (0,9); 8,069 (2,0); 7,667 (0,4);; 7,646 (1,1); 7,621 (0,6); 7,616 (0,6);; 7,538 (0,8); 7,533 (0,7); 6,479 (0,9);; 3,322 (20,1); 2,524 (0,4); 2,516 (0,7);; 2,511 (1,8); 2,506 (24,6); 2,502 (33,4); 2,497 (24,6); 2,493 (12,4); 1,989 (0,8); 1,608 (0,4); 1,584 (0,8); 1,567 (0,9); 1,574 (0,4); 1,398 (16,0); 1,291 (0,4); 1,278 (0,7); 1,271 (0,8); 1,257 (0,3); 1,175 (0,5); 0,008 (0,6); 0,000 (18,5);; -0,009 (0,7)

Beispiel -T3-127: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,850 (5,1); 8,845 (5,4); 8,692 (9,2);; 8,530 (3,1); 8,520 (3,2); 8,484 (9,2);; 8,273 (16,0); 7,973 (5,1); 7,967 (5,3); 4,105 (0,5); 4,091 (0,5); 3,903 (5,0); 3,329 (87,9); 3,175 (1,9); 3,162 (1,8); 2,877 (0,8);; 2,868 (1,2); 2,859 (1,9); 2,849 (1,9); 2,840 (1,3); 2,831 (0,9); 2,820 (0,3);; 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,507 (79,2);; 2,502 (111,9); 2,463 (0,7); 2,334 (0,5); 2,329 (0,6); 0,740 (1,1); 0,727 (3,5); 0,722 (4,8); 0,710 (4,4); 0,704 (4,0);; 0,693 (1,5); 0,571 (1,5); 0,561 (4,3); 0,555 (4,7); 0,551 (4,6); 0,545 (4,2); 0,533 (1,1); 0,000 (0,4)

Beispiel -T3-128: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,840 (3,6); 8,835 (3,5); 8,698 (8,9); 8,465 (8,7); 8,272 (15,4); 8,058 (3,3); 8,053 (3,4);; 7,922 (3,5); 3,903 (5,1); 3,328 (66,8); 3,175 (1,0); 3,162 (1,0); 3,026 (16,0); 2,891 (0,3); 2,784 (0,4); 2,767 (0,9); 2,756 (1,4); 2,746 (1,0); 2,721 (1,9); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,542 (0,7); 2,511 (37,1); 2,507 (71,3); 2,503 (93,3); 2,498 (71,7); 2,395 (14,5); 2,369 (1,9); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4);; 0,819 (0,5);; 0,803 (0,5); 0,758 (0,6); 0,481 (5,4); 0,463 (2,8); 0,000 (0,4)

Beispiel -T3-129: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 9,412 (6,2); 8,906 (4,7); 8,900 (5,0); 8,710 (9,0); 8,478 (8,5); 8,276 (16,0); 8,063 (4,7); 8,058 (4,9); 3,903 (5,3); 3,434 (0,4); 3,334 (71,6); 3,168 (3,4); 2,872 (0,8); 2,520 (27,6); 2,507 (94,6); 2,503 (122,2); 2,499 (100,6);; 2,329 (0,7); 1,612 (1,9); 1,598 (5,2); 1,591 (5,7); 1,578 (2,3); 1,317 (2,3); 1,304 (5,3); 1,297 (5,3); 1,283 (1,9); 0,000 (0,4)

Beispiel -T3-130: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,821 (3,6); 8,815 (3,5); 8,760 (6,9); 8,499 (4,1); 8,484 (9,5); 8,085 (3,9); 8,046 (3,3); 8,040 (3,3); 7,911 (0,5); 3,904 (10,2); 3,327 (87,7); 3,176 (0,7); 3,163 (0,7); 3,025 (16,0); 2,779 (0,4); 2,768 (0,8); 2,762 (0,9); 2,753 (1,5); 2,742 (1,1); 2,736 (1,1); 2,724 (2,2); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (2,4); 2,512 (41,2); 2,507 (81,2); 2,503 (106,8); 2,498 (80,2); 2,494 (41,1); 2,398 (14,3); 2,369 (1,8); 2,334 (0,5);; 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 0,820 (3,5); 0,803 (0,5); 0,757 (0,6); 0,485 (4,9); 0,467 (2,7); 0,000 (0,5)

Beispiel -T3-131: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,891 (3,3); 8,768 (2,3); 8,499 (5,4); 8,485 (2,0); 8,085 (4,9); 7,990 (1,3);; 3,903 (16,0); 3,327 (119,4); 3,175 (0,8); 3,162 (0,9); 3,122 (0,7); 2,879 (3,8); 2,676 (0,7); 2,672 (1,0); 2,667 (0,8); 2,542 (0,7); 2,525 (3,3); 2,511 (51,8); 2,507 (121,8); 2,503 (160,9); 2,498 (122,6); 2,494 (64,2); 2,396 (8,3); 2,334 (0,8); 2,329 (1,0); 2,325 (0,8); 1,586 (1,8); 1,497 (2,2); 1,420 (0,8);; 0,000 (0,7)

Beispiel -T3-132: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,907 (3,3); 8,699 (3,2); 8,461 (1,9); 8,269 (16,0); 8,002 (1,1); 4,088 (0,5); 4,075 (0,5); 3,311 (245,5); 3,269 (0,3); 3,175 (2,1); 3,162 (2,1); 3,123 (0,6); 2,675 (3,1); 2,710 (0,5); 2,674 (0,4); 2,670 (0,5); 2,540 (120,7); 2,505 (48,3);; 2,501 (64,0); 2,497 (45,6); 2,464 (0,3);; 2,396 (8,6); 2,367 (0,8); 2,328 (0,5); 2,323 (0,4); 1,686 (1,6); 1,495 (2,0); 1,431 (0,6); 1,423 (0,8); 0,146 (0,4); 0,008 (3,2); 0,000 (89,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-133: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,822 (3,7); 8,817 (3,4); 8,750 (9,7); 8,470 (9,1); 8,094 (15,1); 8,040 (3,3); 8,035 (3,3);; 7,905 (3,4); 3,371 (86,3); 3,287 (0,3); 3,026 (16,0); 2,781 (0,4); 2,765 (1,0); 2,754 (1,5); 2,743 (1,1); 2,738 (1,1); 2,727 (1,6); 2,711 (0,7); 2,555 (3,4); 2,554 (0,5); 2,553 (0,6); 2,552 (0,7); 2,550 (0,8); 2,549 (1,0); 2,540 (89,5); 2,529 (0,7); 2,528 (0,6); 2,527 (0,6); 2,525 (0,6); 2,524 (0,6); 2,523 (0,6); 2,522 (0,6); 2,510 (12,1); 2,505 (23,8); 2,501 (31,3); 2,497 (21,3); 2,492 (9,9); 2,395 (14,5); 2,371 (1,7); 0,819 (0,4); 0,804 (0,5); 0,755 (0,6); 0,482 (5,8);; 0,164 (3,0);; 0,013 (0,3); 0,011 (0,4); 0,008 (2,1); 0,007 (1,4); 0,000 (61,1); -0,006 (1,7); -0,009 (2,2); -0,013 (0,4); -0,014 (0,3)

Beispiel T3 134: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,823 (4,4); 8,427 (4,3); 8,403 (0,4); 8,263 (1,3); 8,242 (1,6); 8,112 (7,9); 8,071 (2,1); 8,050 (1,8); 7,818 (2,7); 7,813 (2,7); 7,760 (1,6); 7,755 (1,5); 7,747 (1,0); 7,739 (1,8); 7,734 (1,5); 7,724 (0,9); 7,560 (1,0); 7,553 (2,6); 7,540 (1,0); 7,532 (2,1); 3,327 (28,9); 3,321 (6,8);; 3,015 (1,5); 2,766 (0,4); 2,756 (0,8);; 2,748 (1,0); 2,740 (1,3); 2,730 (1,2); 2,716 (2,7); 2,676 (0,4); 2,673 (0,4); 2,507 (45,7); 2,503 (53,0); 2,499 (41,0); 2,330 (0,4); 2,076 (16,0); 2,068 (2,0); 1,270 (0,4); 0,820 (0,4); 0,812 (0,4); 0,804 (0,4); 0,757 (0,5); 0,748 (0,5); 0,559 (2,6); 0,551 (2,5);; 0,503 (0,4); 0,472 (2,1); 0,455 (2,2); 0,000 (51,7); -0,009 (7,9)

Beispiel -T3-135: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,547 (0,5); 8,505 (10,0); 8,454 (9,8); 8,448 (8,1); 8,442 (4,1); 8,281 (10,0); 8,068 (16,2); 7,686 (6,9); 7,680 (6,8); 3,568 (0,4); 3,410 (4,1); 3,394 (11,2); 3,378 (4,3); 3,309 (165,8); 3,286 (0,7); 2,832 (0,3); 2,822 (0,9); 2,812 (1,3); 2,804 (2,0); 2,794 (2,3); 2,785 (1,3); 2,776 (0,9); 2,765 (0,4); 2,710 (0,9); 2,674 (0,5); 2,669 (0,6);; 2,665 (0,5); 2,560 (0,6); 2,540 (226,8); 2,523 (1,6); 2,509 (31,4); 2,505 (80,7); 2,500 (78,7); 2,496 (53,0); 2,492 (24,2); 2,366 (0,8); 2,332 (0,4); 2,327 (0,6); 2,323 (0,4); 1,887 (4,2); 1,871 (11,1); 1,854 (3,9); 1,235 (0,4); 0,704 (1,4); 0,691 (3,7); 0,686 (5,2); 0,674 (4,8); 0,668 (4,0); 0,657 (1,7); 0,547 (1,8); 0,536 (5,3); 0,530 (4,6); 0,526 (4,3); 0,520 (4,2); 0,508 (1,3); 0,146 (0,5); 0,008 (4,2); 0,000 (120,8); -0,008 (4,5); -0,150 (0,5)

Beispiel -T3-136: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,510 (2,6); 8,502 (7,1); 8,497 (6,4);; 8,441 (8,5); 8,259 (8,4); 8,129 (2,2);; 8,117 (2,5); 8,108 (1,0); 8,088 (5,7);; 8,080 (16,0); 4,467 (1,4); 4,453 (4,0); 4,439 (1,3); 4,111 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (15,8);; 3,804 (0,4); 3,483 (0,4); 3,470 (0,5); 3,455 (0,4); 3,395 (8,9); 3,388 (7,6);; 3,381 (9,5);; 3,338 (810,3);; 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,953 (0,4); 2,932 (11,5); 2,920 (11,5); 2,847 (0,4); 2,837 (0,9); 2,829 (1,3); 2,819 (1,9); 2,810 (1,9); 2,801 (1,3); 2,792 (0,9); 2,783 (0,4); 2,671 (2,2); 2,616 (0,3); 2,506 (260,6); 2,502 (354,5); 2,498 (275,8); 2,329 (2,2); 1,234 (0,6); 0,873 (0,6); 0,854 (0,5); 0,742 (1,0); 0,724 (4,4); 0,711 (4,1); 0,706 (3,6); 0,694 (1,4); 0,587 (1,5); 0,576 (4,6); 0,570 (4,4); 0,561 (3,8); 0,548 (1,1); 0,000 (48,0)

Beispiel -T3-137: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d$_6$-DMSO):;
δ= 8,543 (6,9); 8,537 (7,0); 8,455 (8,0);; 8,364 (2,9); 8,356 (3,0); 8,268 (8,1);; 8,118 (4,5); 8,113 (4,5); 8,083 (13,0); 4,467 (0,5); 4,453 (1,5); 4,439 (0,6); 4,112 (0,4); 4,099 (0,4); 3,904 (16,0); 3,493 (0,3);; 3,469 (0,4); 3,433 (0,5); 3,407 (0,8); 3,395 (4,1); 3,388 (3,4); 3,381 (4,6);; 3,338 (731,2);; 3,174 (1,7); 3,161 (1,6); 2,955 (0,8); 2,852 (0,8);; 2,841 (1,2); 2,835 (1,8);; 2,826 (2,0); 2,819 (2,0); 2,809 (2,0); 2,800 (2,0);

2 791 (1,8); 2,782 (1,2); 2,772 (0,8); 2,675 (1,4); 2,672 (1,5); 2,667 (1,5); 2,507 (235,5); 2,502 (302,0); 2,498 (229,6); 2,333 (1,4); 2,329 (1,8); 2,325 (1,4); 1,237 (0,4); 0,873 (0,4); 0,854 (0,3); 0,765 (1,1); 0,753 (3,5); 0,748 (4,4); 0,736 (5,1); 0,731 (4,0); 0,718 (5,1); 0,708 (3,9); 0,700 (3,5); 0,689 (1,4); 0,582 (1,4); 0,571 (4,3); 0,565 (4,0); 0,556 (3,5); 0,544 (1,0); 0,466 (1,3); 0,455 (4,0); 0,450 (4,1); 0,445 (4,0); 0,440 (3,9); 0,428 (1,1); 0,000 (39,5)

Beispiel -T3-138: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,524 (1,8); 8,515 (1,9); 8,487 (3,8); 8,482 (3,9); 8,443 (0,4); 8,432 (1,1); 8,419 (1,9); 8,405 (1,0); 8,274 (0,4); 8,262 (6,3); 8,120 (4,0); 8 114 (3,8); 8,081 (10,3); 4,459 (0,7); 3,904 (16,0); 3,606 (1,0); 3,592 (3,0); 3,579 (3,7); 3,566 (1,8); 3,523 (3,7); 3,51 (4,9); 3 498 (1,9); 3,472 (0,5); 3,449 (0,3); 3,395 (2,5); 3,387 (2,3); 3,381 (2,9); 3,339 (556,7); 3,299 (28,1); 3,286 (1,6); 3,262 (0,8); 3,256 (0,7); 3,174 (0,9); 3,13 (0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,9); 2,822 (1,3); 2,812 (1,4); 2,804 (0,9); 2,795 (0,6); 2,678 (1,4); 2,672 (2,0); 2,367 (1,4); 2,507 (219,1); 2 503 (282,2); 2 498 (210,9); 2,334 (1,2); 2,329 (1,7); 2,325 (1,3); 1,235 (0,5); 0,747 (0,8); 0,734 (2,3); 0,729 (3,2); 0,717 (2,9); 0,711 (2,6); 0 700 (1,0); 0,589 (1,1); 0,579 (3 3); 0,573 (3,0); 0,569 (3,0); 0,563 (2,7); 0,551 (0,9); 0,008 (1,7); 0,000 (45,2); -0,008 (1,8)

Beispiel -T3-139: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 9,474 (2,4); 8,837 (1,9); 8,831 (2,1); 8,602 (3,2); 8,355 (3,4); 7,970 (2,0); 7,965 (2,2); 7,596 (4,3); 4,467 (0,4); 4,453 (1,0); 4,440 (0,4); 3,904 (5,3); 3,423 (0,3); 3,395 (2,3); 3,387 (2,3); 3,381 (2,8); 3,340 (340,7); 3,174 (0,4); 3,161 (0,4); 3,063 (0,6); 2,880 (0,6); 2,672 (0,9); 2 666 (0,7); 2,507 (107,5); 2,503 (142,8); 2 498 (118,4); 2,329 (1,2); 2,325 (1,2); 2,312 (0,8); 2,299 (0,6); 2 292 (0 5); 2,110 (16,0); 1,615 (0,8); 1,601 (2,0); 1,594 (2,3); 1,58 (1,0); 1,324 (0,9); 1,310 (2,1); 1,304 (2,3); 1,289 (0,8); 1,257 (0,4); 1,243 (0,4); 1,168 (0,4); 0,993 (2,1); 0,982 (3,3); 0,962 (1,9); 0,000 (10 4)

Beispiel -T3-140: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,785 (2,0); 8,780 (1,9); 8,595 (1,3); 8,584 (4,5); 8,345 (3,4); 7,890 (2,0); 7,885 (1,9); 7,594 (4,2); 4,455 (0,3); 3,904 (3,2); 3,406 (0,5); 3 394 (1,3); 3,382 (1,7); 3,342 (322,7); 3,174 (0,4); 3,162 (0,4); 2,892 (0,5); 2,883 (0,7); 2,873 (0,7); 2,865 (0,5); 2,855 (0,4); 2 672 (0,7); 2,503 (110,1); 2,352 (0,4); 2,345 (0,5); 2,334 (1,3); 2,314 (0,5); 2,171 (16,0); 0,573 (1,9); 0,961 (1,8); 0,951 (1,9); 0,931 (1,6); 0,740 (0,4); 0 723 (1,7); 0,710 (1,7); 0,705 (1,4); 0,694 (0,8); 0,582 (0,6); 0,571 (1,8); 0,564 (1,8); 0,555 (1,5); 0,543 (0,4); 0,000 (8,3)

Beispiel -T3-141: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 9,093 (2,2); 8,668 (2,1); 8,662 (2,2); 8,577 (3,2); 8,327 (3,3); 8,314 (2,3); 8,308 (2,2); 7,593 (3,6); 3,969 (10,4); 3,904 (3,5); 3,409 (0,5); 3,343 (332,3); 3,285 (0,3); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,668 (0,6); 2,525 (2,4); 2,512 (45,6); 2,507 (89,1); 2,503 (116,0); 2,498 (87,1); 2,334 (0,5); 2,330 (0,7); 2,325 (0,5); 2 121 (16,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,0); 1,581 (2,2); 1 567 (0,9); 1,305 (1,0); 1,292 (2,1); 1,286 (2,2); 1,271 (0,8); 0,008 (0,4); 0,000 (11,6); -0,008 (0,5)

Beispiel -T3-142: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,767 (2,0); 8,562 (3,2); 8,343 (3,2); 7,948 (2,0); 7,851 (0,3); 7,391 (5,1); 4,454 (0,8); 3,904 (4,5); 3,387 (3,9); 3,341 (346,8); 3,218 (0,4); 3,175 (0,5); 3,162 (0,4); 3,043 (7,9); 2,791 (1,0); 2,781 (0,9); 2,766 (1,5); 2,672 (1,0); 2,503 (159,1); 2,330 (1,0); 2,122 (16,0); 1,926 (0,6); 1,915 (0,9); 1,901 (0,7); 1,882 (0,4); 0,992 (1,5); 0,961 (2,3); 0,943 (2,0); 0,824 (0,4); 0,809 (0,4); 0,764 (0,5); 0,540 (2,1); 0,482 (1,7); 0,467 (1,6); 0,000 (14,7)

Beispiel -T3-143: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,608 (2,1); 8,602 (2,1); 8,556 (3,2); 8,308 (3,3); 8,268 (1,0); 8,256 (1,0); 8,227 (2,2); 8,221 (2,1); 7,590 (3,9); 3,948 (10,3); 3,904 (3,5); 3 395 (0,9); 3,343 (295,8); 3,175 (0,5); 2,873 (0,3); 2,863 (0,5); 2,855 (0,7); 2,845 (0,7); 2,837 (0,5); 2,827 (0,3); 2,676 (0,5); 2 672 (0,7); 2 668 (0,5); 2,507 (88,5); 2,503 (112,5); 2,498 (84,8); 2,334 (0,5); 2,329 (0 7); 2,325 (0,5); 2 120 (16,0); 0,740 (0,4); 0,727 (1,3); 0,722 (1,8); 0,709 (1,6); 0,704 (1,4); 0,692 (0,6); 0,580 (0,6); 0,570 (1,8); 0,564 (1,7); 0,554 (1,4); 0,542 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (14,6)

Beispiel -T3-144: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,563 (2,0); 8,556 (2,0); 8,526 (3,6); 8,307 (3,3); 8,005 (1,9); 7,999 (2,0); 7,590 (4,6); 4,468 (0,3); 4,454 (0,8); 4,440 (0,3); 3,915 (9,6); 3,904 (7,4); 3,425 (0,4); 3,395 (2,6); 3,388 (2,3); 3,38 (3,0); 3,341 (345,9); 3,282 (0,4); 2,981 (8,7); 2,748 (0,5); 2,738 (0,8); 2,724 (0,6); 2,711 (0,3); 2,700 (0,9); 2,676 (0,7); 2,672 (0,9); 2,668 (0,8); 2,507 (111,1); 2,503 (144,6); 2,499 (113,9); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,127 (16,0); 0,466 (3,1); 0,449 (1,7); 0,000 (11,3)

Beispiel -T3-145: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,848 (0,6); 8,841 (0,8); 8,835 (4,1); 8,829 (4,2); 8,781 (6,9); 8,537 (7,1); 8,316 (0,4); 8,283 (13,4); 8,274 (4,6); 8,257 (0,6); 8,251 (0,5); 3,424 (0,3); 3,409 (0,3); 3,398 (0,4); 3,387 (0,3); 3,37 (0,4); 3,324 (185,3); 2,776 (0,4); 2,764 (0,8); 2,759 (0,9); 2,750 (1,6); 2,739 (1,0); 2,733 (0,9); 2,722 (0,5); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,1); 2,524 (4,5); 2,506 (173,0); 2,502 (225,3); 2,497 (167,2); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,398 (16,0); 1,238 (4,1); 1,220 (8,5); 1,202 (3,9); 1,120 (0,5); 1 102 (1,0); 1,085 (0,5); 0,951 (0,4); 0,935 (0,5); 0,577 (2,8); 0,549 (2,5); 0,532 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,2); 0,000 (188,0); -0,008 (8,4); -0,150 (0,9)

Beispiel -T3-146: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 10,752 (3,5); 8,900 (3,6); 8,894 (3,7); 8,803 (5,3); 8,57 (5,2); 8,570 (5,2); 8,393 (3,7); 8,387 (3,6); 8,284 (8,3); 8,283 (8,3); 8,028 (4,8); 7 502 (4,8); 7,501 (5,0); 5,756 (5,9); 4,056 (10,5); 4 036 (1,6); 4,020 (1,6); 4,002 (0,5); 3,837 (16,0); 3,324 (33,1); 2,67 (0,4); 2 524 (1,0); 2,520 (1,4); 2,511 (20,1); 2,507 (41,3); 2,502 (54,9); 2,497 (40,1); 2,493 (19,7); 2,329 (0,4); 1,989 (6,9); 1,183 (1,9); 1,175 (3,8); 1,157 (1,9); 0,008 (1,9); 0,000 (38,8); -0,009 (2,2)

Beispiel -T3-147: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,999 (3,5); 8,993 (3,6); 8,778 (6,5); 8,499 (6,5); 8,384 (3,5); 8,378 (3,5); 8,279 (10,7); 5,757 (1,1); 4,384 (1,6); 4,363 (5,0); 4,348 (5,1); 4 331 (1,7); 3,994 (0,5); 3,324 (128,6); 2,714 (16,0); 2,675 (0,9); 2,671 (1,3); 2 666 (1,0); 2,524 (3,3); 2,511 (69,0); 2,506 (138,7); 2,502 (184,5); 2,498 (139,2); 2,333 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 1,989 (0,7); 1,377 (5,4); 1,360 (11,3); 1,342 (5,4); 1,234 (0,5); 1,175 (0,4); 0 146 (0,9); 0,008 (6,9); 0,000 (189,8); -0,150 (0,9)

Beispiel -T3-148: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,344 (1,0); 8,280 (2,1); 8,179 (2,0); 8,138 (1,9); 8,094 (1,0); 7,688 (1,2); 7,683 (1,6); 7,655 (0,9); 7,650 (0,6); 7,634 (1,0); 7,629 (0,8); 7,474 (1,5); 7,454 (1,2); 6,895 (0,4); 6,892 (0,4); 2,860 (0,4); 2,851 (0 6); 2,842 (0,6); 2,833 (0,4); 2,132 (17,4); 2,107 (0 3); 1,994 (1,5); 1,958 (3,8); 1,952 (20,1); 1,946 (36,2); 1,940 (18,4); 1,933 (33,3); 1,927 (17,3); 1,437 (16,0); 0,781 (1,0); 0,776 (1,2); 0,763 (1,3); 0,758 (0,9); 0,746 (0,4); 0,371 (0,4); 0,601 (1,1); 0,594 (1,2); 0,590 (1,0); 0,584 (1,0); 0,000 (2,5)

Beispiel -T3-149: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 18,228 (0,3); 18,070 (0,4); 11,873 (0 3); 9,464 (0,4); 9,435 (13,6); 9,407 (0,4); 9,265 (9,2); 9,186 (16,0); 8,869 (9,9); 8 544 (15,8); 8,314 (0,4); 8,316 (1,1); 8,148 (0,4); 8,012 (0,4); 7,945 (12,0); 7,931 (6,4); 7,910 (8,2); 7,905 (5,4); 7,850 (3,4); 7,843 (0,4); 7,839 (0,4); 7,702

(0,4); 7,639 (0,4); 7,582 (9,8); 7,55[illegible] (9,0); 7,543 (0,4); 3,637 (0,4); 3,591 (0,4); 3,572 (0,4); 3,547 (0,4); 3,535 (0,6); 3,512 (0,5); 3,469 (0,6); 3,434 (0,9); 3 392 (2,8); 3,344 (1318,4); 3,339 (765,9); 3,331 (992 7); 3,218 (1,0); 3,2[illegible]1 (0,9); 3,178 (0,5); 3,121 (0,3); 3,058 (0,3); 2,731 (0,4); 2,671 (5,7); 2,638 (0,4); 2,584 (0,4); 2,506 (689,3); 2,502 (847,8); 2,417 (1,1); 2,381 (0,8); 2,333 (4,7); 2,328 (5,7); 2,288 (0,4); 2,283 (0,4); 1,658 (0,3); 1,620 (4,0); 1,606 (11,5); 1,599 (12,3); 1,586 (5,4); 1,546 (0,6); 1,469 (0,4); 1,370 (0,3); 1,350 (0,7); 1,310 (5,0); 1 296 (11,9); 1,290 (12,3); 1,275 (4,4); 1,237 (0,5); 0,146 (2,0); 0,000 (404,8); -0,150 (2,2); -3 146 (0,3)

