República Federativa do Brasil
Ministério da Economia
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(11) BR 112012011808-0 B1

(22) Data do Depósito: 11/11/2010

(45) Data de Concessão: 04/02/2020

(54) Título: DERIVADOS HETEROARILALQUILSULFETO OXA TIO FLUORADOS PARA COMBATER PRAGAS INVERTEBRADAS.

(51) Int.Cl.: C07D 285/12; A01N 43/824; A61K 31/433; A61P 33/00.

(30) Prioridade Unionista: 17/11/2009 US 61/261,830.

(73) Titular(es): MERIAL, INC.

(72) Inventor(es): SEBASTIAN SÖRGEL; RALPH PAULINI; CARSTEN BEYER; MATTHIAS POHLMAN; HENRICUS MARIA MARTINUS BASTIAANS; MICHAEL RACK; DEBORAH L. CULBERTSON; DOUGLAS D. ANSPAUGH; STEFFEN GROSS.

(86) Pedido PCT: PCT EP2010067248 de 11/11/2010

(87) Publicação PCT: WO 2011/061110 de 26/05/2011

(85) Data do Início da Fase Nacional: 17/05/2012

(57) Resumo: DERIVADOS HETEROARILALQUILSULFETO OXA OU TIO FLUORADOS PARA COMBATER PRAGAS INVERTEBRADAS. A invenção diz respeito a compostos alquilsulfeto derivados de fórmula I, tal como descrito no presente pedido ou os enantiômeros, ou seus sais veterinariamente aceitáveis que são úteis para combater ou controlar pestes invertebradas, em pragas de artrópodes e nematóides particulares. A invenção também se relaciona com métodos para o controle de pragas invertebradas, usando estes compostos e ao meterial de propagação de plantas e para composições agrícolas e veterinárias que compreendem os referidos compostos, em que U, R1, R2, R3u, X, n, p são definidos como no relatório descritivo da presente invenção.

Relatório Descritivo da Patente de Invencão para: **"DERIVADOS HETEROARILALQUILSULFETO OXA OU TIO FLUORADOS PARA COMBATER PRAGAS INVERTEBRADAS".**

A presente invenção diz respeito a compostos alquilssulfeto ou seus enantiômeros, ou sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos que são úteis para combater ou controlar pestes que são invertebrados, em particular pragas artrópodes e nematóides. A invenção também se relaciona com métodos para o controle de pragas invertebradas, utilizando-se estes compostos em material de propagação de plantas e em composições agrícolas e veterinárias que compreendem os referidos compostos.

Pragas invertebradas, e em particular artrópodes e nematóides, destroem o crescimento e a colheita de culturas e habitações de madeira e estruturas comerciais, causando grande perda econômica ao abastecimento alimentar e à propriedade. Muito embora um grande número de agentes pesticidas seja conhecido, devido à capacidade das pragas alvo desenvolverem resistência aos referidos agentes, há uma necessidade contínua de novos agentes para combater pragas invertebradas, em particular insetos, aracnídeos e nematóides.

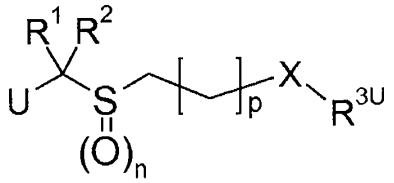
Os documentos WO 2009/075080, WO 2009/028727, WO 2009/025397 e WO 2009/014268 descrevem compostos

organosulfurados contendo flúor e a sua utilização como pesticidas é mencionada.

É um objeto da presente invenção fornecer compostos que possuem uma boa atividade pesticida, em particular atividade inseticida, e que mostram um espectro de atividade amplo contra um grande número de pragas invertebradas diferentes, especialmente contra pragas artrópodes e/ou nematóides, que são difíceis de controlar.

Verificou-se que estes objetivos podem ser alcançados por derivados alquilsulfeto da fórmula I abaixo, pelos seus esteroisômeros e pelos sais e N-óxidos dos mesmos, em particular em seus sais agricultura ou veterinariamente aceitáveis.

Sendo assim, num primeiro aspecto, a invenção diz respeito a compostos alquilsulfeto de fórmula I e os sais e N-óxidos dos mesmos



(I)

em que

X é O ou $S(=O)_m$;

m é 0, 1, 2

n é 0,1 ou 2;

p é 1 ou 2

R^{3U} é C_1-C_{10}-haloalquil, C_2-C_6-haloalquenil, C_3-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquenil, e em que pelo menos um halogênio é flúor;

U é um sistema de anel heteroaromático monocíclico ou bicíclico de 5- a 12- membros que pode conter de 1 a 4 heteroátomos selecionados a partir de O, S, N, em que o anel heteroaromático pode ser substituído por um a quatro substituintes V,

V é independentemente selecionado dentre halogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_1-C_6-alcoxi, C_1-C_6-haloalcoxi, $C(=O)R^4$, $C(=S)R^4$, $S(O)OR^{10}$, CN, NO_2, um grupo amino que pode ser substituído ou não substituído por C_1-C_4-alquil ou por C_1-C_4-acil;

O é 0,1 ou 2;

R^1, R^2 são, independentemente um do outro, selecionados dentre o grupo consistindo de hidrogênio, halogênio, C_1-C_6-alquil que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alquiltio, por C_1-C_4-

alquilsulfinil, por C_1-C_6-alquilsulfonil, por CN, por $C(=O)R^4$, por $OC(=O)R^4$, por N-$(C_1$-C_3-alquil$)_2$, ou por OH, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil, que pode ser substituído por átomo de halogênio, CN, $C(=O)R^7$, $C(=S)R^7$, $C(R^{11})=NR^{12}$, $C(R^{11})=N-OR^{12}$,

ou R^1 e R^2 podem formar ,em conjunto com o átomo de carbono ao qual eles estão ligados, C_3-C_6-cicloalquil, $C=C(R^5)R^6$ ou $C=N-R^5$;

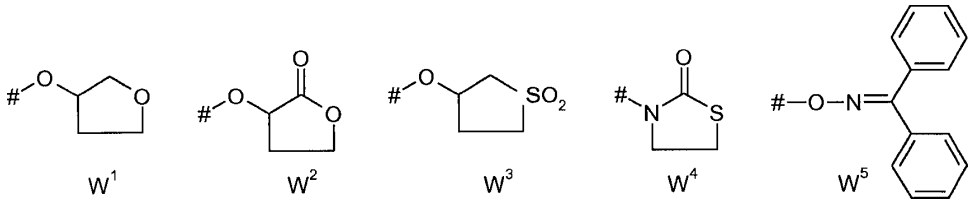
R^4 é hidrogênio, hidroxila, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_1-C_6-alcoxi, NR^8R^9;

R^5 é hidrogênio ou C_1-C_4-alquil;

R^6 é C1-C6-alcoxi, NR^8R^9;

R^7 é hidrogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, OH, C_1-C_6-alcoxi que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alcoxi-C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alquiltio, por C_1-C_4-alquilsulfinil, por C_1-C_6-alquilsulfonil, por C_3-C_6-cicloalquil, por tetra-hidrofuril, por fenil, piridil [em que os dois últimos radicais mencionados podem ser substituídos por halogênio], por CN, por $C(=O)OR^{12}$ ou por $C(=O)NR^{11}R^{12}$, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquiloxi que pode ser substituído por halogênio, C_3-C_6-cicloalquiltio que

pode ser substituído por halogênio, NR^8R^9, C_1-C_6-alquiltio, $N(R^{13})C(=O)N(R^{14})R^{15}$ ou os seguintes grupos W a W5:



W1 W2 W3 W4 W5

R^8 e R^9 formam, juntamente com o átomo de nitrogênio ao qual eles estão ligados, um grupo amino, ou mono-(C_1-C_6-alquil)amino ou di-(C_1-C_4-alquil)amino ou grupos amino C_2-C_5-cíclicos;

R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14} e R^{15} são, independentemente e independentemente entre si, um hidrogênio ou C_1-C_6-alquil;

R^{10} é C_1-C_6-alquil que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alcoxi-C_1-C_4-alcoxi, por $S(O)O$-C_1-C_6-alquil, por fenil ou por tetra-hidrofuril, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio.

A presente invenção também fornece uma composição agrícola que compreende pelo menos um composto de fórmula I

conforme aqui definido e/ou um sal agricolamente aceitável do mesmo e pelo menos um transportador líquido e/ou sólido.

A presente invenção também proporciona uma composição veterinária compreendendo pelo menos um composto da fórmula I como aqui definido e/ou um sal veterinariamente aceitável do mesmo e pelo menos um transportador líquido e/ou sólido.

A presente invenção também fornece um método para controlar pragas invertebradas, em que o método compreende tratar as pragas, a sua oferta de alimento, o seu habitat ou a sua base de procriação ou uma planta cultivada, o material de propagação de plantas (tais como sementes), o solo, área, material ou meio ambiente no qual as pragas crescem ou podem crescer, ou os materiais, plantas cultivadas, materiais de propagação de plantas (tais como semente), solos, superfícies ou espaços de modo a os proteger do ataque ou infestação de pragas com uma quantidade pesticidamente efetiva de um composto de fórmula I ou um sal do mesmo tal como aqui definido.

A presente invenção também se relaciona com um material de propagação de plantas, em particular sementes, compreendendo pelo menos um composto de fórmula I ou um sal agricolamente aceitável do mesmo conforme aqui definido.

A presente invenção diz ainda respeito a um método para tratar ou proteger um animal de infestação ou infecção

por parasitas, que compreende colocar o animal em contato com uma quantidade parasiticidamente eficaz de um composto da fórmula I ou um sal veterinariamente aceitável do mesmo conforme aqui definido. O termo "colocar o animal em contato com o composto I, um sal do mesmo ou a composição veterinária da invenção" significa aplicar ou administrar o referido composto, sal ou composição ao animal.

O termo "estereoisômeros" engloba ambos os isômeros ópticos, tais como enantiômeros ou diasteroisômeros, estes últimos existentes devido a mais do que um centro de quiralidade na molécula, bem como isômeros geométricos (isômeros cis/trans).

Dependendo do padrão de substituição, os compostos da fórmula I podem ter um ou mais centros de quiralidade, caso em que estão presentes como misturas de enantiômeros ou diasteroisômeros. A invenção fornece tanto os enantiômeros puros quanto diasteroisômeros e as misturas e usos de acordo com a invenção, de enantiômeros puros ou diasteroisômeros do composto I ou suas misturas. Os compostos apropriados de fórmula I também incluem todos os estereoisômeros geométricos possíveis (isômeros cis/trans) e suas misturas. Isômeros cis/trans podem estar presentes no que diz respeito ao grupo imina.

Os compostos da presente invenção podem ser amorfos ou

podem existir em um ou mais estados cristalinos diferentes (polimorfos) que podem ter propriedades macroscópicas diferentes, tal como estabilidade ou podem apresentar diferentes propriedades biológicas, como atividade. A presente invenção inclui tanto compostos amorfos quanto cristalinos de fórmula I, misturas de diferentes estados cristalinos do respectivo composto I, bem como sais amorfos ou cristalinos dos mesmos.

Os sais dos compostos de fórmula I são, de preferência, sais agricolamente e veterinariamente aceitáveis. Eles podem ser formados por meio de métodos habituais, por exemplo, fazendo reagir o composto com um ácido do ânion em questão se o composto de fórmula I tem uma funcionalidade básica ou por reação de um composto acídico de fórmula I com uma base adequada.

Os sais agricolamente aceitáveis adequados são especialmente os sais de tais cátions ou os sais de adição de ácido cujos cátions e ânions, respectivamente, não têm qualquer efeito adverso sobre a ação dos compostos de acordo com a presente invenção. Os cátions adequados são, em particular, os íons de metais alcalinos, de preferência lítio, sódio e potássio, de metais alcalino-terrosos, de preferência cálcio, magnésio e bário e dos metais de transição, de preferência de manganês, cobre, zinco e ferro

e também amônio (NH_4^+) e amônio substituído em que de 1 a 4 dos átomos de hidrogênio são substituídos por C_1-C_4-alquil, C_1-C_4-hidroxialquil, C_1-C_4-alcoxi, C_1-C_4-alcoxi-C_1-C_4-alquil, hidroxi-C_1-C_4-alcoxi-C_1-C_4-alquil, fenil ou benzil. Exemplos de íons amônio substituídos compreendem metilamônio, isopropilamônio, dimetilamônio, diisopropilamônio, trimetilamônio, tetrametilamônio, tetraetilamônio, tetrabutilamônio, 2-hidroxietilamônio, 2-(2-hidroxietóxi)etilamônio, bis(2-hidroxietil)amônio, benziltrimetilamônio, e benziltrietilamônio. Além disso, os íons de fosfônio, íons sulfônio, de preferência tri(C_1-C_4-alquil)sulfônio e íons sulfoxônio, de preferência tri(C_1-C_4-alquil)sulfoxônio.

Ânions de sais de adição de ácido úteis são, principalmente, cloreto, brometo, fluoreto, sulfato de hidrogênio, sulfato, di-hidrogenofosfato de fosfato, hidrogenofosfato, fosfato, nitrato, carbonato de hidrogênio, carbonato, hexafluorossilicato, hexafluorofosfato, benzoato e os ânions de ácidos C_1-C_4-alcanóicos, de preferência de formato, acetato, propionato e butirato. Eles podem ser formados por reação de um composto de fórmula I com um ácido do ânion correspondente, de preferência do ácido clorídrico, ácido bromídrico, ácido sulfúrico, ácido fosfórico ou ácido nítrico.

Pelo termo "sais veterinariamente aceitáveis" deve-se entender sais desses cátions ou ânions que são conhecidos e aceitos na arte para a formação de sais para uso veterinário. Sais de adição de ácido adequados, por exemplo, formados por compostos de fórmula I que contêm um átomo de nitrogênio básico, por exemplo um grupo amino, incluem sais com ácidos inorgânicos, por exemplo hidrocloretos, sulfatos, fosfatos e nitratos, e sais de ácidos orgânicos, por exemplo de ácido acético, ácido maleico, ácido dimaleico, ácido fumárico, ácido difumárico, ácido metano-sulfênicos, ácido metano-sulfônicos e ácido succínico.

O termo "pragas invertebradas", tal como aqui utilizado, abrange populações de animais, tais como insetos, aracnídeos e nematóides, que podem atacar as plantas, causando assim danos substanciais para as plantas atacadas, bem como ectoparasitas que podem infestar animais, em particular animais de sangue quente tais como, por exemplo, mamíferos ou aves ou outros animais superiores, como répteis, anfíbios ou peixes, causando assim danos substanciais aos animais infestados.

O termo "material de propagação da planta", como aqui usado, inclui todas as partes generativas da planta tais como sementes e material vegetativo, tais como recortes e

tubérculos (por exemplo, batatas), que podem ser utilizados para a multiplicação da planta. Isto inclui sementes, raízes, frutos, tubérculos, bulbos, rizomas, brotos, botões e outras partes de plantas. As plântulas e plantas jovens, as quais são para serem transplantadas após a germinação ou após a emergência do solo, podem também ser incluídos. Estes materiais de propagação de plantas podem ser tratados profilaticamente com um composto de proteção de plantas no plantio ou antes de plantar ou transplantar.

O termo "plantas" engloba todos os tipos de plantas, incluindo as "plantas não cultivadas" e em particular "plantas cultivadas".

O termo "plantas não cultivadas" refere-se a qualquer espécie selvagem ou espécies relacionadas ou gêneros relacionados de uma planta cultivada.

O termo "plantas cultivadas", tal como aqui utilizado, inclui plantas que tenham sido modificadas por cruzamento, mutagênese ou engenharia genética. Plantas geneticamente modificadas são as plantas em que o material genético foi modificado pela utilização de técnicas de DNA recombinante que, sob circunstâncias naturais, não poderiam ser facilmente obtidos por cruzamento, mutações ou recombinação natural. Tipicamente, um ou mais genes foram integrados ao material genético de uma planta geneticamente modificada,

de modo a melhorar certas propriedades da planta. Tais modificações genéticas podem também incluir, mas não estão limitadas a: modificação pós-traducionais de proteína alvo (oligo ou polipeptídeos), por exemplo, por glicosilação ou adições de polímero tais como prenilações, porções acetiladas ou farnesiladas ou porções de PEG (por exemplo, como revelado em *Biotechnol Prog.* 2001 Jul-Aug; 17(4):720-8, *Protein Eng Des Sel.* 2004 Jan; 17(1):57-66, *Nat. Protoc.* 2007; 2(5):1225-35, *Curr. Opin. Chem. Biol.* 2006 Oct; 10(5): 487-91. Epub 2006 Aug 28, *Biomaterials*, 2001 Mar; 22(5): 405-17, *Bioconjug Chem.* 2005 Jan-Feb; 16(1): 113-21).