Beispiel -T3-150: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,265 (5,5); 9,179 (0,4); 9,141 (12,1); 9,086 (0,6); 8,838 (5,9); 8,863 (6,0); 8 554 (0,6); 8,536 (16,0); 8,525 (4,5); 8,504 (0,7); 8,316 (0,8); 8,292 (0,4); 7,872 (14,1); 7,866 (7,0); 7,855 (6,0); 7,850 (3,3); 7,539 (0,3); 7,534 (7,4); 7,527 (1,7); 7,518 (1,6); 7,511 (6,7); 3,568 (0,6); 3,468 (0,4); 3,455 (0,4); 3,444 (0,5); 3,341 (576,1); 3,339 (580,5); 3,331 (552,2); 2,875 (0,5); 2,864 (1,2); 2,855 (1,6); 2,846 (2,6); 2 836 (2,6); 2,828 (1,7); 2,818 (1,3); 2,807 (0,5); 2,675 (2,6); 2,672 (3,7); 2 667 (2,8); 2,662 (1,4); 2,580 (0,4); 2,525 (9,0); 2,520 (13,1); 2 511 (197,7); 2,507 (411,4); 2,502 (559,2); 2,498 (423,2); 2 493 (212,8); 2,488 (0,5); 2,334 (2,7); 2,329 (3,7); 2 325 (2,7); 0 736 (1,7); 0,724 (4,5); 0,718 (3,6); 0,706 (6,1); 0,700 (5,1); 0,689 (2,3); 0,650 (0,3); 0,608 (0,4); 0,578 (2,2); 0,568 (6,4); 0,562 (5,7); 0,558 (5,5); 0,552 (5,2); 0,540 (1,7); 0,146 (1,7); 0,030 (0,4); 0,024 (0,4); 0,017 (0,6); 0,008 (12,6); 0,000 (401,4); -0,009 (15,0); -0,150 (1,7)

Beispiel -T3-151: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,444 (12,0); 9,048 (16,0); 8,890 (7,0); 8,886 (7,3); 8,610 (8,1); 8,605 (7,8); 8,506 (15,9); 8,495 (0,3); 8,317 (4,4); 7,899 (6,5); 7,894 (13,4); 7,885 (2,5); 7,870 (6,7); 7,865 (4,8); 7,579 (9,1); 7,559 (8,2); 3,410 (0,4); 3,383 (0,7); 3,364 (1,2); 3,327 (1576,2); 3,293 (1,2); 2,694 (0,5); 2,675 (8,0); 2,671 (11,2); 2,667 (8,3); 2,643 (0,4); 2,530 (0,4); 2,523 (0,5); 2,399 (0,7); 2,524 (28,8); 2,520 (43,4); 2,511 (564,8); 2,507 (1217,9); 2,502 (1623,1); 2,498 (1195,4); 2,493 (589,7); 2,419 (0,6); 2,339 (3,7); 2,333 (7,9); 2,329 (11,1); 2,324 (8,1); 2,320 (4,0); 1 620 (3,9); 1,606 (9,5); 1,599 (10,3); 1,586 (4,4); 1,546 (0,4); 1,342 (0,4); 1,303 (4,6); 1 289 (9,5); 1,282 (10,2); 1,268 (3,8); 1,234 (0,6); 1,148 (0,9); 0,146 (8,7); 0,049 (0,4); 0,039 (3,7); 0,008 (63,6); 0,000 (1893,8); -0,009 (67,7); -0,035 (1,3); -0,045 (0,8); -0,088 (0,3); -0,150 (8,7)

Beispiel -T3-152: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,046 (3,6); 9,022 (16,0); 8,893 (8,5); 8,608 (9,0); 8,604 (8,5); 8,543 (6,0); 8,532 (6,0); 8,515 (3,9); 8,496 (15,9); 8,453 (0,3); 8,317 (2,0); 7,901 (0,4); 7,896 (0,4); 7,828 (8,8); 7,823 (11,4); 7,818 (11,0); 7,812 (8,2); 7,682 (0,3); 7,532 (8,5); 7,521 (2,4); 7,510 (7,5); 3,508 (0,4); 3,327 (1034,9); 3,230 (3,5); 3,210 (0,4); 2,671 (0,7); 2,664 (1,6); 2,654 (2,4); 2,646 (3,5); 2,636 (3,5); 2,627 (2,5); 2,617 (1,7); 2,607 (0,6); 2,671 (6,3); 2,522 (0,7); 2,508 (0,8); 2,506 (980,0); 2,502 (1178,0); 2,329 (8,1); 2,297 (0,4); 2,287 (0,3); 1,236 (0,7); 1,148 (0,6); 0 735 (2,2); 0,717 (3,7); 0,705 (3,5); 0,699 (7,0); 0,688 (2,9); 0,686 (0,5); 0,648 (0,4); 0,615 (0,3); 0,603 (0,4); 0,574 (3,0); 0,563 (9,1); 0 556 (9,0); 0,548 (7,5); 0,535 (2,1); 0,525 (0,5); 0,488 (0,3); 0,146 (5 2); 0,000 (1050,7); -0,150 (5,5)

Beispiel -T3-153: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,441 (7,1); 9,380 (9,1); 8,960 (4,8); 8,954 (5,0); 8,941 (9,2); 8,581 (3,9); 8,577 (3,9); 8,317 (0,9); 8,166 (7,1); 8,002 (5,1); 7,997 (3,5); 7,968 (3,3); 7,963 (2,5); 7,948 (3,5); 7,942 (3,0); 7,569 (6,2); 7,568 (5,7); 3,430 (0,6); 3,411 (1,9); 3,393 (2,3); 3,378 (2,6); 3,358 (2,8); 3 328 (240,7); 2,950 (0,6); 2,932 (2,1); 2,913 (2,4); 2,898 (2,1); 2,880 (1,9); 2,862 (0,5); 2,676 (1,9); 2,671 (2,7); 2,667 (2,0); 2 542 (1,0); 2 525 (6,6); 2,520 (10,2); 2,511 (145,4); 2,507 (298,8); 2,502 (396,9); 2,498 (292,6); 2 493 (144,6); 2,334 (1,9); 2,329 (2,6); 2 325 (1,9); 2,320 (1,0); 2,075 (0,6); 1,908 (0,5); 1,627 (2,3); 1,613 (5,6); 1,606 (6,0); 1,593 (2,7); 1,314 (2,6); 1,301 (5,6); 1,294 (5,9); 1,279 (2,3); 1,106 (7,4); 1,088 (16,0); 1,069 (7,2); 0,146 (2,3); 0,008 (17,1); 0,000 (509,3); -0,009 (19,8); -0,031 (0,4); -0,034 (0,4); -0,150 (2,3)

Beispiel -T3-154: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,448 (6,4); 9,231 (4,3); 9,226 (4,3); 9 186 (8,2); 8,634 (4,2); 8,629 (4,2); 8,596 (8,2); 8,317 (3,6); 7,954 (4,3); 7,949 (6,0); 7,934 (3,1); 7,929 (2,0); 7,913 (3,2); 7,908 (2,5); 7,595 (5,2); 7,574 (4,7); 4,152 (1,7); 4,133 (5,6); 4,115 (5,6); 4,096 (1,8); 3,459 (0,4); 3,445 (0,3); 3 436 (0,3); 3,328 (1348,5); 2,894 (0,4); 2,673 (6,7); 2,671 (9,0); 2,667 (6,9); 2,629 (0,5); 2,620 (0,5); 2,524 (24,4); 2,506 (1009,7); 2,502 (1305,6); 2,498 (989,2); 2,405 (0,6); 2,389 (0,6); 2,333 (6,4); 2,329 (8,7); 2,325 (6,5); 1,623 (2,1); 1,608 (5,2); 1,602 (5,6); 1,589 (2,4); 1 575 (0,5); 1,326 (6,4); 1,308 (16 0); 1 288 (1,7); 1,274 (2,1); 1,258 (0,6); 1,247 (0,5); 1,236 (0,7); 1,158 (0,5); 1,147 (0,4); 1 068 (0,8); 0,146 (6,9); 0,008 (62,7); 0,000 (1428,7); -0,009 (0,5); -0,080 (0,4); -0,107 (0,4); -0,150 (7,0)

Beispiel -T3-155: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,345 (0,9); 8,192 (1,8); 8,153 (1,5); 8,094 (0,9); 7,738 (1,0); 7,732 (1,3); 7,726 (0,6); 7,700 (0,5); 7,685 (0,7); 7,680 (0,6); 7,583 (0,4); 7,507 (1,1); 7,486 (0,9); 2,144 (6,2); 2,114 (0,5); 2,108 (0,4); 1,972 (1,1); 1,964 (1,1); 1,958 (2,8); 1,952 (14,4); 1,946 (26,2); 1,940 (35,3); 1 934 (25,1); 1,928 (13,6); 1,596 (0,5); 1,582 (1,3); 1,575 (1,3); 1,561 (0,7); 1,437 (16 0); 1,362 (0,6); 1,349 (1,3); 1,342 (1,4); 1,327 (0,5); 1,204 (0,5); 0,146 (0,8); 0,008 (7,0); 0,000 (147,1); -0,008 (10,2); -0,150 (0,7)

Beispiel -T3-156: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,077 (8,4); 9,076 (8,4); 8,593 (4,1); 8 589 (4,2); 8,540 (3,1); 8,529 (3,2); 8,471 (8,5); 8,469 (8,4); 8,317 (0,7); 8,019 (4,1); 8,015 (4,0); 7 848 (1,5); 7,843 (5,5); 7,839 (7,4); 7,834 (5,9); 7,826 (4,6); 7,820 (2,2); 7,526 (5,7); 7,517 (1,0); 7,513 (0 9); 7,504 (5,1); 3,328 (238,4); 3,109 (1,9); 3,091 (3,4); 3,072 (6,5); 3,054 (2,0); 2,874 (0,4); 2,864 (0,9); 2,854 (1,2); 2,846 (1,9); 2,836 (2,0); 2,827 (1,2); 2,818 (1,0); 2 808 (0,4); 2,676 (1,5); 2,671 (2,2); 2,667 (1,6); 2,662 (0,8); 2,525 (5,6); 2,520 (8,4); 2,511 (110,7); 2,507 (227,2); 2,502 (302,7); 2,498 (222,3); 2,493 (109,6); 2,338 (0,6); 2,334 (1,4); 2,329 (1,9); 2,324 (1,4); 2,320 (0,7); 1,368 (1,0); 1,235 (8,0); 1,217 (16,0); 1,198 (7,0); 0 736 (1,2); 0,723 (3,4); 0,718 (4,9); 0,706 (4,5); 0,700 (3,8); 0,688 (1,6); 0,577 (1,6); 0,566 (4,8); 0,560 (4,3); 0,556 (4,1); 0,550 (3,9); 0,538 (1,2); 0,146 (0,6); 0,008 (4 5); 0,000 (140 4); -0,009 (5,1); -0,150 (0,6)

Beispiel -T3-157: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,389 (0,4); 9,355 (9,8); 8,994 (5 4); 8,959 (5,4); 8,642 (0,5); 8,627 (9 7); 8,577 (4,7); 8,540 (3,8); 8,529 (3,8); 8,317 (1,2); 7,913 (12,3); 7,893 (4,1); 7,887 (2,8); 7,541 (4,9); 7,520 (4,4); 4,038 (0,9); 4,020 (0,8); 4,002 (0,4); 3,454 (0,4); 3,425 (0,9); 3,406 (2,4); 3,387 (2,9); 3,372 (3,7); 3,353 (5,7); 3,329 (694,0); 2,952 (0,7); 2,934 (2,2); 2,915 (2,5); 2,900 (2,2); 2,882 (2,0); 2,864 (1,6); 2,855 (1,6); 2,846 (2,3); 2 836 (2,3); 2,827 (1,6); 2,818 (1,1); 2,807 (0,5); 2,676 (3,2); 2,671 (4,1); 2,667 (3,2); 2,507 (462,3); 2,502 (588,8); 2,498 (442,8); 2,333 (2,8); 2,329 (3,8); 2,325 (2,8); 1 989 (3,4); 1,398 (1,9); 1,234 (0,7); 1,193 (1,0); 1,175 (1,8); 1,157 (0,9); 1 099 (7,6); 1,081 (16,0); 1,063 (7,3); 0,741 (1,3); 0,728 (4,0); 0,723 (5,4); 0,711 (5,1); 0,705 (4,3); 0,394 (1,7); 0,583 (1,9); 0,573 (5,3); 0,566 (5,3); 0,557 (4,5); 0,545 (1,3); 0,146 (0,3); 0,008 (3,2); 0,000 (63,6)

Beispiel -T3-158: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,234 (1,8); 9,229 (1,6); 9,165 (3,1); 8,632 (1,8); 8,627 (1,6); 8,584 (3,2); 8,547 (1,2); 8,536 (1,2); 7,875 (4,5); 7,871 (1,9); 7,857 (1,5); 7 852 (0,9); 7,548 (1,5); 7,543 (0,7); 7,529 (0,6); 7,525 (1,4); 4,151 (0 7); 4 132 (2,2); 4,114 (2,2); 4,095 (0,7); 3,329 (71 4); 2,887 (0,3); 2,857 (0,4); 2,849 (0,7); 2,839 (0,7); 2,830 (0,5); 2,821 (0,3); 2,676 (0,4); 2,672 (0,6); 2,667 (0,4); 2,525 (1,6); 2,511 (33,5); 2,507 (63,9);

2 502 (87,7); 2,498 (64,8);; 2,494 (32,5); 2 334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,398 (16,0); 1,324 (2,6); 1,306 (5,7); 1,287 (2,6); 1,236 (0,3); 0 738 (0,4);; 0,725 (1,3); 0,720 (1,8); 0,708 (1,8); 0,702 (1,4); 0,691 (0,6); 0,580 (0,6); 0,569 (1,8); 0,563 (1,8); 0 554 (1,4); 0,541 (0,4);; 0,008 (0,4); 0,000 (10,6); -0,008 (0,4)

Beispiel -T3-159: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,812 (2,8); 9,773 (7,1); 8,904 (2,9); 8 880 (3,5); 8,874 (0,4); 8,852 (1,7); 8,845 (2,6); 8,822 (6,9); 8,816 (7,2); 8,765 (9,2); 8,536 (3,7); 8 554 (1,9); 8,512 (5,8); 8,484 (11,2); 8,455 (6,7);; 8,449 (6,6); 8,318 (0,7); 8,263 (1,1); 8,257 (1,1);; 8,237 (0,4); 8,053 (5,7); 3,903 (16,0); 3 680 (2,8); 3,593 (0,6); 3,582 (0,9); 3 570 (0,7);; 3,388 (0,9); 3,333 (309,9); 3,276 (1,0); 3,267 (1,3); 3,168 (13,0); 3,044 (0,4); 2,980 (0,9); 2,891 (2,0); 2,732 (1,7); 2,676 (1,9); 2,672 (2,6); 2,667 (1,9); 2,542 (0,9); 2,525 (6,2);; 2,511 (158,8); 2,507 (322,0); 2,503 (423,2); 2,498 (311,3); 2,494 (256,1); 2,334 (2,0); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,083 (0,4); 2,055 (0,3); 1,877 (2,4); 1,867 (5,7); 1,857 (6,2); 1,848 (2,6); 1,718 (0,4); 1,709 (0,4); 1,435 (0,4); 1,355 (0,6); 1,298 (0,6); 1,284 (0,5); 1,276 (0,6); 1,259 (3,3); 1,249 (6,9); 1,239 (9,7); 1,236 (9,6); 1,001 (0,6); 0,991 (0,5); 0 986 (0,5); 0,871 (0,5); 0,862 (0,6); 0,854 (1,3); 0,843 (0,5); 0,837 (0 7); 0,827 (0,3); 0,008 (0,7); 0,000 (25,7); -0,008 (1,0)

Beispiel -T3-160: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,728 (0,3); 8,722 (0,5); 8,704 (8,5); 8,698 (9,6); 8,524 (0,3); 8,353 (7,7); 8,234 (15,1); 8,219 (12,8); 8,100 (7,8);; 8,052 (10,3); 8,046 (10 1); 7 603 (0,4); 7,592 (0,6); 7,580 (0,5); 7,537 (0,5); 7,495 (0,5); 7,490 (0,5); 7 342 (0,5); 7,067 (2,6); 5,449 (0,7); 4,054 (1,4); 3,893 (0,3); 3,441 (0,7); 3,375 (0,6); 3,247 (1,1); 3,154 (3,0); 3,070 (0,6); 2,886 (0,9); 2,876 (1,9); 2,867 (2,7); 2,858 (3,9); 2,849 (3,9); 2,840 (2,7); 2,831 (1,9); 2,821 (0,7); 2,600 (0,3); 2,590 (0,4); 2,531 (0,4); 2,470 (3,6); 2,465 (5,3); 2,460 (3,7); 2,432 (0,3); 2,425 (0,4); 2,394 (0,4); 2,368 (0,5); 2,359 (0,5);; 2,329 (0,6); 2,315 (0,6); 2,299 (0,8); 2,281 (1,3); 2,257 (1,3); 2,255 (1,3); 2,243 (1,9); 2,178 (1072,5); 2,127 (0,9); 2,121 (1,9); 2,114 (3,1); 2,108 (4 0); 2,102 (2,8); 2,096 (1,6); 2,087 (0,7); 2,057 (0,4); 2,036 (0,7); 2,017 (1,1); 1,998 (1,2); 1,965 (20,6); 1,958 (52,5). 1,953 (270,7); 1,947 (487,5); 1,941 (651,6); 1,935 (450,7); 1,929 (234,0); 1,782 (1,4); 1,775 (2,7). 1,769 (3,6); 1,763 (2,5); 1,757 (1,3); 1,711 (2,4); 1 384 (0,4); 1,380 (0,8); 1,269 (16,0); 0,897 (0,7); 0 881 (1,8); 0,864 (3,9); 0,858 (2,2); 0,795 (6,8); 0,790 (8,9); 0,779 (9,1); 0,772 (8,9); 0,730 (3,0); 0,738 (0,4); 0,721 (0,4); 0,861 (0,4); 0,651 (0,4); 0,621 (3,0); 0,609 (8,1); 0,603 (8,3); 0,599 (7,4); 0,594 (7,1); 0,591 (2,1); 0 543 (0,5); 0.390 (0,4); 0,385 (0,5); 0,146 (8,5); 0,085 (0,4); 0,078 (0,5); 0 066 (0,5); 0.008 (58,5); 0.000 (1738,3); -0,009 (75,1); -0,049 (2,5); -0,058 (0,4); -0,150 (6,4)

Beispiel -T3-161: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,826 (2,2); 8,153 (7,1) 8,140 (16,0); 8 100 (13,1); 7,994 (7,8); 7,949 (7,7); 7,929 (9,3); 7,924 (11,5) 7,896 (8,2); 7,591 (4,8); 7,585 (2,3); 7,575 (7,4); 7,570 (6,0); 7 488 (0,5); 7,467 (0,4); 7,436 (11,0); 7,415 (8,4); 4 085 (1,8); 4,068 (5,5); 4,050 (5,6); 4,032 (1,9); 3,435 (0,7); 3,425 (1,5); 3,416 (1,9); 3,407 (3 0); 3,394 (2,9); 3,383 (1,8); 3,376 (1,3); 3,365 (0,9); 3,033 (0,3); 2,905 (0,4); 2,683 (0,6); 2,665 (0,6); 2,467 (0,8); 2,443 (2313,8); 2,417 (459,9); 2,108 (11,0); 2,101 (6,9); 2,095 (3,7); 1,972 (32,2); 1,964 (49,2); 1,958 (118,9); 1,953 (611,9); 1,946 (1099,9); 1,940 (1474,5); 1,934 (1019,6); 1,928 (525,2); 1,781 (2,8); 1,775 (5,7); 1,769 (7,9); 1,762 (5,4); 1,756 (2,4); 1,437 (7,6); 1,270 (1,1); 1,222 (6,5); 1 204 (13,0); 1,186 (6,4); 0,951 (2,0); 0,939 (6,4); 0 934 (8,6); 0,921 (8,9); 0,915 (6,5); 0,902 (2,8); 0,881 (0,8); 0,863 (0,6); 0,821 (0,5); 0,817 (0,4); 0,782 (2,8); 0,770 (7,8); 0,764 (8,1); 0,760 (8,9); 0,754 (6,8); 0,741 (1,9); 0,192 (0,4); 0,146 (19,2); 0,087 (1,3); 0,063 (1,5); 0,008 (155,4); 0,000 (3971,4); -0,009 (173,7); -0,068 (0,4); -0,150 (7,8)

Beispiel -T3-162: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,194 (6,9); 8,179 (8,7); 7,872 (3,4); 7 759 (3,0); 7,668 (3,5); 7,662 (4,6); 7,655 (2,4); 7,650 (1,8); 7,635 (2,7); 7,629 (2,4); 7,477 (4,3); 7 456 (3,4);; 6,951 (1,1); 2,872 (0,7); 2,862 (1,1); 2,854 (1,6) 2,844 (1,6); 2,835 (1,1); 2,826 (0,8); 2,471 (0,3); 2,466 (0,5); 2,461 (0,3);; 2 180 (199,2); 2,134 (0,5); 2,115 (0 5); 2,109 (0,6); 2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (6,7) 1,953 (37,6); 1,947 (69,3); 1,941 (93,6); 1,935 (65,6); 1,929 (34,4); 1,775 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 1,437 (16,0); 1,269 (0,4); 0,795 (0,9); 0,782 (2,6); 0,777 (3,6); 0,765 (3,7); 0,759 (2,6); 0,747 (1,2); 0,612 (1,2); 0,601 (3,3); 0,595 (3,4); 0,591 (3,1); 0,586 (3,0); 0,573 (0,9); 0,146 (1,5); 0,008 (10,7); 0,000 (294,5); -0,150 (1,5)

Beispiel -T3-163: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,205 (4,0); 8,190 (4,1); 7,973 (2,2); 7 780 (2,0); 7,736 (2,0); 7,731 (2,6); 7,704 (1,2); 7,700 (1,0); 7,684 (1,4); 7,679 (1,2); 7,600 (0,8); 7 508 (2,3); 7 438 (1,9); 2,161 (116,4); 2,121 (0,5); 2,114 (0,5); 2,108 (0,6); 2,102 (0,4); 1,963 (2,5); 1,952 (29,4); 1,946 (52,9); 1,941 (70,8); 1,934 (50,0); 1,928 (25,5); 1,769 (0,4); 1,598 (1,0); 1,583 (2,9); 1,575 (2,8); 1,563 (1,3); 1,436 (16,0); 1,352 (1,3); 1,348 (2,9); 1,341 (3,0); 1,327 (1,0); 1,269 (0,5); 0.145 (1,2); 0 000 (226,5); -0,150 (1,2)

Beispiel -T3-164: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,460 (5,0); 8,854 (7,4); 8,671 (4,0); 8,651 (4,3); 8,535 (7,4); 7,846 (1,3); 7,840 (3,0); 7,835 (4,3); 7,827 (5,4); 7,824 (4,4); 7,818 (1,5); 7 594 (4,1); 7,584 (3,8); 7,582 (0,8); 7,572 (3,8); 4,053 (1,2); 4,038 (3,7); 4 020 (3,7); 4,002 (1,3); 3,934 (1,6); 3,329 (39,1); 2,671 (0,4);; 2 525 (1,1);; 2,507 (42,6); 2 502 (56,3); 2,498 (42,5);; 2,329 (0,4); 1,589 (16,0); 1,619 (1,7); 1,605 (4,3); 1,598 (4,6); 1,585 (1,9); 1,397 (5,6);; 1,295 (2,3); 1,281 (4,2); 1,275 (4 5); 1,260 (1,8); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,1); 1,069 (10,8);; 0,008 (1,8); 0,000 (48,4); -0,008 (2,3)

Beispiel -T3-165: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,748 (1,7); 8,742 (1,8); 8,353 (1,5); 8,243 (2,8); 8,228 (2,4); 8,116 (1,9); 8,110 (2,1); 8,101 (1,5); 7,706 (0,5); 3,236 (0,5); 3,070 (0,4); 2,883 (0,4); 2,284 (0,3); 2,154 (118,3); 2,120 (0,8); 2,114 (0,9); 2,108 (0,9); 2,102 (0,7);; 2,065 (0,4); 1,972 (0,7); 1,965 (3,4); 1,958 (8,8); 1 953 (47,0); 1,946 (85,3); 1,940 (114,8); 1,934 (80,1);; 1,928 (41,8); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7);; 1,763 (0,5); 1,612 (0,8); 1,397 (2,0); 1,591 (2,0); 1,577 (1,0); 1,437 (16,0); 1,370 (1,0); 1,356 (2,0) 1,349 (2,1); 1,334 (0,8); 1,289 (0,9); 0,146 (1,9); 0,008 (15,7); 0,000 (390 9); -0,009 (19,9); -0,150 (2,0)

Beispiel T3 166: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6 DMSO):

δ= 9,440 (11,6); 9,127 (15,3);; 8,569 (7,7); 8,491 (16,0); 8,316 (2,5); 7,965 (7,6); 7,961 (7,7); 7,926 (7,5); 7,921 (12,0); 7,912 (6,7); 7,906 (3,4); 7,891 (6,2); 7,885 (4,8); 7,573 (10,1); 7,553 (9,2); 3,459 (0,4); 3,399 (0,7); 3,365 (1,8); 3,331 (1516,7); 3,298 (1,6); 2,701 (0,4); 2,694 (0,3); 2,676 (6,5) 2,671 (9,1) 2,667 (6,9); 2,638 (0,4); 2,576 (1,1); 2,529 (53,9); 2,520 (35,9); 2,511 (509,9); 2,507 (1041,8); 2,502 (1375,8); 2,498 (1016,8); 2,417 (0,5); 2,351 (0,8); 2,334 (0,6); 2,329 (0,1); 2,325 (0 8); 2,302 (0,3); 1,921 (3,9); 1,807 (9,8); 1,600 (10,6); 1,587 (4,4); 1,547 (0,4); 1,348 (0,4); 1,307 (4,5); 1,294 (9,7); 1,287 (10,6); 1,273 (3,7); 1,237 (0,4); 0,146 (3,4); 0,024 (0,3); 0,008 (24,7); 0,000 (766,8); -0,006 (29,5); -0,032 (0,8);; -0,150 (3,5)

Beispiel -T3-167: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):

δ= 9,440 (6,2); 9,103 (8,3); 9,094 (0,8); 8,587 (4,2); 8,479 (8,5); 8,317 (1,1); 8,021 (4,5); 7,917 (3,9); 7,911 (6,2); 7,903 (3,6); 7,898 (1,8); 7 882 (3,2); 7,877 (2,5); 7,597 (0,4); 7,574 (5,4); 7 554 (4,7); 3,329 (494,7); 3,110 (1,9); 3,092 (6,3); 3,074 (6,4); 3,056 (2,0); 2 671 (0,3); 2,676 (3,0); 2,671 (4,2); 2,667 (3,1); 2,524 (9,6); 2,507 (478,6); 2,502 (637,0); 2,498 (477,3);; 2,408 (0,8); 2,333 (2,9); 2,329 (4,1); 2,325

(3,1); 1,621 (2,0); 1,607 (5,2); 1,600 (5,6); 1,587 (2,3); 1,306 (2,4); 1,293 (5,3); 1,286 (5,7); 1,272 (2,1); 1,261 (0,6); 1,235 (7,8); 1,217 (16,0); 1,199 (7,1); 0,146 (1,6); 0,008 (11,5); 0,000 (382,6); -0,008 (14,5); -0,028 (0,6); -0,150 (1,6)

Beispiel T3 168: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 8,917 (4,0); 8,676 (2,2); 8,612 (2,2); 8,554 (1,4); 8,543 (1,4); 8,439 (4,1); 7,783 (0,8); 7,777 (1,3); 7,770 (2,3); 7,764 (3,0); 7,539 (2,1); 7,527 (0,4); 7,517 (1,8); 4,038 (0,4); 4,020 (0,4); 3,936 (2,3); 3,333 (40,9); 2,864 (0,4); 2,854 (0,6); 2,846 (0,6); 2,836 (0,8); 2,827 (0,6); 2,818 (0,4); 2,507 (26,6); 2,503 (34,6); 2,498 (26,4); 1,589 (1,7); 1,296 (0,7); 1,193 (3,5); 1,175 (0,9); 1,157 (0,5); 1,069 (16,0); 0,733 (0,5); 0,720 (1,8); 0,716 (2,1); 0,703 (2,0); 0,698 (1,8); 0,686 (0,7); 0,586 (0,7); 0,555 (2,1); 0,549 (2,0); 0,540 (1,8); 0,527 (0,6); 0,000 (11,0)

Beispiel -T3-169: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 9,161 (11,1); 9,416 (0,4); 8,936 (15,7); 8,681 (8,8); 8,616 (8,7); 8,450 (16,0); 7,833 (11,0); 7,827 (9,7); 7,820 (7,2); 7,652 (0,3); 7,589 (8,1); 7,578 (1,9); 7,567 (7,0); 7,556 (0,5); 4,038 (0,8); 4,020 (0,8); 3,937 (0,6); 3,333 (133,2); 2,672 (3,7); 2,503 (113,4); 2,330 (0,7); 1,989 (3,2); 1,622 (3,6); 1,607 (9,7); 1,601 (10,5); 1,587 (4,3); 1,563 (0,4); 1,556 (0,4); 1,547 (0,5); 1,334 (0,4); 1,314 (0,5); 1,300 (4,8); 1,294 (5,2); 1,281 (9,9); 1,274 (10,4); 1,259 (3,7); 1,235 (0,6); 1,193 (3,5); 1,175 (1,7); 1,157 (0,9); 1,069 (3,7); 0,000 (35,7)

Beispiel -T3-170: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 9,141 (1,5); 9,436 (2,4); 8,694 (1,7); 8,619 (3,2); 8,443 (1,7); 8,398 (3,2); 8,274 (2,8); 7,960 (1,6); 7,956 (1,6); 7,810 (0,9); 7,804 (2,1); 7,797 (2,3); 7,792 (2,9); 7,787 (3,1); 7,782 (0,9); 7,742 (1,6); 7,739 (1,6); 7,569 (1,0); 7,557 (2,1); 7,546 (1,3); 7,535 (1,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,3); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,332 (35,6); 3,113 (0,7); 3,097 (2,3); 3,078 (2,4); 3,061 (0,7); 2,525 (0,5); 2,512 (10,5); 2,507 (21,4); 2,503 (28,1); 2,498 (20,5); 2,494 (9,9); 1,990 (16,0); 1,615 (1,1); 1,601 (2,8); 1,594 (2,9); 1,581 (1,3); 1,289 (1,3); 1,276 (2,8); 1,269 (3,0); 1,255 (1,1); 1,208 (2,7); 1,193 (5,6); 1,190 (3,2); 1,175 (9,2); 1,157 (4,2); 0,000 (3,5)

Beispiel -T3-171: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 9,443 (12,6); 9,162 (16,0); 8,676 (8,2); 8,530 (16,0); 8,412 (7,8); 8,317 (4,0); 7,937 (8,0); 7,932 (12,0); 7,921 (6,8); 7,915 (3,8); 7,900 (6,4); 7,895 (5,0); 7,716 (0,4); 7,584 (10,3); 7,563 (9,1); 4,359 (2,5); 4,332 (7,5); 4,306 (7,8); 4,280 (2,7); 4,104 (0,5); 4,079 (0,4); 3,496 (0,5); 3,480 (0,4); 3,466 (0,5); 3,452 (0,4); 3,396 (0,8); 3,329 (1554,1); 3,287 (1,0); 2,676 (8,0); 2,671 (11,1); 2,667 (9,6); 2,645 (0,6); 2,525 (28,7); 2,511 (314,7); 2,507 (1266,3); 2,502 (1687,1); 2,498 (1264,4); 2,389 (0,6); 2,380 (0,8); 2,333 (7,8); 2,329 (11,0); 2,325 (8,3); 2,256 (0,4); 2,075 (1,4); 1,823 (4,0); 1,608 (10,0); 1,601 (10,8); 1,588 (4,6); 1,348 (0,5); 1,347 (0,4); 1,336 (4,7); 1,293 (10,0); 1,286 (10,8); 1,272 (3,9); 1,234 (0,7); 0,146 (0,5); 0,017 (0,4); 0,008 (3,6); 0,000 (115,1); -0,008 (5,1); -0,150 (0,6)

Beispiel -T3-172: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 8,613 (0,3); 8,596 (6,4); 8,529 (2,9); 8,516 (3,0); 8,492 (0,7); 8,381 (8,5); 8,333 (0,6); 7,956 (4,4); 7,953 (4,4); 7,749 (2,3); 7,743 (4,8); 7,739 (5,0); 7,725 (13,2); 7,507 (4,3); 7,488 (2,3); 7,485 (3,1); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (51,5); 3,112 (1,9); 3,094 (6,1); 3,076 (6,1); 3,057 (2,0); 3,048 (0,4); 3,029 (0,9); 3,011 (0,9); 2,856 (0,8); 2,847 (1,1); 2,838 (1,8); 2,828 (1,8); 2,819 (1,1); 2,809 (0,9); 2,676 (0,4); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,524 (1,3); 2,511 (30,4); 2,507 (60,9); 2,502 (78,7); 2,498 (58,7); 2,494 (29,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,5); 2,324 (0,4); 1,989 (16,0); 1,235 (0,4); 1,207 (6,8); 1,192 (7,1); 1,189 (14,7); 1,175 (10,4); 1,170 (7,2); 1,157 (4,7); 1,068 (0,4); 0,727 (1,1); 0,714 (3,3); 0,709 (4,6); 0,697 (4,3); 0,691 (3,7); 0,680 (1,5); 0,563 (1,5); 0,552 (4,6); 0,546 (4,3); 0,535 (3,8); 0,524 (1,7); 0,008 (2,2); 0,000 (61,3); -0,008 (2,4)

Beispiel -T3-173: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 8,853 (6,0); 8,567 (3,1); 8,561 (3,2); 8,401 (5,7); 8,091 (10,1); 8,013 (3,1); 8,007 (3,2); 7,957 (0,4); 6,579 (0,7); 5,409 (0,3); 3,923 (16,0); 3,592 (0,3); 3,367 (923,7); 2,985 (14,3); 2,767 (0,4); 2,740 (1,3); 2,725 (0,9); 2,704 (1,4); 2,674 (0,9); 2,509 (98,0); 2,505 (123,6); 2,501 (91,6); 2,332 (0,8); 2,074 (1,6); 1,271 (0,8); 1,169 (5,1); 0,467 (4,6); 0,450 (2,4); 0,008 (1,4); 0,000 (28,9)

Beispiel -T3-174: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 8,835 (7,5); 8,672 (3,0); 8,669 (4,0); 8,650 (3,3); 8,649 (3,9); 8,645 (2,9); 8,556 (2,5); 8,545 (2,5); 8,525 (7,6); 7,787 (1,7); 7,781 (2,9); 7,766 (4,0); 7,763 (11,3); 7,546 (3,2); 7,542 (1,7); 7,527 (1,5); 7,524 (2,8); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,329 (59,6); 2,865 (0,7); 2,856 (0,9); 2,847 (1,4); 2,836 (1,5); 2,828 (0,9); 2,818 (0,7); 2,671 (0,4); 2,525 (1,0); 2,520 (1,6); 2,511 (21,0); 2,507 (42,8); 2,502 (58,7); 2,498 (41,2); 2,493 (19,8); 2,329 (0,4); 1,989 (16,0); 1,193 (4,3); 1,175 (8,7); 1,157 (4,2); 0,733 (1,0); 0,720 (2,7); 0,715 (3,8); 0,703 (3,5); 0,697 (2,9); 0,686 (1,3); 0,566 (1,3); 0,555 (3,7); 0,549 (3,3); 0,545 (3,1); 0,540 (3,0); 0,527 (0,9); 0,008 (1,4); 0,000 (40,4); -0,009 (1,3)

Beispiel -T3-175: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,146 (3,1); 8,082 (4,8); 7,714 (1,6); 7,697 (2,0); 7,692 (2,5); 7,663 (1,3); 7,658 (1,0); 7,642 (1,5); 7,637 (1,3); 7,472 (2,3); 7,451 (1,8); 6,931 (0,6); 2,873 (0,4); 2,864 (0,6); 2,855 (0,9); 2,845 (0,9); 2,837 (0,6); 2,827 (0,4); 2,165 (79,0); 2,115 (0,4); 2,108 (0,5); 2,102 (0,3); 1,965 (1,5); 1,959 (4,0); 1,953 (28,1); 1,947 (52,6); 1,941 (72,5); 1,935 (50,5); 1,929 (26,2); 1,769 (0,4); 1,437 (16,0); 0,796 (0,5); 0,783 (1,5); 0,778 (2,0); 0,765 (2,0); 0,760 (1,5); 0,748 (0,7); 0,613 (0,6); 0,601 (1,7); 0,595 (1,8); 0,591 (1,6); 0,586 (1,6); 0,574 (0,5); 0,000 (0,6)

Beispiel -T3-176: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 19,983 (0,4); 8,920 (0,7); 8,270 (0,3); 8,158 (11,0); 8,124 (0,4); 8,095 (11,8); 8,083 (8,1); 8,035 (0,7); 7,748 (8,2); 7,741 (7,8); 7,713 (8,2); 7,692 (4,8); 7,686 (4,4); 7,669 (3,3); 7,590 (0,6); 7,505 (6,9); 7,484 (5,7); 3,901 (3,1); 2,470 (2,3); 2,466 (3,4); 2,461 (2,6); 2,417 (1,0); 2,179 (1701,9); 2,153 (39,9); 2,121 (2,8); 2,115 (3,6); 2,109 (4,3); 2,103 (3,2); 2,098 (1,9); 2,034 (0,5); 1,965 (12,0); 1,954 (218,5); 1,947 (401,4); 1,941 (546,5); 1,935 (384,1); 1,929 (201,2); 1,782 (1,6); 1,776 (2,3); 1,770 (2,4); 1,764 (2,5); 1,599 (3,1); 1,581 (8,5); 1,577 (8,4); 1,564 (4,1); 1,524 (0,7); 1,437 (16,0); 1,401 (0,7); 1,362 (3,9); 1,349 (8,6); 1,347 (8,8); 1,327 (3,1); 1,268 (2,7); 0,882 (0,4); 0,000 (4,2)

Beispiel -T3-177: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 9,462 (7,5); 8,855 (1,9); 8,790 (8,6); 8,673 (1,1); 8,653 (1,1); 8,536 (1,9); 8,483 (8,9); 8,391 (4,5); 8,388 (4,6); 8,105 (4,5); 8,102 (4,5); 7,846 (0,5); 7,840 (1,0); 7,833 (2,8); 7,827 (5,2); 7,820 (5,9); 7,814 (7,0); 7,810 (5,4); 7,804 (1,9); 7,595 (1,3); 7,586 (5,5); 7,573 (1,8); 7,564 (4,6); 4,355 (0,5); 4,038 (1,4); 4,020 (1,4); 4,002 (0,5); 3,331 (91,4); 3,168 (2,0); 3,150 (6,5); 3,131 (6,6); 3,113 (2,0); 2,676 (0,5); 2,672 (0,7); 2,667 (0,5); 2,525 (1,8); 2,511 (39,2); 2,507 (78,6); 2,502 (103,0); 2,498 (76,1); 2,494 (38,1); 2,334 (0,5); 2,329 (0,7); 2,325 (0,5); 1,989 (6,1); 1,619 (2,5); 1,604 (6,3); 1,598 (6,8); 1,585 (2,8); 1,397 (5,9); 1,293 (2,9); 1,279 (6,3); 1,273 (6,7); 1,258 (2,4); 1,203 (7,5); 1,193 (2,5); 1,184 (16,0); 1,175 (4,1); 1,166 (7,2); 1,157 (2,0); 1,069 (0,5); 0,008 (2,2); 0,000 (62,2); -0,008 (2,5)

Beispiel T3 178: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):
δ= 8,730 (5,4); 8,726 (5,4); 8,701 (10,4); 8,556 (3,7); 8,545 (3,7); 8,483 (0,5); 8,463 (10,3); 8,318 (0,6); 8,268 (5,5); 8,264 (5,4); 7,760

(2,4); 7,754 (3,8); 7,736 (14,8); 7,524 (4,5); 7,505 (2,3); 7,502 (3,8); 4,055 (1,2); 4 037 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,460 (1,7); 3,442 (5,0); 3,424 (5,0); 3,405 (1,7); 3,329 (124,3); 2,868 (0,4); 2,858 (1,0); 2,848 (1,4); 2,840 (2,2); 2,830 (2,2); 2,821 (1,4); 2,811 (1,0); 2,802 (0,4); 2,675 (1,1); 2,671 (1,5); 2,667 (1,2); 2,541 (5,3); 2,506 (175,4); 2,502 (223,8); 2,498 (167,1); 2,333 (1,1); 2,329 (1,4); 2,324 (1,1); 1,989 (15,7); 1,235 (0,4); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (5,1); 1,150 (7,5); 1,132 (16,0); 1,113 (7,2); 0,728 (1,4); 0,715 (4,2); 0,710 (5,5); 0,698 (5,2); 0,592 (4,4); 0,681 (1,7); 0,581 (1,8); 0,551 (5,6); 0,545 (5,4); 0,535 (4,6); 0,523 (1,3); 0,146 (0,4); 0,000 (94,7); -0,008 (4,3); -0,150 (0,4)

Beispiel T3-179: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 8,862 (9,5); 8,701 (0,4); 8,548 (3,2); 8,537 (3,2); 8,504 (0,4); 8,487 (10,0); 8,482 (5,1); 8,477 (4,7); 8,463 (0,4); 8,317 (1,4); 8,095 (4,8); 8,091 (4,8); 7,769 (2,1); 7,764 (3,9); 7,753 (5,3); 7,748 (11,5); 7,736 (0,7); 7,540 (5,3); 7,533 (1,3); 7,524 (1,3); 7,517 (4,5); 4,055 (1,0); 4,037 (3,2); 4,020 (3,2); 4,002 (1,1); 3,507 (0,3); 3,443 (0,4); 3,424 (0,4); 3,396 (0,5); 3,373 (0,8); 3,332 (779,0); 3,293 (0,7); 3,067 (0,5); 3,042 (1,8); 3,024 (2,1); 3,008 (2,2); 2,995 (0,5); 2,990 (2,0); 2,971 (0,6); 2,870 (0,4); 2,860 (0,9); 2,850 (1,3); 2,842 (2,0); 2,831 (2,1); 2,822 (1,3); 2,813 (1,0); 2,803 (0,4); 2,580 (1,3); 2,676 (2,7); 2,671 (3,7); 2,667 (2,8); 2,584 (1,0); 2,565 (2,6); 2,547 (3,3); 2,542 (5,6); 2,525 (10,0); 2,520 (15,4); 2,511 (205,0); 2,507 (417,5); 2,502 (550,6); 2,498 (403,5); 2,493 (198,2); 2,333 (2,6); 2,329 (3,6); 2,325 (2,7); 1,989 (13,8); 1,298 (0,3); 1,259 (0,5); 1,235 (0,9); 1,193 (3,9); 1,175 (7,6); 1,157 (3,8); 1,132 (0,6); 1,047 (7,2); 1,029 (16,0); 1,010 (6,9); 0,733 (1,3); 0,720 (3,5); 0,715 (5,2); 0,703 (4,7); 0,697 (4,1); 0,685 (1,7); 0,583 (1,7); 0,552 (5,0); 0,546 (4,7); 0,542 (4,4); 0,536 (4,2); 0,524 (1,3); 0,146 (1,1); 0,008 (8,8); 0,000 (281,7); -0,009 (10,5); -0,150 (1,1)

Beispiel -T3-180: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,105 (5,5); 9,100 (4,5); 8,889 (0,7); 8,871 (9,2); 8,561 (4,6); 8,570 (6,0); 8,564 (6,6); 8,558 (5,5); 8,545 (9,1); 8,317 (0,8); 7,817 (0,3); 7,812 (0,3); 7,774 (3,3); 7,768 (4,2); 7,755 (7,5); 7,751 (13,2); 7,553 (4,7); 7,548 (2,1); 7,535 (2,4); 7,530 (3,5); 4,055 (0,8); 4,037 (2,1); 4,020 (2,1); 4,002 (0,7); 3,559 (2,3); 3,541 (6,5); 3,523 (6,4); 3,504 (2,1); 3,334 (39,2); 3,328 (431,0); 2,866 (1,3); 2,858 (1,8); 2,847 (2,5); 2,837 (2,3); 2,828 (1,5); 2,819 (1,0); 2,809 (0,4); 2,676 (2,3); 2,671 (2,5); 2,667 (1,8); 2,621 (0,4); 2,507 (343,0); 2,502 (380,1); 2,498 (256,9); 2,333 (2,1); 2,329 (2,4); 2,324 (1,6); 1,995 (2,3); 1,989 (8,7); 1,298 (0,4); 1,258 (0,6); 1,249 (0,7); 1,236 (1,2); 1,193 (3,8); 1,181 (8,8); 1,175 (7,3); 1,163 (15,0); 1,157 (4,7); 1,144 (6,8); 1,114 (0,6); 0,731 (1,9); 0,716 (5,2); 0,711 (5,7); 0,702 (5,8); 0,696 (4,2); 0,684 (1,6); 0,593 (0,3); 0,563 (2,7); 0,553 (6,7); 0,547 (6,1); 0,538 (4,5); 0,525 (1,3); 0,006 (15,8); 0,000 (61,8); -0,008 (2,7)

Beispiel -T3-181: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,108 (0,4); 9,087 (10,3); 8,892 (5,1); 8,888 (5,2); 8,613 (0,4); 8,591 (10,0); 8,579 (3,8); 8,568 (3,7); 8,407 (5,3); 8,403 (5,3); 7,787 (2,0); 7,781 (4,5); 7,775 (8,6); 7,759 (7,7); 7,755 (6,0); 7,739 (2,3); 7,575 (6,0); 7,564 (1,5); 7,552 (5,0); 4,056 (1,1); 4,038 (3,4); 4,020 (3,4); 4,002 (1,2); 3,330 (39,4); 3,101 (0,5); 3,083 (1,8); 3,065 (2,2); 3,049 (2,3); 3,031 (2,1); 3,012 (0,6); 2,879 (0,4); 2,869 (1,0); 2,860 (1,4); 2,851 (2,1); 2,841 (2,1); 2,833 (1,4); 2,823 (1,0); 2,813 (0,4); 2,676 (0,5); 2,672 (0,6); 2,667 (0,5); 2,601 (0,7); 2,583 (2,1); 2,564 (2,5); 2,549 (2,3); 2,530 (2,5); 2,525 (2,1); 2,507 (69,4); 2,503 (80,4); 2,498 (58,1); 2,334 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (14,7); 1,193 (3,9); 1,175 (7,7); 1,158 (3,8); 1,081 (0,4); 1,067 (7,5); 1,048 (16,0); 1,030 (7,2); 0,738 (1,3); 0,725 (4,0); 0,720 (5,5); 0,708 (5,1); 0,702 (4,4); 0,691 (1,8); 0,568 (1,8); 0,555 (5,4); 0,549 (5,2); 0,539 (4,6); 0,527 (1,3); 0,008 (0,8); 0,000 (16,1)

Beispiel T3-182: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,454 (7,2); 8,864 (10,7); 8,500 (10,2); 8,482 (4,9); 8,478 (5,0); 8,317 (0,4); 8,068 (5,0); 8,093 (5,0); 7,829 (1,5); 7,823 (5,9); 7,821 (7,6); 7,815 (6,3); 7,807 (4,8); 7,801 (2,4); 7,588 (5,9); 7,579 (1,0); 7,574 (1,0); 7,566 (5,1); 4,056 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,329 (62,1); 3,069 (0,5); 3,051 (1,8); 3,032 (2,1); 3,017 (2,3); 2,998 (2,1); 2,980 (0,6); 2,676 (0,6); 2,672 (0,8); 2,667 (0,6); 2,584 (0,6); 2,575 (2,1); 2,557 (2,5); 2,541 (2,4); 2,523 (3,8); 2,520 (3,9); 2,511 (46,1); 2,507 (93,1); 2,503 (122,1); 2,498 (89,1); 2,494 (44,0); 2,334 (0,6); 2,329 (0,8); 2,325 (0,6); 1,989 (15,8); 1,622 (2,4); 1,607 (5,9); 1,601 (6,4); 1,586 (2,7); 1,290 (2,8); 1,276 (5,9); 1,270 (6,4); 1,255 (2,4); 1,235 (0,5); 1,193 (4,2); 1,175 (8,3); 1,157 (4,1); 1,134 (0,3); 1,051 (7,3); 1,033 (16,0); 1,014 (7,1); 0,008 (0,8); 0,000 (23,6); -0,008 (0,9)

Beispiel -T3-183: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,464 (4,8); 8,733 (3,3); 8,729 (3,6); 8,723 (6,9); 8,477 (6,6); 8,270 (3,3); 8,268 (3,3); 7,820 (1,3); 7,814 (3,0); 7,808 (4,3); 7,803 (4,8); 7,798 (3,7); 7,792 (1,4); 7,573 (4,0); 7,562 (0,9); 7,551 (3,4); 4,055 (1,2); 4,038 (3,6); 4,020 (3,7); 4,002 (1,2); 3,460 (0,9); 3,447 (2,9); 3,429 (3,0); 3,410 (1,0); 3,329 (48,5); 2,676 (0,4); 2,671 (0,6); 2,667 (0,5); 2,525 (1,6); 2,511 (35,4); 2,507 (71,4); 2,502 (93,1); 2,498 (68,1); 2,494 (33,4); 2,333 (0,4); 2,329 (0,6); 2,325 (0,4); 1,989 (16,0); 1,614 (1,6); 1,600 (3,6); 1,593 (4,1); 1,580 (1,7); 1,280 (1,9); 1,277 (4,0); 1,270 (4,3); 1,256 (1,6); 1,235 (0,5); 1,193 (4,4); 1,175 (8,8); 1,157 (4,9); 1,152 (5,1); 1,134 (10,7); 1,115 (4,8); 0,008 (0,6); 0,000 (19,6); -0,009 (0,7)

Beispiel -T3-184: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,222 (1,1); 8,212 (14,6); 8,193 (0,9); 8,183 (0,7); 8,151 (14,2); 8,150 (13,6); 7,984 (5,5); 7,968 (5,6); 7,937 (0,6); 7,860 (0,5); 7,837 (0,5); 7,699 (8,7); 7,694 (11,4); 7,686 (5,9); 7,680 (4,9); 7,645 (8,7); 7,639 (8,1); 7,588 (0,8); 7,523 (0,3); 7,480 (10,7); 7,459 (8,3); 6,928 (2,6); 5,448 (5,4); 2,881 (0,7); 2,871 (1,9); 2,862 (2,7); 2,853 (1,3); 2,841 (1,3); 2,835 (2,8); 2,825 (2,1); 2,816 (0,7); 2,474 (0,9); 2,469 (1,8); 2,464 (2,4); 2,460 (1,9); 2,455 (1,0); 2,293 (0,4); 2,270 (0,7); 2,266 (0,7); 2,246 (1,0); 2,227 (1,0); 2,160 (875,2); 2,121 (3,1); 2,114 (4,2); 2,108 (5,3); 2,102 (3,8); 2,096 (2,1); 2,036 (0,6); 2,018 (0,8); 1,998 (0,9); 1,965 (19,7); 1,959 (49,7); 1,953 (311,9); 1,947 (575,9); 1,941 (786,4); 1,935 (548,9); 1,929 (287,9); 1,883 (0,6); 1,782 (1,8); 1,775 (3,4); 1,769 (4,7); 1,763 (3,2); 1,757 (1,8); 1,525 (0,4); 1,385 (0,3); 1,372 (0,5); 1,359 (0,4); 1,340 (1,4); 1,335 (0,8); 1,285 (2,9); 1,270 (16,0); 1,204 (0,3); 0,918 (0,4); 0,899 (0,9); 0,882 (2,1); 0,864 (1,1); 0,832 (0,4); 0,795 (2,4); 0,783 (7,1); 0,777 (9,7); 0,765 (9,6); 0,760 (7,5); 0,747 (3,3); 0,726 (0,5); 0,708 (0,5); 0,652 (0,5); 0,643 (0,5); 0,627 (0,4); 0,613 (3,3); 0,601 (8,2); 0,595 (8,8); 0,591 (7,8); 0,586 (7,8); 0,573 (2,3); 0,536 (0,3); 0,520 (0,4); 0,478 (0,3); 0,392 (0,4); 0,387 (0,4); 0,008 (0,7); 0,000 (20,9); -0,009 (1,0)

Beispiel T3-185: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 17,517 (0,4); 15,219 (0,3); 14,973 (0,3); 13,920 (0,3); 8,404 (0,4); 8,394 (0,4); 8,224 (16,0); 8,208 (0,8); 8,165 (12,9); 7,986 (5,2); 7,970 (5,1); 7,938 (1,2); 7,864 (0,5); 7,840 (0,4); 7,747 (7,8); 7,741 (10,5); 7,715 (5,2); 7,710 (4,3); 7,694 (9,0); 7,689 (5,7); 7,654 (3,5); 7,624 (1,2); 7,601 (2,1); 7,594 (1,3); 7,590 (2,0); 7,564 (1,9); 7,541 (1,1); 7,513 (9,5); 7,492 (7,5); 7,282 (0,7); 7,282 (0,4); 7,270 (0,7); 7,201 (0,4); 7,178 (1,6); 7,168 (0,4); 7,151 (0,4); 7,064 (0,5); 7,045 (0,4); 6,914 (0,4); 6,892 (0,4); 6,881 (0,8); 6,859 (0,6); 6,178 (0,3); 6,160 (0,4); 6,111 (0,4); 6,099 (0,4); 6,087 (0,4); 6,042 (0,4); 6,038 (0,4); 6,017 (0,4); 5,640 (0,4); 5,594 (0,3); 5,540 (0,3); 5,513 (0,4); 5,485 (0,4); 5,427 (0,3); 5,373 (0,3); 4,507 (0,6); 4,491 (0,6); 4,068 (1,3); 4,050 (1,1); 4,032 (0,5); 3,789 (0,5); 3,776 (1,0); 3,758 (2,9); 3,656 (0,4); 3,149 (0,4); 3,128 (0,4); 2,720 (13,7); 2,656 (0,5); 2,492 (0,9); 2,475 (2,8); 2,470 (6,1); 2,465 (9,0); 2,461 (6,7); 2,456 (3,4); 2,285 (0,4); 2,264 (0,7); 2,247 (1,5); 2,237 (1,1); 2,171 (2483,4); 2,121 (7,1); 2,114 (9,5); 2,108 (11,9); 2,102 (8,8); 2,096 (5,2); 2,075 (1,8); 2,032