O termo "plantas cultivadas", tal como aqui utilizado, inclui ainda as plantas que foram tornadas tolerantes a aplicações de classes específicas de herbicidas, tais como inibidores de hidroxi fenilpiruvato-dioxigenase (HPPD); inibidores de acetolactato sintase (ALS), tais como sulfonilureias (ver, por exemplo, documentos US 6.222.100, WO 01/82685, WO 00/26390, WO 97/41218, WO 98/02526, WO 98/02527, WO 04/106529, WO 05/20673, WO 03/14357, WO 03/13225, WO 03/14356, WO 04/16073) ou imidazolinonas (ver, por exemplo, documentos US 6.222.100, WO 01/82685, WO 00/26390, WO 97/41218, WO 98/02526, WO 98/02527, WO 04/106529, WO 05/20673, WO 03/14357, WO 03/13225, WO

03/14356, WO 04/16073); inibidores de enolpiruvilshikimato-3-fosfato sintase (EPSPS), tais como glifosato (ver, por exemplo, o documento WO 92/00377); inibidores de glutamina sintetase (GS), tais como inibidores de glufosinato (ver, por exemplo, os documentos EP-A-0242236 e EP-A-242246) ou herbicidas de oxinila (ver por exemplo o documento US 5.559.024), como um resultado de métodos convencionais de cruzamento ou engenharia genética. Várias plantas cultivadas foram tornadas tolerantes a herbicidas por métodos convencionais de cruzamento (mutagênese), por exemplo, colza *Clearfield* de verão® (canola) sendo tolerantes a imidazolinonas, e.g. imazamox. Métodos de engenharia genética têm sido usados para processar as plantas cultivadas, tais como soja, algodão, milho, beterraba e colza, e plantas tolerantes a herbicidas, tais como glifosato e glufosinato, algumas das quais estão comercialmente disponíveis sob os nomes comerciais RoundupReady® (glifosato) e Libertylink® (glufosinato).

O termo "plantas cultivadas", tal como aqui utilizado, inclui ainda as plantas que são obtidas pelo uso de técnicas de DNA recombinante capazes de sintetizar uma ou mais proteínas inseticidas, especialmente aquelas conhecidas a partir do gênero bacteriano *Bacillus*, em particular a partir de *Bacillus thuringiensis*, tais como

delta-endotoxinas, e.x. CrylA(b), CrylA(c), CrylF, CrylF(a2), CryllA(b), CrylllA, CrylllB(bl) ou Cry9c; proteínas vegetativas inseticidas (VIP), e.x. VIP1, VIP2, VIP3 ou VIP3A; proteínas inseticidas de bactérias que colonizam nematóides, por exemplo *Photorhabdus spp.* ou *Xenorhabdus spp.*; toxinas produzidas por animais, tais como as toxinas de escorpião, toxinas de aracnídeo, toxinas de vespas, ou outras neurotoxinas específicas de insetos; toxinas produzidas por fungos, tais como toxinas de estreptomicetos, lecitinas vegetais, tais como as lecitinas de ervilha ou de cevada; aglutininas; inibidores de proteinase, tais como inibidores de tripsina, os inibidores de serina protease, patatina, inibidores da papaína ou cistatina; proteínas inativadoras de ribossomos (RIP), tais como a ricina, milho-PIR, abrina, luffin, saporina ou bryodin, enzimas do metabolismo de esteróides, tais como 3-hidroxiesteróide oxidase, ecdiesteróide-IDP-glicosil-transferase, colesterol oxidases, inibidores de ecdisona ou da HMG-CoA-redutase, bloqueadores dos canais de íons, como os bloqueadores de canais de sódio ou cálcio; esterase do hormônio juvenil; receptores de hormônio diurético (receptores helicoquinina); stilbeno sintase, bibenzila sintase, quitinases ou glucanases. No contexto da presente invenção, estas proteínas inseticidas ou toxinas devem ser

entendidas expressamente também como pré-toxinas, proteínas híbridas, proteínas truncadas ou de outra forma modificadas. Proteínas híbridas são caracterizadas por uma nova combinação de domínios proteicos, (ver, por exemplo, o documento WO 02/015701). Outros exemplos de tais toxinas ou plantas geneticamente modificadas capazes de sintetizar tais toxinas são divulgados, por exemplo, nos documentos EP-A 374 753, WO 93/007278, WO 95/34656, EP-A 427 529, EP-A 451 878, WO 03/018810 e WO 03/052073. Essas proteínas inseticidas contidas nas plantas geneticamente modificadas irão transmitir às plantas que produzem essas proteínas proteção contra pragas prejudiciais de determinados grupos taxonômicos de insetos artrópodes, em particular aos besouros (Coleoptera), moscas (Diptera) e borboletas e mariposas (Lepidoptera) e para nematóides (Nematoda) parasitas de plantas.

O termo "plantas cultivadas", tal como aqui utilizado, inclui ainda as plantas que são, pelo uso de técnicas de DNA recombinante, capazes de sintetizar uma ou mais proteínas para aumentar a resistência ou tolerância das referidas plantas à agentes patogênicos bacterianos, virais ou fúngicos. Exemplos de tais proteínas são as assim chamadas "proteínas relacionadas com patogênese" (proteínas PR, ver, por exemplo, o documento EP-A 0 392 225), genes de

de resistência de plantas a doenças (por exemplo cultivares de batata que expressam os genes de resistência agindo contra *Phytophtora infestans* derivados da batata selvagem mexicana *Solanum bulbocastanum*) ou T4-liso-ZYM (por exemplo, cultivar de batata capaz de sintetizar estas proteínas com resistência aumentada contra bactérias tais como *Erwinia amilvora*).

O termo "plantas cultivadas", tal como aqui utilizado, inclui ainda as plantas que são obtidas pelo uso de técnicas de DNA recombinante capazes de sintetizar uma ou mais proteínas para aumentar a produtividade (por exemplo, a produção em biomassa, rendimento de grãos, teor de amido, o teor de óleo ou conteúdo de proteína), tolerância à salinidade, seca ou outro fator limitante do crescimento tais como fatores ambientais ou tolerância a pragas e patógenos fúngicos, virais ou bacterianos, dessas plantas.

O termo "plantas cultivadas", tal como aqui utilizado, inclui ainda as plantas que contêm, pelo uso de tecnologia do DNA recombinante, uma quantidade modificada de substâncias, de conteúdo ou novas substâncias de conteúdo, especificamente para melhorar a nutrição humana ou animal, por exemplo óleo de culturas que produzem por meio de ácidos graxos ômega-3 ou insaturados ômega-9 de cadeia longa (por exemplo, Nex-era ®) para a promoção de saúde.

O termo "plantas cultivadas", tal como aqui utilizado, inclui ainda as plantas, obtidas pelo uso de técnicas de DNA recombinante, que contêm uma quantidade modificada de substâncias de conteúdo ou novas substâncias em seu conteúdo, especificamente para melhorar a produção de matéria-prima, por exemplo batatas que produzem quantidades de amilopectina aumentadas (por exemplo, batata Amflora®).

As porções orgânicas mencionadas nas definições acima das variáveis são - como o termo halogênio - termos coletivos para listas individuais dos membros do grupo. O prefixo C_x-C_y, em cada caso, indica o número possível de átomos de carbono no grupo.

O termo "halogênio" significa, em cada caso, flúor, cloro, bromo ou iodo, em especial flúor, cloro ou bromo.

O termo "C_1-C_6-alquil", tal como aqui utilizado e nas porções alquil de alcoxi, alquiltio, alquilsulfinil, alquilsulfonil e semelhantes, refere-se a radicais de hidrocarbonetos saturados de cadeia linear ou ramificada com 1 a 2 ("C_1-C_2-alquil"), de 1 a 4 ("C_1-C_4-alquil") ou de 1 a 6 ("C_1-C_6-alquil") átomos de carbono. Um grupo C_1-C_2-alquil é metil ou etil. Um grupo C_1-C_4-alquil é, adicionalmente, propil, isopropil, butil, 1-metilpropil (sec-butil), 2-metilpropil (isobutil) ou 1,1-dimetiletil (terc-butil). Um grupo C_1-C_6-alquil é, adicionalmente,

também, por exemplo, pentil, 1-metilbutil, 2-metilbutil, 3-metilbutil, 2,2-dimetilpropil, 1-etilpropil, 1,1-dimetilpropil, 1,2-dimetilpropila, hexila, 1-metilpentila, 2-metilpentila, 3-metilpentila, 4-metilpentila, 1,1-dimetilbutila, 1,2-dimetilbutila, 1,3-dimetilbutila, 2,2-dimetilbutila, 2,3-dimetilbutila, 3,3-dimetilbutila, 1-etilbutila, 2-etilbutila, 1,1,2-trimetilpropila, 1,2,2-trimetilpropila, 1-etil-1-metilpropila, ou 1-etil-2-metilpropila.

O termo "C_1-C_{10}-haloalquil", tal como aqui utilizado, o qual também é expresso como "C_1-C_{10}-alquil que pode ser substituído por halogênio", e refere-se a uma cadeia linear ou ramificada de grupos alquil com de 1 a 2 ("C_1-C_2-haloalquil"), de 1 a 4 ("C_1-C_4-haloalquil"), de 1 a 6 ("C_1-C_6-haloalquil"), de 1 a 8 ("C_1-C_8- haloalquil") ou de 1 a 10 ("C_1-C_{10}-haloalquil") átomos de carbono (como mencionado acima), em que alguns ou todos os átomos de hidrogênio destes grupos são substituídos por átomos de halogênio, como mencionado acima: em particular C_1-C_2-haloalquil, tais como clorometila, bromometila, diclorometila,triclorometila, fluorometila, difluorometila, trifluorometila, clorofluorometila, diclorofluorometila, clorodifluorometila, 1-cloroetila, 1-bromoetila, 1-fluoroetila, 2-fluoroetila, 2,2-difluoroetila, 2,2,2-

trifluoroetila, 2-cloro-2-fluoroetila, 2-cloro-2,2-difluoroetila, 2,2-dicloro-2-fluoroetila, 2,2,2-tricloroetila, pentafluoroetila ou 1,1,1-trifluoro-2-ila.

Um grupo "halometila" é uma metila em que 1, 2 ou 3 dos átomos de hidrogênio são substituídos por átomos de halogênio. Exemplos são bromometila, clorometila, fluorometila, diclorometila, triclorometila, difluorometila, trifluorometila, clorofluorometila, diclorofluorometila, clorodifluorometila e semelhantes.

O termo "C_2-C_6-alquenila", tal como aqui utilizado e na porção alquenila de alqueniloxi e semelhantes e refere-se a radicais de hidrocarboneto monoinsaturados de cadeia linear ou ramificada com de 2 a 4 ("C_2-C_4-alquenila") ou de 2 a 6 ("C_2-C_6-alquenil") átomos de carbono e uma ligação dupla em qualquer posição, por exemplo, C_2-C_4-alquenila, tal como etenila, 1-propenila, 2-propenila, 1-metiletenila, 1-butenila, 2-butenila, 3-butenila, 1-metil-1-propenila, 2-metil-1-propenila, 1-metil-2-propenila ou 2-metil-2-propenila; C_2-C_6-alquenila, tal como etenila, 1-propenila, 2-propenila, 1-metiletenil, 1-butenila, 2-butenila, 3-butenila, 1-metil-1-propenila, 2-metil-1-propenila, 1-metil-2-propenila, 2-metil-2- propenila, 1-pentenila, 2-pentenila, 3-pentenila, 4-pentenila, 1-metil-1-butenila, 2-metil-1-butenila, 3-metil-1-butenila, 1-metil-2-butenila,

2-metil-2-butenila, 3-metil-2-butenila, 1-metil-3-butenila, 2-metil-3-butenila, 3-metil-3-butenila, 1,1-dimetil-2-propenila, 1,2-dimetil-1-propenila, 1,2-dimetil-2-propenila, 1-etil-1-propenila, 1-etil-2-propenila, 1-hexenila, 2-hexenila, 3-hexenila, 4-hexenila, 5-hexenila, 1-metil-1-pentenila, 2-metil-1-pentenila ,3-metil-1-pentenila, 4-metil-1-pentenila, 1-metil-2-pentenila, 2-metil-2-pentenila, 3-metil-2-pentenila, 4-metil-2-pentenila, 1-metil-3-pentenila, 2-metil-3-pentenila, 3-metil-3-pentenila, 4-metil-3-pentenila, 1-metil-4-pentenila, 2-metil-4-pentenila, 3-metil-4-pentenila, 4-metil-4-pentenila, 1,1-dimetil-2-butenila, 1,1-dimetil-3-butenila, 1,2-dimetil-1-butenila, 1,2-dimetil-2-butenila, 1,2-dimetil-3-butenila, 1,3-dimetil-1-butenila, 1,3-dimetil- 2-butenila, 1,3-dimetil-3-butenila, 2,2-dimetil-3-butenila, 2,3-dimetil-1-butenila, 2,3-dimetil-2-butenila, 2,3-dimetil-3-butenila, 3,3-dimetil-1-butenila, 3,3-dimetil-2-butenila, 1-etil-1-butenila, 1-etil-2-butenila, 1-etil-3-butenila, 2-etil-1-butenila, 2-etil-2-butenila, 2-etil-3-butenila, 1,1,2-trimetil-2-propenila, 1-etil-1-metil-2-propenila, 1-etil- 2-metil-1-propenila, 1-etil-2-metil-2-propenila e semelhantes, e os isômeros de posição dos mesmos.

O termo "C_2-C_6-haloalquenil", tal como aqui utilizado,

o qual também é expresso como "C_2-C_6-alquenil que pode ser substituído por halogênio", se refere a porções de haloalquenil em haloalqueniloxi, haloalquenilcarbonila e semelhantes, refere-se a radicais de hidrocarbonetos insaturados cadeia ramificada ou linear possuindo de 2 a 4 ("C_2-C_4-haloalquenil") ou de 2 a 6 ("C_2-C_6-haloalquenil") átomos de carbono e uma ligação dupla em qualquer posição (como mencionado acima), em que alguns ou todos dos átomos de hidrogênio destes grupos são substituídos por átomos de halogênio, como mencionado acima, em especial flúor, cloro e bromo, por exemplo clorovinila, cloroalila e semelhantes.

O termo "C_2-C_6-alquinil", tal como é aqui utilizado, se refere a porções alquinil em alquinilóxi alquinilcarbonila, e semelhantes e refere-se a grupos hidrocarboneto de cadeia linear ou ramificada com de 2 a 4 ("C_2-C_4-alquinil") ou de 2 a 6 ("C_2-C_6-alquinil") átomos de carbono e uma ou duas ligações triplas em qualquer posição, por exemplo, C_2-C_4-alquinil, tal como etinila, 1-propinila, 2-propinila, 1-butinila, 2-butinila, 3-butinila, 1-metil-2-propinila e semelhantes, C_2-C_6-alquinil, tal como etinila, 1-propinila, 2-propinila, 1-butinila, 2-butinila, 3-butinila, 1-metil-2-propinila, 1-pentinila, 2-pentinila, 3-pentinila, 4-pentinila, 1-metil-2-butinila, 1-metil-3-butinila, 2-metil-3-butinila, 3-metil-1-butinila, 1,1-

dimetil-2-propinila, 1-etil-2-propinila, 1-hexinila, 2-hexinila, 3-hexinila, 4-hexinila, 5-hexinila, 1-metil-2-pentinila, 1-metil-3-pentinila, 1-metil-4-pentinila, 2-metil-3-pentinila, 2-metil-4-pentinila, 3-metil-1-pentinila, 3-metil-4-pentinila, 4-metil-1-pentinila, 4-metil-2-pentinila, 1,1-dimetil-2-butinila, 1,1-dimetil-3-butinila, 1,2-dimetil-3-butinila, 2,2-dimetil-3-butinila, 3,3-dimetil-1-butinila, 1-etil-2-butinila, 1-etil-3-butinila, 2-etil-3-butinila, 1-etil-1-metil-2-propinila e semelhantes.

O termo "C_2-C_6-haloalquinil", tal como aqui utilizado, também é expresso como "C_2-C_6-alquinil que pode ser substituído por halogênio", e se refere a porções de haloalquinil em haloalquiniléxi, haloalquinilcarbonila e semelhantes, e refere-se a radicais hidrocarboneto de cadeia simples ou ramificada insaturados com de 2 a 4 ("C_2-C_4-haloalquinil"), de 3 a 4 ("C_3-C_4-haloalquinil"), de 2 a 6 ("C_2-C_6-haloalquinil"), de 3 a 6 ("C_3-C_6-haloalquinil") átomos de de carbono e uma ou duas ligações triplas em qualquer posição (como mencionado acima), em que alguns ou todos os átomos de hidrogênio destes grupos são substituídos por halogênio, como mencionado acima, em particular flúor, cloro e bromo.

O termo "C_3-C_6-cicloalquil", tal como aqui utilizado,

refere-se a radicais de hidrocarbonetos saturados mono- ou bi- ou policíclicos com de 3 a 6 átomos de carbono. Exemplos de radicais monocíclicos tendo de 3 a 6 átomos de carbono incluem ciclopropila, ciclobutila, ciclopentila e ciclohexila.

O termo "C_3-C_6-halocicloalquil", tal como aqui utilizado, também é expresso como "C_3-C_6-cicloalquil que pode ser substituído por halogênio", e se refere a porções halocicloalquil em halocicloalcóxi, halo-cicloalquilcarbonila e semelhantes, e refere-se a grupos hidrocarboneto saturados mono- ou bi- ou policíclicos possuindo de 3 a 6 ("C_3-C_6-halocicloalquil") membros anéis de carbono (como mencionado acima), em que alguns ou todos os átomos de hidrogênio são substituídos por átomos de halogênio, como mencionado acima, em particular, flúor cloro e bromo.

O termo "C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil" refere-se a um grupo C_3-C_6-cicloalquila, tal como definido acima, que está ligado ao resto da molécula através de um grupo C_1-C_3-alquila, como definido acima. Exemplos são ciclopropilmetila, ciclopropiletila, ciclopropilpropila, ciclobutilmetila, ciclobu-tiletila, ciclobutilpropila, ciclopentilmetila, cicloppentiletila, ciclopentilpropila, ciclo-hexil-metila, ciclo-hexiletila, ciclohexilpropila, e

semelhantes.

O termo "C_1-C_2-alcoxi" é um grupo C_1-C_2-alquila, como definido acima, ligado através de um átomo de oxigênio. O termo "C_1-C_4-alcoxi" é um grupo C_1-C_4-alquila, como definido acima, ligado através de um átomo de oxigênio. O termo "C_1-C_6-alcoxi" é um grupo C_1-C_6-alquila, como definido acima, ligado através de um átomo de oxigênio. O grupo C_1-C_2-alcoxi é metóxi ou etóxi. O grupo C_1-C_4-alcoxi é, adicionalmente, por exemplo, n-propoxi, 1-metiletóxi (isopropoxi), butóxi, 1-metilpropoxi (sec-butóxi), 2-metilpropoxi (isobutóxi) ou 1,1-dimetiletóxi (terc-butóxi). O grupo C_1-C_6-alcóxi é, adicionalmente, por exemplo, pentóxi, 1-metilbutóxi, 2-metilbutóxi, 3-metilbutóxi, 1,1-dimetilpropóxi, 1,2-dimetilpropóxi, 2,2-dimetilpropóxi, 1-etilpropóxi, hexóxi, 1-metilpentóxi, 2-metilpentóxi, 3-metilpentóxi, 4-metilpentóxi, 1,1-dimetilbutóxi, 1,2-dimetilbutóxi, 1,3-dimetilbutóxi, 2,2-dimetilbutóxi, 2,3-dimetilbutóxi, 3,3-dimetilbutóxi, 1-etilbutóxi, 2-etilbutóxi, 1,1,2-trimetilpropóxi, 1,2,2-trimetilpropóxi, 1-etil-1-metilpropóxi ou 1-etil-2-metilpropóxi.

O termo "C_1-C_2-haloalcóxi" é um grupo C_1-C_2-haloalquila, como definido acima, ligado através de um átomo de oxigênio. O termo "C_1-C_4-haloalcóxi" é um grupo C_1-C_4-haloalquila, como definido acima, ligado através de um

átomo de oxigênio. O termo "C_1-C_6-haloalcoxi" é um grupo C_1-C_6-haloalquila, tal como definido acima, ligado através de um átomo de oxigênio. O grupo C_1-C_2-haloalcoxi é, por exemplo, OCH_2F, $OCHF_2$, OCF_3, OCH_2Cl, $OCHCl_2$, $OCCl_3$, clorofluorometóxi, diclorofluorometóxi, clorodifluorometóxi, 2-fluoroetóxi, 2-cloroetóxi, 2-bromoetóxi, 2-iodoetóxi, 2,2-difluoroetóxi, 2,2,2-trifluoroetóxi, 2-cloro-2-fluoroetóxi, 2-cloro-2,2-difluoroetóxi, 2,2-dicloro-2-fluoroetóxi, 2,2,2-tricloroetóxi ou OC_2F_5. O grupo C_1-C_4-haloalcoxi é, adicionalmente, por exemplo, 2-fluoropropóxi, 3-fluoropropóxi, 2,2-difluoropropóxi, 2,3-difluoropropóxi, 2-cloropropóxi, 3-cloropropóxi, 2,3-dicloropropóxi, 2-bromopropóxi, 3-bromopropóxi, 3,3,3-trifluoropropóxi, 3,3,3-tricloropropóxi, OCH_2-C_2F_5, C_2F_5-OCF_2, 1-(CH_2F)-2-fluoroetóxi, 1-(CH_2Cl)-2-cloroetóxi, 1-(CH_2Br)-2-bromoetóxi, 4-fluorobutóxi, 4-clorobutóxi, 4-bromobutóxi ou nonafluorobutóxi. O grupo C_1-C_6-haloalcoxi é, adicionalmente, por exemplo, 5-fluoropentóxi, 5-cloropentóxi, 5-brompentóxi, 5-iodopentóxi, undecafluoropentóxi, 6-fluorohexóxi, 6-clorohexóxi, 6-bromohexóxi, 6-iodohexóxi ou dodecafluorohexóxi.

O termo "C_1-C_2-alquiltio" é um grupo C_1-C_2-alquil, como definido acima, ligado através de um átomo de enxofre. O

termo "C_1-C_4-alquiltio" é um grupo C_1-C_4-alquil, como definido acima, ligado através de um átomo de enxofre. O termo "C_1-C_6-alquiltio" é um grupo C_1-C_6-alquil, como definido acima, ligado através de um átomo de enxofre. O grupo C_1-C_2-alquiltio é metiltio ou etiltio. O grupo C_1-C_4-alquiltio é, adicionalmente, por exemplo, n-propiltio, 1-metilaetiltio (isopropiltio), butiltio, 1-metilpropiltio (sec-butiltio), 2-metilpropiltio (isobutiltio) ou 1,1-dimetiletiltio (terc-butiltio). C1-C6-alquiltio é adicionalmente, por exemplo, pentiltio, 1-metilbutiltio, 2-metilbutiltio, 3-metilbutiltio, 1,1-dimetilpropiltio, 1,2-dimetilpropiltio, 2,2-dimetilpropiltio, 1-etilpropiltio, hexiltio, 1-metilpentiltio, 2-metilpentiltio, 3-metilpentiltio, 4-metilpentiltio, 1,1-dimetilbutiltio, 1,2-dimetilbutiltio, 1,3-dimetilbutiltio, 2,2-dimetilbutiltio, 2,3-dimetilbutiltio, 3,3-dimetilbutiltio , 1-etilbutiltio, 2-etilbutiltio, 1,1,2-trimetilpropiltio, 1,2,2-trimetilpropiltio, 1-etil-1-metilpropiltio ou 1-etil-2-metilpropiltio.

O termo "C_1-C_2-haloalquiltio" é um grupo C_1-C_2-haloalquila, como definido acima, ligado através de um átomo de enxofre. O termo "C_1-C_4-haloalquiltio" é um grupo C_1-C_4-haloalquil, como definido acima, ligado através de um átomo de enxofre. O termo "C_1-C_6-haloalquiltio" é um grupo

C_1-C_6-haloalquil, tal como definido acima, ligado através de um átomo de enxofre. C_1-C_2-haloalquiltio é, por exemplo, SCH_2F, $SCHF_2$, SCF_3, SCH_2Cl, $SCHCl_2$, $SCCl_3$, clorofluorometiltio, diclorofluorometiltio, clorodifluorometiltio, 2-fluoroetiltio, 2-cloroetiltio, 2-bromoetiltio, 2-iodoetiltio, 2,2-difluoroetiltio, 2,2,2-trifluoroetiltio, 2-cloro-2-fluoroetiltio, 2-cloro-2,2-difluoroetiltio, 2,2-dicloro-2-fluoroetiltio, 2,2,2-tricloroetiltio ou SC2F5. O grupo C_1-C_4-haloalquiltio é, adicionalmente, por exemplo, 2-fluoropropiltio, 3-fluoropropiltio, 2,2-difluoropropiltio, 2,3-difluoropropiltio, 2-cloropropiltio, 3-cloropropiltio, 2,3-dicloropropiltio, 2-bromopropiltio, 3-bromopropiltio, 3,3,3-trifluoropropiltio, 3,3,3-tricloropropiltio, SCH_2-C_2F_5, SCF_2-C_2F_5, 1-(CH_2F)-2-fluoroetiltio, 1-(CH_2Cl)-2-cloroetiltio, 1-(CH_2Br)-2-bromoetiltio, 4-fluorobutiltio, 4-clorobutiltio, 4-bromobutiltio ou nonafluorobutiltio. O grupo C_1-C_6-haloalquiltio é, adicionalmente, por exemplo, 5-fluoropentiltio, 5-cloropentiltio, 5-brompentiltio, 5-iodopentiltio, undecafluoropentiltio, 6-fluorohexiltio, 6-clorohexiltio, 6-bromohexiltio, 6-iodohexiltio ou dodecafluorohexiltio.

O termo "C_1-C_2-alquilsulfinila" é um grupo C_1-C_2-alquila, como definido acima, ligado através de um grupo

sulfinila [S(O)]. O termo "C_1-C_4-alquilsulfinila" é um grupo C_1-C_4-alquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfinila [S(O)]. O termo "C_1-C_6-alquilsulfinila" é um grupo C_1-C_6-alquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfinila [S(O)]. O grupo C_1-C_2-alquilsulfinila é metilsulfinila ou etilsulfinila. O grupo C_1-C_4-alquilsulfinila é, adicionalmente, por exemplo, n-propilsulfinila, 1-metilaetilsulfinila (isopropil-sulfinila), butilsulfinila, 1-metilpropilsulfinila (sec-butilsulfinila), 2-metilpropilsulfinila (isobutil-sulfinila) ou 1,1-dimetilaetilsulfinila (terc-butilsulfinila). O grupo C_1-C_6-alquilsulfinila é, adicionalmente, por exemplo, pentilsulfinila, 1-metilbutilsulfinila, 2-metilbutilsulfinila, 3-metilbutilsulfinila, 1,1-dimetilpropilsulfinila, 1,2-dimetilpropilsulfinila, 2,2-dimetilpropilsulfinila, 1-etilpropilsulfinila, hexilsulfinila, 1-metilapentilsulfinila, 2-metilapentilsulfinila, 3-metilapentilsulfinila, 4-metilapentilsulfinila, 1,1-dimetilbutilsulfinila, 1,2-dimetilbutilsulfinila, 1,3-dimetilbutilsulfinila, 2,2-dimetilbutilsulfinila, 2,3-dimetilbutilsulfinila, 3,3-dimetilbutilsulfinila, 1-etilbutilsulfinila, 2-etilbutilsulfinila, 1,1,2-trimetilpropilsulfinila, 1,2,2-trimetilpropilsulfinila, 1-

etil-1-metilpropilsulfinila ou 1-etil-2-metilpropilsulfinila.

O termo "C_1-C_2-haloalquilsulfinila" é um grupo C_1-C_2-haloalquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfinila [S(O)]. O termo "C_1-C_4-haloalquilsulfinila" é um grupo C_1-C_4-haloalquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfinila [S(O)]. O termo "C_1-C_6-haloalquilsulfinila" é um grupo C_1-C_6-haloalquila, tal como definido acima, ligado através de um grupo sulfinila [S(O)]. O grupo C_1-C_2-haloalquilsulfinila é, por exemplo, $S(O)CH_2F$, $S(O)CHF_2$, $S(O)CF_3$, $S(O)CH_2Cl$, $S(O)CHCl_2$, $S(O)CCl_3$, cloro-fluorometilsulfinila, diclorofluorometilsulfinila, clorodifluorometilsulfinila, 2-fluoroetilsulfinila, 2-cloroetilsulfinila, 2-bromoetilsulfinila, 2-iodoetilsulfinila, 2,2-difluoroetilsulfinila, 2,2,2-trifluoroetilsulfinila, 2-cloro-2-fluoroetilsulfinila, 2-cloro-2,2-difluoroetilsulfinila, 2,2-dicloro-2-fluoroetilsulfinila, 2,2,2-tricloroetilsulfinila ou $S(O)C_2F_5$. O grupo C_1-C_4-haloalquilsulfinila é, adicionalmente, por exemplo, 2-fluoropropilsulfinila, 3-fluoropropilsulfinila, 2,2-difluoropropilsulfinila, 2,3-difluoropropilsulfinila, 2-cloropropilsulfinila, 3-cloropropilsulfinila, 2,3-dicloropropilsulfinila, 2-bromopropilsulfinila, 3-bromopropilsulfinila, 3,3,3-

trifluoropropilsulfinila, 3,3,3-tricloropropilsulfinila, $S(O)CH_2-C_2F_5$, $S(O)CF_2-C_2F_5$, 1-(CH_2F)-2-fluoroetilsulfinila, 1-(CH_2Cl)-2-cloroetilsulfinila, 1-(CH_2Br)-2-bromoetilsulfinila, 4-fluorobutilsulfinila, 4-clorobutilsulfinila, 4-bromobutilsulfinila ou nonafluorobutilsulfinila. O grupo C_1-C_6-haloalquilsulfinila é, adicionalmente, por exemplo, 5-fluoropentilsulfinila, 5-cloropentilsulfinila, 5-brompentilsulfinila, 5-iodopentilsulfinila, undecafluoropentilsulfinila, 6-fluorohexilsulfinila, 6-clorohexilsulfinila, 6-bromohexilsulfinila, 6-iodohexilsulfinila ou dodecafluorohexilsulfinila.

O termo "C_1-C_2-alquilsulfonila" é um grupo C_1-C_2-alquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfonila [$S(O)_2$]. O termo "C_1-C_4-alquilsulfonila" é um grupo C_1-C_4-alquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfonila [$S(O)_2$]. O termo "C_1-C_6-alquilsulfonila" é um grupo C_1-C_6-alquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfonila [$S(O)_2$]. O grupo C_1-C_2-alquilsulfonila é metilsulfonila ou etilaulfonila. O grupo C_1-C_4-alquilsulfonila é, adicionalmente, por exemplo, n-propilsulfonila, 1-metiletilsulfonila (isopropilsulfonil), butilsulfonila, 1-metilpropilsulfonila (sec-butilsulfonila), 2-metilpropilsulfonila (isobutilsulfonila)

ou 1,1-dimetiletilsulfonila (terc-butilsulfonila). O grupo C_1-C_6-alquilsulfonila é, adicionalmente, por exemplo, pentilsulfonila, 1-metilbutilsulfonila, 2-metilbutilsulfonila, 3-metilbutilsulfonila, 1,1-dimetilpropilsulfonila, 1,2-dimetilpropilsulfonila, 2,2-dimetilpropilsulfonila, 1-etilpropilsulfonila, hexilasulfonila, 1-metilapentilsulfonila, 2-metilapentilsulfonila, 3-metilapentilsulfonila, 4-metilapentilsulfonila, 1,1-dimetilbutilsulfonila, 1,2-dimetilbutilsulfonila, 1,3-dimetilbutilsulfonila, 2,2-dimetilbutilsulfonila, 2,3-dimetilbutilsulfonila, 3,3-dimetilbutilsulfonila, 1-etilbutilsulfonila, 2-etilbutilsulfonila, 1,1,2-trimetilpropilsulfonila, 1,2,2-trimetilpropilsulfonila, 1-etil-1-metilpropilsulfonila ou 1-etil-2-metilpropilsulfonila.