(0,9); 2,020 (0,7); 2,011 (0,6); 1,972 (8,4); 1,965 (39,5); 1,959 (102,1); 1,953 (642,3); 1,947 (1199,8); 1,941 (1645,9); 1,935 (1167,9); 1,929 (879,1); 1,818 (1,3); 1,782 (4,2); 1,775 (7,5); 1,769 (10,3); 1,763 (7,4); 1,757 (4,5); 1,722 (0,9); 1,708 (0,9); 1,696 (0,9); 1,688 (0,9); 1,674 (0,7); 1,638 (0,8); 1,597 (4,6); 1,583 (11,3); 1,576 (12,0); 1,562 (6,3); 1,543 (0,8); 1,522 (1,2); 1,501 (0,6); 1,472 (0,6); 1,437 (9,0); 1,402 (1,2); 1,361 (6,2); 1,348 (11,9); 1,341 (12,8); 1,327 (7,6); 1,317 (3,5); 1,269 (8,7); 1,222 (1,9); 1,204 (3,2); 1,186 (1,7); 1,164 (0,6); 1,154 (0,6); 1,145 (0,5); 1,131 (0,6); 1,109 (0,6); 1,095 (0,6); 1,091 (0,6); 1,047 (0,5); 1,040 (0,4); 1,031 (0,4); 1,009 (0,4); 0,987 (0,4); 0,976 (0,4); 0,952 (0,4); 0,945 (0,5); 0,897 (0,8); 0,881 (1,8); 0,855 (1,3); 0,838 (0,9); 0,824 (0,5); 0,808 (0,5); 0,797 (0,4); 0,776 (0,4); 0,766 (0,5); 0,739 (0,4); 0,635 (0,3); 0,526 (0,3); 0,147 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (80,2); -0,020 (0,5); -0,121 (0,3); -0,149 (0,4); -0,213 (0,4); -2,478 (0,3); -3,017 (0,3)

Beispiel -T3-186: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,202 (8,0); 8,190 (8,4); 7,927 (0,7); 7,858 (4,8); 7,731 (2,7); 7,708 (2,9); 7,690 (4,8); 7,685 (3,1); 7,657 (2,8); 7,652 (2,5); 7,637 (3,4); 7,632 (3,2); 7,590 (0,8); 7,477 (3,0); 7,456 (4,0); 6,984 (0,3); 6,951 (1,9); 6,041 (0,3); 5,521 (0,4); 5,491 (0,4); 5,486 (0,3); 3,874 (0,9); 3,056 (0,3); 2,890 (4,6); 2,872 (1,0); 2,863 (1,5); 2,853 (2,1); 2,844 (2,2); 2,835 (1,7); 2,825 (1,1); 2,799 (0,4); 2,772 (4,2); 2,711 (0,4); 2,684 (0,4); 2,671 (0,4); 2,362 (0,4); 2,319 (0,4); 2,001 (1,1); 2,583 (0,4); 2,543 (0,5); 2,522 (0,5); 2,505 (0,6); 2,486 (6,3); 2,351 (0,9); 2,310 (1,3); 2,296 (1,3); 2,179 (2377,2); 2,121 (5,6); 2,115 (6,3); 2,108 (7,1); 2,102 (5,6); 2,043 (0,8); 2,018 (1,0); 1,953 (344,9); 1,947 (823,4); 1,941 (840,7); 1,935 (641,3); 1,929 (374,2); 1,827 (0,6); 1,781 (2,1); 1,776 (3,3); 1,770 (4,8); 1,763 (3,6); 1,758 (2,2); 1,437 (16,0); 1,311 (0,4); 1,283 (0,5); 1,268 (0,9); 0,794 (1,2); 0,777 (5,1); 0,764 (5,1); 0,747 (1,8); 0,738 (0,4); 0,612 (1,5); 0,600 (4,9); 0,594 (5,3); 0,586 (4,3); 0,573 (1,5); 0,000 (28,5)

Beispiel -T3-187: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 19,987 (0,6); 8,214 (12,8); 8,200 (13,9); 7,859 (6,8); 7,738 (9,0); 7,733 (14,7); 7,707 (9,2); 7,701 (5,6); 7,686 (6,6); 7,680 (5,9); 7,610 (3,2); 7,587 (1,7); 7,510 (9,9); 7,469 (8,2); 7,448 (0,5); 2,469 (1,8); 2,464 (2,6); 2,459 (2,0); 2,157 (1156,2); 2,120 (5,2); 2,114 (6,3); 2,108 (7,3); 2,102 (5,6); 2,096 (3,3); 1,965 (26,5); 1,959 (71,5); 1,953 (40,8); 1,947 (750,3); 1,941 (1019,6); 1,935 (723,9); 1,928 (383,2); 1,781 (2,7); 1,775 (4,6); 1,769 (8,2); 1,763 (4,3); 1,757 (2,6); 1,634 (0,6); 1,597 (4,4); 1,583 (11,2); 1,576 (11,2); 1,563 (6,0); 1,523 (1,0); 1,437 (16,0); 1,401 (1,1); 1,361 (6,0); 1,347 (11,3); 1,341 (12,0); 1,326 (4,9); 1,270 (8,5); 0,882 (2,0); 0,857 (2,2); 0,000 (31,6)

Beispiel -T3-188: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,340 (9,9); 8,272 (16,0); 8,192 (0,3); 7,761 (9,7); 7,755 (12,3); 7,742 (0,4); 7,737 (0,3); 7,727 (6,7); 7,721 (5,0); 7,706 (7,8); 7,700 (6,5); 7,569 (4,5); 7,574 (11,5); 7,503 (9,3); 5,447 (0,8); 2,576 (0,8); 2,572 (0,8); 2,250 (0,4); 2,139 (89,4); 2,120 (0,7); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,3); 1,965 (3,2); 1,959 (8,4); 1,953 (52,4); 1,947 (96,8); 1,940 (132,2); 1,934 (91,5); 1,928 (47,5); 1,781 (0,3); 1,775 (0,8); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,604 (5,0); 1,590 (12,7); 1,583 (12,8); 1,569 (6,7); 1,529 (0,9); 1,406 (0,8); 1,366 (6,8); 1,352 (12,5); 1,346 (13,2); 1,331 (5,3); 1,309 (0,5); 1,293 (0,9); 1,285 (1,5); 1,269 (7,2); 0,898 (0,3); 0,881 (0,9); 0,864 (0,4); 0,000 (3,9)

Beispiel -T3-189: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,726 (0,3); 8,720 (0,4); 8,701 (10,1); 8,694 (10,3); 8,265 (0,8); 8,253 (15,0); 8,246 (15,9); 8,032 (0,8); 8,021 (11,3); 8,015 (11,1); 7,978 (7,4); 7,766 (6,5); 7,051 (2,2); 5,449 (0,6); 4,068 (0,4); 4,050 (0,4); 3,024 (0,4); 2,888 (0,5); 2,878 (1,7); 2,869 (2,5); 2,860 (3,8); 2,851 (3,8); 2,842 (2,5); 2,833 (1,8); 2,823 (0,6); 2,729 (0,6); 2,473 (0,5); 2,468 (0,9); 2,464 (1,2); 2,459 (0,9); 2,454 (0,5); 2,186 (234,9); 2,121 (0,8); 2,114 (1,2); 2,108 (1,5); 2,102 (1,1); 2,096 (0,6); 2,087 (0,5); 2,035 (0,4); 2,017 (0,7); 1,998 (0,6); 1,972 (2,6); 1,965 (5,7); 1,959 (13,8); 1,953 (85,4); 1,947 (157,6); 1,941 (215,5); 1,935 (150,1); 1,928 (78,1); 1,782 (0,5); 1,775 (0,9); 1,769 (1,3); 1,763 (0,9); 1,757 (0,5); 1,437 (3,4); 1,308 (0,3); 1,268 (8,7); 1,222 (0,6); 1,204 (1,0); 1,186 (0,5); 0,898 (0,4); 0,881 (1,1); 0,864 (0,5); 0,810 (2,1); 0,797 (6,2); 0,792 (8,4); 0,779 (8,6); 0,774 (6,4); 0,762 (2,8); 0,740 (0,4); 0,722 (0,4); 0,682 (0,3); 0,652 (0,4); 0,622 (2,8); 0,610 (7,3); 0,604 (7,7); 0,600 (6,9); 0,595 (6,8); 0,582 (2,1); 0,543 (0,4); 0,391 (0,3); 0,386 (0,3); 0,008 (1,2); 0,000 (38,3); -0,009 (1,6)

Beispiel -T3-190: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,487 (7,1); 9,105 (5,1); 9,102 (5,1); 8,887 (9,5); 8,557 (11,6); 8,317 (0,4); 7,823 (4,4); 7,820 (6,3); 7,815 (6,8); 7,810 (5,3); 7,602 (5,1); 7,597 (1,5); 7,580 (4,2); 4,055 (1,3); 4,038 (3,6); 4,020 (3,8); 4,002 (1,3); 3,560 (1,9); 3,542 (6,2); 3,523 (6,3); 3,505 (2,1); 3,328 (157,1); 2,671 (1,6); 2,506 (190,5); 2,502 (243,8); 2,329 (1,7); 1,989 (16,0); 1,617 (2,3); 1,602 (5,1); 1,586 (6,6); 1,563 (2,7); 1,296 (2,7); 1,282 (6,2); 1,276 (6,6); 1,261 (2,3); 1,193 (4,5); 1,181 (7,3); 1,175 (10,1); 1,163 (14,9); 1,158 (7,2); 1,145 (6,8); 0,000 (25,1)

Beispiel -T3-191: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,426 (3,3); 8,594 (4,6); 8,359 (4,8); 8,317 (0,5); 7,785 (4,0); 7,779 (2,8); 7,770 (2,1); 7,765 (1,1); 7,545 (2,7); 7,537 (0,6); 7,530 (0,5); 7,522 (2,3); 7,351 (6,5); 3,331 (363,6); 3,015 (2,0); 2,897 (6,6); 2,979 (6,7); 2,960 (2,1); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,524 (4,4); 2,511 (86,9); 2,507 (177,3); 2,502 (236,3); 2,498 (176,3); 2,493 (90,0); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,2); 1,611 (1,1); 1,597 (2,7); 1,590 (2,9); 1,577 (1,2); 1,398 (15,1); 1,285 (1,3); 1,271 (2,7); 1,264 (2,9); 1,250 (1,1); 1,195 (7,5); 1,177 (18,0); 1,158 (7,3); 0,146 (1,7); 0,008 (13,5); 0,000 (371,8); -0,008 (16,5); -0,150 (1,7)

Beispiel -T3-192: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,435 (6,5); 8,667 (9,2); 8,408 (9,3); 8,317 (1,5); 7,796 (4,7); 7,787 (4,3); 7,780 (6,0); 7,775 (3,7); 7,770 (5,2); 7,764 (2,0); 7,559 (5,8); 7,548 (5,4); 7,537 (5,3); 3,330 (735,7); 3,123 (0,7); 3,082 (1,9); 3,063 (6,4); 3,045 (6,6); 3,027 (2,0); 2,838 (0,6); 2,676 (2,8); 2,671 (4,1); 2,667 (3,1); 2,525 (10,0); 2,520 (15,7); 2,511 (270,8); 2,507 (459,4); 2,502 (612,6); 2,498 (450,6); 2,493 (223,7); 2,333 (2,9); 2,329 (4,0); 2,324 (3,0); 1,614 (2,1); 1,600 (5,3); 1,593 (5,7); 1,580 (2,4); 1,284 (2,5); 1,271 (5,3); 1,264 (5,7); 1,250 (2,1); 1,205 (7,5); 1,187 (16,0); 1,168 (7,5); 0,146 (1,8); 0,008 (13,1); 0,000 (404,0); -0,009 (15,5); -0,150 (1,8)

Beispiel -T3-193: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, c_6-DMSO):

δ= 9,458 (0,3); 8,777 (8,3); 8,542 (3,2); 8,531 (3,0); 8,504 (0,3); 8,462 (8,6); 8,337 (3,7); 8,317 (1,8); 7,962 (3,6); 7,750 (2,0); 7,745 (3,2); 7,738 (1,0); 7,726 (12,9); 7,717 (1,1); 7,710 (1,7); 7,692 (1,1); 7,658 (1,1); 7,653 (0,9); 7,569 (1,2); 7,549 (1,0); 7,529 (3,7); 7,526 (2,4); 7,510 (2,0); 7,507 (3,2); 7,484 (1,3); 7,465 (0,8); 7,420 (0,5); 7,402 (0,6); 7,058 (1,6); 6,924 (3,7); 6,789 (1,9); 4,055 (1,2); 4,037 (3,6); 4,020 (3,6); 4,002 (1,2); 3,328 (98,6); 3,305 (0,8); 2,858 (0,9); 2,848 (1,2); 2,840 (1,9); 2,830 (1,9); 2,821 (1,3); 2,812 (0,9); 2,807 (0,4); 2,676 (1,1); 2,671 (1,6); 2,667 (1,2); 2,662 (0,6); 2,524 (3,6); 2,511 (83,9); 2,507 (175,0); 2,502 (233,7); 2,498 (171,2); 2,493 (84,1); 2,338 (0,5); 2,333 (1,1); 2,329 (1,5); 2,324 (1,1); 1,989 (16,0); 1,234 (0,8); 1,193 (4,2); 1,175 (8,4); 1,157 (4,2); 0,729 (1,2); 0,716 (3,5); 0,711 (4,9); 0,699 (4,5); 0,693 (4,0); 0,682 (1,6); 0,568 (0,4); 0,559 (1,8); 0,549 (5,1); 0,543 (4,5); 0,534 (3,7); 0,522 (1,2); 0,146 (0,4); 0,008 (2,5); 0,000 (83,8); -0,009 (3,2); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-194: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):

δ= 8,349 (9,1); 8,304 (0,4); 8,286 (14,8); 8,241 (0,3); 7,801 (9,7); 7,795 (11,3); 7,718 (6,0); 7,712 (5,6); 7,697 (7,3); 7,692 (6,9); 7,665 (0,5); 7,647 (0,7); 7,643 (0,7); 7,635 (0,5); 7,617 (0,6); 7,614 (0,7); 7,584 (1,1); 7,541 (0,6); 7,522 (11,4); 7,501 (9,2); 7,484 (0,5); 7,458

(4,1); 7,422 (0,4); 7,236 (0,4); 7,215 (0,3); 6,837 (0,5); 6,673 (0,4); 5,517 (1,3); 5,575 (0,4); 5,973 (0,3); 5,954 (0,3); 5,895 (1,4); 5,447 (5,8); 3,817 (0,8); 3,789 (0,4); 3,550 (1,0); 3,545 (0,9); 2,579 (0,4); 2,575 (0,5); 2,269 (0,4); 2,253 (0,5); 2,140 (512,8); 2,120 (7,2); 2,114 (6,9); 2,108 (7,9); 2,102 (5,5); 2,095 (3,1); 1,965 (25,3); 1,959 (63,5); 1,953 (41,4); 1,947 (768,8); 1,940 (1065,1); 1,934 (761,0); 1,928 (406,5); 1,849 (1,2); 1,799 (0,7); 1,781 (2,8); 1,775 (4,8); 1,769 (6,7); 1,763 (4,7); 1,756 (2,7); 1,728 (0,5); 1,714 (0,5); 1,699 (0,5); 1,677 (0,4); 1,666 (0,5); 1,649 (0,4); 1,628 (0,4); 1,580 (0,4); 1,570 (0,4); 1,556 (0,4); 1,515 (3,6); 1,477 (5,4); 1,466 (14,4); 1,457 (16,0); 1,447 (6,5); 1,407 (0,7); 1,398 (0,5); 1,386 (0,8); 1,368 (0,5); 1,340 (6,0); 1,305 (1,0); 1,285 (8,1); 1,270 (5,0); 1,247 (0,7); 1,230 (0,5); 1,217 (0,6); 1,199 (0,5); 1,190 (0,6); 1,185 (0,7); 1,145 (6,1); 1,135 (15,7); 1,126 (14,8); 1,115 (5,4); 1,076 (0,6); 1,063 (0,4); 0,994 (0,4); 0,976 (0,6); 0,958 (0,5); 0,951 (0,4); 0,930 (0,4); 0,923 (0,4); 0,882 (1,1); 0,856 (0,9); 0,842 (0,7); 0,783 (0,4); 0,771 (0,4); 0,764 (0,5); 0,735 (0,4); 0,597 (0,3); 0,564 (0,4); 0,008 (1,0); 0,000 (32,8)

Beispiel -T3-195: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,157 (9,1); 8,920 (11,2); 8,511 (11,3); 8,325 (5,6); 8,319 (6,1); 8,030 (5,3); 7,802 (8,5); 7,797 (7,4); 7,789 (5,4); 7,781 (3,0); 7,591 (6,0); 7,582 (1,3); 7,569 (5,0); 4,037 (0,6); 4,019 (0,6); 3,329 (278,3); 3,090 (0,5); 3,071 (1,9); 3,053 (2,4); 3,037 (2,5); 3,019 (2,1); 3,000 (0,7); 2,675 (3,1); 2,671 (4,3); 2,667 (3,5); 2,597 (0,4); 2,506 (484,1); 2,502 (653,4); 2,498 (511,0); 2,470 (6,8); 2,452 (3,7); 2,434 (2,4); 2,416 (1,0); 2,333 (3,0); 2,329 (4,1); 2,325 (3,3); 1,969 (2,4); 1,621 (2,6); 1,607 (6,7); 1,600 (7,6); 1,587 (3,1); 1,397 (1,3); 1,335 (0,4); 1,327 (0,3); 1,297 (0,8); 1,286 (3,2); 1,273 (7,0); 1,266 (7,8); 1,252 (3,2); 1,235 (5,1); 1,193 (0,7); 1,175 (1,3); 1,157 (0,7); 1,107 (0,4); 0,982 (7,4); 0,964 (16,0); 0,945 (7,3); 0,854 (0,5); 0,835 (0,3); 0,000 (20,8)

Beispiel -T3-196: ^{1}H-NMR (301,6 MHz, CD_3CN):

δ= 8,223 (0,5); 8,218 (0,5); 8,045 (0,3); 8,041 (0,3); 2,621 (0,7); 2,150 (4,6); 1,948 (1,3); 1,944 (2,2); 1,940 (3,2); 1,936 (2,2); 1,932 (1,1); 1,135 (16,0); 0,000 (0,9)

Beispiel -T3-197: ^{1}H-NMR (301,6 MHz, CD_3CN):

δ= 8,765 (7,5); 8,761 (7,5); 8,2493 (5,5); 8,2486 (9,9); 8,230 (8,0); 8,115 (8,3); 8,111 (8,0); 8,038 (4,4); 7,992 (4,5); 7,394 (1,5); 3,844 (16,0); 3,552 (11,2); 3,542 (11,1); 3,312 (0,7); 3,303 (0,7); 2,172 (783,3); 2,155 (28,3); 2,088 (0,6); 2,084 (0,8); 2,080 (0,6); 1,998 (2,0); 1,989 (5,4); 1,985 (7,5); 1,982 (52,9); 1,977 (99,7); 1,973 (145,4); 1,969 (98,4); 1,965 (48,4); 1,956 (0,7); 1,863 (0,5); 1,859 (0,8); 1,854 (0,6); 1,312 (2,7); 1,303 (8,1); 1,299 (8,0); 1,291 (3,5); 1,266 (0,4); 1,192 (0,4); 1,186 (3,5); 1,158 (7,9); 1,154 (7,9); 1,146 (2,6)

Beispiel -T3-198: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,484 (3,8); 9,467 (5,6); 8,776 (0,9); 8,753 (5,3); 8,574 (0,6); 8,561 (8,6); 8,539 (5,3); 8,491 (3,8); 8,317 (1,8); 8,178 (0,4); 7,782 (7,1); 7,778 (3,7); 7,765 (7,7); 7,759 (1,3); 7,579 (2,8); 7,557 (2,4); 4,049 (0,4); 3,497 (0,3); 3,479 (0,7); 3,461 (0,7); 3,413 (1,0); 3,395 (1,5); 3,377 (1,6); 3,329 (582,8); 3,287 (1,0); 2,676 (4,0); 2,671 (5,5); 2,667 (4,1); 2,524 (14,3); 2,507 (629,0); 2,502 (826,7); 2,498 (606,0); 2,333 (3,8); 2,329 (5,2); 2,324 (3,9); 1,974 (1,3); 1,600 (3,4); 1,593 (3,7); 1,580 (1,5); 1,289 (1,5); 1,276 (3,3); 1,269 (3,6); 1,255 (1,3); 1,237 (0,4); 1,150 (0,4); 1,126 (0,7); 1,108 (8,3); 1,089 (16,0); 1,071 (7,0); 0,009 (0,5); 0,000 (18,9); -0,008 (0,7)

Beispiel T3 199: ^{1}H-NMR (400,1 MHz, d_6-DMSO):

d= 9,86 (0,0328); 8,85 (0,0664); 8,56 (0,0471);8,51 (0,0250);8,18 (0,0290);8,17 (0,0298);8,09 (0,0245);3,47 (0,0401);3,45 (0,0407);3,31 (0,7767);2,54 (0,3233);2,50 (0,3250);2,50 (0,4400);2,50 (0,3578);1,25 (0,0306);1,25 (0,0369);1,15 (0,0210);1,14 (0,0347);1,13 (0,0321);0,00 (1,0000)

Beispiel -T3-200: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD_3CN):

δ= 8,745 (9,9); 8,739 (8,9); 8,566 (1,6); 8,560 (1,6); 8,264 (13,9); 8,256 (11,3); 8,244 (0,7); 8,115 (9,6); 8,109 (9,4); 8,056 (1,8); 8,050 (1,7); 7,998 (0,4); 7,993 (7,2); 7,990 (7,2); 7,767 (6,3); 7,690 (2,3); 7,366 (0,6); 7,357 (0,3); 5,448 (3,1); 3,724 (0,8); 3,071 (0,5); 2,882 (0,5); 2,626 (0,7); 2,603 (0,5); 2,468 (0,4); 2,463 (0,5); 2,458 (0,4); 2,152 (188,2); 2,120 (1,4); 2,114 (1,8); 2,108 (2,1); 2,102 (1,5); 2,096 (0,8); 1,965 (8,5); 1,959 (23,8); 1,953 (126,4); 1,947 (227,5); 1,941 (305,0); 1,935 (212,6); 1,928 (110,8); 1,868 (0,3); 1,781 (0,8); 1,775 (1,4); 1,769 (1,9); 1,763 (1,3); 1,757 (0,7); 1,615 (3,9); 1,600 (10,0); 1,593 (10,8); 1,580 (6,7); 1,571 (2,5); 1,557 (1,3); 1,540 (0,7); 1,410 (0,6); 1,386 (0,4); 1,370 (5,3); 1,356 (10,0); 1,350 (10,4); 1,335 (5,3); 1,325 (2,3); 1,310 (1,1); 1,297 (0,5); 1,285 (0,7); 1,270 (2,4); 1,202 (0,6); 1,134 (16,0); 0,882 (0,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,0); -0,008 (0,8)

Beispiel -T3-201: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,467 (2,2); 8,775 (3,1); 8,578 (1,5); 8,573 (1,5); 8,490 (3,1); 8,477 (1,4); 7,800 (0,6); 7,795 (1,2); 7,787 (1,8); 7,782 (2,4); 7,778 (1,9); 7,578 (1,7); 7,555 (1,5); 3,498 (0,6); 3,479 (1,9); 3,461 (1,9); 3,443 (0,6); 3,330 (198,5); 2,676 (0,7); 2,671 (1,0); 2,667 (0,7); 2,524 (2,5); 2,507 (107,2); 2,502 (141,8); 2,498 (106,1); 2,333 (0,7); 2,329 (0,9); 2,325 (0,7); 1,989 (0,4); 1,614 (0,7); 1,600 (1,8); 1,593 (1,9); 1,580 (0,8); 1,398 (16,0); 1,287 (0,8); 1,274 (1,8); 1,267 (2,0); 1,253 (0,7); 1,235 (0,3); 1,126 (2,1); 1,108 (4,7); 1,089 (2,1); 0,146 (0,9); 0,008 (7,4); 0,000 (188,9); -0,008 (8,7); -0,150 (0,9)

Beispiel T3 202: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 9,428 (4,8); 8,626 (5,4); 8,603 (6,6); 8,357 (6,9); 8,346 (0,6); 7,790 (1,3); 7,785 (2,8); 7,777 (4,1); 7,772 (5,1); 7,768 (4,0); 7,562 (3,3); 7,548 (3,9); 7,537 (0,8); 7,525 (3,2); 7,428 (3,2); 3,343 (390,5); 2,997 (1,5); 2,973 (4,8); 2,955 (5,1); 2,937 (1,8); 2,676 (1,0); 2,672 (1,3); 2,668 (1,0); 2,507 (163,2); 2,503 (208,0); 2,499 (152,2); 2,334 (1,0); 2,330 (1,3); 2,325 (0,9); 2,188 (1,0); 2,100 (16,0); 2,075 (0,5); 1,613 (1,6); 1,598 (4,1); 1,592 (4,5); 1,579 (2,0); 1,284 (2,0); 1,270 (4,3); 1,263 (4,5); 1,249 (1,8); 1,232 (0,4); 1,214 (0,7); 1,192 (3,5); 1,173 (11,4); 1,155 (5,2); 0,146 (0,5); 0,008 (4,9); 0,000 (117,1); -0,008 (4,9); -0,150 (0,5)