O termo "C_1-C_2-haloalquilsulfonila" é um grupo C_1-C_2-haloalquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfonila [$S(O)_2$]. O termo "C_1-C_4-haloalquilsulfonila" é um grupo C_1-C_4-haloalquila, como definido acima, ligado através de um grupo sulfonila [$S(O)_2$]. O termo "C_1-C_6-haloalquilsulfonila" é um grupo C_1-C_6-haloalquila, tal como definido acima, ligado através de um grupo sulfonila [$S(O)_2$]. O grupo C_1-C_2-haloalquilsulfonila é, por exemplo, $S(O)_2CH_2F$, $S(O)_2CHF_2$, $S(O)_2CF_3$, $S(O)_2CH_2Cl$, $S(O)_2CHCl_2$,

$S(O)_2CCl_3$, cloro-fluorometilsulfonila, diclorofluorometilsulfonila, clorodifluorometilsulfonila, 2-fluoroetilsulfonila, 2-cloroetilsulfonila, 2-bromoetilsulfonila, 2-iodoetilsulfonila, 2,2-difluoroetilsulfonila, 2,2,2-trifluoroetilsulfonila, 2-cloro-2-fluoroetilsulfonila, 2-cloro-2,2-difluoroetilsulfonila, 2,2-dicloro-2-fluoroetilsulfonila, 2,2,2-tricloroetilsulfonila ou $S(O)_2C_2F_2$. O grupo C_1-C_4-haloalquilsulfonila é, adicionalmente, por exemplo, 2-fluoropropilsulfonila, 3-fluoropropilsulfonila, 2,2-difluoropropilsulfonila, 2,3-difluoropropilsulfonila, 2-cloropropilsulfonila, 3-cloropropilsulfonila, 2,3-dicloropropilsulfonila, 2-bromopropilsulfonila, 3-bromopropilsulfonila, 3,3,3-trifluoropropilsulfonila, 3,3,3-tricloropropilsulfonila, $S(O)_2CH_2$-C_2F_5, $S(O)_2CF_2$-C_2F_5, 1-(CH_2F)-2-fluoroetilsulfonila, 1-(CH_2Cl)-2-cloroetilsulfonila, 1-(CH_2Br)-2-bromoetilsulfonila, 4-fluorobutilsulfonila, 4-clorobutilsulfonila, 4-bromobutilsulfonila ou nona-fluorobutilsulfonila. O grupo C_1-C_6-haloalquilsulfonila é, adicionalmente, por exemplo, 5-fluoropentilsulfonila, 5-cloropentilsulfonila, 5-brompentilsulfonila, 5-iodopentilsulfonila, undecafluoropentilsulfonila, 6-fluorohexilsulfonila, 6-clorohexilsulfonila, 6-bromohexilsulfonila, 6-

iodohexilsulfonila ou dodecafluorohexilsulfonila.

O termo "anel heterocíclico saturado, parcialmente insaturado ou aromático de 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- ou 12-membros, contendo 1, 2 ou 3 heteroátomos ou grupos de heteroátomo (se um ou dois ou, no máximo, três heteroátomos do anel heterocíclico são oxidados) selecionado a partir de N, O, S, NO, SO e SO_2, como membros do anel", conforme aqui utilizado, refere-se a radicais monocíclicos, os radicais monocíclicos sendo saturados, parcialmente insaturados ou aromáticos. O radical heterocíclico pode ser ligado ao restante da molécula através de um membro do anel de carbono ou através de um membro do anel de nitrogênio.

O anel hetearomático pode ser um sistema mono- ou bicíclico- de anel heteroaromático. Exemplos de sistemas de anéis heteroaromáticos monocíclicos que podem ser dados incluem, mas não estão limitados a: piridina, pirimidina, pirazina, piridazina, 1,3,5-triazina, 1,2,4-triazina, pirrol, pirazol, imidazol, 1,2,4-triazol, 1,2,3-triazol, tetrazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol, 1,2,3-oxadiazol, tiofeno, tiazol, isotiazol, 1,3,4-tiadiazol, 1,2,4-tiadiazol, 1,2,3-tiadiazole. Exemplos de sistemas de anéis heteroaromáticos bicíclicos que podem ser dados incluem, mas não estão limitados a

quinolina, indol, benzofurano, benzotiofeno, benzoimidazol, benzoxazol, benzoisoxazol, benzotiazol, benzoisotiazol.

Exemplos de anel heterocíclico saturado de 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- ou 12-membros incluem: oxiranila, aziridinila, azetidinila, 2-tetra-hidrofuranila, 3-tetra-hidrofuranila, 2-tetrahidrotienila, 3-tetrahidrotienila, 2-pirrolidinila, 3-pirrolidinila, 3-pirazolidinila, 4-pirazolidinila, 5-pirazolidinila, 2-imidazolidinila, 4-imidazolidinila, 2-oxazolidinila, 4-oxazolidinila, 5-oxazolidinila, 3-isoxazolidinila, 4-isoxazolidinila, 5-isoxazolidinila, 2-tiazolidinila, 4-tiazolidinila, 5-tiazolidinila, 3-isotiazolidinila, 4-isotiazolidinila, 5-isotiazolidinila, 1,2,4-oxadiazolidin-3-ila, 1,2,4-oxadiazolidin-5-ila, 1,2,4-thiadiazolidin-3-ila, 1,2,4-thiadiazolidin-5-ila, 1,2,4-triazolidin-3-ila, 1,3,4-oxadiazolidin-2-ila, 1,3,4-thiadiazolidin-2-ila, 1,3,4-triazolidin-2-ila, 2-tetra-hidropiranila, 4-tetra-hidropiranila, 1,3-dioxano-5-ila, 1,4-dioxano-2-ila, 2-piperidinila, 3-piperidinila, 4-piperidinila, 3-hexahidropiridazinila, 4-hexahidropiridazinila, 2-hexahidropirimidinila, 4-hexahidropirimidinila, 5-hexahidropirimidinila, 2-piperazinila, 1,3,5-hexahidrotriazin-2-ila e 1,2,4-hexahidrotriazin-3-ila, 2-

morfolinila, 3-morfolinila, 2-tiomorfolinila, 3-tiomorfolinila, 1-oxotiomorfolin-2-ila, 1-oxotiomorfolin-3-il, 1,1-dioxotiomorfolin-2-ila, 1,1-dioxotiomorfolin-3-ila, hexa-hidroazepin-1-, -2-, -3- ou-4-ila, hexahidrooxepinila, hexahidro-1,3-diazepinila, hexahidro-1,4-diazepinila, hexahidro-1,3-oxazepinila, hexa-hidro-1,4-oxazepinila, hexahidro-1,3-dioxepinila, hexa-hidro-1,4-dioxepinila e semelhantes.

Exemplos de anel heterocíclico insaturado de 3-, 4-, 5-, 6-, 7- membros parcialmente incluem: 2,3-dihidrofur-2-ila, 2,3-dihidrofur-3-ila, 2,4-dihidrofur-2-ila, 2,4-dihidrofur-3-ila, 2,3-dihidrotien-2-ila, 2,3-dihidrotien-3-ila, 2,4-dihidrotien-2-ila, 2,4-dihidrotien-3-ila, 2-pirrolin-2-ila, 2-pirrolin-3-ila, 3-pirrolin-2-ila, 3-pirrolin-3-ila, 2-isoxazolin-3-ila, 3-isoxazolin-3-il, 4-isoxazolin-3-ila, 2-isoxazolin-4-ila, 3-isoxazolin-4-ila, 4-isoxazolin-4-ila, 2-isoxazolin-5-ila, 3-isoxazolin-5-ila, 4-isoxazolin-5-ila, 2-isotiazolin-3-ila, 3-isotiazolin-3-ila, 4-isotiazolin-3-ila, 2-isotiazolin-4-ila, 3-isotiazolin-4-ila, 4-isotiazolin-4-ila, 2-isotiazolin-5-ila, 3-isotiazolin-5-ila, 4-isotiazolina-5-ila, 2,3-dihidropirazol-1-ila, 2,3-dihidropirazol-2-ila, 2,3-dihidropirazol-3-ila, 2,3-dihidropirazol-4-ila, 2,3-dihidropirazol-5-ila, 3,4-dihidropirazol-1-ila, 3,4-

dihidropirazol-3-ila, 3,4-dihidropirazol-4-ila, 3,4-dihidropirazol-5-ila, 4,5-dihidropirazol-1-ila, 4,5-dihidropirazol-3-ila, 4,5-dihidropirazol-4-ila, 4,5-dihidropirazol-5-ila, 2,3-dihidrooxazol-2-ila, 2,3-dihidrooxazol-3-ila, 2,3-dihidrooxazol-4-ila, 2,3-dihidrooxazol-5-ila, 3,4-dihidrooxazol-2-ila, 3,4-dihidrooxazol-3-ila, 3,4-dihidrooxazol-4-ila, 3,4-dihidrooxazol-5-ila, 3,4-dihidrooxazol-2-ila, 3,4-dihidrooxazol-3-ila, 3,4-dihidrooxazol-4-ila, 2-, 3-, 4-, 5- ou 6-di- ou tetrahidropiridinila, 3-di- ou tetrahidropiridazinila, 4-di- ou -tetra-piridazinila, 2-di- ou tetrahidropirimidinila, 4-di- ou tetrahidropirimidinila, 5-di- ou tetra-pirimidinila, di- ou tetrahidropirazinila, 1,3,5-di-ou tetrahidrotriazin-2-ila, 1,2,4-di- ou tetra-hidro-triazin-3-ila,2,3,4,5-tetra-hidro[1H]azepin-1; -2-, -3-, -4-, -5-, -6- ou -7-ila, 3,4,5,6-tetra-hidro[2H]azepin-2-, -3-, -4-, -5-, -6-, ou -7-ila, 2,3,4,7-tetra-hidro[1H]azepin-1-; -2-, -3-, -4-, -5-, -6- ou -7-ila, 2,3,6,7-tetra-hidro[1H]azepin-1-, -2-, -3-, -4-, -5-, -6- ou -7-ila, tetrahidrooxepinila, tais como 2,3,4,5-tetra-hidro[1H]oxepin-2-, -3-, -4-, -5-, -6- ou -7-ila, 2,3,4,7-tetra-hidro[1H]oxepin-2-, -3-, -4-, -5-, -6- ou -7-ila, 2,3,6,7-tetra-hidro[1H]oxepin-2-, -3-, -4-, -5-, -6- ou -7-ila, tetra-hidro-1,3-diazepinila, tetra-1,4-diazepinila,

tetra-1,3-oxazepinila, tetra-1,4-oxazepinila, tetra-1,3-dioxepinila e tetrahidro-1 ,4-dioxepinila.

Anel heterocíclico aromático de 3-, 4-, 5-, 6-, 7-membros é heterocíclico (hetarila) aromático de 5 - ou 6-membros . Exemplos são: 2-furila, 3-furila, 2-tienila, 3-tienila, 2-pirrolila, 3-pirrolila, 3-pirazolila, 4-pirazolila, 5-pirazolila, 2-oxazolila, 4-oxazolila, 5-oxazolila , 2-tiazolila, 4-tiazolila, 5-tiazolila, 2-imidazolila, 4-imidazolila, 1,3,4-triazol-2-ila, 2-piridinila, 3-piridinila, 4-piridinila, 3-piridazinila, 4-piridazinila, 2-pirimidinila, 4-pirimidinila, 5-pirimidinila e 2-pirazinila.

As observações feitas abaixo se aplicam a formas de realização preferidas das variáveis dos compostos de fórmula I, especialmente no que diz respeito aos seus substituintes X, U, V, R^1, R^2, R^3U, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14}, R^{15}, m, n, o e p, e as características de utilização e de método de acordo com a invenção e da composição da presente invenção são válidas tanto por si mesmas e, em particular, em cada combinação possível umas com as outras.

Em uma forma de realização preferida X é $S(=O)_m$ com m sendo 0, 1 ou 2. De preferência m é 0 ou 1 e mais preferivelmente m é 0.

Numa modalidade preferida n é 0, 1 ou 2. De preferência, n é 1, 2 e mais preferivelmente, n é 2.

Numa modalidade preferida p é 1 ou 2. De preferência, p é 1.

De preferência, U é um sistema de anel heteroaromático monocíclico ou bicíclico de 5- a 12-membros que pode conter de 1 a 4 heteroátomos selecionados a partir de O, S, N, em que o anel heteroaromático pode ser substituído por de um a quatro substituintes V que têm, cada, preferência para V, como mencionado a seguir.

De preferência, U é um sistema de anéis heteroaromático monocíclico ou bicíclico de 5- a 10-membros, que pode conter de 1 a 4 heteroátomos selecionados a partir de O, S, N, em que o anel heteroaromático pode ser substituído por um a quatro substituintes V que têm, cada, preferência para V, como mencionado a seguir.

Mais preferivelmente, U é um sistema de anéis heteroaromático de 5- a 10-membros selecionado dentre o grupo consistindo de: piridina, pirimidina, pirazina, piridazina, 1,3,5-triazina, quinolina, 1H-indol, 1H-benzoimidazol, benzotiazol, benzooxazol, benzofurano, benzotiofeno, 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-1,2,3-triazol, 1H-tetrazol, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol,

1,3,4-oxadiazol, em que o anel heteroaromático pode ser substituído por 1-4 substituintes V que têm, cada, preferência para V, como mencionado a seguir. Mais preferivelmente, U é um anel heteroaromático de 5 membros selecionado dentre o grupo consistindo de 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-1,2,3-triazol, 1H-tetrazol, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol, em que o anel heteroaromático pode ser substituído por um a quatro substituintes V, que têm, cada, preferência para V, como mencionado a seguir. Ainda mais preferivelmente, U é um anel heteroaromático de 5 membros selecionado dentre o grupo consistindo de 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol , 1H-1,2,3-triazol, 1H-tetrazol, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol, em que o anel heteroaromático é preferivelmente pelo menos substituído por halogênio, CN, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil, que podem ser substituídos com átomos de halogênio, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_1-C_6-alcoxi ou C_1-C_6-haloalcoxi. Ainda mais preferivelmente, U é um anel heteroaromático de 5-membros selecionado dentre o grupo consistindo de: 1H-

pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-tetrazol, isoxazol, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, em que o anel heteroaromático é preferivelmente pelo menos substituído por CN, terc-butila, CF_3 ou halogênio sendo preferencialmente Cl. Mais preferivelmente, U é um anel heteroaromático de 5 membros selecionado dentre o grupo consistindo de: 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1,3,4-tiadiazol, em que o anel heteroaromático é substituído por um dos grupos selecionado dentre Cl, CN, terc-butila e CF_3.

De preferência, V é independentemente selecionado dentre o grupo consistindo de halogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_1-C_6-alcoxi, C_1-C_6-haloalcoxi, $C(=O)R^4$, $C(=S)R^4$, $S(O)OR^{10}$, CN, NO_2, um grupo amino que pode ser substituído por C_1-C_4-alquil ou por C_1-C_4-acila.

De preferência, V é independentemente selecionado dentre o grupo consistindo de: halogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_1-C_6-alcoxi, C_1-C_6-

haloalcoxi, C_1-C_6-alquiltio, C_1-C_6-haloalquiltio, C_1-C_6-alquilsulfinila, C_1-C_6-haloalquilsulfinila, C_1-C_6-alquilsulfonila, C_1-C_6-haloalquilsulfonila, $C(=O)R^4$, $C(=S)R^4$, CN, NO_2, um grupo amino que pode ser substituído por C_1-C_4-alquil ou por C_1-C_4-acila. Mais preferencialmente V é independentemente selecionado dentre o grupo consistindo de halogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_3-C_6-cicloalquil- C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_1-C_6-alcoxi, C_1-C_6-haloalcoxi, NC.

Mais preferivelmente, V é independentemente selecionado dentre o grupo consistindo de halogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil e CN.

Ainda mais preferivelmente, V é independentemente selecionado dentre o grupo consistindo de terc-butila, CN, CF_3 e halogênio, em especial Cl. Mais preferivelmente, V é CF_3.

De preferência, R^1 e R^2 são, independentemente um do outro, selecionados dentre o grupo consistindo de hidrogênio, halogênio, C_1-C_6-alquil que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alquiltio, por C_1-C_4-alquilsulfinila, por C_1-C_6-alquilsulfonila, por CN, por $C(=O)R^4$, por $OC(=O)R^4$, por N

$(C_1-C_3\text{-alquil})_2$ ou por OH, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído por átomo de halogênio, CN, $C(=O)R^7$, $C(=S)R^7$, $C(R^{11})=NR^{12}$, $C(R^{11})=N-OR^{12}$, ou R^1 e R^2 podem formar em conjunto com o átomo de carbono ao qual eles estão ligados C_3-C_6-cicloalquil, $C=C(R^5)R^6$ ou $C=N-R^5$.

Mais preferivelmente, R^1 e R^2 são independentemente selecionados dentre o grupo consistindo de hidrogênio, halogênio, C_1-C_4-alquil, CN, $C(=O)-C_1-C_4$-alquil, $C(=0)-C_1-C_4$-alcoxi, $C(=O)-NR^8R^9$, $C(=S)-NR^8R^9$. Ainda mais preferencialmente, R^1 e R^2 são independentemente selecionados dentre o grupo consistindo de: hidrogênio, C_1-C_4-alquil, Cl, CN, C(=O)-Me, C(=O)-Et, C(=O)-OMe , C(=O)-OEt, $C(=O)-NH_2$, C(=O)-NMeH, C(=O)-NEtH, $C(=O)-NMe_2$, C(=O)-NMeEt, $C(=O)-NEt_2$, $C(=S)-NH_2$, C(=S)-NMeH, C(=S)-NEtH, $C(=S)-NMe_2$, C(=S)-NMeEt, $C(=S)-NEt_2$.

Ainda mais preferivelmente, R^1 e R^2 são, cada um, uma combinação de R^1 selecionado dentre o grupo consistindo em H, CN, C(=O)-Me, C(=O)-Et, $C(=O)-NH_2$, C(=O)-NMeH, C(=O)-NEtH, $C(=O)-NMe_2$, C(=O)-NMeEt, $C(=O)-NEt_2$, $C(=S)-NH_2$, C(=S)-NMeH, C(=S)-NEtH, $C(=S)-NMe_2$, C(=S)-NMeEt e $C(=S)-NEt_2$ com R^2 selecionado dentre o grupo constituído por hidrogênio, Cl e C_1-C_4-alquil, em particular Me ou Et.

De preferência, R^3U é selecionado a partir do grupo consistindo de C_1-C_{10}-haloalquil, C_2-C_6-haloalquenil, C_3-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-halocicloalquil e C_3-C_6-halocicloalquenila e em que pelo menos um halogênio é flúor.

De preferência, R^3U é C_1-C_4-haloalquil, C_2-C_4-haloalquenil e C_3-C_4-haloalquinil, em que o halogênio é flúor ou, adicionalmente, cloro.

Mais preferencialmente, R^3U é C_1-C_4-haloalquil por exemplo C_1-C_2-fluoroalquil. grupos perfluorados R^3U são também preferidos. Por exemplo, R^3U pode ser CF_3, CF_2H, CH_2F, CF_2CF_3 ou $CF_2CF_2CF_3$. Ainda mais preferivelmente, R^3U é CF_3 ou CF_2H. Mais preferivelmente, R^3U é CF_3.

A seguinte notação para um grupo substituinte é definida como segue, quando utilizada no texto:

Me = grupo metila,

Et = grupo etila,

Pr = grupo propila,

i-Pr = grupo isopropila,

Bu = grupo n-butila,

i-Bu = grupo isobutila,

s-Bu = grupo secbutil,

t-Bu = grupo terc-butila,

c-Pr = grupo ciclopropila,

Pen = grupo pentila,

c-Pen = grupo ciclopentila,

c-Hex = grupo ciclohexila,

Ac = grupo acetila,

Ph = grupo fenila,

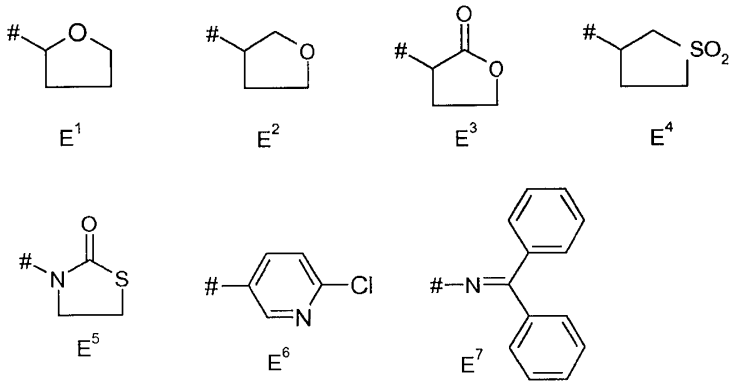
Além disso, a notação submencionada denota, por exemplo, o referido significado de cada:

5-CF_3 é um substituinte trifluorometil na posição 5;

3-Cl-5-CF_3 é um átomo de cloro na posição 3 e um substituinte trifluorometil na posição 5;

2,6-$(Cl)_2$ é um substituinte de átomo de cloro nas posições 2 e 6.

Os substituintes representados por E^1 a E^7 denotam as respectivas estruturas abaixo mencionadas:

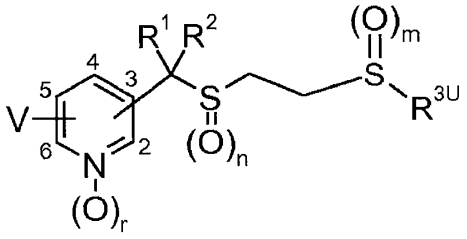


Exemplos de compostos de fórmula geral I, de acordo com a presente invenção, são combinações dos vários

substituintes acima mencionados.

Em particular, uma modalidade preferida da invenção se constitui por cada exemplo como representado nas Tabelas de 1 a 9.

Tabela 1: descreve exemplos com compostos com número do tipo 1-xxxx como representado na seguinte fórmula:



1-xxxx

Compostos de número 1 -01 a 1 -0145: m = 0

No.	Posição	V	r	R^1	R^2	R^{3U}	n
1-01.	2	5-CF_3	0	H	H	CF_3	2
1-02.	2	5-CF_3	0	H	H	CF_2H	2
1-03.	2	5-CF_3	0	CN	H	CF_3	2
1-04.	2	5-CF_3	0	CN	H	CF_2H	2
1-05.	2	5-CF_3	0	COOMe	H	CF_3	2
1-06.	2	5-CF_3	0	COOMe	H	CF_2H	2
1-07.	2	5-CF_3	0	COOEt	H	CF_3	2
1-08.	2	5-CF_3	0	COOEt	H	CF_2H	2
1-09.	2	5-CF_3	0	COO-i-Pr	H	CF_3	2
1-010.	2	5-CF_3	0	COO-i-Pr	H	CF_2H	2
1-011.	2	5-CF_3	0	COO-t-Bu	H	CF_3	2

No.	Posição	V	r	R^1	R^2	R^{3U}	n
1-012.	2	5-CF_3	0	COO-t-Bu	H	CF_2H	2
1-013.	2	5-CF_3	0	$CON(Me)_2$	H	CF_3	2
1-014.	2	5-CF_3	0	$CON(Me)_2$	H	CF_2H	2
1-015.	2	5-CF_3	0		H	CF_3	2
1-016.	2	5-CF_3	0		H	CF_2H	2
1-017.	2	5-CF_3	0	COOMe	F	CF_3	2
1-018.	2	5-CF_3	0	COOMe	F	CF_2H	2
1-019.	2	5-CF_3	0	COOMe	Cl	CF_3	2
1-020.	2	5-CF_3	0	COOMe	Cl	CF_2H	2
1-021.	2	5-CF_3	0	COOMe	Me	CF_3	2
1-022.	2	5-CF_3	0	COOMe	Me	CF_2H	2
1-023.	2	5-CF_3	0	Me	H	CF_3	2
1-024.	2	5-CF_3	0	Me	H	CF_2H	2
1-025.	2	3-Cl-5-CF_3	0	H	H	CF_3	2
1-026.	2	3-Cl-5-CF_3	0	H	H	CF_2H	2
1-027.	2	3-Cl-5-CF_3	0	CN	H	CF_3	2
1-028.	2	3-Cl-5-CF_3	0	CN	H	CF_2H	2
1-029.	2	3-Cl-5-CF_3	0	COOMe	H	CF_3	2
1-030.	2	3-Cl-5-CF_3	0	COOMe	H	CF_2H	2
1-031.	2	3-Cl-5-CF_3	0	COOEt	H	CF_3	2
1-032.	2	3-Cl-5-CF_3	0	COOEt	H	CF_2H	2
1-033.	2	5-CN	0	H	H	CF_3	2
1-034.	2	5-CN	0	H	H	CF_2H	2
1-035.	2	5-CN	0	CN	H	CF_3	2
1-036.	2	5-CN	0	CN	H	CF_2H	2
1-037.	3	6-Cl	0	H	H	CF_3	0
1-038.	3	6-Cl	0	H	H	CF_2H	0
1-039.	3	6-Cl	0	H	H	CF_3	1
1-040.	3	6-Cl	0	H	H	CF_2H	1
1-041.	3	6-Cl	0	H	H	CF_3	2
1-042.	3	6-Cl	0	H	H	CF_2H	2
1-043.	3	6-Cl	1	H	H	CF_3	2
1-044.	3	6-Cl	1	H	H	CF_2H	2

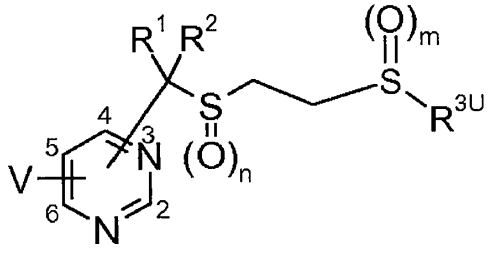
No.	Posição	V	r	R^1	R^2	R^{3U}	n
1-045.	3	6-Cl	0	Me	H	CF_3	2
1-046.	3	6-Cl	0	Me	H	CF_2H	2
1-047.	3	6-Cl	0	Me	Me	CF_3	2
1-048.	3	6-Cl	0	Me	Me	CF_2H	2
1-049.	3	6-Cl	0	H	H	CF_3	0
1-050.	3	6-Cl	0	H	H	CF_2H	0
1-051.	3	6-Cl	0	H	H	CF_3	1
1-052.	3	6-Cl	0	H	H	CF_2H	1
1-053.	3	6-Cl	0	H	H	CF_3	2
1-054.	3	6-Cl	0	H	H	$(CF_2)_2CF_3$	0
1-055.	3	6-Cl	0	H	H	$(CF_2)_2CF_3$	1
1-056.	3	6-Cl	0	H	H	$(CF_2)_2CF_3$	2
1-057.	3	6-Cl	0	Me	H	$(CF_2)_2CF_3$	2
1-058.	3	6-Cl	0	H	H	CF_2H	2
1-059.	3	6-Cl	0	F	H	CF_3	2
1-060.	3	6-Cl	0	F	H	CF_2H	2
1-061.	3	6-Cl	0	F	F	CF_3	2
1-062.	3	6-Cl	0	F	F	CF_2H	2
1-063.	3	6-Cl	0	Cl	H	CF_3	2
1-064.	3	6-Cl	0	Cl	H	CF_2H	2
1-065.	3	6-Cl	0	Cl	Cl	CF_3	2
1-066.	3	6-Cl	0	Cl	Cl	CF_2H	2
1-067.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_3	0
1-068.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_2H	0
1-069.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_3	1
1-070.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_2H	1
1-071.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_3	2
1-072.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_2H	2
1-073.	3	6-CF_3	0	Me	H	CF_3	2
1-074.	3	6-CF_3	0	Me	H	CF_2H	2
1-075.	3	6-CF_3	0	Me	Me	CF_3	2
1-076.	3	6-CF_3	0	Me	Me	CF_2H	2
1-077.	3	6-CF_3	0	Et	H	CF_3	2
1-078.	3	6-CF_3	0	Et	H	CF_2H	2

No.	Posição	V	r	R^1	R^2	R^{3U}	n
1-079.	3	6-CF_3	0	i-Pr	H	CF_3	2
1-080.	3	6-CF_3	0	i-Pr	H	CF_2H	2
1-081.	3	6-CF_3	0	Pr	H	CF_3	2
1-082.	3	6-CF_3	0	Pr	H	CF_2H	2
1-083.	3	6-CF_3	0	s-Bu	H	CF_3	2
1-084.	3	6-CF_3	0	s-Bu	H	CF_2H	2
1-085.	3	6-CF_3	0	i-Bu.	H	CF_3	2
1-086.	3	6-CF_3	0	i-Bu.	H	CF_2H	2
1-087.	3	6-CF_3	0	Bu	H	CF_3	2
1-088.	3	6-CF_3	0	Bu	H	CF_2H	2
1-089.	3	6-CF_3	0	CH_2-c-Pr	H	CF_3	2
1-090.	3	6-CF_3	0	CH_2-c-Pr	H	CF_2H	2
1-091.	3	6-CF_3	0	$CH_2CH=CH_2$	H	CF_3	2
1-092.	3	6-CF_3	0	$CH_2CH=CH_2$	H	CF_2H	2
1-093.	3	6-CF_3	0	$CH_2C\equiv CH$	H	CF_3	2
1-094.	3	6-CF_3	0	$CH_2C\equiv CH$	H	CF_2H	2
1-095.	3	6-CF_3	0	COOMe	H	CF_3	2
1-096.	3	6-CF_3	0	COOMe	H	CF_2H	2
1-097.	3	6-CF_3	0	F	H	CF_3	2
1-098.	3	6-CF_3	0	F	H	CF_2H	2
1-099.	3	6-CF_3	0	F	F	CF_3	2
1-0100.	3	6-CF_3	0	F	F	CF_2H	2
1-0101.	3	6-CF_3	0	Cl	H	CF_3	2
1-0102.	3	6-CF_3	0	Cl	H	CF_2H	2
1-0103.	3	6-CF_3	0	Cl	Cl	CF_3	2
1-0104.	3	6-CF_3	0	Cl	Cl	CF_2H	2
1-0105.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_2CF_3	0
1-0106.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_2CF_3	1
1-0107.	3	6-CF_3	0	H	H	CF_2CF_3	2
1-0108.	3	6-OCH_2CF_3	0	H	H	CF_3	0
1-0109.	3	6-OCH_2CF_3	0	H	H	CF_2H	0
1-0110.	3	6-OCH_2CF_3	0	H	H	CF_3	1
1-0111.	3	6-OCH_2CF_3	0	H	H	CF_2H	1
1-0112.	3	6-OCH_2CF_3	0	H	H	CF_3	2

No.	Posição	V	r	R^1	R^2	R^{3U}	n
1-0113.	3	6-OCH_2CF_3	0	H	H	CF_2H	2
1-0114.	3	6-C≡ CH	0	H	H	CF_3	0
1-0115.	3	6-C≡ CH	0	H	H	CF_2H	0
1-0116.	3	6-C≡ CH	0	H	H	CF_3	1
1-0117.	3	6-C≡ CH	0	H	H	CF_2H	1
1-0118.	3	6-C≡ CH	0	H	H	CF_3	2
1-0119.	3	6-C≡ CH	0	H	H	CF_2H	2
1-0120.	3	6-C≡ CH	1	H	H	CF_3	2
1-0121.	3	6-C≡ CH	1	H	H	CF_2H	2
1-0122.	3	6-SCF_3	0	H	H	CF_3	0
1-0123.	3	6-SCF_3	0	H	H	CF_2H	1
1-0124.	3	6-SCF_3	0	H	H	CF_3	2
1-0125.	3	6-SCF_3	0	H	H	CF_2H	2
1-0126.	3	6-SMe	0	H	H	CF_3	2
1-0127.	3	6-SMe	0	H	H	CF_2H	2
1-0128.	3	6-SOMe	0	H	H	CF_3	2
1-0129.	3	6-SOMe	0	H	H	CF_2H	2
1-0130.	3	6-SO_2Me	0	H	H	CF_3	2
1-0131.	3	6-SO_2Me	0	H	H	CF_2H	2
1-0132.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	H	H	CF_3	0
1-0133.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	H	H	CF_2H	0
1-0134.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	H	H	CF_3	1
1-0135.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	H	H	CF_2H	1
1-0136.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	H	H	CF_3	2
1-0137.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	H	H	CF_2H	2
1-0138.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	Me	H	CF_3	2
1-0139.	4	2,6-$(Cl)_2$	0	Me	H	CF_2H	2
1-0140.	4	2,3,5,6-$(F)_4$	0	H	H	CF_3	0
1-0141.	4	2,3,5,6-$(F)_4$	0	H	H	CF_2H	0
1-0142.	4	2,3,5,6-$(F)_4$	0	H	H	CF_3	1
1-0143.	4	2,3,5,6-$(F)_4$	0	H	H	CF_2H	1
1-0144.	4	2,3,5,6-$(F)_4$	0	H	H	CF_3	2
1-0145.	4	2,3,5,6-$(F)_4$	0	H	H	CF_2H	2

De modo análogo aos compostos numerados de 1-01 a 1-0145 são os compostos numerados de 1-1 a 1-145, em que as variáveis têm o mesmo significado exceto quando m é 1, em vez de 0.