Beispiel -T3-203: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,601 (0,6); 8,581 (6,8); 8,520 (2,4); 8,509 (2,4); 8,343 (7,1); 8,137 (0,8); 7,732 (1,3); 7,726 (2,4); 7,707 (9,8); 7,561 (3,2); 7,499 (2,9); 7,477 (2,5); 7,427 (3,2); 3,329 (31,4); 2,989 (1,5); 2,971 (5,0); 2,952 (5,1); 2,940 (0,7); 2,934 (1,6); 2,922 (0,4); 2,854 (0,6); 2,844 (0,9); 2,836 (1,4); 2,826 (1,4); 2,818 (1,0); 2,808 (0,7); 2,676 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,524 (1,7); 2,511 (39,4); 2,507 (80,4); 2,502 (106,1); 2,498 (78,2); 2,333 (0,5); 2,329 (0,7); 2,324 (0,5); 2,187 (1,2); 2,116 (0,8); 2,101 (16,0); 2,075 (1,0); 1,909 (0,5); 1,230 (0,4); 1,212 (0,9); 1,190 (5,7); 1,172 (11,9); 1,154 (5,4); 0,726 (0,9); 0,713 (2,6); 0,708 (3,6); 0,686 (3,5); 0,680 (3,0); 0,673 (1,3); 0,560 (1,2); 0,550 (3,7); 0,542 (3,5); 0,534 (3,0); 0,522 (0,9); 0,008 (2,2); 0,000 (67,6); -0,008 (2,8)

Beispiel -T3-204: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d_6-DMSO):

δ= 8,968 (6,3); 8,871 (0,8); 8,864 (4,0); 8,858 (3,7); 8,617 (3,8); 8,358 (2,8); 8,554 (2,9); 8,469 (3,0); 8,464 (2,8); 8,379 (3,8); 8,373 (3,6); 8,318 (1,3); 8,261 (0,5); 8,255 (0,6); 4,135 (1,4); 3,332 (210,2); 3,309 (0,8); 3,036 (16,0); 3,014 (1,0); 2,886 (0,9); 2,809 (0,3); 2,798 (0,7); 2,791 (0,8); 2,782 (1,3); 2,772 (1,0); 2,762 (3,0); 2,727 (0,4); 2,676 (0,8); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,541 (0,4); 2,525 (2,7); 2,511 (61,5); 2,507 (127,7); 2,503 (170,1); 2,498 (126,6); 2,494 (64,4); 2,334 (0,8); 2,329 (1,1); 2,325 (0,9); 2,075 (2,2); 1,169 (0,5); 0,836 (0,3); 0,817 (0,4); 0,775 (0,4); 0,608 (0,4); 0,587 (2,1); 0,579 (2,6); 0,570 (1,1); 0,562 (0,6); 0,544 (1,3); 0,532 (2,1); 0,515 (2,1); 0,498 (0,5); 0,146

(0,4); 0,008 (2,9); 0,000 (95,4); -0,008 (4,6); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-205: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,991 (0,5); 8,972 (14,8); 8,878 (0,4); 8,861 (9,9); 8,855 (10,1); 8,716 (4,9); 8,706 (5,3); 8,672 (0,4); 8,661 (0,4); 8,642 (0,8); 8,631 (14,8); 8,562 (7,0); 8,557 (7,2); 8,471 (7,3); 8,467 (6,8); 8,319 (8,7); 8,284 (0,7); 8,258 (0,8); 8,247 (9,6); 8,240 (9,4); 7,948 (0,4); 7,942 (0,4); 7,795 (0,4); 4,156 (1,3); 3,329 (163,2); 3,306 (1,7); 2,887 (0,6); 2,877 (1,4); 2,867 (2,0); 2,859 (3,0); 2,849 (3,2); 2,840 (2,2); 2,830 (1,7); 2,821 (0,8); 2,676 (1,6); 2,671 (2,1); 2,667 (1,6); 2,575 (5,4); 2,507 (239,7); 2,502 (316,6); 2,498 (235,7); 2,333 (1,4); 2,329 (2,0); 2,325 (1,5); 2,076 (16,0); 0,760 (1,9); 0,747 (5,6); 0,743 (7,6); 0,730 (7,4); 0,725 (6,3); 0,713 (2,8); 0,573 (2,3); 0,559 (7,1); 0,553 (7,0); 0,550 (8,7); 0,544 (6,4); 0,532 (2,3); 0,495 (0,4); 0,146 (0,8); 0,008 (5,8); 0,000 (177,1); -0,008 (8,0); -0,150 (0,8)

Beispiel -T3-206: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 9,149 (4,9); 8,859 (6,6); 8,459 (6,7); 8,318 (4,2); 8,038 (3,0); 7,936 (3,0); 7,803 (3,4); 7,796 (4,7); 7,793 (4,8); 7,787 (3,7); 7,781 (1,6); 7,587 (4,2); 7,570 (0,9); 7,556 (3,6); 3,733 (0,3); 3,690 (0,4); 3,329 (896,7); 3,282 (0,7); 2,981 (1,3); 2,963 (1,5); 2,947 (1,5); 2,929 (1,4); 2,910 (0,5); 2,676 (7,6); 2,671 (10,3); 2,667 (7,7); 2,525 (28,4); 2,511 (589,6); 2,507 (1168,5); 2,502 (1555,2); 2,498 (1146,1); 2,493 (578,6); 2,389 (1,6); 2,370 (1,8); 2,354 (1,8); 2,333 (8,0); 2,329 (10,4); 2,324 (7,7); 2,296 (16,0); 1,909 (0,6); 1,627 (1,6); 1,607 (4,0); 1,600 (4,3); 1,587 (2,0); 1,282 (2,1); 1,269 (3,9); 1,262 (4,2); 1,248 (1,6); 1,147 (0,8); 0,945 (4,8); 0,927 (10,3); 0,908 (4,6); 0,146 (3,8); 0,008 (30,4); 0,000 (880,4); -0,008 (42,5); -0,150 (3,7)

Beispiel -T3-207: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 9,624 (6,5); 9,586 (0,7); 8,884 (9,3); 8,916 (5,7); 8,910 (5,5); 8,728 (0,7); 8,636 (9,3); 8,571 (1,5); 8,560 (4,6); 8,473 (4,6); 8,469 (4,3); 8,330 (6,1); 8,324 (6,0); 7,943 (0,4); 7,798 (0,4); 7,793 (0,4); 4,156 (3,5); 3,332 (774,7); 3,051 (0,6); 2,875 (0,6); 2,672 (1,1); 2,667 (0,9); 2,507 (117,6); 2,503 (153,3); 2,499 (115,3); 2,330 (1,0); 2,325 (0,7); 2,076 (16,0); 1,648 (2,1); 1,634 (5,4); 1,627 (6,2); 1,614 (2,5); 1,304 (2,4); 1,291 (5,2); 1,284 (5,7); 1,269 (2,1); 1,262 (0,8); 1,254 (0,7); 1,240 (0,3); 0,146 (0,4); 0,008 (2,8); 0,000 (78,1); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-208: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,696 (3,0); 8,690 (3,1); 8,249 (4,2); 8,240 (4,3); 8,003 (3,2); 7,997 (3,1); 7,982 (2,3); 7,978 (2,3); 7,946 (0,5); 7,940 (0,5); 7,736 (2,1); 3,066 (16,0); 2,800 (2,7); 2,783 (0,6); 2,776 (0,6); 2,767 (1,1); 2,756 (0,7); 2,748 (0,6); 2,465 (0,4); 2,170 (94,3); 2,115 (0,5); 2,109 (0,6); 2,102 (0,4); 1,965 (2,7); 1,959 (7,1); 1,954 (39,1); 1,947 (71,0); 1,941 (94,9); 1,935 (64,8); 1,929 (33,1); 1,776 (0,4); 1,770 (0,5); 1,763 (0,4); 0,855 (0,3); 0,789 (0,4); 0,579 (1,4); 0,535 (1,7); 0,525 (1,1); 0,518 (1,6); 0,000 (0,5)

Beispiel -T3-209: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 9,461 (4,8); 8,713 (6,6); 8,448 (6,8); 8,317 (1,4); 8,261 (3,0); 8,094 (3,1); 7,800 (1,3); 7,794 (2,8); 7,787 (4,1); 7,782 (5,1); 7,776 (4,1); 7,568 (3,8); 7,557 (0,8); 7,546 (3,2); 3,393 (0,4); 3,331 (347,0); 2,676 (2,0); 2,672 (2,7); 2,667 (2,1); 2,524 (7,4); 2,507 (323,5); 2,503 (427,2); 2,498 (324,8); 2,426 (0,4); 2,334 (1,9); 2,329 (2,7); 2,325 (2,1); 2,197 (0,8); 2,160 (16,0); 1,614 (1,5); 1,600 (4,0); 1,593 (4,4); 1,580 (1,8); 1,284 (1,8); 1,270 (4,0); 1,264 (4,4); 1,249 (1,5); 1,147 (0,6); 1,079 (4,6); 1,061 (10,1); 1,042 (4,5); 0,146 (0,9); 0,008 (6,6); 0,000 (197,0); -0,150 (1,0)

Beispiel -T3-210: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,835 (0,4); 8,692 (6,6); 8,552 (2,5); 8,540 (2,5); 8,513 (0,5); 8,435 (7,0); 8,318 (0,5); 8,278 (3,0); 8,094 (3,0); 7,873 (0,4); 7,742 (1,5); 7,736 (2,5); 7,718 (10,2); 7,520 (3,0); 7,502 (1,5); 7,498 (2,5); 3,367 (1,0); 3,329 (76,1); 3,304 (1,0); 2,857 (0,6); 2,847 (0,9); 2,839 (1,4); 2,829 (1,4); 2,820 (0,9); 2,811 (0,7); 2,676 (0,8); 2,671 (1,1); 2,667 (0,9); 2,524 (3,0); 2,511 (66,6); 2,507 (135,2); 2,502 (176,3); 2,498 (130,4); 2,493 (64,6); 2,333 (0,9); 2,329 (1,2); 2,324 (0,9); 2,193 (1,1); 2,159 (16,0); 2,075 (0,6); 1,153 (0,3); 1,135 (0,7); 1,078 (4,8); 1,060 (10,5); 1,041 (4,6); 0,727 (0,9); 0,714 (2,6); 0,709 (3,6); 0,697 (3,5); 0,691 (3,0); 0,680 (1,3); 0,559 (1,2); 0,548 (3,6); 0,542 (3,3); 0,539 (3,1); 0,533 (3,0); 0,521 (0,9); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (92,3); -0,008 (3,7); -0,150 (0,4)

Beispiel -T3-211: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,641 (0,5); 8,541 (0,8); 8,530 (3,2); 8,524 (3,1); 8,504 (5,0); 8,495 (0,7); 8,385 (0,5); 8,318 (1,5); 8,268 (5,7); 8,260 (0,8); 7,977 (3,1); 7,965 (3,0); 7,943 (0,5); 7,803 (0,8); 7,532 (2,9); 7,375 (2,7); 7,322 (0,3); 7,209 (0,3); 4,421 (0,6); 4,404 (2,1); 4,386 (2,3); 4,369 (1,0); 4,240 (1,1); 4,224 (3,6); 4,206 (3,6); 4,189 (1,2); 4,179 (0,5); 4,162 (0,4); 3,741 (0,4); 3,727 (0,4); 3,328 (176,8); 3,027 (0,8); 2,985 (16,0); 2,886 (0,8); 2,775 (0,5); 2,762 (1,0); 2,748 (1,4); 2,734 (1,2); 2,717 (2,0); 2,676 (2,7); 2,671 (3,8); 2,667 (2,8); 2,524 (10,0); 2,510 (212,4); 2,507 (426,0); 2,502 (559,5); 2,498 (412,6); 2,456 (0,7); 2,333 (2,6); 2,329 (3,5); 2,324 (2,7); 2,075 (1,5); 1,361 (0,8); 1,344 (1,7); 1,329 (5,1); 1,312 (10,0); 1,294 (5,0); 1,282 (0,6); 1,229 (0,6); 1,213 (4,5); 1,196 (8,4); 1,178 (4,2); 1,160 (0,4); 1,147 (0,4); 0,788 (0,3); 0,779 (0,4); 0,704 (0,4); 0,469 (4,1); 0,454 (2,9); 0,146 (1,0); 0,008 (7,5); 0,000 (219,5); -0,008 (9,3); -0,150 (1,0)

Beispiel -T3-212: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 9,450 (2,0); 8,714 (2,7); 8,433 (2,7); 8,220 (1,3); 8,083 (1,3); 7,802 (0,5); 7,796 (1,2); 7,790 (1,7); 7,785 (1,8); 7,780 (1,4); 7,774 (0,6); 7,567 (1,5); 7,556 (3,4); 7,545 (1,3); 3,329 (62,0); 2,675 (0,5); 2,671 (0,7); 2,667 (0,5); 2,506 (78,1); 2,502 (103,1); 2,498 (77,2); 2,329 (0,7); 1,615 (0,6); 1,607 (1,6); 1,594 (1,7); 1,581 (0,7); 1,368 (16,0); 1,287 (0,7); 1,274 (1,6); 1,267 (1,7); 1,253 (0,6); 0,008 (1,3); 0,000 (41,2); -0,008 (1,8)

Beispiel -T3-213: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, d6-DMSO):
δ= 8,692 (2,3); 8,542 (0,8); 8,531 (0,8); 8,417 (2,3); 8,220 (1,0); 8,216 (1,1); 8,079 (1,1); 8,075 (1,0); 7,742 (0,5); 7,737 (0,8); 7,717 (3,3); 7,517 (1,0); 7,496 (0,9); 3,348 (0,4); 3,330 (73,9); 2,839 (0,5); 2,829 (0,5); 2,676 (0,3); 2,671 (0,5); 2,667 (0,4); 2,525 (1,2); 2,520 (1,9); 2,511 (28,1); 2,507 (54,6); 2,502 (72,8); 2,498 (52,8); 2,493 (25,6); 2,333 (0,3); 2,329 (0,5); 2,324 (0,3); 1,398 (16,0); 0,716 (0,8); 0,710 (1,2); 0,698 (1,1); 0,692 (0,9); 0,681 (0,4); 0,562 (0,4); 0,552 (1,2); 0,545 (1,1); 0,536 (0,9); 0,008 (1,1); 0,000 (33,4); -0,009 (1,1)

Beispiel -T3-214: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 20,020 (0,4); 8,203 (15,1); 8,187 (0,8); 8,173 (15,3); 7,865 (8,4); 7,716 (8,3); 7,711 (10,7); 7,683 (5,4); 7,677 (4,2); 7,662 (6,4); 7,656 (5,5); 7,608 (8,3); 7,528 (0,3); 7,504 (10,0); 7,484 (7,9); 7,013 (4,8); 6,937 (3,0); 6,832 (9,8); 6,553 (5,0); 2,910 (0,6); 2,901 (1,7); 2,891 (2,6); 2,883 (3,9); 2,873 (4,0); 2,865 (2,6); 2,855 (1,8); 2,846 (0,6); 2,174 (590,6); 2,150 (3,3); 2,144 (3,9); 2,138 (4,9); 2,132 (3,3); 2,125 (2,0); 1,995 (20,3); 1,988 (51,7); 1,983 (284,0); 1,977 (520,7); 1,970 (703,8); 1,964 (488,9); 1,958 (251,0); 1,811 (1,6); 1,805 (2,8); 1,799 (4,0); 1,793 (2,8); 1,786 (1,4); 1,467 (16,0); 1,299 (0,7); 0,824 (7,1); 0,817 (6,5); 0,807 (8,8); 0,794 (8,9); 0,789 (6,8); 0,777 (2,9); 0,755 (0,4); 0,737 (0,4); 0,570 (0,4); 0,641 (2,8); 0,629 (8,1); 0,623 (8,3); 0,614 (7,3); 0,602 (2,1); 0,030 (2,9)

Beispiel -T3-215: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,215 (15,4); 8,189 (16,0); 7,966 (9,4); 7,763 (8,8); 7,758 (11,3); 7,732 (5,7); 7,726 (4,7); 7,711 (6,6); 7,705 (5,9); 7,672 (4,3); 7,609 (9,4); 7,536 (9,6); 7,515 (7,8); 7,022 (4,7); 6,840 (9,6); 6,659 (4,7); 4,096 (0,8); 4,079 (0,8); 2,495 (1,5); 2,491 (1,3); 2,206 (851,9); 2,150

(2,6); 2,744 (2,8); 2,738 (3,0); 2,131 (2,4); 2,001 (6,5); 1,994 (14,1); 1,983 (141,6); 1,976 (255,1); 1,970 (340,8); 1,964 (252,4); 1,958 (142,1); 1,811 (1,0); 1,805 (1,6); 1,799 (2,1); 1,793 (1,6); 1,787 (1,0); 1,684 (0,9); 1,628 (4,3); 1,611 (12,2); 1,605 (12,9); 1,591 (8,2); 1,551 (0,7); 1,466 (4,4); 1,437 (0,8); 1,390 (5,7); 1,376 (12,2); 1,370 (13,2); 1,355 (4,7); 1,318 (0,5); 1,297 (1,2); 1,251 (1,0); 1,233 (1,9); 1,215 (1,0); 0,029 (1,1)

Beispiel -T3-216: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,197 (4,6); 8,189 (4,8); 7,865 (3,0); 7,859 (1,3); 7,854 (1,9); 7,844 (6,9); 7,839 (3,0); 7,584 (0,6); 7,579 (0,6); 7,516 (2,2); 7,495 (1,7); 7,023 (1,3); 7,018 (0,4); 6,841 (2,7); 6,835 (0,7); 6,660 (1,3); 3,086 (16,0); 2,794 (3,5); 2,778 (0,8); 2,769 (1,2); 2,759 (0,9); 2,751 (0,7); 2,741 (0,3); 2,184 (18,2); 2,175 (42,1); 2,144 (0,3); 2,138 (0,4); 2,002 (1,1); 1,994 (1,5); 1,988 (3,9); 1,983 (13,8); 1,976 (36,2); 1,970 (48,7); 1,964 (34,4); 1,958 (18,2); 1,466 (8,2); 1,233 (0,5); 0,869 (0,5); 0,852 (0,5); 0,805 (0,6); 0,795 (0,5); 0,598 (1,8); 0,512 (1,7); 0,504 (1,6); 0,495 (1,8)

Beispiel -T3-217: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,724 (2,9); 8,717 (3,2); 8,247 (7,4); 8,240 (1,1); 8,028 (3,1); 8,022 (3,1); 7,971 (0,5); 7,965 (0,5); 7,869 (2,3); 7,815 (2,4); 7,034 (1,5); 6,852 (2,9); 6,846 (0,6); 6,671 (1,5); 3,097 (16,0); 2,828 (2,8); 2,812 (0,8); 2,805 (0,6); 2,797 (1,1); 2,786 (0,7); 2,778 (0,8); 2,179 (58,3); 2,150 (0,4); 2,144 (0,5); 2,138 (0,6); 2,131 (0,4); 1,994 (4,3); 1,988 (6,2); 1,982 (37,6); 1,976 (69,1); 1,970 (93,5); 1,964 (64,7); 1,958 (33,4); 1,805 (0,4); 1,799 (0,6); 1,792 (0,4); 0,817 (0,4); 0,606 (1,4); 0,573 (1,0); 0,565 (1,7); 0,556 (1,1); 0,548 (1,5)

Beispiel -T3-218: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 20,011 (0,4); 8,773 (8,6); 8,766 (9,0); 8,741 (1,2); 8,735 (1,2); 8,265 (14,9); 8,261 (16,0); 8,253 (3,2); 8,250 (2,9); 8,143 (9,4); 8,137 (9,5); 8,009 (1,3); 8,002 (1,3); 7,870 (7,3); 7,869 (3,7); 7,814 (8,2); 7,029 (4,5); 6,847 (9,1); 6,666 (4,5); 5,477 (0,5); 3,753 (3,4); 3,653 (0,4); 3,636 (0,6); 3,628 (0,6); 3,611 (0,4); 3,327 (0,4); 3,315 (0,8); 3,304 (0,7); 3,098 (3,7); 3,087 (0,6); 2,911 (0,4); 2,188 (284,6); 2,150 (2,8); 2,144 (3,6); 2,138 (4,5); 2,131 (3,1); 2,125 (1,7); 1,994 (21,0); 1,988 (48,8); 1,982 (280,0); 1,976 (513,9); 1,970 (694,8); 1,964 (480,4); 1,958 (247,2); 1,811 (1,5); 1,805 (2,9); 1,799 (4,1); 1,792 (2,5); 1,786 (1,4); 1,644 (3,6); 1,629 (5,1); 1,623 (9,3); 1,609 (4,8); 1,568 (0,6); 1,440 (0,5); 1,399 (4,9); 1,388 (9,0); 1,379 (9,4); 1,364 (3,7); 1,327 (0,4); 1,299 (0,5); 1,164 (0,7); 0,029 (2,4)

Beispiel -T3-219: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,186 (4,3); 8,170 (4,3); 7,971 (2,5); 7,758 (2,2); 7,641 (1,2); 7,636 (1,8); 7,616 (6,7); 7,558 (0,6); 7,552 (0,5); 7,490 (2,0); 7,488 (1,7); 7,483 (0,7); 7,470 (1,3); 7,468 (1,5); 7,462 (0,8); 3,057 (16,0); 2,765 (3,5); 2,755 (0,7); 2,747 (0,7); 2,739 (1,1); 2,728 (0,7); 2,720 (0,6); 2,138 (32,4); 2,131 (0,4); 2,109 (0,5); 2,102 (0,4); 1,965 (2,1); 1,959 (5,3); 1,953 (31,9); 1,947 (58,9); 1,941 (79,3); 1,934 (56,2); 1,928 (28,6); 1,775 (0,3); 1,769 (0,5); 1,437 (6,1); 0,840 (0,4); 0,822 (0,4); 0,777 (0,5); 0,766 (0,4); 0,568 (1,4); 0,482 (1,4); 0,474 (1,3); 0,464 (1,5)

Beispiel -T3-220: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,895 (3,0); 8,889 (3,2); 8,219 (7,0); 8,000 (3,0); 7,994 (3,0); 7,937 (8,6); 7,897 (0,6); 5,449 (12,1); 3,067 (16,0); 2,891 (0,7); 2,869 (0,3); 2,798 (2,8); 2,785 (0,6); 2,778 (0,7); 2,769 (1,2); 2,758 (0,8); 2,750 (0,7); 2,741 (0,4); 2,474 (0,3); 2,469 (0,5); 2,464 (0,4); 2,189 (56,5); 2,121 (0,4); 2,115 (0,4); 2,109 (0,5); 2,103 (0,4); 2,097 (3,4); 1,965 (1,9); 1,959 (4,3); 1,954 (23,2); 1,947 (42,6); 1,941 (57,3); 1,935 (40,0); 1,928 (20,9); 1,770 (0,3); 1,316 (1,1); 1,300 (0,9); 1,285 (0,3); 1,269 (1,0); 0,853 (0,4); 0,834 (0,4); 0,787 (0,4); 0,776 (0,4); 0,578 (1,6); 0,535 (1,9); 0,525 (1,3); 0,518 (1,7); 0,146 (0,6); 0,008 (4,9); 0,000 (137,9); -0,008 (6,9); -0,150 (0,6)

Beispiel -T3-221: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,893 (3,2); 8,887 (3,2); 8,231 (0,7); 8,225 (0,9); 8,212 (10,1); 8,053 (0,4); 8,042 (6,8); 8,036 (3,6); 7,932 (16,0); 7,011 (1,9); 5,447 (15,9); 2,886 (3,5); 2,876 (1,3); 2,867 (1,8); 2,858 (2,8); 2,848 (2,8); 2,840 (1,8); 2,830 (1,3); 2,821 (0,4); 2,149 (16,6); 2,121 (1,4); 2,114 (1,2); 2,108 (1,2); 2,102 (0,9); 2,096 (0,6); 1,965 (3,2); 1,959 (9,3); 1,953 (46,1); 1,947 (83,1); 1,941 (110,8); 1,934 (76,5); 1,928 (39,4); 1,775 (0,5); 1,769 (0,7); 1,763 (0,4); 1,269 (1,0); 1,259 (0,5); 0,809 (1,5); 0,796 (4,5); 0,791 (5,9); 0,778 (6,1); 0,773 (4,5); 0,761 (2,0); 0,620 (2,0); 0,608 (5,1); 0,603 (5,5); 0,599 (4,9); 0,593 (4,7); 0,581 (1,4); 0,146 (1,3); 0,008 (11,5); 0,000 (286,0); -0,009 (12,3); -0,150 (1,3)

Beispiel -T3-222: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,742 (7,3); 8,736 (7,9); 8,237 (11,7); 8,230 (10,8); 8,112 (8,3); 8,106 (8,3); 7,935 (16,0); 7,717 (1,6); 6,777 (0,5); 5,448 (3,1); 2,170 (68,6); 2,121 (0,4); 2,115 (0,6); 2,108 (0,7); 2,102 (0,5); 1,965 (4,0); 1,959 (7,7); 1,953 (42,0); 1,947 (76,9); 1,941 (104,1); 1,935 (72,7); 1,928 (37,9); 1,776 (0,5); 1,769 (0,6); 1,763 (0,5); 1,697 (0,5); 1,612 (3,1); 1,598 (7,6); 1,591 (7,8); 1,577 (4,2); 1,537 (0,5); 1,523 (1,3); 1,505 (1,2); 1,408 (0,5); 1,368 (4,3); 1,355 (7,7); 1,348 (8,0); 1,333 (3,2); 1,277 (0,4); 1,269 (0,9); 1,259 (1,1); 1,193 (0,9); 1,187 (0,6); 1,183 (0,4); 1,177 (1,0); 1,171 (0,6); 1,166 (0,4); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (259,4); -0,009 (11,5); -0,150 (1,1)

Beispiel -T3-223: ^{1}H-NMR (500,1 MHz, CD3CN):
δ= 8,772 (0,8); 8,732 (3,1); 8,728 (3,0); 8,222 (7,7); 8,215 (5,8); 8,200 (0,8); 8,021 (3,2); 8,017 (3,1); 7,943 (13,2); 6,642 (0,5); 4,077 (1,3); 4,065 (3,9); 4,053 (3,9); 4,042 (1,3); 3,752 (0,8); 3,165 (3,1); 3,069 (0,4); 2,934 (16,0); 2,880 (0,4); 2,245 (0,5); 2,240 (0,6); 2,222 (0,8); 2,146 (25,4); 2,078 (1,0); 2,059 (0,8); 2,055 (1,1); 2,050 (1,3); 2,048 (1,0); 2,042 (0,7); 1,972 (17,2); 1,964 (2,0); 1,958 (5,4); 1,952 (7,4); 1,948 (55,6); 1,944 (100,9); 1,940 (146,1); 1,936 (99,1); 1,931 (49,9); 1,833 (0,4); 1,829 (0,7); 1,825 (0,9); 1,821 (0,7); 1,816 (0,4); 1,684 (3,6); 1,661 (4,0); 1,505 (0,4); 1,473 (3,0); 1,443 (0,6); 1,425 (0,6); 1,422 (0,6); 1,409 (0,8); 1,406 (0,8); 1,380 (2,1); 1,369 (1,6); 1,372 (1,4); 1,363 (0,5); 1,358 (0,7); 1,347 (1,7); 1,316 (0,9); 1,303 (0,9); 1,285 (3,5); 1,277 (3,9); 1,271 (6,9); 1,221 (1,2); 1,213 (6,4); 1,214 (5,7); 1,204 (9,5); 1,201 (7,5); 1,192 (4,8); 1,180 (0,6); 1,175 (0,3); 0,948 (0,4); 0,893 (0,8); 0,882 (1,8); 0,870 (1,5); 0,863 (0,9); 0,860 (0,9); 0,856 (0,9); 0,846 (0,9); 0,000 (7,9)