Tabela 2: Descreve exemplos com compostos com número do tipo 2-xxxx como representado na seguinte fórmula:



2-xxxx

Compostos de número 2-01 a 2-01 13: m = 0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
2-01.	2	4,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_3	0
2-02.	2	4,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_2H	0
2-03.	2	4,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_3	1
2-04.	2	4,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_2H	1
2-05.	2	4,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_3	2
2-06.	2	4,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_2H	2
2-07.	2	4-CF_3	H	H	CF_3	2
2-08.	2	4-CF_3	H	H	CF_2H	2
2-09.	2	4-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
2-010.	2	4-CF_3	COOMe	H	CF_2H	2
2-011.	2	4-CF_3	COOEt	H	CF_3	2
2-012.	2	4-CF_3	COOEt	H	CF_2H	2
2-013.	2	4-CF_3	CN	H	CF_3	2
2-014.	2	4-CF_3	CN	H	CF_2H	2
2-015.	4	2,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_3	0
2-016.	4	2,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_2H	0
2-017.	4	2,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_3	1
2-018.	4	2,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_2H	1
2-019.	4	2,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_3	2
2-020.	4	2,6-$(Cl)_2$	H	H	CF_2H	2
2-021.	4	2-CF_3	H	H	CF_3	2
2-022.	4	2-CF_3	H	H	CF_2H	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
2-023.	4	2-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
2-024.	4	2-CF_3	COOMe	H	CF_2H	2
2-025.	4	2-CF_3	COOEt	H	CF_3	2
2-026.	4	2-CF_3	COOEt	H	CF_2H	2
2-027.	4	2-CF_3	CN	H	CF_3	2
2-028.	4	2-CF_3	CN	H	CF_2H	2
2-029.	4	6-CF_3	H	H	CF_3	2
2-030.	4	6-CF_3	H	H	CF_2H	2
2-031.	4	6-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
2-032.	4	6-CF_3	COOMe	H	CF_2H	2
2-033.	4	6-CF_3	COOEt	H	CF_3	2
2-034.	4	6-CF_3	COOEt	H	CF_2H	2
2-035.	4	6-CF_3	CN	H	CF_3	2
2-036.	4	6-CF_3	CN	H	CF_2H	2
2-037.	5	2-CF_3	H	H	CF_3	0
2-038.	5	2-CF_3	H	H	CF_2H	0
2-039.	5	2-CF_3	H	H	CF_3	1
2-040.	5	2-CF_3	H	H	CF_2H	1
2-041.	5	2-CF_3	H	H	CF_3	2
2-042.	5	2-CF_3	H	H	CF_2H	2
2-043.	5	2-CF_3	Me	H	CF_3	2
2-044.	5	2-CF_3	Me	H	CF_2H	2
2-045.	5	2-CF_3	Me	Me	CF_3	2
2-046.	5	2-CF_3	Me	Me	CF_2H	2
2-047.	5	2-CF_3	Et	H	CF_3	2
2-048.	5	2-CF_3	Et	H	CF_2H	2
2-049.	5	2-CF_3	i-Pr	H	CF_3	2
2-050.	5	2-CF_3	i-Pr	H	CF_2H	2
2-051.	5	2-CF_3	Pr	H	CF_3	2
2-052.	5	2-CF_3	Pr	H	CF_2H	2
2-053.	5	2-CF_3	s-Bu	H	CF_3	2
2-054.	5	2-CF_3	s-Bu	H	CF_2H	2
2-055.	5	2-CF_3	i-Bu	H	CF_3	2
2-056.	5	2-CF_3	i-Bu	H	CF_2H	2

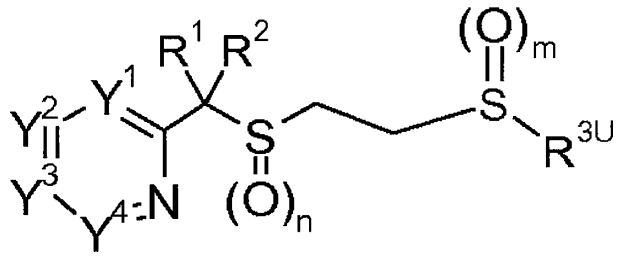
No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
2-057.	5	2-CF_3	Bu	H	CF_3	2
2-058.	5	2-CF_3	Bu	H	CF_2H	2
2-059.	5	2-CF_3	CH_2-c-Pr	H	CF_3	2
2-060.	5	2-CF_3	CH_2-c-Pr	H	CF_2H	2
2-061.	5	2-CF_3	$CH_2CH=CH_2$	H	CF_3	2
2-062.	5	2-CF_3	$CH_2CH=CH_2$	H	CF_2H	2
2-063.	5	2-CF_3	$CH_2C\equiv CH$	H	CF_3	2
2-064.	5	2-CF_3	$CH_2C\equiv CH$	H	CF_2H	2
2-065.	5	2-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
2-066.	5	2-CF_3	COOMe	H	CF_2H	2
2-067.	5	2-CF_3	CONHEt	H	CF_3	2
2-068.	5	2-CF_3	CONHEt	H	CF_2H	2
2-069.	5	2-CF_3	CSNHMe	H	CF_3	2
2-070.	5	2-CF_3	CSNHMe	H	CF_2H	2
2-071.	5	2-CF_3	F	H	CF_3	2
2-072.	5	2-CF_3	F	H	CF_2H	2
2-073.	5	2-CF_3	F	F	CF_3	2
2-074.	5	2-CF_3	F	F	CF_2H	2
2-075.	5	2-CF_3	Cl	H	CF_3	2
2-076.	5	2-CF_3	Cl	H	CF_2H	2
2-077.	5	2-CF_3	Cl	Cl	CF_3	2
2-078.	5	2-CF_3	Cl	Cl	CF_2H	2
2-079.	5	2-CF_3	H	H	CF_2CF_3	0
2-080.	5	2-CF_3	H	H	CF_2CF_3	1
2-081.	5	2-CF_3	H	H	CF_2CF_3	2
2-082.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_3	0
2-083.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_2H	0
2-084.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_3	1
2-085.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_2H	1
2-086.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_3	2
2-087.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_2H	2
2-088.	5	2-CF_3-4-Me	Me	H	CF_3	2
2-089.	5	2-CF_3-4-Me	Me	H	CF_2H	2
2-090.	5	2-SCF_3-4-Me	H	H	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
2-091.	5	2-SCF_3-4-Me	H	H	CF_2H	0
2-092.	5	2-SCF_3-4-Me	H	H	CF_3	1
2-093.	5	2-SCF_3-4-Me	H	H	CF_2H	1
2-094.	5	2-SCF_3-4-Me	H	H	CF_3	2
2-095.	5	2-SCF_3-4-Me	H	H	CF_2H	2
2-096.	5	2-SCF_3-4-Me	Me	H	CF_3	2
2-097.	5	2-SCF_3-4-Me	Me	H	CF_2H	2
2-098.	5	2-c-Pr	H	H	CF_3	0
2-099.	5	2-c-Pr	H	H	CF_2H	0
2-0100.	5	2-c-Pr	H	H	CF_3	1
2-0101.	5	2-c-Pr	H	H	CF_2H	1
2-0102.	5	2-c-Pr	H	H	CF_3	2
2-0103.	5	2-c-Pr	H	H	CF_2H	2
2-0104.	5	2-c-Pr	Me	H	CF_3	2
2-0105.	5	2-c-Pr	Me	H	CF_2H	2
2-0106.	5	2-t-Bu	H	H	CF_3	0
2-0107.	5	2-t-Bu	H	H	CF_2H	0
2-0108.	5	2-t-Bu	H	H	CF_3	1
2-0109.	5	2-t-Bu	H	H	CF_2H	1
2-0110.	5	2-t-Bu	H	H	CF_3	2
2-0111.	5	2-t-Bu	H	H	CF_2H	2
2-0112.	5	2-t-Bu	Me	H	CF_3	2
2-0113.	5	2-t-Bu	Me	H	CF_2H	2

De modo análogo aos compostos numerados de 2-01 a 2-0113 são os compostos numerados de 2-1 a 2-113, em que as variáveis têm o mesmo significado exceto por m ser 1, em vez de 0.

Tabela 3: Descreve exemplos com compostos com número do

tipo 3-xxxx como representado na seguinte fórmula:



3-xxxx

Compostos de número 3-01 a 3-062: m = 0

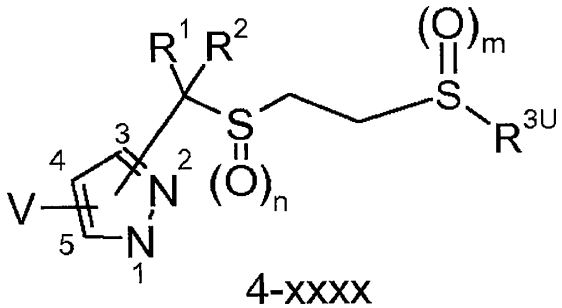
No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{3U}	n
3-01.	C-H	N	C-H	C-Cl	H	H	CF_3	2
3-02.	C-H	N	C-H	C-Cl	H	H	CF_2H	2
3-03.	C-H	N	C-H	C-Cl	COOMe	H	CF_3	2
3-04.	C-H	N	C-H	C-Cl	COOMe	H	CF_2H	2
3-05.	C-H	N	C-H	C-Cl	COOMe	H	CF_3	2
3-06.	C-H	N	C-H	C-Cl	COOMe	H	CF_2H	2
3-07.	C-H	N	C-H	C-Cl	CN	H	CF_3	2
3-08.	C-H	N	C-H	C-Cl	CN	H	CF_2H	2
3-09.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	H	H	CF_3	2
3-010.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	H	H	CF_2H	2
3-011.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	COOMe	H	CF_3	2
3-012.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	COOMe	H	CF_2H	2
3-013.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	COOEt	H	CF_3	2
3-014.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	COOEt	H	CF_2H	2
3-015.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	CN	H	CF_3	2
3-016.	C-Cl	N	C-CN	C-CN	CN	H	CF_2H	2
3-017.	C-H	N	C-CN	C-CN	H	H	CF_3	2
3-018.	C-H	N	C-CN	C-CN	H	H	CF_2H	2
3-019.	C-H	N	C-CN	C-CN	COOMe	H	CF_3	2
3-020.	C-H	N	C-CN	C-CN	COOMe	H	CF_2H	2
3-021.	C-H	N	C-CN	C-CN	COOEt	H	CF_3	2
3-022.	C-H	N	C-CN	C-CN	COOEt	H	CF_2H	2
3-023.	C-H	N	C-CN	C-CN	CN	H	CF_3	2
3-024.	C-H	N	C-CN	C-CN	CN	H	CF_2H	2
3-025.	C-H	C-H	C-Cl	N	H	H	CF_3	2
3-026.	C-H	C-H	C-Cl	N	H	H	CF_2H	2
3-027.	C-H	C-H	C-Cl	N	COOMe	H	CF_3	2
3-028.	C-H	C-H	C-Cl	N	COOMe	H	CF_2H	2
3-029.	C-H	C-H	C-Cl	N	COOEt	H	CF_3	2
3-030.	C-H	C-H	C-Cl	N	COOEt	H	CF_2H	2
3-031.	C-H	C-H	C-Cl	N	CN	H	CF_3	2
3-032.	C-H	C-H	C-Cl	N	CN	H	CF_2H	2
3-033.	C-H	C-H	$C-CF_3$	N	H	H	CF_3	2

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{3U}	n
3-034.	C-H	C-H	C-CF_3	N	H	H	CF_2H	2
3-035.	C-H	C-H	C-CF_3	N	COOMe	H	CF_3	2
3-036.	C-H	C-H	C-CF_3	N	COOMe	H	CF_2H	2
3-037.	C-H	C-H	C-CF_3	N	COOEt	H	CF_3	2
3-038.	C-H	C-H	C-CF_3	N	COOEt	H	CF_2H	2
3-039.	C-H	C-H	C-CF_3	N	CN	H	CF_3	2
3-040.	C-H	C-H	C-CF_3	N	CN	H	CF_2H	2
3-041.	N	C-Cl	N	C-Cl	H	H	CF_3	2
3-042.	N	C-Cl	N	C-Cl	H	H	CF_2H	2
3-043.	N	C-Cl	N	C-Cl	COOMe	H	CF_3	2
3-044.	N	C-Cl	N	C-Cl	COOMe	H	CF_2H	2
3-045.	N	C-Cl	N	C-Cl	COOEt	H	CF_3	2
3-046.	N	C-Cl	N	C-Cl	COOEt	H	CF_2H	2
3-047.	N	C-Cl	N	C-Cl	CN	H	CF_3	2
3-048.	N	C-Cl	N	C-Cl	CN	H	CF_2H	2
3-049.	N	C-OMe	N	C-OMe	H	H	CF_3	2
3-050.	N	C-OMe	N	C-OMe	H	H	CF_2H	2
3-051.	N	C-OMe	N	C-OMe	COOMe	H	CF_3	2
3-052.	N	C-OMe	N	C-OMe	COOMe	H	CF_2H	2
3-053.	N	C-OMe	N	C-OMe	COOEt	H	CF_3	2
3-054.	N	C-OMe	N	C-OMe	COOEt	H	CF_2H	2
3-055.	N	C-OMe	N	C-OMe	CN	H	CF_3	2
3-056.	N	C-OMe	N	C-OMe	CN	H	CF_2H	2
3-057.	C-H	C-H	C-CH=CH-CH=CH-C		H	H	CF_3	0
3-058.	C-H	C-H	C-CH=CH-CH=CH-C		H	H	CF_2H	0
3-059.	C-H	C-H	C-CH=CH-CH=CH-C		H	H	CF_3	1
3-060.	C-H	C-H	C-CH=CH-CH=CH-C		H	H	CF_2H	1
3-061.	C-H	C-H	C-CH=CH-CH=CH-C		H	H	CF_3	2
3-062.	C-H	C-H	C-CH=CH-CH=CH-C		H	H	CF_2H	2

De modo análogo aos compostos numerados de 3-01 a 3-

062 são os compostos numerados de 3-1 a 3-62, em que as variáveis têm o mesmo significado exceto por m ser 1, em vez de 0.

Tabela 4: Descreve exemplos com compostos de número do tipo 4-xxxx como representado na seguinte fórmula:



4-xxxx

Compostos de número de 4-01 a 4-0487: m = 0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
4-01.	1	3-CF_3	H	H	CF_3	0
4-02.	1	3-CF_3	H	H	CF_2H	0
4-03.	1	3-CF_3	H	H	CF_3	1
4-04.	1	3-CF_3	H	H	CF_2H	1
4-05.	1	3-CF_3	H	H	CF_3	2
4-06.	1	3-CF_3	H	H	CF_2H	2
4-07.	1	3-CF_3	Me	H	CF_3	0
4-08.	1	3-CF_3	Me	H	CF_2H	0
4-09.	1	3-CF_3	Me	H	CF_3	1
4-010.	1	3-CF_3	Me	H	CF_2H	1
4-011.	1	3-CF_3	Me	H	CF_3	2
4-012.	1	3-CF_3	Me	H	CF_2H	2
4-013.	1	3-CF_3	Et	H	CF_3	0
4-014.	1	3-CF_3	Et	H	CF_2H	0
4-015.	1	3-CF_3	Et	H	CF_3	1
4-016.	1	3-CF_3	Et	H	CF_2H	1
4-017.	1	3-CF_3	Et	H	CF_3	2
4-018.	1	3-CF_3	Et	H	CF_2H	2
4-019.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_3	0
4-020.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_2H	0
4-021.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_3	1
4-022.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_2H	1
4-023.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_3	2
4-024.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_2H	2
4-025.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_3	0
4-026.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_2H	0
4-027.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_3	1
4-028.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_2H	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-029.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_3	2
4-030.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_2H	2
4-031.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_3	0
4-032.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_2H	0
4-033.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_3	1
4-034.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_2H	1
4-035.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_3	2
4-036.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_2H	2
4-037.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_3	0
4-038.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_2H	0
4-039.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_3	1
4-040.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_2H	1
4-041.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_3	2
4-042.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_2H	2
4-043.	1	3-CF_8	i-Bu	H	CF_3	0
4-044.	1	3-CF_8	i-Bu	H	CF_2H	0
4-045.	1	3-CF_3	i-Bu	H	CF_3	1
4-046.	1	3-CF_3	i-Bu	H	CF_2H	1
4-047.	1	3-CF_3	i-Bu	H	CF_3	2
4-048.	1	3-CF_3	i-Bu	H	CF_2H	2
4-049.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_3	0
4-050.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_2H	0
4-051.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_3	1
4-052.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_2H	1
4-053.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_3	2
4-054.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_2H	2
4-055.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_3	0
4-056.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_2H	0
4-057.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_3	1
4-058.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_2H	1
4-059.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_3	2
4-060.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_2H	2
4-061.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_3	0
4-062.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_2H	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
4-063.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_3	1
4-064.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_2H	1
4-065.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_3	2
4-066.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_2H	2
4-067.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_3	0
4-068.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_2H	0
4-069.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_3	1
4-070.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_2H	1
4-071.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_3	2
4-072.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_2H	2
4-073.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_3	0
4-074.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_2H	0
4-075.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_3	1
4-076.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_2H	1
4-077.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_3	2
4-078.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_2H	2
4-079.	1	3-CF_3	CN	H	CF_3	0
4-080.	1	3-CF_3	CN	H	CF_2H	0
4-081.	1	3-CF_3	CN	H	CF_3	1
4-082.	1	3-CF_3	CN	H	CF_2H	1
4-083.	1	3-CF_3	CN	H	CF_3	2
4-084.	1	3-CF_3	CN	H	CF_2H	2
4-085.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_3	0
4-086.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_2H	0
4-087.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_3	1
4-088.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_2H	1
4-089.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
4-090.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_2H	2
4-091.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_3	0
4-092.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_2H	0
4-093.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_3	1
4-094.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_2H	1
4-095.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_3	2
4-096.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_2H	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-097.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_3	0
4-098.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_2H	0
4-099.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_3	1
4-0100.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_2H	1
4-0101.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_3	2
4-0102.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_2H	2
4-0103.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_3	0
4-0104.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_2H	0
4-0105.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_3	1
4-0106.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_2H	1
4-0107.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_3	2
4-0108.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_2H	2
4-0109.	1	3-CF_3-5-Me	C N	H	CF_3	0
4-0110.	1	3-CF_3-5-Me	C N	H	CF_2H	0
4-0111.	1	3-CF_3-5-Me	C N	H	CF_3	1
4-0112.	1	3-CF_3-5-Me	C N	H	CF_2H	1
4-0113.	1	3-CF_3-5-Me	C N	H	CF_3	2
4-0114.	1	3-CF_3-5-Me	C N	H	CF_2H	2
4-0115.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_3	0
4-0116.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_2H	0
4-0117.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_3	1
4-0118.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_2H	1
4-0119.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_3	2
4-0120.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_2H	2
4-0121.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_3	0
4-0122.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_2H	0
4-0123.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_3	1
4-0124.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_2H	1
4-0125.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_3	2
4-0126.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_2H	2
4-0127.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_3	0
4-0128.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_2H	0
4-0129.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_3	1
4-0130.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_2H	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
4-0131.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_3	2
4-0132.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_2H	2
4-0133.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_3	2
4-0134.	1	3-CF_3-4-CN	H	H	CF_2H	2
4-0135.	1	3-CF_3-4-CN	Me	H	CF_3	0
4-0136.	1	3-CF_3-4-CN	Me	H	CF_2H	0
4-0137.	1	3-CF_3-4-CN	Me	H	CF_3	1
4-0138.	1	3-CF_3-4-CN	Me	H	CF_2H	1
4-0139.	1	3-CF_3-4-CN	Me	H	CF_3	2
4-0140.	1	3-CF_3-4-CN	Me	H	CF_2H	2
4-0141.	1	4-CF_3	H	H	CF_3	0
4-0142.	1	4-CF_3	H	H	CF_2H	0
4-0143.	1	4-CF_3	H	H	CF_3	1
4-0144.	1	4-CF_3	H	H	CF_2H	1
4-0145.	1	4-CF_3	H	H	CF_3	2
4-0146.	1	4-CF_3	H	H	CF_2H	2
4-0147.	1	4-CF_3	Me	H	CF_3	0
4-0148.	1	4-CF_3	Me	H	CF_2H	0
4-0149.	1	4-CF_3	Me	H	CF_3	1
4-0150.	1	4-CF_3	Me	H	CF_2H	1
4-0151.	1	4-CF_3	Me	H	CF_3	2
4-0152.	1	4-CF_3	Me	H	CF_2H	2
4-0153.	1	4-CF_3	Et	H	CF_3	0
4-0154.	1	4-CF_3	Et	H	CF_2H	0
4-0155.	1	4-CF_3	Et	H	CF_3	1
4-0156.	1	4-CF_3	Et	H	CF_2H	1
4-0157.	1	4-CF_3	Et	H	CF_3	2
4-0158.	1	4-CF_3	Et	H	CF_2H	2
4-0159.	1	4-CF_3	i-Pr	H	CF_3	0
4-0160.	1	4-CF_3	i-Pr	H	CF_2H	0
4-0161.	1	4-CF_3	i-Pr	H	CF_3	1
4-0162.	1	4-CF_3	i-Pr	H	CF_2H	1
4-0163.	1	4-CF_3	i-Pr	H	CF_3	2
4-0164.	1	4-CF_3	i-Pr	H	CF_2H	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
4-0165.	1	4-CF_3	c-Pr	H	CF_3	0
4-0166.	1	4-CF_3	c-Pr	H	CF_2H	0
4-0167.	1	4-CF_3	c-Pr	H	CF_3	1
4-0168.	1	4-CF_3	c-Pr	H	CF_2H	1
4-0169.	1	4-CF_3	c-Pr	H	CF_3	2
4-0170.	1	4-CF_3	c-Pr	H	CF_2H	2
4-0171.	1	4-CF_3	Pr	H	CF_3	0
4-0172.	1	4-CF_3	Pr	H	CF_2H	0
4-0173.	1	4-CF_3	Pr	H	CF_3	1
4-0174.	1	4-CF_3	Pr	H	CF_2H	1
4-0175.	1	4-CF_3	Pr	H	CF_3	2
4-0176.	1	4-CF_3	Pr	H	CF_2H	2
4-0177.	1	4-CF_3	s-Bu	H	CF_3	0
4-0178.	1	4-CF_3	s-Bu	H	CF_2H	0
4-0179.	1	4-CF_3	s-Bu	H	CF_3	1
4-0180.	1	4-CF_3	s-Bu	H	CF_2H	1
4-0181.	1	4-CF_3	s-Bu	H	CF_3	2
4-0182.	1	4-CF_3	s-Bu	H	CF_2H	2
4-0183.	1	4-CF_3	i-Bu	H	CF_3	0
4-0184.	1	4-CF_3	i-Bu	H	CF_2H	0
4-0185.	1	4-CF_3	i-Bu	H	CF_3	1
4-0186.	1	4-CF_3	i-Bu	H	CF_2H	1
4-0187.	1	4-CF_3	i-Bu	H	CF_3	2
4-0188.	1	4-CF_3	i-Bu	H	CF_2H	2
4-0189.	1	4-CF_3	Bu	H	CF_3	0
4-0190.	1	4-CF_3	Bu	H	CF_2H	0
4-0191.	1	4-CF_3	Bu	H	CF_3	1
4-0192.	1	4-CF_3	Bu	H	CF_2H	1
4-0193.	1	4-CF_3	Bu	H	CF_3	2
4-0194.	1	4-CF_3	Bu	H	CF_2H	2
4-0195.	1	4-CF_3	2-Pen	H	CF_3	0
4-0196.	1	4-CF_3	2-Pen	H	CF_2H	0
4-0197.	1	4-CF_3	2-Pen	H	CF_3	1
4-0198.	1	4-CF_3	2-Pen	H	CF_2H	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-0199.	1	4-CF_3	2-Pen	H	CF_3	2
4-0200.	1	4-CF_3	2-Pen	H	CF_2H	2
4-0201.	1	4-CF_3	3-Pen	H	CF_3	0
4-0202.	1	4-CF_3	3-Pen	H	CF_2H	0
4-0203.	1	4-CF_3	3-Pen	H	CF_3	1
4-0204.	1	4-CF_3	3-Pen	H	CF_2H	1
4-0205.	1	4-CF_3	3-Pen	H	CF_3	2
4-0206.	1	4-CF_3	3-Pen	H	CF_2H	2
4-0207.	1	4-CF_3	c-Pen	H	CF_3	0
4-0208.	1	4-CF_3	c-Pen	H	CF_2H	0
4-0209.	1	4-CF_3	c-Pen	H	CF_3	1
4-0210.	1	4-CF_3	c-Pen	H	CF_2H	1
4-0211.	1	4-CF_3	c-Pen	H	CF_3	2
4-0212.	1	4-CF_3	c-Pen	H	CF_2H	2
4-0213.	1	4-CF_3	c-Hex	H	CF_3	0
4-0214.	1	4-CF_3	c-Hex	H	CF_2H	0
4-0215.	1	4-CF_3	c-Hex	H	CF_3	1
4-0216.	1	4-CF_3	c-Hex	H	CF_2H	1
4-0217.	1	4-CF_3	c-Hex	H	CF_3	2
4-0218.	1	4-CF_3	c-Hex	H	CF_2H	2
4-0219.	1	4-CF_3	CN	H	CF_3	0
4-0220.	1	4-CF_3	CN	H	CF_2H	0
4-0221.	1	4-CF_3	CN	H	CF_3	1
4-0222.	1	4-CF_3	CN	H	CF_2H	1
4-0223.	1	4-CF_3	CN	H	CF_3	2
4-0224.	1	4-CF_3	CN	H	CF_2H	2
4-0225.	1	4-CF_3	COOMe	H	CF_3	0
4-0226.	1	4-CF_3	COOMe	H	CF_2H	0
4-0227.	1	4-CF_3	COOMe	H	CF_3	1
4-0228.	1	4-CF_3	COOMe	H	CF_2H	1
4-0229.	1	4-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
4-0230.	1	4-CF_3	COOMe	H	CF_2H	2
4-0231.	1	4-CF_3	COOEt	H	CF_3	0
4-0232.	1	4-CF_3	COOEt	H	CF_2H	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-0233.	1	4-CF_3	COOEt	H	CF_3	1
4-0234.	1	4-CF_3	COOEt	H	CF_2H	1
4-0235.	1	4-CF_3	COOEt	H	CF_3	2
4-0236.	1	4-CF_3	COOEt	H	CF_2H	2
4-0237.	3	1-Me-5-$OCHF_2$	H	H	CF_3	0
4-0238.	3	1-Me-5-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	0
4-0239.	3	1-Me-5-$OCHF_2$	H	H	CF_3	1
4-0240.	3	1-Me-5-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	1
4-0241.	3	1-Me-5-$OCHF_2$	H	H	CF_3	2
4-0242.	3	1-Me-5-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	2
4-0243.	4	1-t-Bu	H	H	CF_3	0
4-0244.	4	1-t-Bu	H	H	CF_2H	0
4-0245.	4	1-t-Bu	H	H	CF_3	1
4-0246.	4	1-t-Bu	H	H	CF_2H	1
4-0247.	4	1-t-Bu	H	H	CF_3	2
4-0248.	4	1-t-Bu	H	H	CF_2H	2
4-0249.	4	1-CHF_2	H	H	CF_3	0
4-0250.	4	1-CHF_2	H	H	CF_2H	0
4-0251.	4	1-CHF_2	H	H	CF_3	1
4-0252.	4	1-CHF_2	H	H	CF_2H	1
4-0253.	4	1-CHF_2	H	H	CF_3	2
4-0254.	4	1-CHF_2	H	H	CF_2H	2
4-0255.	4	1-Me-3-CF_3-5-$OCHF_2$	H	H	CF_3	0
4-0256.	4	1-Me-3-CF_3-5-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	0
4-0257.	4	1-Me-3-CF_3-5-$OCHF_2$	H	H	CF_3	1
4-0258.	4	1-Me-3-CF_3-5-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	1
4-0259.	4	1-Me-3-CF_3-5-$OCHF_2$	H	H	CF_3	2
4-0260.	4	1-Me-3-CF_3-5-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-0261.	5	1-Me-3-$OCHF_2$	H	H	CF_3	0
4-0262.	5	1-Me-3-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	0
4-0263.	5	1-Me-3-$OCHF_2$	H	H	CF_3	1
4-0264.	5	1-Me-3-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	1
4-0265.	5	1-Me-3-$OCHF_2$	H	H	CF_3	2
4-0266.	5	1-Me-3-$OCHF_2$	H	H	CF_2H	2
4-0267.	1	3-CF_3	CO_2Me	Me	CF_3	0
4-0268.	1	3-CF_3	CO_2Me	Me	CF_2H	0
4-0269.	1	3-CF_3	CO_2Me	Me	CF_3	1
4-0270.	1	3-CF_3	CO_2Me	Me	CF_2H	1
4-0271.	1	3-CF_3	CO_2Me	Me	CF_3	2
4-0272.	1	3-CF_3	CO_2Me	Me	CF_2H	2
4-0273.	1	3-CF_3	CO_2Et	Me	CF_3	0
4-0274.	1	3-CF_3	CO_2Et	Me	CF_2H	0
4-0275.	1	3-CF_3	CO_2Et	Me	CF_3	1
4-0276.	1	3-CF_3	CO_2Et	Me	CF_2H	1
4-0277.	1	3-CF_3	CO_2Et	Me	CF_3	2
4-0278.	1	3-CF_3	CO_2Et	Me	CF_2H	2
4-0279.	1	3-CF_3	CO_2-i-Pr	Me	CF_3	0
4-0280.	1	3-CF_3	CO_2-i-Pr	Me	CF_2H	0
4-0281.	1	3-CF_3	CO_2-i-Pr	Me	CF_3	1
4-0282.	1	3-CF_3	CO_2-i-Pr	Me	CF_2H	1
4-0283.	1	3-CF_3	CO_2-i-Pr	Me	CF_3	2
4-0284.	1	3-CF_3	CO_2-i-Pr	Me	CF_2H	2
4-0285.	1	3-CF_3	CO_2-i-Pr	Me	CF_3	2
4-0286.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	H	CF_2H	0
4-0287.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	H	CF_3	0
4-0288.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	H	CF_2H	1
4-0289.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	H	CF_3	1
4-0290.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	H	CF_2H	2
4-0291.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	H	CF_3	2
4-0292.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	Me	CF_2H	0
4-0293.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	0
4-0294.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	Me	CF_2H	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
4-0295.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	1
4-0296.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	Me	CF_2H	2
4-0297.	1	3-CF_3	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	2
4-0298.	1	3-CF_3	CO_2-c-Pen	Me	CF_2H	0
4-0299.	1	3-CF_3	CO_2-c-Pen	Me	CF_3	0
4-0300.	1	3-CF_3	CO_2-c-Pen	Me	CF_2H	1
4-0301.	1	3-CF_3	CO_2-c-Pen	Me	CF_3	1
4-0302.	1	3-CF_3	CO_2-c-Pen	Me	CF_2H	2
4-0303.	1	3-CF_3	CO_2-c-Pen	Me	CF_3	2
4-0304.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CF_3$	Me	CF_2H	0
4-0305.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CF_3$	Me	CF_3	0
4-0306.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CF_3$	Me	CF_2H	1
4-0307.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CF_3$	Me	CF_3	1
4-0308.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CF_3$	Me	CF_2H	2
4-0309.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CF_3$	Me	CF_3	2
4-0310.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	0
4-0311.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	0
4-0312.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	1
4-0313.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	1
4-0314.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	2
4-0315.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	2
4-0316.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_2H	0
4-0317.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_3	0
4-0318.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_2H	1
4-0319.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_3	1
4-0320.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_2H	2
4-0321.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_3	2
4-0322.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	0
4-0323.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	0
4-0324.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	1
4-0325.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	1
4-0326.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_2H	2
4-0327.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CH_2OMe$	Me	CF_3	2
4-0328.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-0329.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	0
4-0330.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	1
4-0331.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	1
4-0332.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_2H	2
4-0333.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	Me	CF_3	2
4-0334.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2SMe$	Me	CF_2H	0
4-0335.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2SMe$	Me	CF_3	0
4-0336.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2SO_2Me$	Me	CF_2H	2
4-0337.	1	3-CF_3	$CO_2(CH_2)_2SO_2Me$	Me	CF_3	2
4-0338.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_2H	0
4-0339.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	0
4-0340.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_2H	1
4-0341.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	1
4-0342.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_2H	2
4-0343.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	2
4-0344.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_2H	0
4-0345.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_3	0
4-0346.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_2H	1
4-0347.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_3	1
4-0348.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_2H	2
4-0349.	1	3-CF_3	$CO_2CH(CH_3)CONH_2$	Me	CF_3	2
4-0350.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_2H	0
4-0351.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_3	0
4-0352.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_2H	1
4-0353.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_3	1
4-0354.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_3	2
4-0355.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_2H	2
4-0356.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2Cl$	Me	CF_3	0
4-0357.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2Cl$	Me	CF_2H	0
4-0358.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2Cl$	Me	CF_3	1
4-0359.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2Cl$	Me	CF_2H	1
4-0360.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2Cl$	Me	CF_3	2
4-0361.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2Cl$	Me	CF_2H	2
4-0362.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	H	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-0363.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	H	CF_2H	0
4-0364.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	H	CF_3	1
4-0365.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	H	CF_2H	1
4-0366.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	H	CF_3	2
4-0367.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	H	CF_2H	2
4-0368.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	Me	CF_3	0
4-0369.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	Me	CF_2H	0
4-0370.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	Me	CF_3	1
4-0371.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	Me	CF_2H	1
4-0372.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	Me	CF_3	2
4-0373.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2CO_2Et$	Me	CF_2H	2
4-0374.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_3	0
4-0375.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_2H	0
4-0376.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_3	1
4-0377.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_2H	1
4-0378.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_3	2
4-0379.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_2H	2
4-0380.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_3	0
4-0381.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_2H	0
4-0382.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_3	1
4-0383.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_2H	1
4-0384.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_3	2
4-0385.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_2H	2
4-0386.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_3	0
4-0387.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_2H	0
4-0388.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_3	1
4-0389.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_2H	1
4-0390.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_3	2
4-0391.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_2H	2
4-0392.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_3	0
4-0393.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_2H	0
4-0394.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_3	1
4-0395.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_2H	1
4-0396.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_3	2