Beispiel -T3-224: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,271 (7,9); 8,267 (7,8); 8,184 (15,8); 8,183 (15,6); 8,152 (0,7); 8,147 (16,0); 7,781 (6,9); 7,693 (9,4); 7,688 (12,0); 7,678 (0,6); 7,662 (6,6); 7,656 (4,7); 7,641 (7,7); 7,635 (6,2); 7,591 (0,7); 7,179 (11,5); 7,158 (9,1); 6,959 (2,7); 4,086 (0,9); 4,068 (2,7); 4,050 (2,8); 4,032 (0,9); 2,886 (0,4); 2,883 (0,8); 2,873 (2,2); 2,864 (3,0); 2,855 (4,6); 2,846 (4,6); 2,837 (2,8); 2,828 (2,2); 2,816 (0,9); 2,567 (0,7); 2,536 (0,3); 2,503 (0,4); 2,477 (1,2); 2,472 (1,9); 2,467 (2,6); 2,462 (1,9); 2,458 (1,1); 2,411 (0,5); 2,398 (0,5); 2,373 (0,6); 2,310 (0,9); 2,281 (1,2); 2,187 (1104,6); 2,121 (0,9); 2,115 (2,0); 2,109 (2,7); 2,103 (1,9); 2,096 (0,9); 1,993 (0,6); 1,979 (14,2); 1,966 (15,1); 1,960 (36,7); 1,954 (209,3); 1,948 (380,7); 1,941 (511,0); 1,935 (347,0); 1,929 (175,8); 1,916 (1,4); 1,782 (1,0); 1,776 (1,9); 1,770 (2,8); 1,764 (1,8); 1,757 (0,6); 1,437 (14,7); 1,340 (0,4); 1,285 (0,6); 1,270 (2,8); 1,222 (3,4); 1,204 (6,6); 1,186 (3,2); 0,882 (0,5); 0,857 (0,5); 0,847 (0,4); 0,796 (2,4); 0,784 (7,0); 0,779 (9,4); 0,766 (9,7); 0,761 (6,9); 0,749 (3,1); 0,727 (0,5); 0,709 (0,4); 0,654 (0,4); 0,644 (0,4); 0,614 (3,2); 0,602 (7,9); 0,597 (8,2); 0,593 (7,3); 0,587 (7,3); 0,575 (2,2); 0,526 (0,3); 0,146 (7,1); 0,138 (0,4); 0,079 (0,4); 0,069 (0,4); 0,066 (0,3); 0,058 (0,5); 0,054 (0,5); 0,049 (0,5); 0,045 (0,6); 0,037 (0,8); 0,023 (2,0); 0,008 (59,7); 0,000 (1582,5); -0,009 (57,5); -0,033 (0,5); -0,036

(0,5); -0,150 (7,0)

Beispiel -T3-225: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,269 (2,4); 8,266 (2,4); 8,170 (4,4); 8,126 (4,2); 7,787 (2,2); 7,644 (1,2); 7,639 (1,7); 7,624 (1,3); 7,618 (5,4); 7,613 (1,7); 7,56[illegible] (3,6); 7,556 (0,5); 7,490 (2,1); 7,489 (2,0); 7,482 (0,7); 7,479 (1,6); 7,468 (1,6); 7,462 (0,6); 3,058 (14,9); 3,008 (0,4); 2,778 (0,6); 2,77[illegible] (3,2); 2,761 (0,6); 2,753 (0,7); 2,744 (1,1); 2,734 (0,7); 2,726 (0,8); 2,127 (33,1); 2,113 (0,8); 2,106 (0,7); 2,100 (0,5); 1,971 (0,8); 1,963 (2,6); 1,957 (6,7); 1,951 (37,7); 1,945 (66,8); 1,939 (92,9); 1,933 (64,3); 1,927 (33,3); 1,774 (0,4); 1,767 (0,5); 1,761 (0,4); 1,437 (16,0); 1,779 (0,8); 1,204 (0,4); 0,841 (0,5); 0,823 (0,4); 0,780 (0,5); 0,769 (0,4); 0,581 (1,4); 0,575 (1,4); 0,487 (1,5); 0,479 (1,3); 0,470 (1,5); 0,146 (1,1); 0,008 (9,5); 0,000 (282,4); -0,009 (11,4); -0,150 (1,2)

Beispiel -T3-226: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,269 (7,2); 8,266 (7,5); 8,191 (16,0); 8,117 (15,3); 8,056 (0,9); 7,789 (6,5); 7,741 (8,2); 7,735 (10,5); 7,709 (5,2); 7,703 (4,0); 7,687 (6,0); 7,682 (5,1); 7,582 (0,8); 7,554 (4,5); 7,509 (10,0); 7,488 (8,2); 4,084 (0,6); 4,067 (1,9); 4,049 (1,9); 4,032 (0,6); 3,063 (0,7); 3,040 (5,6); 2,802 (4,9); 2,854 (0,6); 2,568 (0,4); 2,126 (170,0); 2,112 (2,6); 2,106 (2,7); 2,100 (1,9); 2,093 (1,0); 2,035 (0,4); 1,970 (10,0); 1,962 (11,5); 1,956 (26,7); 1,951 (152,2); 1,944 (278,1); 1,938 (376,5); 1,932 (259,9); 1,926 (134,2); 1,913 (1,4); 1,779 (0,8); 1,773 (1,5); 1,767 (2,1); 1,761 (1,4); 1,754 (0,7); 1,597 (4,0); 1,583 (10,7); 1,578 (10,4); 1,563 (5,3); 1,523 (0,7); 1,436 (8,2); 1,404 (0,7); 1,384 (5,4); 1,350 (10,4); 1,344 (11,2); 1,329 (4,1); 1,318 (0,3); 1,292 (0,5); 1,269 (2,7); 1,221 (2,2); 1,209 (4,2); 1,185 (2,1); 0,881 (0,4); 0,858 (0,3); 0,145 (5,2); 0,031 (0,9); 0,0071 (35,1); 0,0066 (35,1); -0,001 (985,7); -0,009 (44,0); -0,026 (0,9); -0,040 (0,4); -0,151 (5,1)

Beispiel -T3-227: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,511 (7,8); 8,508 (7,8); 8,174 (16,0); 8,118 (13,4); 8,099 (7,8); 7,694 (9,8); 7,688 (12,4); 7,682 (6,8); 7,656 (5,0); 7,641 (7,7); 7,635 (8,4); 7,499 (0,3); 7,476 (11,6); 7,455 (9,2); 6,938 (2,9); 3,062 (0,6); 2,880 (0,7); 2,870 (2,1); 2,861 (3,0); 2,852 (4,7); 2,843 (4,7); 2,834 (3,0); 2,825 (2,2); 2,815 (0,7); 2,543 (0,4); 2,468 (0,4); 2,463 (0,6); 2,459 (0,4); 2,163 (162,8); 2,120 (1,0); 2,114 (1,0); 2,108 (1,1); 2,102 (0,9); 2,087 (20,5); 1,972 (1,6); 1,965 (5,0); 1,959 (13,4); 1,953 (69,2); 1,947 (125,1); 1,941 (166,4); 1,935 (115,7); 1,928 (58,6); 1,781 (0,4); 1,775 (0,7); 1,769 (1,0); 1,763 (0,6); 1,757 (0,3); 1,285 (0,4); 1,269 (1,7); 1,204 (0,6); 1,186 (0,3); 1,179 (0,8); 0,794 (2,5); 0,781 (7,3); 0,776 (9,8); 0,763 (10,2); 0,758 (7,4); 0,746 (3,4); 0,724 (0,4); 0,707 (0,4); 0,652 (0,4); 0,642 (0,4); 0,612 (3,3); 0,601 (8,5); 0,595 (8,9); 0,591 (8,1); 0,586 (7,9); 0,573 (2,5); 0,536 (0,4); 0,528 (0,3); 0,146 (2,7); 0,029 (0,4); 0,008 (25,1); 0,000 (580,3); -0,009 (29,4); -0,028 (0,7); -0,150 (2,7)

Beispiel -T3-228: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,508 (2,3); 8,184 (4,7); 8,130 (3,9); 8,099 (2,3); 7,741 (2,6); 7,735 (3,4); 7,717 (1,8); 7,705 (1,3); 7,690 (2,1); 7,684 (1,7); 7,644 (1,3); 7,539 (3,2); 7,488 (2,6); 7,545 (0,6); 7,468 (0,5); 2,483 (0,7); 2,459 (0,5); 2,159 (239,3); 2,119 (0,6); 2,113 (0,8); 2,107 (0,9); 2,101 (0,7); 2,095 (0,4); 1,971 (1,0); 1,964 (3,7); 1,958 (8,3); 1,952 (53,0); 1,946 (96,2); 1,940 (130,0); 1,933 (90,1); 1,927 (46,8); 1,780 (0,3); 1,774 (0,6); 1,768 (0,8); 1,762 (0,6); 1,595 (1,3); 1,581 (3,4); 1,574 (3,5); 1,560 (1,8); 1,437 (16,0); 1,363 (1,8); 1,349 (3,4); 1,343 (3,5); 1,328 (1,4); 1,270 (0,7); 1,204 (0,4); 0,146 (1,3); 0,008 (10,5); 0,000 (282,8); -0,009 (11,9); -0,150 (1,3)

Beispiel -T3-229: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,507 (1,8); 8,181 (3,4); 8,104 (3,1); 7,844 (0,8); 7,839 (1,1); 7,619 (3,9); 7,382 (0,4); 7,357 (0,4); 7,488 (1,4); 7,481 (0,5); 7,466 (1,1); 7,460 (0,4); 3,056 (10,5); 2,855 (0,4); 2,771 (2,3); 2,763 (0,5); 2,755 (0,5); 2,745 (0,8); 2,736 (0,5); 2,728 (0,4); 2,544 (0,4); 2,131 (16,7); 1,971 (0,5); 1,963 (1,1); 1,957 (2,7); 1,951 (15,4); 1,945 (28,4); 1,939 (38,5); 1,933 (28,5); 1,927 (13,7); 1,437 (16,0); 0,779 (0,4); 0,576 (1,0); 0,488 (1,0); 0,480 (0,9); 0,471 (1,0); 0,146 (0,4); 0,008 (3,0); 0,000 (85,2); -0,009 (3,4); -0,150 (0,4)

Beispiel T4-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,170 (4,8); 7,860 (5,7); 7,840 (2,0); 7,833 (1,3); 7,687 (4,2); 7,561 (1,9); 7,539 (1,6); 7,436 (5,5); 6,972 (0,8); 2,871 (0,5); 2,862 (0,8); 2,853 (1,1); 2,843 (1,1); 2,835 (0,6); 2,825 (0,5); 2,251 (24,5); 2,140 (6,0); 1,971 (0,5); 1,964 (0,6); 1,958 (1,4); 1,952 (6,2); 1,946 (11,2); 1,940 (15,0); 1,934 (10,9); 1,928 (5,9); 1,436 (16,0); 0,796 (0,5); 0,784 (1,9); 0,779 (2,5); 0,766 (2,6); 0,761 (2,0); 0,749 (0,9); 0,619 (0,8); 0,608 (2,3); 0,601 (2,5); 0,592 (2,1); 0,580 (0,6); 0,000 (15,7)

Beispiel -T4-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,184 (6,7); 8,183 (6,5); 7,920 (2,5); 7,915 (8,3); 7,894 (3,0); 7,887 (1,9); 7,639 (6,2); 7,380 (1,5); 7,602 (3,0); 7,600 (2,8); 7,582 (2,4); 7,580 (2,6); 7,438 (7,8); 2,463 (0,2); 2,253 (39,2); 2,151 (134,9); 2,120 (0,5); 2,114 (0,7); 2,108 (0,9); 2,102 (0,6); 2,095 (0,4); 1,972 (1,2); 1,965 (4,2); 1,959 (10,5); 1,953 (54,2); 1,947 (98,7); 1,940 (132,9); 1,934 (93,2); 1,928 (48,4); 1,775 (0,6); 1,769 (0,8); 1,763 (0,6); 1,599 (1,8); 1,585 (4,6); 1,578 (4,7); 1,564 (2,4); 1,437 (16,0); 1,415 (0,4); 1,375 (2,4); 1,361 (4,7); 1,354 (4,9); 1,340 (1,8); 1,269 (1,5); 1,204 (0,4); 0,146 (0,7); 0,008 (3,3); 0,000 (150,3); -0,008 (1,3); -0,149 (0,7)

Beispiel -T4-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,929 (2,4); 8,922 (2,4); 8,231 (2,7); 8,224 (2,3); 8,205 (4,3); 7,754 (3,6); 7,444 (5,0); 7,072 (0,7); 2,861 (0,4); 2,872 (0,7); 2,863 (1,0); 2,853 (1,0); 2,845 (0,7); 2,835 (0,4); 2,252 (22,9); 2,140 (16,7); 1,964 (1,1); 1,952 (13,4); 1,946 (23,9); 1,940 (31,3); 1,934 (21,8); 1,928 (11,3); 1,436 (16,0); 0,814 (0,5); 0,800 (1,8); 0,796 (2,2); 0,783 (2,3); 0,778 (1,7); 0,766 (0,7); 0,633 (0,7); 0,622 (2,1); 0,616 (2,2); 0,612 (2,0); 0,607 (1,8); 0,594 (0,5); 0,146 (0,6); 0,000 (113,1); -0,150 (0,6)

Beispiel -T4-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,974 (3,9); 8,967 (3,9); 8,300 (4,1); 8,294 (4,3); 8,216 (6,7); 7,764 (6,3); 7,753 (0,6); 7,735 (1,8); 7,446 (7,8); 4,067 (0,9); 4,050 (0,9); 3,076 (1,0); 2,898 (1,0); 2,254 (38,8); 2,144 (39,1); 2,114 (0,6); 2,107 (0,6); 2,101 (0,4); 2,095 (0,4); 2,088 (0,4); 2,083 (0,4); 1,972 (4,1); 1,964 (2,3); 1,958 (5,0); 1,952 (30,2); 1,946 (53,9); 1,940 (71,6); 1,934 (48,9); 1,928 (25,1); 1,768 (0,4); 1,617 (1,7); 1,602 (4,5); 1,595 (4,4); 1,581 (2,7); 1,437 (16,0); 1,388 (2,3); 1,375 (4,5); 1,368 (4,5); 1,353 (1,7); 1,266 (0,9); 1,221 (1,0); 1,204 (2,0); 1,186 (1,0); 0,146 (1,1); 0,008 (8,7); 0,000 (211,3); -0,009 (8,7); -0,150 (1,1)

Beispiel -T22-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,934 (2,4); 7,928 (3,4); 7,908 (1,9); 7,902 (1,3); 7,867 (2,0); 7,682 (1,6); 7,615 (3,0); 7,594 (2,6); 7,466 (5,3); 7,037 (0,7); 6,864 (0,4); 6,858 (3,5); 2,877 (0,5); 2,867 (0,8); 2,858 (1,2); 2,849 (1,2); 2,840 (0,8); 2,831 (0,6); 2,258 (25,0); 2,168 (12,6); 1,965 (0,4); 1,958 (1,0); 1,953 (5,8); 1,947 (10,6); 1,941 (14,3); 1,935 (10,0); 1,928 (5,3); 1,436 (16,0); 0,800 (0,6); 0,788 (1,8); 0,783 (2,5); 0,770 (2,6); 0,765 (1,9); 0,753 (0,9); 0,624 (0,9); 0,613 (2,2); 0,606 (2,3); 0,602 (2,0); 0,597 (2,0); 0,585 (0,7); 0,008 (0,7); 0,000 (20,3); -0,009 (0,9)

Beispiel -T22-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,992 (6,1); 7,986 (8,0); 7,960 (4,3); 7,954 (3,3); 7,939 (4,6); 7,933 (4,0); 7,709 (2,2); 7,954 (7,3); 7,633 (6,4); 7,487 (13,6); 6,877 (16,0); 5,448 (2,4); 2,418 (0,4); 2,260 (68,3); 2,153 (49,7); 2,120 (0,4); 2,114 (0,4); 2,108 (0,5); 2,098 (0,5); 2,086 (1,9); 1,972 (0,6); 1,964

(1,9); 1,958 (4,9); 1,953 (28,0); 1,946 (51,5); 1,940 (70,2); 1,934 (49,9); 1,928 (27,0); 1,775 (0,3); 1,759 (0,4); 1,603 (3,1); 1,588 (8,0); 1,581 (8,3); 1,566 (4,3); 1,528 (0,5); 1,436 (0,9); 1,419 (0,5); 1,379 (4,2); 1,365 (8,0); 1,359 (8,7); 1,344 (3,3); 1,288 (0,4); 0,146 (0,5); 0,008 (3,8); 0,000 (117,3); -0,008 (7,0); -0,150 (0,6)

Beispiel -T22-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,982 (3,5); 7,977 (5,3); 7,966 (3,0); 7,960 (1,9); 7,945 (2,9); 7,939 (2,5); 7,669 (4,3); 7,648 (3,7); 7,487 (9,9); 6,883 (8,4); 4,152 (1,0); 4,136 (1,1); 4,129 (3,0); 4,112 (3,1); 4,105 (3,3); 4,089 (3,1); 4,082 (1,4); 4,065 (1,1); 2,262 (40,4); 2,156 (20,4); 2,101 (0,4); 1,972 (0,5); 1,964 (1,0); 1,958 (2,4); 1,953 (12,4); 1,946 (23,1); 1,940 (37,5); 1,934 (23,1); 1,928 (12,8); 1,436 (16,0); 0,008 (2,0); 0,000 (53,5)

Beispiel -T22-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,983 (1,2); 8,977 (1,3); 8,360 (1,3); 8,355 (1,3); 7,953 (1,3); 7,941 (1,4); 7,036 (2,1); 2,306 (5,0); 2,160 (8,1); 1,953 (4,2); 1,947 (7,8); 1,941 (10,6); 1,935 (7,9); 1,929 (4,3); 1,619 (0,6); 1,604 (1,6); 1,597 (1,6); 1,584 (0,8); 1,437 (16,0); 1,390 (0,8); 1,376 (1,6); 1,369 (1,7); 1,354 (0,8)

Beispiel -T22-5: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,942 (4,2); 7,936 (5,2); 7,918 (1,6); 7,912 (1,1); 7,897 (1,8); 7,892 (1,3); 7,619 (2,4); 7,598 (2,1); 7,045 (0,8); 6,922 (4,2); 2,874 (0,4); 2,865 (0,7); 2,856 (1,0); 2,847 (1,0); 2,838 (0,7); 2,828 (0,4); 2,305 (10,8); 2,183 (27,7); 1,960 (0,8); 1,954 (3,8); 1,948 (6,9); 1,942 (9,3); 1,936 (6,5); 1,930 (3,4); 1,436 (16,0); 0,799 (0,5); 0,790 (1,7); 0,781 (2,2); 0,769 (2,2); 0,764 (1,7); 0,751 (0,7); 0,624 (0,7); 0,613 (2,1); 0,607 (2,1); 0,603 (2,0); 0,597 (1,8); 0,585 (0,5); 0,000 (23,8)

Beispiel -T22-6: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,939 (1,4); 8,933 (1,4); 8,292 (1,5); 8,286 (1,4); 7,952 (1,1); 7,942 (1,1); 7,150 (0,3); 7,022 (2,3); 2,874 (0,4); 2,865 (0,5); 2,855 (0,5); 2,847 (0,4); 2,305 (5,7); 2,187 (7,7); 1,973 (0,7); 1,963 (0,4); 1,954 (2,8); 1,948 (5,1); 1,942 (7,0); 1,936 (4,8); 1,930 (2,5); 1,436 (16,0); 1,204 (0,3); 0,803 (0,9); 0,798 (1,1); 0,785 (1,2); 0,780 (0,9); 0,767 (0,4); 0,636 (0,4); 0,624 (1,0); 0,619 (1,1); 0,613 (0,9); 0,608 (0,9); 0,000 (5,3)

Beispiel -T22-7: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,999 (1,6); 7,994 (2,1); 7,970 (1,1); 7,965 (0,8); 7,949 (2,6); 7,944 (2,6); 7,937 (1,8); 7,659 (2,2); 7,638 (1,6); 6,939 (3,3); 2,306 (8,4); 2,155 (9,0); 1,972 (0,6); 1,965 (0,3); 1,953 (5,6); 1,947 (10,3); 1,941 (14,0); 1,935 (9,7); 1,929 (5,0); 1,602 (0,8); 1,587 (2,1); 1,581 (2,1); 1,567 (1,1); 1,436 (16,0); 1,380 (1,1); 1,366 (2,1); 1,360 (2,2); 1,345 (0,8)

Beispiel -T23-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,961 (5,3); 7,958 (2,0); 7,942 (1,7); 7,937 (1,3); 7,864 (5,1); 7,609 (1,6); 7,606 (1,0); 7,590 (1,0); 7,587 (1,4); 7,148 (5,1); 6,968 (0,5); 2,876 (0,4); 2,867 (0,6); 2,858 (0,9); 2,849 (0,9); 2,840 (0,6); 2,831 (0,4); 2,134 (6,5); 1,964 (1,6); 1,958 (2,5); 1,952 (17,3); 1,946 (20,0); 1,940 (26,1); 1,934 (17,8); 1,928 (9,0); 1,437 (16,0); 0,800 (0,5); 0,787 (1,5); 0,782 (1,9); 0,770 (2,0); 0,764 (1,4); 0,752 (0,7); 0,624 (0,7); 0,614 (1,8); 0,606 (1,7); 0,602 (1,5); 0,597 (1,5); 0,584 (0,5); 0,000 (0,7)

Beispiel -T23-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,014 (3,3); 8,010 (1,3); 7,997 (1,1); 7,991 (0,6); 7,868 (3,6); 7,648 (1,5); 7,642 (0,8); 7,630 (0,6); 7,625 (1,2); 7,162 (3,0); 6,447 (16,0); 2,140 (12,0); 1,972 (0,4); 1,964 (2,4); 1,958 (4,0); 1,952 (17,2); 1,946 (30,2); 1,940 (39,3); 1,934 (26,8); 1,928 (13,7); 1,600 (0,6); 1,586 (1,7); 1,579 (1,7); 1,565 (0,9); 1,437 (0,9); 1,380 (0,9); 1,367 (1,6); 1,360 (1,7); 1,345 (0,7); 0,000 (0,8)

Beispiel T48-1: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,669 (6,3); 7,664 (9,6); 7,654 (5,5); 7,648 (2,9); 7,633 (5,5); 7,627 (4,3); 7,582 (3,1); 7,509 (16,0); 7,426 (8,2); 7,405 (6,8); 7,166 (4,7); 7,161 (8,3); 7,156 (5,0); 6,767 (3,7); 6,760 (7,3); 6,754 (5,5); 6,735 (5,6); 6,730 (6,3); 6,723 (3,6); 2,468 (0,7); 2,463 (1,0); 2,458 (0,7); 2,298 (0,5); 2,161 (388,0); 2,139 (76,8); 2,127 (1,2); 2,114 (1,5); 2,108 (1,7); 2,102 (1,2); 2,096 (0,7); 1,993 (0,7); 1,977 (0,9); 1,965 (8,8); 1,959 (16,3); 1,953 (98,1); 1,947 (179,8); 1,941 (243,9); 1,935 (187,4); 1,928 (86,0); 1,856 (0,9); 1,842 (0,6); 1,782 (0,6); 1,775 (1,1); 1,769 (1,5); 1,763 (1,0); 1,757 (0,5); 1,585 (3,5); 1,570 (9,4); 1,563 (9,3); 1,550 (4,6); 1,510 (0,5); 1,394 (0,5); 1,354 (4,7); 1,340 (9,4); 1,333 (9,8); 1,319 (3,5); 0,146 (0,4); 0,008 (2,3); 0,000 (87,6); -0,008 (3,4); -0,150 (0,4)

Beispiel -T48-2: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 7,682 (3,3); 7,677 (6,3); 7,676 (6,2); 7,673 (6,2); 7,668 (4,7); 7,665 (5,9); 7,653 (5,1); 7,647 (7,8); 7,628 (1,3); 7,623 (1,7); 7,606 (1,1); 7,600 (0,7); 7,585 (1,1); 7,579 (1,0); 7,578 (4,3); 7,517 (4,5); 7,507 (3,5); 7,496 (6,1); 7,478 (6,1); 7,475 (3,5); 7,459 (3,7); 7,422 (2,5); 7,419 (1,8); 7,409 (1,0); 7,403 (2,8); 7,394 (1,8); 7,385 (1,0); 7,373 (1,2); 7,153 (0,9); 7,148 (1,6); 7,143 (1,1); 6,961 (0,8); 6,900 (0,5); 6,760 (0,8); 6,753 (1,5); 6,747 (1,1); 6,724 (1,1); 6,720 (1,3); 6,717 (1,2); 6,713 (0,9); 3,855 (0,7); 3,051 (1,3); 2,881 (0,4); 2,871 (1,1); 2,862 (1,6); 2,853 (2,4); 2,843 (3,0); 2,834 (1,8); 2,825 (1,3); 2,816 (0,6); 2,476 (0,8); 2,472 (1,3); 2,467 (1,8); 2,462 (1,4); 2,427 (0,5); 2,391 (0,4); 2,383 (0,3); 2,359 (0,4); 2,327 (0,5); 2,182 (852,2); 2,138 (15,6); 2,121 (1,5); 2,115 (2,2); 2,109 (2,8); 2,102 (2,4); 2,096 (1,2); 1,992 (0,9); 1,966 (9,9); 1,959 (26,3); 1,954 (166,7); 1,947 (309,9); 1,941 (423,2); 1,935 (291,5); 1,929 (148,5); 1,782 (0,9); 1,776 (1,7); 1,770 (2,4); 1,764 (1,7); 1,757 (0,9); 1,437 (16,0); 1,270 (1,6); 0,790 (1,1); 0,778 (3,3); 0,773 (4,8); 0,765 (2,0); 0,760 (4,8); 0,755 (4,0); 0,743 (1,7); 0,736 (0,5); 0,614 (1,5); 0,602 (4,2); 0,593 (4,9); 0,587 (4,7); 0,575 (1,8); 0,000 (1,7)

Beispiel -T48-3: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,649 (2,9); 8,643 (3,2); 7,935 (2,9); 7,929 (2,9); 7,873 (7,9); 7,322 (1,5); 7,318 (2,7); 7,313 (1,9); 6,923 (1,5); 6,917 (2,0); 6,916 (2,3); 6,910 (1,9); 6,802 (1,7); 6,798 (2,2); 6,795 (2,0); 6,790 (1,9); 3,058 (16,0); 2,780 (2,7); 2,783 (0,4); 2,772 (0,6); 2,765 (0,6); 2,757 (1,2); 2,748 (0,7); 2,738 (0,6); 2,170 (18,1); 1,966 (1,0); 1,960 (2,0); 1,954 (17,8); 1,948 (21,8); 1,941 (29,7); 1,935 (20,7); 1,929 (10,7); 1,269 (0,6); 0,844 (0,3); 0,826 (0,4); 0,783 (0,4); 0,573 (1,4); 0,528 (1,7); 0,518 (1,1); 0,511 (1,3); 0,000 (7,0); -0,008 (0,3)

Beispiel -T48-4: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,649 (6,8); 8,643 (7,0); 7,990 (0,3); 7,976 (7,4); 7,970 (7,3); 7,871 (16,0); 7,320 (4,1); 7,315 (6,6); 7,310 (4,1); 6,976 (1,6); 6,920 (3,8); 6,914 (4,9); 6,912 (5,2); 6,907 (4,0); 6,805 (4,5); 6,801 (4,8); 6,798 (4,5); 6,794 (3,8); 5,448 (0,6); 2,876 (0,4); 2,867 (1,2); 2,857 (1,7); 2,849 (2,7); 2,839 (2,8); 2,831 (1,8); 2,821 (1,3); 2,811 (0,4); 2,143 (54,7); 2,114 (0,4); 2,108 (0,4); 1,965 (2,0); 1,959 (5,3); 1,953 (26,5); 1,947 (48,2); 1,941 (64,2); 1,934 (44,7); 1,928 (23,1); 1,769 (0,4); 1,269 (0,9); 1,260 (0,4); 0,799 (1,4); 0,786 (4,5); 0,781 (5,9); 0,769 (6,1); 0,763 (4,5); 0,751 (1,9); 0,614 (1,9); 0,602 (5,1); 0,597 (5,6); 0,593 (5,0); 0,587 (4,8); 0,575 (1,4); 0,008 (0,5); 0,000 (15,3)

Beispiel -T48-5: ^{1}H-NMR (400,0 MHz, CD3CN):
δ= 8,683 (7,0); 8,667 (7,3); 8,034 (7,5); 8,028 (7,5); 7,873 (16,0); 7,693 (1,3); 7,335 (3,9); 7,330 (6,8); 7,325 (4,4); 6,977 (3,7); 6,922 (4,7); 6,920 (5,0); 6,914 (4,3); 6,816 (4,3); 6,812 (4,8); 6,808 (4,4); 6,804 (3,9); 5,449 (14,1); 2,173 (58,5); 2,115 (0,4); 2,109 (0,3); 2,103 (0,4); 1,966 (2,9); 1,960 (5,1); 1,954 (29,3); 1,948 (53,8); 1,941 (72,9); 1,935 (50,8); 1,929 (28,4); 1,776 (0,3); 1,770 (0,4); 1,764 (0,3); 1,602

(2,9); 1,588 (7,3); 1,581 (7,4); 1,567 (3,9); 1,551 (0,4); 1,523 (0,7); 1,505 (0,6); 1,405 (0,5); 1,365 (4,1); 1,351 (7,2); 1,345 (7,6); 1,330 (3,0); 1,269 (0,9); 1,259 (0,5); 1,200 (0,6); 1,193 (0,4); 1,187 (0,4); 1,177 (0,5); 1,117 (0,4); 0,008 (0,4); 0,000 (13,0)

Beispiel T48 6: ^{1}H NMR (400,0 MHz, CD3CN): δ= 8,729 (1,0); 8,692 (3,0); 8,687 (3,0); 8,145 (1,0); 7,954 (3,0); 7,949 (3,0); 7,871 (14,1); 7,325 (3,5); 7,071 (0,6); 6,928 (2,7); 6,920 (3,2); 6,914 (2,1); 6,808 (7,6); 6,803 (7,8); 6,343 (1,1); 6,496 (1,1); 3,751 (1,8); 3,659 (0,8); 3,649 (0,9); 3,643 (2,1); 3,624 (1,8); 3,158 (4,2); 3,076 (1,9); 3,062 (0,3); 2,927 (16,0); 2,905 (0,3); 2,887 (0,3); 2,874 (0,3); 2,240 (1,1); 2,176 (37,5); 2,121 (0,6); 2,115 (0,7); 2,109 (0,7); 2,103 (0,6); 2,097 (0,4); 1,966 (2,3); 1,960 (8,3); 1,954 (35,6); 1,948 (85,4); 1,942 (88,3); 1,935 (62,6); 1,929 (33,3); 1,819 (1,0); 1,811 (1,1); 1,803 (2,6); 1,794 (1,2); 1,786 (1,1); 1,776 (0,6); 1,770 (0,8); 1,764 (0,6); 1,758 (0,4); 1,698 (0,4); 1,653 (4,1); 1,599 (0,4); 1,586 (0,3); 1,548 (0,4); 1,541 (0,4); 1,523 (0,9); 1,505 (1,0); 1,468 (3,4); 1,453 (1,6); 1,415 (1,4); 1,405 (1,4); 1,389 (9,5); 1,358 (1,0); 1,340 (1,1); 1,315 (1,4); 1,303 (3,2); 1,285 (4,6); 1,270 (11,8); 1,221 (12,0); 1,214 (12,0); 1,200 (3,3); 1,193 (1,3); 1,190 (1,5); 1,177 (1,0); 1,172 (1,1); 1,161 (0,7); 1,121 (0,6); 1,107 (0,6); 1,093 (0,9); 1,057 (0,7); 0,974 (0,4); 0,957 (0,5); 0,947 (0,6); 0,934 (0,5); 0,923 (0,7); 0,898 (1,3); 0,882 (3,1); 0,876 (2,5); 0,859 (2,8); 0,840 (1,7); 0,815 (0,6); 0,000 (3,4)

[1] Bei der angegebenen Masse handelt es sich um den Peak des Isotopenmusters des [M+H]$^+$ Ions mit der höchsten Intensität; falls das [M-H]$^-$ Ion detektiert wurde, ist die Massenangabe mit [2] gekennzeichnet.

[2] Bei der angegebenen Masse handelt es sich um den Peak des Isotopenmusters des [M-H]$^-$ Ions mit der höchsten Intensität.

[a] Anmerkung zur Bestimmung der logP Werte und Massendetektion: Die Bestimmung der angegebenen logP-Werte erfolgte gemäß EEC-Direktive 79/831 Annex V.A8 durch HPLC (High Performance Liquid Chromatography) an einer Phasenumkehrsäule (C18).Agilent 1100 LC-System; 50*4,6 Zorbax Eclipse Plus C18 1,8 microm; Eluent A: Acetonitril (0,1 % Ameisensäure); Eluent B: Wasser (0,09 % Ameisensäure); linearer Gradient von 10 % Acetonitril bis 95 % Acetonitril in 4,25 min, dann 95% Acetonitril für weitere 1,25 min; Ofentemperatur 55 °C; Fluß:2,0 mL/min. Die Massendetektion erfolgt über ein Agilent MSD System.

Biologische Beispiele

Rhipicephalus sanguineus - in-vitro Kontakttests mit Adulten der braunen Hundezecke

[0664] Für die Beschichtung der Teströhrchen werden zunächst 9 mg Wirkstoff in 1 ml Aceton p.a. gelöst und anschließend mit Aceton p.a. auf die gewünschte Konzentration verdünnt. 250 µl der Lösung werden durch Drehen und Kippen auf einem Rotationsschüttler (2 h Schaukelrotation bei 30 rpm) homogen auf den Innenwänden und dem Boden eines 25ml Glasröhrchens verteilt. Bei 900 ppm Wirkstofflösung und 44,7 cm² Innenoberfläche wird bei homogener Verteilung eine Flächendosis von 5 µg/cm² erreicht.

[0665] Nach Abdampfen des Lösungsmittels werden die Gläschen mit 5-10 adulten Hundezecken (*Rhipicephalus sanguineus)* besetzt, mit einem gelochten Kunststoffdeckel verschlossen und liegend im Dunkeln bei Raumtemperatur und Umgebungsfeuchte inkubiert. Nach 48 h wird die Wirksamkeit bestimmt. Hierzu werden die Zecken auf den Boden des Gläschens geklopft und auf einer Wärmeplatte bei 45-50°C maximal 5 min. inkubiert. Zecken, die unbeweglich auf dem Boden verbleiben oder sich so unkoordiniert bewegen, dass sie nicht gezielt der Wärme durch nach oben klettern ausweichen können, gelten als tot bzw. angeschlagen.

[0666] Eine Substanz zeigt gute Wirkung gegen *Rhipicephalus sanguineus*, wenn in diesem Test bei einer Aufwandmenge von 5 µg/cm² mindestens 80% Wirkung erzielt wurde. Dabei bedeutet 100% Wirkung, dass alle Zecken angeschlagen oder tot waren. 0% Wirkung bedeutet, dass keine Zecken geschädigt wurden.

[0667] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 5 µg/cm²: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-42, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-2, I-T22-1, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7

[0668] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 5 µg/cm²: I-T3-38, I-T3-43, I-T3-80, I-T3-88, I-T3-92, I-T3-143

[0669] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 1 µg/cm²: I-T3-108, I-T3-114, I-T3-141

[0670] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 1 µg/cm²: I-T3-94, I-T3-123

[0671] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 0,7 µg/cm²: I-T3-105

[0672] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 0,2 µg/cm²: I-T3-61

Ctenocephalides felis – in-vitro Kontakttests mit adulten Katzenflöhen

[0673] Für die Beschichtung der Teströhrchen werden zunächst 9 mg Wirkstoff in 1 ml Aceton p.a. gelöst und anschließend mit Aceton p.a. auf die gewünschte Konzentration verdünnt. 250 µl der Lösung werden durch Drehen und Kippen auf einem Rotationsschüttler (2 h Schaukelrotation bei 30 rpm) homogen auf den Innenwänden und dem Boden eines 25ml Glasröhrchens verteilt. Bei 900 ppm Wirkstofflösung und 44,7 cm² Innenoberfläche wird bei homogener Verteilung eine Flächendosis von 5 µg/cm² erreicht.

[0674] Nach Abdampfen des Lösungsmittels werden die Gläschen mit 5-10 adulten Katzenflöhen (*Ctenocephalides felis*) besetzt, mit einem gelochten Kunststoffdeckel verschlossen und liegend bei Raumtemperatur und Umgebungsfeuchte inkubiert. Nach 48 h wird die Wirksamkeit bestimmt. Hierzu werden die Gläschen aufrecht gestellt und die Flöhe auf den Boden des Gläschens geklopft. Flöhe, die unbeweglich auf dem Boden verbleiben oder sich unkoordiniert bewegen, gelten als tot bzw. angeschlagen.

[0675] Eine Substanz zeigt gute Wirkung gegen *Ctenocephalides felis*, wenn in diesem Test bei einer Aufwandmenge von 5 µg/cm² mindestens 80% Wirkung erzielt wurde. Dabei bedeutet 100% Wirkung, dass alle Flöhe angeschlagen oder tot waren. 0% Wirkung bedeutet, dass keine Flöhe geschädigt wurden.

[0676] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 5 µg/cm² (= 500g/ha): I-T3-1, I-T3-3, I-T3-7, I-T3-9, I-T3-17, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-196, I-T3-199, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Amblyomma hebraeum –Test

[0677] Lösungsmittel: Dimethylsulfoxid

[0678] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 10 mg Wirkstoff mit 0.5 ml Dimethylsulfoxid und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die gewünschte Konzentration.

[0679] Zeckennymphen *(Amblyomma hebraeum)* werden in perforierte Plastikbecher gesetzt und in der gewünschten Konzentration eine Minute getaucht. Die Zecken werden auf Filterpapier in eine Petrischale überführt und in einem Klimaschrank gelagert.

[0680] Nach 42 Tagen wird die Abtötung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Zecken abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keine der Zecken abgetötet wurde.

[0681] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-114, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-131, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-162, I-T3-163, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T4-3, I-T4-4

[0682] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 95% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-101

[0683] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-102, I-T3-103

[0684] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 85% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-105

[0685] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-53, I-T3-61, I-T3-111, I-T3-123

Boophilus microplus –Injektionstest

[0686] Lösungsmittel: Dimethylsulfoxid

[0687] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 10 mg Wirkstoff mit 0.5 ml Lösungsmittel und verdünnt das Konzentrat mit Lösungsmittel auf die gewünschte Konzentration.

[0688] 1µl der Wirkstofflösung wird in das Abdomen von 5 vollgesogenen, adulten, weiblichen Rinderzecken *(Boophilus microplus)* injiziert. Die Tiere werden in Schalen überführt und in einem klimatisierten Raum aufbewahrt.

[0689] Die Wirkungskontrolle erfolgt nach 7 Tagen auf Ablage fertiler Eier. Eier, deren Fertilität nicht äußerlich sichtbar ist, werden bis zum Larvenschlupf nach etwa 42 Tagen im Klimaschrank aufbewahrt. Eine Wirkung von 100 % bedeutet, dass keine der Zecken fertile Eier gelegt hat, 0% bedeutet, dass alle Eier fertil sind.

[0690] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 20µg/Tier: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-11, I-T3-12, I-T3-13, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-60, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-126, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-142, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

[0691] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 20µg/Tier: I-T3-75

[0692] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 20µg/Tier: I-T3-121

Boophilus microplus – Diptest

[0693] Testtiere: Rinderzecken (*Boophilus microplus)* Stamm Parkhurst,SP-resistent

[0694] Lösungsmittel: Dimethylsulfoxid

[0695] 10 mg Wirkstoff werden in 0,5 ml Dimethylsulfoxid gelöst. Zwecks Herstellung einer geeigneten Formulierung verdünnt man die Wirkstofflösung mit Wasser auf die jeweils gewünschte Konzentration.

[0696] Diese Wirkstoffzubereitung wird in Röhrchen pipettiert. 8 10 gesogene, adulte, weibliche Rinderzecken (*Boophilus microplus*) werden in ein weiteres Röhrchen mit Löchern überführt. Das

Röhrchen wird in die Wirkstoffzubereitung getaucht wobei alle Zecken vollständig benetzt werden. Nach Ablaufen der Flüssigkeit werden die Zecken auf Filterscheiben in Kunststoffschalen überführt und in einem klimatisierten Raum aufbewahrt.

[0697] Die Wirkungskontrolle erfolgt nach 7 Tagen auf Ablage fertiler Eier. Eier, deren Fertilität nicht äußerlich sichtbar ist, werden bis zum Larvenschlupf nach etwa 42 Tagen im Klimaschrank aufbewahrt. Eine Wirkung von 100 % bedeutet, dass keine der Zecken fertile Eier gelegt hat, 0% bedeutet, dass alle Eier fertil sind.

[0698] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-24, I-T3-28, I-T3-39, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-48, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-81, I-T3-86, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1

[0699] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 98% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-111

[0700] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-99

[0701] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-27, I-T3-80

Ctenocephalides felis - Oraltest

[0702] Lösungsmittel: Dimethylsulfoxid

[0703] Zwecks Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 10 mg Wirkstoff mit 0,5 ml Dimethylsulfoxid. Durch Verdünnen mit citriertem Rinderblut erhält man die gewünschte Konzentration.

[0704] Ca. 20 nüchterne adulte Katzenflöhe (*Ctenocephalides felis*) werden in eine Kammer eingesetzt, die oben und unten mit Gaze verschlossen ist. Auf die Kammer wird ein Metallzylinder gestellt, dessen Unterseite mit Parafilm verschlossen ist. Der Zylinder enthält die Blut-Wirkstoffzubereitung, die von den Flöhen durch die Parafilmmembran aufgenommen werden kann.

[0705] Nach 2 Tagen wird die Abtötung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Flöhe abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keiner der Flöhe abgetötet wurde.

Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-135, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 95% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-11, I-T3-17, I-T3-19, I-T3-41, I-T3-45, I-T3-70, I-T3-79, I-T3-82, I-T3-83, I-T22-6

Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-15, I-T3-37, I-T3-60, I-T3-126, I-T3-144

Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-13, I-T3-16, I-T3-36

Lucilia cuprina – Test

[0706] Lösungsmittel: Dimethylsulfoxid

[0707] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 10 mg Wirkstoff mit 0,5 ml Dimethylsulfoxid und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die gewünschte Konzentration.

[0708] Ca. 20 L1-Larven der Australischen Schafgoldfliege (*Lucilia cuprina*) werden in ein Testgefäß überführt, welches gehacktes Pferdefleisch und die Wirkstoffzubereitung der gewünschten Konzentration enthält.

[0709] Nach 2 Tagen wird die Abtötung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Larven abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keine Larven abgetötet wurden.

[0710] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-32, I-T3-33, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-70, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2, I-T46-2

[0711] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 95% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-69

[0712] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-41, I-T3-60, I-T3-74, I-T3-76, I-T3-127, I-T3-146

[0713] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-12, I-T3-75, I-T3-79, I-T3-121, I-T3-137

Musca domestica–Test

[0714] Lösungsmittel: Dimethylsulfoxid

[0715] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 10 mg Wirkstoff mit 0,5 ml Dimethylsulfoxid und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die gewünschte Konzentration.

[0716] Gefäße, die einen Schwamm enthalten, der mit Zuckerlösung und der Wirkstoffzubereitung der gewünschten Konzentration behandelt wurde, werden mit 10 adulten Stubenfliegen *(Musca domestica)* besetzt.

[0717] Nach 2 Tagen wird die Abtötung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Fliegen abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keine der Fliegen abgetötet wurde.

[0718] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-29, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-65, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-77, I-T3-80, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-89, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-150, I-T3-151, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-165, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T4-2, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T23-1, I-T23-2

[0719] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 95% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-51

[0720] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-30, I-T3-67, I-T3-76, I-T3-81, I-T3-90, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-139, I-T3-145, I-T22-6

[0721] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 100ppm: I-T3-7, I-T3-66, I-T3-68, I-T3-79, I-T3-88, I-T3-105, I-T3-121, I-T3-129

[0722] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 20ppm: I-T3-28

[0723] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 80% bei einer Aufwandmenge von 4ppm: I-T3-35

Meloidogyne incognita- Test

[0724] Lösungsmittel: 125,0 Gewichtsteile Aceton

[0725] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung vermischt man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit der angegebenen Menge Lösungsmittel und verdünnt das Konzentrat mit Wasser auf die gewünschte Konzentration.

[0726] Gefäße werden mit Sand, Wirkstofflösung, einer Ei-Larven-Suspension des südlichen Wurzelgallenälchens (*Meloidogyne incognita*) und Salatsamen gefüllt. Die Salatsamen keimen und die Pflänzchen entwickeln sich. An den Wurzeln entwickeln sich die Gallen.

[0727] Nach 14 Tagen wird die nematizide Wirkung anhand der Gallenbildung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass keine Gallen gefunden wurden; 0 % bedeutet, dass die Zahl der Gallen an den behandelten Pflanzen der unbehandelten Kontrolle entspricht.

[0728] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 20ppm: I-T3-27, I-T3-28, I-T3-184, I-T3-185

Myzus persicae - Sprühtest

[0729] Lösungsmittel: 78 Gewichtsteile Aceton und 1,5 Gewichtsteile Dimethylformamid

[0730] Emulgator: Alkylarylpolyglykolether

[0731] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung löst man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit den angegebenen Gewichtsteilen Lösungsmittel und füllt mit Wasser, welches eine Emulgatorkonzentration von 1000 ppm enthält, bis zum Erreichen der gewünschten Konzentration auf. Zur Herstellung weiterer Testkonzentrationen wird mit emulgatorhaltigem Wasser verdünnt.

[0732] Chinakohlblattscheiben (*Brassica pekinensis*), die von allen Stadien der Grünen Pfirsichblattlaus (*Myzus persicae*) befallen sind, werden mit einer Wirkstoffzubereitung der gewünschten Konzentration gespritzt.

[0733] Nach 6 Tagen wird die Wirkung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Blattläuse abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keine Blattläuse abgetötet wurden.

[0734] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 500g/ha: I-T3-7, I-T3-20, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-46, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-110, I-T3-122, I-T3-185, I-T3-187

[0735] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 500g/ha: I-T3-8, I-T3-21, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-42, I-T3-91, I-T3-97, I-T3-103, I-T3-105, I-T3-109, I-T3-114, I-T3-117, I-T3-119, I-T3-170, I-T3-186

[0736] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-27, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-77, I-T3-88, I-T3-99, I-T3-101, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-118, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-162, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-179, I-T3-184, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-5, I-T22-7

[0737] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-53, I-T3-64, I-T3-72,

I-T3-76, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-85, I-T3-87, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-145, I-T3-160, I-T3-164, I-T3-163, I-T4-3

[0738] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 20g/ha: I-T3-182, I-T4-2

Phaedon cochleariae - Sprühtest

[0739] Lösungsmittel: 78,0 Gewichtsteile Aceton und 1,5 Gewichtsteile Dimethylformamid

[0740] Emulgator: Alkylarylpolyglykolether

[0741] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung löst man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit den angegebenen Gewichtsteilen Lösungsmittel und füllt mit Wasser, welches eine Emulgatorkonzentration von 1000 ppm enthält, bis zum Erreichen der gewünschten Konzentration auf. Zur Herstellung weiterer Testkonzentrationen wird mit emulgatorhaltigem Wasser verdünnt.

[0742] Chinakohlblattscheiben *(Brassica pekinensis)* werden mit einer Wirkstoffzubereitung der gewünschten Konzentration gespritzt und nach dem Abtrocknen mit Larven des Meerrettichblattkäfers *(Phaedon cochleariae)* besetzt.

[0743] Nach 7 Tagen wird die Wirkung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Käferlarven abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keine Käferlarven abgetötet wurden.

[0744] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 500g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-15, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-35, I-T3-36, I-T3-37, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T3-188, I-T23-1, I-T23-2

[0745] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T2-1, I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-5, I-T3-6, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-49, I-T3-50, I-T3-51, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-59, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-128, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-144, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-149, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-153, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-

T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-T3-170, I-T3-171, I-T3-172, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-195, I-T3-197, I-T3-198, I-T3-220, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-6, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

[0746] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 83% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T3-138

Spodoptera frugiperda - Sprühtest

[0747] Lösungsmittel: 78,0 Gewichtsteile Aceton und 1,5 Gewichtsteile Dimethylformamid

[0748] Emulgator: Alkylarylpolyglykolether

[0749] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung löst man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit den angegebenen Gewichtsteilen Lösungsmittel und füllt mit Wasser, welches eine Emulgatorkonzentration von 1000 ppm enthält, bis zum Erreichen der gewünschten Konzentration auf. Zur Herstellung weiterer Testkonzentrationen wird mit emulgatorhaltigem Wasser verdünnt.

[0750] Maisblattscheiben (*Zea mays*) werden mit einer Wirkstoffzubereitung der gewünschten Konzentration gespritzt und nach dem Abtrocknen mit Raupen des Heerwurms (*Spodoptera frugiperda*) besetzt.

[0751] Nach 7 Tagen wird die Wirkung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Raupen abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keine Raupe abgetötet wurde.

[0752] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 500g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-12, I-T3-17, I-T3-18, I-T3-19, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-65, I-T3-66, I-T3-67, I-T3-68, I-T3-69, I-T3-70, I-T3-73, I-T3-74, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-79, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-111, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-126, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

[0753] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 83% bei einer Aufwandmenge von 500g/ha: I-T3-101

[0754] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T2-2, I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3

28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-40, I-T3-41, I-T3-48, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-71, I-T3-72, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-123, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-133, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-139, I-T3-140, I-T3-141, I-T3-143, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-152, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-189, I-T3-191, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-198, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-2, I-T46-3, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

[0755] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 83% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T3-35, I-T3-50, I-T3-169, I-T3-177

Tetranychus urticae – Sprühtest, OP-resistent

[0756] Lösungsmittel: 78,0 Gewichtsteile Aceton und 1,5 Gewichtsteile Dimethylformamid

[0757] Emulgator: Alkylarylpolyglykolether

[0758] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung löst man 1 Gewichtsteil Wirkstoff mit den angegebenen Gewichtsteilen Lösungsmittel und füllt mit Wasser, welches eine Emulgatorkonzentration von 1000 ppm enthält, bis zum Erreichen der gewünschten Konzentration auf. Zur Herstellung weiterer Testkonzentrationen wird mit emulgatorhaltigem Wasser verdünnt.

[0759] Bohnenblattscheiben *(Phaseolus vulgaris)*, die von allen Stadien der Gemeinen Spinnmilbe *(Tetranychus urticae)* befallen sind, werden mit einer Wirkstoffzubereitung der gewünschten Konzentration gespritzt.

[0760] Nach 6 Tagen wird die Wirkung in % bestimmt. Dabei bedeutet 100 %, dass alle Spinnmilben abgetötet wurden; 0 % bedeutet, dass keine Spinnmilben abgetötet wurden.

[0761] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 500g/ha: I-T3-7, I-T3-8, I-T3-9, I-T3-10, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-22, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-29, I-T3-30, I-T3-31, I-T3-34, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-44, I-T3-45, I-T3-46, I-T3-47, I-T3-69, I-T3-75, I-T3-76, I-T3-77, I-T3-78, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-96, I-T3-97, I-T3-98, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-109, I-T3-110, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-114, I-T3-115, I-T3-119, I-T3-120, I-T3-184, I-T3-185, I-T3-186, I-T3-187, I-T23-1, I-T23-2

[0762] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 500g/ha: I-T3-25, I-T3-65, I-T3-70, I-T3-89, I-T3-90, I-T3-102, I-T3-104, I-T3-105, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118

[0763] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T3-1, I-T3-2, I-T3-3, I-T3-4, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-39, I-T3-41, I-T3-51, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-62, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-72, I-T3-73, I-T3-80, I-T3-81, I-T3-82, I-T3-83, I-T3-84, I-T3-85, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-88, I-T3-93, I-T3-94, I-T3-95, I-T3-99, I-T3-124, I-T3-125, I-T3-127, I-T3-129, I-T3-130, I-T3-131, I-T3-132, I-T3-133, I-T3-139, I-T3-145, I-T3-146, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-161, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-164, I-T3-165, I-T3-168, I-T3-169, I-T3-170, I-T3-174, I-T3-175, I-T3-176, I-T3-177, I-T3-178, I-T3-179, I-T3-180, I-T3-181, I-T3-182, I-T3-183, I-T3-189, I-T3-190, I-T3-192, I-T3-197, I-T3-221, I-T3-222, I-T3-223, I-T4-1, I-T4-2, I-T4-3, I-T4-4, I-T22-4, I-T22-5, I-T22-7, I-T46-4, I-T46-5, I-T46-6

[0764] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 90% bei einer Aufwandmenge von 100g/ha: I-T3-50, I-T3-52, I-T3-71, I-T3-74, I-T3-111, I-T3-123, I-T3-137, I-T3-138, I-T3-147, I-T3-148, I-T3-151, I-T3-172, I-T3-195, I-T22-1, I-T22-2, I-T22-3

[0765] Bei diesem Test zeigen z. B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele eine Wirkung von 100% bei einer Aufwandmenge von 20g/ha: I-T3-49

Anopheles Test (ANPHGB Oberflächenbehandlung)

[0766] Lösungsmittel: Aceton + 2000ppm Rapsölmethylester (RME)

[0767] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung löst man den Wirkstoff im Lösungsmittel (2mg/ml). Die Wirkstoffzubereitung wird auf eine lasierte Kachel pipettiert und nach Abtrocknen werden adulte Mücken der Spezies Anopheles gambiae Stamm RSPH (homozygot kdr) auf die behandelte Kachel gesetzt. Die Expositionszeit beträgt 30 Minuten.

[0768] 24 Stunden nach Kontakt zur behandelten Oberfläche wird die Mortalität in % bestimmt. Dabei bedeutet 100%, dass alle Mücken abgetötet wurden; 0% bedeutet, dass keine Mücken abgetötet wurden.

[0769] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90-100% bei einer Aufwandmenge von 100mg/m^2: I-T3-20, I-T3-24, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-112, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1

[0770] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90-100% bei einer Aufwandmenge von 20mg/m^2: I-T3-23, I-T3-24, I-T3-26, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-43, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-100, I-T3-

102, I-T3-106, I-T3-112, I-T3-116, I-T3-130; I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-137, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-2

Anopheles Test (ANPHFU Oberflächenbehandlung)

[0771] Lösungsmittel: Aceton + 2000ppm Rapsölmethylester (RME)

[0772] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung löst man den Wirkstoff im Lösungsmittel (2mg/ml). Die Wirkstoffzubereitung wird auf eine lasierte Kachel pipettiert und nach Abtrocknen werden adulte Mücken der Spezies Anopheles funestus Stamm FUMOZ-R (Hunt et al., Med Vet Entomol. 2005 Sep; 19(3):271-5) auf die behandelte Kachel gesetzt. Die Expositionszeit beträgt 30 Minuten.

[0773] 24 Stunden nach Kontakt zur behandelten Oberfläche wird die Mortalität in % bestimmt. Dabei bedeutet 100%, dass alle Mücken abgetötet wurden; 0% bedeutet, dass keine Mücken abgetötet wurden.

[0774] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90-100% bei einer Aufwandmenge von 100mg/m^2: I-T3-24, I-T3-25, I-T3-38, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-54, I-T3-56, I-T3-58, I-T3-63, I-T3-86, I-T3-92, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-123, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2

[0775] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90-100% bei einer Aufwandmenge von 20mg/m^2: I-T3-3, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-26, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-57, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-102, I-T3-107, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-116, I-T3-123, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

Aedes Test (AEDSAF Oberflächenbehandlung)

[0776] Lösungsmittel: Aceton + 2000ppm Rapsölmethylester (RME)

[0777] Zur Herstellung einer zweckmäßigen Wirkstoffzubereitung löst man den Wirkstoff im Lösungsmittel (2mg/ml). Die Wirkstoffzubereitung wird auf eine lasierte Kachel pipettiert und nach Abtrocknen werden adulte Mücken der Spezies Aedes aegypti Stamm MONHEIM auf die behandelte Kachel gesetzt. Die Expositionszeit beträgt 30 Minuten.

[0778] 24 Stunden nach Kontakt zur behandelten Oberfläche wird die Mortalität in % bestimmt. Dabei bedeutet 100%, dass alle Mücken abgetötet wurden; 0% bedeutet, dass keine Mücken abgetötet wurden.

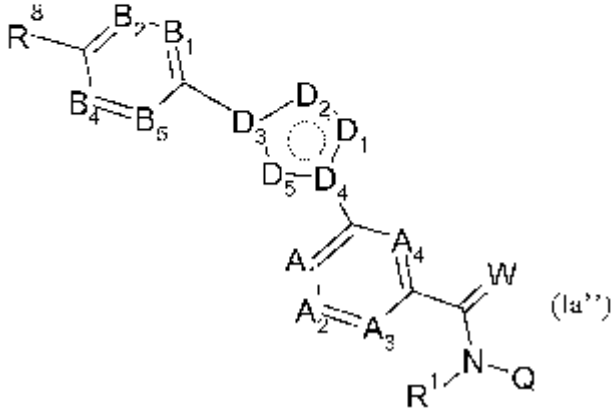
[0779] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90-100% bei einer Aufwandmenge von 100mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-

23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-120, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

[0780] Bei diesem Test zeigen z.B. die folgenden Verbindungen der Herstellungsbeispiele Wirkung von 90-100% bei einer Aufwandmenge von 20mg/m^2: I-T3-1, I-T3-3, I-T3-8, I-T3-20, I-T3-21, I-T3-23, I-T3-24, I-T3-25, I-T3-27, I-T3-28, I-T3-38, I-T3-42, I-T3-43, I-T3-46, I-T3-52, I-T3-53, I-T3-54, I-T3-55, I-T3-56, I-T3-57, I-T3-58, I-T3-61, I-T3-63, I-T3-64, I-T3-86, I-T3-87, I-T3-91, I-T3-92, I-T3-93, I-T3-95, I-T3-96, I-T3-98, I-T3-99, I-T3-100, I-T3-101, I-T3-102, I-T3-103, I-T3-106, I-T3-107, I-T3-108, I-T3-112, I-T3-113, I-T3-115, I-T3-116, I-T3-117, I-T3-118, I-T3-123, I-T3-130, I-T3-133, I-T3-134, I-T3-136, I-T3-145, I-T3-148, I-T3-155, I-T3-159, I-T3-160, I-T3-162, I-T3-163, I-T3-173, I-T3-189, I-T22-1, I-T22-2, I-T23-1, I-T23-2

Patentansprüche:

1. Verbindungen der Formel (Ia'')



(Ia'')

worin

D_1 für C-R^1 oder ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O steht;

D_2 für C-R^1 oder ein Heteroatom ausgewählt aus N oder O steht;

D_3 für C oder N steht;

D_4 für C, oder N steht;

D_5 für C-R^1 oder N steht;

wobei maximal ein (1) oder zwei Gruppierungen ausgewählt aus D_1, D_2, D_3, D_4 und D_5 für ein Heteroatom stehen;

 für ein aromatisches System steht; und

R für H, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_7-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkoxycarbonyl, Aryl(C_1-C_3)-alkyl, oder Heteroaryl(C_1-C_3)-alkyl steht;

die Gruppierungen

A_1 für CR^2 oder N,

A_2 für CR^3 oder N,

A_3 für CR^4 oder N,

A_4 für CR^5 oder N ,

B_1 für CR^6 oder N,

B_2 für CR^7 oder N,

B_4 für CR^9 oder N, und

B_5 für CR^{10} oder N stehen,

wobei aber nicht mehr als drei der Gruppierungen A_1 bis A_5 für N und nicht mehr als drei der Gruppierungen B_1 bis B_5 gleichzeitig für N stehen;

R^2, R^5, R^4, R^5, R^6, R^7, R^9 und R^{10} unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_2-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino, *N,N*-Di-C_1-C_6-alkylamino, oder *N*-C_1-C_3-Alkoxy-C_1-C_2-Alkylamino oder 1-Pyrrolidinyl stehen;

wenn keine der Gruppierungen A_1 und A_2 für N steht, können R^3 und R^4 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 5- oder 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome und/oder 0 oder 1 O-Atom und/oder 0 oder 1 S-Atom enthält, oder

wenn keine der Gruppierungen A_1 und A_2 für N steht, können R^3 und R^4 gemeinsam mit dem Kohlenstoffatom, an das sie gebunden sind, einen 6-gliedrigen Ring bilden, der 0, 1 oder 2 N-Atome enthält;

R^8 für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, *N*-C_1-C_6-Alkylamino oder *N,N*-Di-C_1-C_6-alkylamino, steht;

R^1 unabhängig voneinander für H, Halogen, Cyano, Nitro, Amino oder ein gegebenenfalls substituiertes C_1-C_8-Alkyl, C_1-C_8-Alkyloxy, C_1-C_8-Alkylcarbonyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, bevorzugt für H, steht;

W für O oder S steht;

Q für H, Formyl, Hydroxy, Amino oder jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_2-C_6-Alkenyl, C_2-C_6-Alkinyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Heterocycloalkyl, C_1-C_4-Alkoxy, C_1-C_6-Alkyl-C_3-C_6-cycloalkyl, C_3-C_6-Cycloalkyl-C_1-C_6-alkyl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Aryl, C_1-C_5-Heteroaryl, C_6-,C_{10}-,C_{14}-Aryl-(C_1-C_3)-alkyl, C_1-C_5-Heteroaryl-(C_1-C_3)-alkyl, *N*-C_1-C_4-Alkylamino, *N*-C_1-C_4-Alkylcarbonylamino, oder *N,N*-Di-C_1-C_4-alkylamino steht; oder

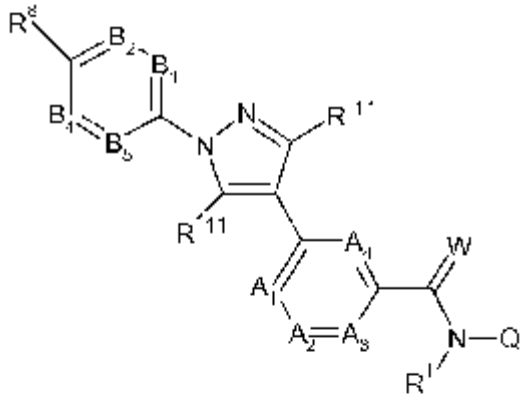
für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 6-gliedrigen Carbozyklus steht; oder

für einen gegebenenfalls mehrfach mit V substituierten, ungesättigten 4-, 5- bzw. 6-gliedrigen, heterozyklischen Ring steht, wobei

V unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Nitro, jeweils gegebenenfalls substituiertes C_1-C_6-Alkyl, C_1-C_4-Alkenyl, C_1-C_4-Alkinyl, C_3-C_6-Cycloalkyl, C_1-C_6-Alkoxy, *N*-C_1-C_6-Alkoxy-imino-C_1-C_3-alkyl, C_1-C_6-Alkylsulfanyl, C_1-C_6-Alkylsulfinyl, C_1-C_6-Alkylsulfonyl, oder *N*,*N*-Di-(C_1-C_6-alkyl)amino steht.

sowie Salze, N-Oxide und tautomere Formen der Verbindungen der Formel (Ia'').

2. Verbindungen gemäß Anspruch 1, wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T3) darstellen

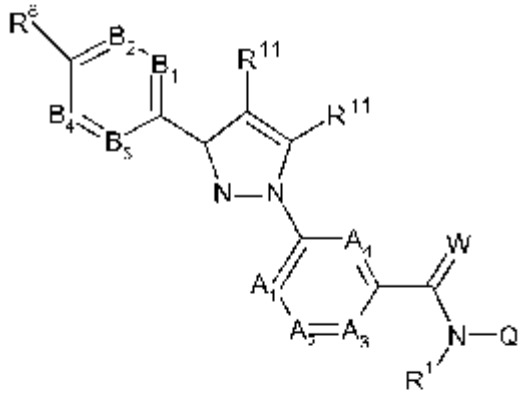


(I-T3)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Anspruch 1 beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

3. Verbindungen gemäß Anspruch 1, wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T2) darstellen

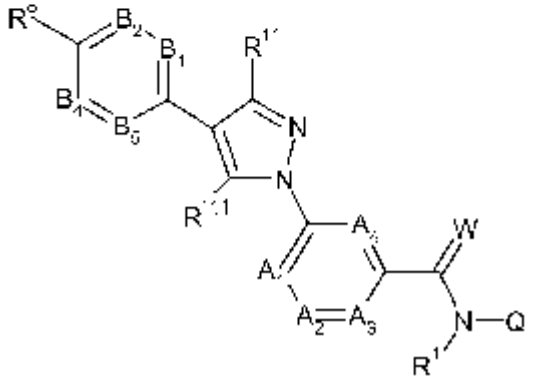


(I-T2)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Anspruch 1 beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

4. Verbindungen gemäß Anspruch 1, wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T4) darstellen

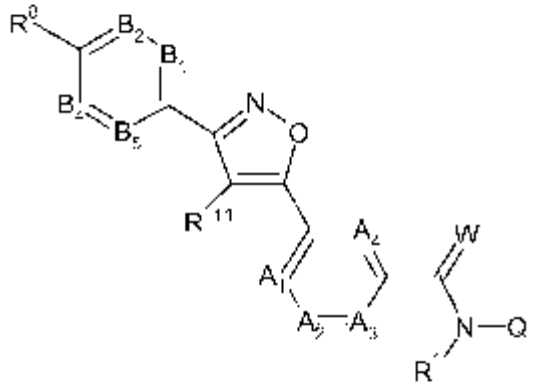


(I-T4)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Anspruch 1 beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_5, B_4, und B_5 für N steht.

5. Verbindungen gemäß Anspruch 1, wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T22) darstellen

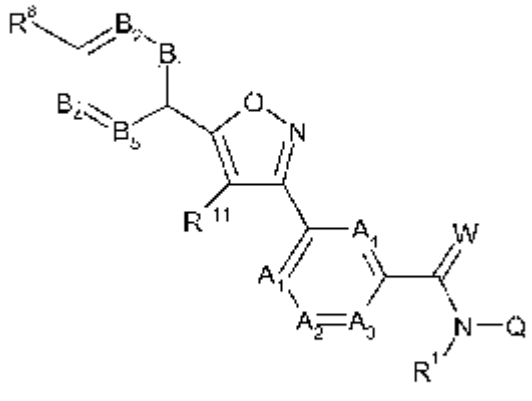


(T-22)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Anspruch 1 beschrieben definiert sind wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_5, B_4, und B_5 für N steht.

6. Verbindungen gemäß Anspruch 1, wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T23) darstellen



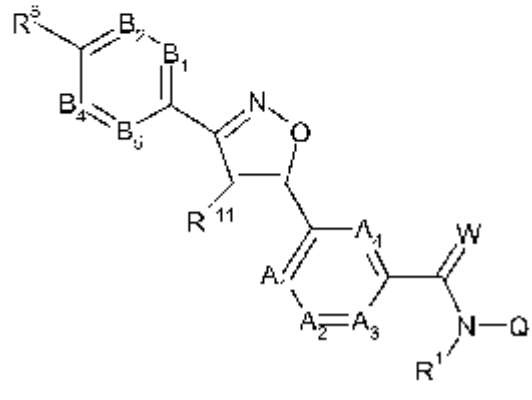
(I-T23)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Anspruch 1 beschrieben definiert sind

wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

7. Verbindungen gemäß Anspruch 1, wobei die Verbindungen der Formel (Ia'') Verbindungen der Formel (I-T46) darstellen



(I-T46)

worin

R^1, A_1, A_2, A_3, A_4, R^{11}, B_1, B_2, B_3, B_4, B_5, R^8, Q und W wie in Anspruch 1 beschrieben definiert sind

wobei maximal eine Gruppierung ausgewählt aus A_1, A_2, A_3, A_4, für N steht und maximal eine Gruppierung ausgewählt aus B_1, B_2, B_3, B_4, und B_5 für N steht.

8. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 7, wobei R^{11} unabhängig voneinander für H steht und W für O steht.

9. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 8, wobei R^{11} unabhängig voneinander für H steht und W für O steht und B_3 für C-R^5 steht, R^5 für mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkyl oder mit Halogen substituiertes C_1-C_3-Alkoxy steht.

10. Verbindung gemäß einem der Ansprüche 1 bis 9, wobei die Gruppierungen A_1 bis A_4 und B bis B_5 für

A_1 C-H,
A_2 CR^3 oder N,
A_3 CR^4,
A_4 C-H,

B CR^6 oder N,
B_2 C-H,
B_5 CR^8,
B C-H und
B_5 CR^{10} oder N stehen.

11. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 10, wobei R^1 für H steht.

12. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 11, wobei Q für C_1-C_3-Alkyl, Cyclopropyl, 1-(Cyano)-cyclopropyl, 1-(perfluoriertes C_1-C_2-Alkyl)-cyclopropyl, 1-(C_1-C_2-Alkyl)-cyclopropyl, 1-(Thiocarbamoyl)-cyclopropyl, mit Halogen substituiertes C_1-C_2-Alkyl, Thietan-3-yl, N-Methyl-Pyrazol-3-yl oder 2-oxo-2(2,2,2-trifluorethylamino)ethyl steht.

13. Verbindungen gemäß einem der Ansprüche 1 bis 12, wobei R^3 für mit Fluor substituiertes C_1-C_3-Alkoxy oder mit Fluor substituiertes C_1-C_4-Alkyl steht.

14. Insektizides Mittel, gekennzeichnet durch einen Gehalt von mindestens einer Verbindung der Formel (I) gemäß einem der Anspruch 1 bis 13 und einem Streckmittel und/oder einer oberflächenaktiven Substanz.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2014/073795

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. C07D231/12 A01N43/56 A01N43/72 C07D261/08 A01P7/00
C07D401/04 C07D403/04 C07D207/337 A01N43/80
ADD.
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07D A01N A01P

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
EPO-Internal, WPI Data, CHEM ABS Data, BEILSTEIN Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	GABRIEL G GAMBER ET AL: "3,5-Diarylazoles as novel and selective inhibitors of protein kinase D", BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS, PERGAMON, GB, vol. 21, no. 5, 6 January 2011 (2011-01-06), pages 1447-1451, XP028144502, ISSN: 0960-894X, DOI: 10.1016/J.BMCL.2011.01.014 [retrieved on 2011-01-11] page 1448; compound 16 Scheme 5; page 1449; compounds 22a-d,24a-c page 1450; table 2; compounds ----- -/--	1,14

[X] Further documents are listed in the continuation of Box C.

[X] See patent family annex.

* Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
25 November 2014	17/12/2014

Name and mailing address of the ISA/	Authorized officer
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Stix-Malaun, Elke

2

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (April 2005)

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2011/009484 A1 (NOVARTIS AG [CH]; CAPPARELLI MICHAEL PAUL [US]; GAMBER GABRIEL G [US];) 27 January 2011 (2011-01-27) page 91 - page 92; examples page 98 - page 102; examples page 105 - page 111; examples page 117 - page 119; examples page 135 - page 140; examples page 121; examples page 142 - page 156; examples page 158 - page 159; examples claims	1,14
X	WO 03/087061 A1 (PFIZER PHARMA [JP]; HIRANO MISATO [JP]; NAKAO KAZUNARI [JP]; NUKUI SEI) 23 October 2003 (2003-10-23) page 112 - page 117; examples 59-62 claims steps; compounds	1,14
X	LOUNKINE EUGEN ET AL: "Chemotography for multi-target SAR analysis in the context of biological pathways", BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY, vol. 20, no. 18, 20 February 2012 (2012-02-20), pages 5416-5427, XP028938241, ISSN: 0968-0896, DOI: 10.1016/J.BMC.2012.02.034 page 5425; compound 6m	1,14
X	DATABASE CA [Online] CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE, COLUMBUS, OHIO, US; BALLELL, LLUIS ET AL: "Fueling Open-Source Drug Discovery: 177 Small-Molecule Leads against Tuberculosis", XP002732971, retrieved from STN Database accession no. 2013:56758 abstract	1,14
A	WO 2013/041602 A1 (BAYER IP GMBH [DE]) 28 March 2013 (2013-03-28) examples claims	1-14
A	WO 2012/175474 A1 (SYNGENTA PARTICIPATIONS AG [CH]; JUNG PIERRE JOSEPH MARCEL [CH]; HUETE) 27 December 2012 (2012-12-27) cited in the application examples claims	1-14

2

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/EP2014/073795

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2011009484 A1	27-01-2011	NONE	
WO 03087061 A1	23-10-2003	AU 2003216581 A1	27-10-2003
		BR 0309188 A	09-02-2005
		CA 2482382 A1	23-10-2003
		EP 1495005 A1	12-01-2005
		JP 2005532291 A	27-10-2005
		MX PA04009960 A	13-12-2004
		US 2004019045 A1	29-01-2004
		WO 03087061 A1	23-10-2003
WO 2013041602 A1	28-03-2013	AR 087971 A1	30-04-2014
		CN 103929964 A	16-07-2014
		EP 2757886 A1	30-07-2014
		US 2014329684 A1	06-11-2014
		WO 2013041602 A1	28-03-2013
WO 2012175474 A1	27-12-2012	NONE	

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen
PCT/EP2014/073795

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES
INV. C07D231/12 A01N43/56 A01N43/72 C07D261/08 A01P7/00
C07D401/04 C07D403/04 C07D207/337 A01N43/80
ADD.
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC

B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)
C07D A01N A01P

Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evt. verwendete Suchbegriffe)
EPO-Internal, WPI Data, CHEM ABS Data, BEILSTEIN Data

C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	GABRIEL G GAMBER ET AL: "3,5-Diarylazoles as novel and selective inhibitors of protein kinase D", BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS, PERGAMON, GB, Bd. 21, Nr. 5, 6. Januar 2011 (2011-01-06), Seiten 1447-1451, XP028144502, ISSN: 0960-894X, DOI: 10.1016/J.BMCL.2011.01.014 [gefunden am 2011-01-11] Seite 1448; Verbindung 16 Scheme 5; Seite 1449; Verbindungen 22a-d,24a-c Seite 1450; Tabelle 2; Verbindungen ----- -/--	1,14

[X] Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen [X] Siehe Anhang Patentfamilie

* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :
"A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist
"E" frühere Anmeldung oder Patent, die bzw. das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist
"L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)
"O" Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht
"P" Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist
"T" Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist
"X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden
"Y" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist
"&" Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche	Absendedatum des internationalen Recherchenberichts
25. November 2014	17/12/2014

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde	Bevollmächtigter Bediensteter
Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Stix-Malaun, Elke

2

C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommender Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	WO 2011/009484 A1 (NOVARTIS AG [CH]; CAPPARELLI MICHAEL PAUL [US]; GAMBER GABRIEL G [US];) 27. Januar 2011 (2011-01-27) Seite 91 - Seite 92; Beispiele Seite 98 - Seite 102; Beispiele Seite 105 - Seite 111; Beispiele Seite 117 - Seite 119; Beispiele Seite 135 - Seite 140; Beispiele Seite 121; Beispiele Seite 142 - Seite 156; Beispiele Seite 158 - Seite 159; Beispiele Ansprüche	1,14
X	WO 03/087061 A1 (PFIZER PHARMA [JP]; HIRANO MISATO [JP]; NAKAO KAZUNARI [JP]; NUKUI SEI) 23. Oktober 2003 (2003-10-23) Seite 112 - Seite 117; Beispiele 59-62 Ansprüche steps; Verbindungen	1,14
X	LOUNKINE EUGEN ET AL: "Chemotography for multi-target SAR analysis in the context of biological pathways", BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY, Bd. 20, Nr. 18, 20. Februar 2012 (2012-02-20), Seiten 5416-5427, XP028938241, ISSN: 0968-0896, DOI: 10.1016/J.BMC.2012.02.034 Seite 5425; Verbindung 6m	1,14
X	DATABASE CA [Online] CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE, COLUMBUS, OHIO, US; BALLELL, LLUIS ET AL: "Fueling Open-Source Drug Discovery: 177 Small-Molecule Leads against Tuberculosis", XP002732971, gefunden im STN Database accession no. 2013:56758 Zusammenfassung	1,14
A	WO 2013/041602 A1 (BAYER IP GMBH [DE]) 28. März 2013 (2013-03-28) Beispiele Ansprüche	1-14
A	WO 2012/175474 A1 (SYNGENTA PARTICIPATIONS AG [CH]; JUNG PIERRE JOSEPH MARCEL [CH]; HUETE) 27. Dezember 2012 (2012-12-27) in der Anmeldung erwähnt Beispiele Ansprüche	1-14

2

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

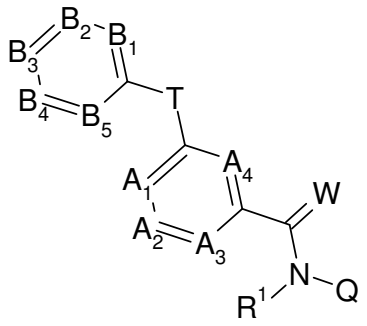
Internationales Aktenzeichen
PCT/EP2014/073795

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 2011009484 A1	27-01-2011	KEINE	
WO 03087061 A1	23-10-2003	AU 2003216581 A1	27-10-2003
		BR 0309188 A	09-02-2005
		CA 2482382 A1	23-10-2003
		EP 1495005 A1	12-01-2005
		JP 2005532291 A	27-10-2005
		MX PA04009960 A	13-12-2004
		US 2004019045 A1	29-01-2004
		WO 03087061 A1	23-10-2003
WO 2013041602 A1	28-03-2013	AR 087971 A1	30-04-2014
		CN 103929964 A	16-07-2014
		EP 2757886 A1	30-07-2014
		US 2014329684 A1	06-11-2014
		WO 2013041602 A1	28-03-2013
WO 2012175474 A1	27-12-2012	KEINE	

Nuevos compuestos para el combate de artrópodos

RESUMEN

La invención se refiere *inter alia* a compuestos de la fórmula general (I)



(I)

en donde los radicales A_1-A_4, T, n, W, Q, R^1 y B_1-B_4 son cada uno como se define en la descripción. También se describen procesos para preparar los compuestos de la fórmula (I). Los compuestos de la invención son en especial apropiados para controlar insectos, arácnidos y nematodos en agricultura y ectoparásitos en medicina veterinaria.