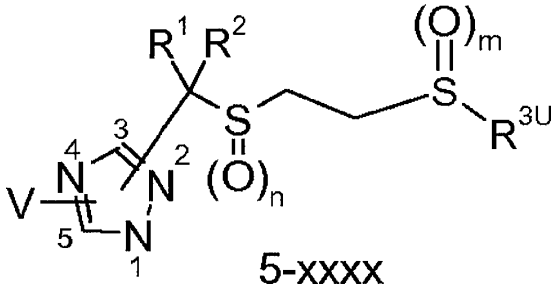
No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-0397.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_2H	2
4-0398.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^2	Me	CF_3	0
4-0399.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^2	Me	CF_2H	0
4-0400.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^2	Me	CF_3	1
4-0401.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^2	Me	CF_2H	1
4-0402.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^2	Me	CF_3	2
4-0403.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^2	Me	CF_2H	2
4-0404.	1	3-CF_3	CONH-i-Pr	Me	CF_3	0
4-0405.	1	3-CF_3	CONH-i-Pr	Me	CF_2H	0
4-0406.	1	3-CF_3	CONH-i-Pr	Me	CF_3	1
4-0407.	1	3-CF_3	CONH-i-Pr	Me	CF_2H	1
4-0408.	1	3-CF_3	CONH-i-Pr	Me	CF_3	2
4-0409.	1	3-CF_3	CONH-i-Pr	Me	CF_2H	2
4-0410.	1	3-CF_3	Ac	H	CF_3	0
4-0411.	1	3-CF_3	Ac	H	CF_2H	0
4-0412.	1	3-CF_3	Ac	H	CF_3	1
4-0413.	1	3-CF_3	Ac	H	CF_2H	1
4-0414.	1	3-CF_3	Ac	H	CF_3	2
4-0415.	1	3-CF_3	Ac	H	CF_2H	2
4-0416.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_3	0
4-0417.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_2H	0
4-0418.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_3	1
4-0419.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_2H	1
4-0420.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_3	2
4-0421.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_2H	2
4-0422.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	H	CF_3	0
4-0423.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	H	CF_2H	0
4-0424.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	H	CF_3	1
4-0425.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	H	CF_2H	1
4-0426.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	H	CF_3	2
4-0427.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	H	CF_2H	2
4-0428.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
4-0429.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	Me	CF_2H	0
4-0430.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	Me	CF_3	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
4-0431.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	Me	CF_2H	1
4-0432.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
4-0433.	1	3-CF_3-4-Cl	COO-t-Bu	Me	CF_2H	2
4-0434.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	H	CF_3	0
4-0435.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	H	CF_2H	0
4-0436.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	H	CF_3	1
4-0437.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	H	CF_2H	1
4-0438.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	H	CF_3	2
4-0439.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	H	CF_2H	2
4-0440.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
4-0441.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_2H	0
4-0442.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
4-0443.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_2H	1
4-0444.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
4-0445.	1	3-CF_3-4-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_2H	2
4-0446.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_3	0
4-0447.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_2H	0
4-0448.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_3	1
4-0449.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_2H	1
4-0450.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_3	2
4-0451.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_2H	2
4-0452.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
4-0453.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_2H	0
4-0454.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
4-0455.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_2H	1
4-0456.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
4-0457.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_2H	2
4-0458.	1	5-CF_3	COOMe	H	CF_3	0
4-0459.	1	5-CF_3	COOMe	H	CF_2H	0
4-0460.	1	5-CF_3	COOMe	H	CF_3	1
4-0461.	1	5-CF_3	COOMe	H	CF_2H	1
4-0462.	1	5-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
4-0463.	1	5-CF_3	COOMe	H	CF_2H	2
4-0464.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
4-0465.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_2H	0
4-0466.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
4-0467.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_2H	1
4-0468.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
4-0469.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_2H	2
4-0470.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	H	H	CF_3	0
4-0471.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	H	H	CF_2H	0
4-0472.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	H	H	CF_3	1
4-0473.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	H	H	CF_2H	1
4-0474.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	H	H	CF_3	2
4-0475.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	H	H	CF_2H	2
4-0476.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	Me	H	CF_3	2
4-0477.	4	1-t-Bu-3-CF_3-5-Cl	Me	H	CF_2H	2
4-0478.	4	1-t-Bu-3-CF_3	Me	H	CF_3	2
4-0479.	4	1-t-Bu-3-CF_3	Me	H	CF_2H	2
4-0480.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_3	0
4-0481.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_2H	0
4-0482.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_3	1
4-0483.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_2H	1
4-0484.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_3	2
4-0485.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_2H	2
4-0486.	1	3-CF_3	COOH	Me	CF_3	0
4-0487.	1	3-CF_3	COOH	Me	CF_2H	0

De modo análogo aos compostos numerados de 4-01 a 4-0487 são os compostos numerados de 4-1 a 4-487, em que as variáveis têm o mesmo significado exceto por m ser 1, em vez de 0.

Tabela 5: Descreve exemplos com compostos com número do tipo 5-xxxx, como representado na seguinte fórmula:



5-xxxx

Compostos de número 5-01 a 5-0973: m = 0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-01.	1	3-CF_3	H	H	CF_3	0
5-02.	1	3-CF_3	H	H	CF_3	1
5-03.	1	3-CF_3	H	H	CF_3	2
5-04.	1	3-CF_3	Me	H	CF_3	0
5-05.	1	3-CF_3	Me	H	CF_3	1
5-06.	1	3-CF_3	Me	H	CF_3	2
5-07.	1	3-CF_3	Me	Me	CF_3	2
5-08.	1	3-CF_3	Et	H	CF_3	0
5-09.	1	3-CF_3	Et	H	CF_3	1
5-010.	1	3-CF_3	Et	H	CF_3	2
5-011.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_3	0
5-012.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_3	1
5-013.	1	3-CF_3	i-Pr	H	CF_3	2
5-014.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_3	0
5-015.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_3	1
5-016.	1	3-CF_3	c-Pr	H	CF_3	2
5-017.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_3	0
5-018.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_3	1
5-019.	1	3-CF_3	Pr	H	CF_3	2
5-020.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_3	0
5-021.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_3	1
5-022.	1	3-CF_3	s-Bu	H	CF_3	2
5-023.	1	3-CF_3	i-Bu	H	CF_3	0
5-024.	1	3-CF_3	i-Bu	H	CF_3	1
5-025.	1	3-CF_3	i-Bu	H	CF_3	2
5-026.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_3	0
5-027.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_3	1
5-028.	1	3-CF_3	Bu	H	CF_3	2
5-029.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_3	0
5-030.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_3	1
5-031.	1	3-CF_3	2-Pen	H	CF_3	2
5-032.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_3	0
5-033.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_3	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-034.	1	3-CF_3	3-Pen	H	CF_3	2
5-035.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_3	0
5-036.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_3	1
5-037.	1	3-CF_3	c-Pen	H	CF_3	2
5-038.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_3	0
5-039.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_3	1
5-040.	1	3-CF_3	c-Hex	H	CF_3	2
5-041.	1	3-CF_3	CN	H	CF_3	0
5-042.	1	3-CF_3	CN	H	CF_3	1
5-043.	1	3-CF_3	CN	H	CF_3	2
5-044.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_3	0
5-045.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_3	1
5-046.	1	3-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
5-047.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_3	0
5-048.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_3	1
5-049.	1	3-CF_3	COOEt	H	CF_3	2
5-050.	1	3-SCF_3	H	H	CF_3	0
5-051.	1	3-SCF_3	H	H	CF_3	1
5-052.	1	3-SCF_3	H	H	CF_3	2
5-053.	1	3-SCF_3	Me	H	CF_3	0
5-054.	1	3-SCF_3	Me	H	CF_3	1
5-055.	1	3-SCF_3	Me	H	CF_3	2
5-056.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_3	0
5-057.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_3	1
5-058.	1	3-CF_3-5-Me	H	H	CF_3	2
5-059.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_3	0
5-060.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_3	1
5-061.	1	3-CF_3-5-Me	Me	H	CF_3	2
5-062.	1	3-CF_3-5-Me	CN	H	CF_3	0
5-063.	1	3-CF_3-5-Me	CN	H	CF_3	1
5-064.	1	3-CF_3-5-Me	CN	H	CF_3	2
5-065.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_3	0
5-066.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_3	1
5-067.	1	3-CF_3-5-Me	COOMe	H	CF_3	2
5-068.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3D}	n
5-069.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_3	1
5-070.	1	3-CF_3-5-Me	COOEt	H	CF_3	2
5-071.	3	-	H	H	CF_3	0
5-072.	3	1-CH_2CF_3	H	H	CF_3	0
5-073.	3	1-CH_2CF_3	H	H	CF_3	1
5-074.	3	1-CH_2CF_3	H	H	CF_3	2
5-075.	3	1-$CBrF_2$	H	H	CF_3	0
5-076.	3	1-$CBrF_2$	H	H	CF_3	1
5-077.	3	1-$CBrF_2$	H	H	CF_3	2
5-078.	3	1-CHF_2	H	H	CF_3	0
5-079.	3	1-CHF_2	H	H	CF_3	1
5-080.	3	1-CHF_2	H	H	CF_3	2
5-081.	3	1-CH_2-c-Pr	H	H	CF_3	0
5-082.	3	1-CH_2-c-Pr	H	H	CF_3	1
5-083.	3	1-CH_2-c-Pr	H	H	CF_3	2
5-084.	3	1-CF_2CHF_2	H	H	CF_3	0
5-085.	3	1-CF_2CHF_2	H	H	CF_3	1
5-086.	3	1-CF_2CHF_2	H	H	CF_3	2
5-087.	3	1-$CF=CF_2$	H	H	CF_3	0
5-088.	3	1-$CF=CF_2$	H	H	CF_3	1
5-089.	3	1-$CF=CF_2$	H	H	CF_3	2
5-090.	5	1-$CBrF_2$	H	H	CF_3	0
5-091.	5	1-$CBrF_2$	H	H	CF_3	1
5-092.	5	1-$CBrF_2$	H	H	CF_3	2
5-093.	1	3-CF_3	CH_2OH	H	CF_3	0
5-094.	1	3-CF_3	CH_2OH	H	CF_3	1
5-095.	1	3-CF_3	CH_2OH	H	CF_3	2
5-096.	1	3-CF_3	CH_2OH	Me	CF_3	0
5-097.	1	3-CF_3	CH_2OH	Me	CF_3	1
5-098.	1	3-CF_3	CH_2OH	Me	CF_3	2
5-099.	1	3-CF_3	CH_2OMe	Me	CF_3	0
5-0100.	1	3-CF_3	CH_2OMe	Me	CF_3	1
5-0101.	1	3-CF_3	CH_2OMe	Me	CF_3	2
5-0102.	1	3-CF_3	CH_2OAc	Me	CF_3	0
5-0103.	1	3-CF_3	CH_2OAc	Me	CF_3	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0104.	1	3-CF_3	CH_2OAc	Me	CF_3	2
5-0105.	1	3-CF_3	CH_2OCO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0106.	1	3-CF_3	CH_2OCO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0107.	1	3-CF_3	CH_2OCO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0108.	1	3-CF_3	$CH_2OCONMe_2$	Me	CF_3	0
5-0109.	1	3-CF_3	$CH_2OCONMe_2$	Me	CF_3	1
5-0110.	1	3-CF_3	$CH_2OCONMe_2$	Me	CF_3	2
5-0111.	1	3-CF_3	CH(Me)OH	Me	CF_3	0
5-0112.	1	3-CF_3	CH(Me)OH	Me	CF_3	2
5-0113.	1	3-CF_3	CH(Me)OMe	Me	CF_3	0
5-0114.	1	3-CF_3	CH(Me)OMe	Me	CF_3	2
5-0115.	1	3-CF_3	CH(OH)-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0116.	1	3-CF_3	COOH	Me	CF_3	0
5-0117.	1	3-CF_3	COOMe	Me	CF_3	0
5-0118.	1	3-CF_3	COOMe	Me	CF_3	1
5-0119.	1	3-CF_3	COOMe	Me	CF_3	2
5-0120.	1	3-CF_3	COOEt	Me	CF_3	0
5-0121.	1	3-CF_3	COOEt	Me	CF_3	1
5-0122.	1	3-CF_3	COOEt	Me	CF_3	2
5-0123.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_3	0
5-0124.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_3	1
5-0125.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	H	CF_3	2
5-0126.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	Me	CF_3	0
5-0127.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	Me	CF_3	1
5-0128.	1	3-CF_3	COO-i-Pr	Me	CF_3	2
5-0129.	1	3-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0130.	1	3-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0131.	1	3-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0132.	1	3-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0133.	1	3-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0134.	1	3-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0135.	1	3-CF_3	COO-i-Bu	Me	CF_3	0
5-0136.	1	3-CF_3	COO-i-Bu	Me	CF_3	1
5-0137.	1	3-CF_3	COO-i-Bu	Me	CF_3	2
5-0138.	1	3-CF_3	COO-s-Bu	Me	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0139.	1	3-CF_3	COO-s-Bu	Me	CF_3	1
5-0140.	1	3-CF_3	COO-s-Bu	Me	CF_3	2
5-0141.	1	3-CF_3	COO-c-Pen	Me	CF_3	0
5-0142.	1	3-CF_3	COO-c-Pen	Me	CF_3	1
5-0143.	1	3-CF_3	COO-c-Pen	Me	CF_3	2
5-0144.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0145.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0146.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0147.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-c-Pr	Me	CF_3	0
5-0148.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-c-Pr	Me	CF_3	1
5-0149.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-c-Pr	Me	CF_3	2
5-0150.	1	3-CF_3	$COOCH_2CF_3$	Me	CF_3	0
5-0151.	1	3-CF_3	$COOCH_2CF_3$	Me	CF_3	1
5-0152.	1	3-CF_3	$COOCH_2CF_3$	Me	CF_3	2
5-0153.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2C\equiv CH$	Me	CF_3	0
5-0154.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2C\equiv CH$	Me	CF_3	1
5-0155.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2C\equiv CH$	Me	CF_3	2
5-0156.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH=CH_2$	Me	CF_3	0
5-0157.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH=CH_2$	Me	CF_3	1
5-0158.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH=CH_2$	Me	CF_3	2
5-0159.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2OMe$	Me	CF_3	0
5-0160.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2OMe$	Me	CF_3	1
5-0161.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2OMe$	Me	CF_3	2
5-0162.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2SMe$	Me	CF_3	0
5-0163.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2SO_2Me$	Me	CF_3	0
5-0164.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2SO_2Me$	Me	CF_3	1
5-0165.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CH_2SO_2Me$	Me	CF_3	2
5-0166.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	0
5-0167.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	1
5-0168.	1	3-CF_3	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	2
5-0169.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)C\equiv CH$	Me	CF_3	0
5-0170.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)C\equiv CH$	Me	CF_3	1
5-0171.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)C\equiv CH$	Me	CF_3	2
5-0172.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_3	0
5-0173.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_3	1

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
5-0174.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CN$	Me	CF_3	2
5-0175.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_3	0
5-0176.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_3	1
5-0177.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)CONH_2$	Me	CF_3	2
5-0178.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2COOEt$	H	CF_3	0
5-0179.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2COOEt$	H	CF_3	1
5-0180.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2COOEt$	H	CF_3	2
5-0181.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2COOEt$	Me	CF_3	0
5-0182.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2COOEt$	Me	CF_3	1
5-0183.	1	3-CF_3	$CO_2C(Me)_2COOEt$	Me	CF_3	2
5-0184.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_3	0
5-0185.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_3	1
5-0186.	1	3-CF_3	$COOCH_2$-E^1	Me	CF_3	2
5-0187.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_3	0
5-0188.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_3	1
5-0189.	1	3-CF_3	COO-E^2	Me	CF_3	2
5-0190.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_3	0
5-0191.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_3	1
5-0192.	1	3-CF_3	COO-E^3	Me	CF_3	2
5-0193.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_3	0
5-0194.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_3	1
5-0195.	1	3-CF_3	COO-E^4	Me	CF_3	2
5-0196.	1	3-CF_3	$COOCH_2Ph$	Me	CF_3	0
5-0197.	1	3-CF_3	$COOCH_2Ph$	Me	CF_3	1
5-0198.	1	3-CF_3	$COOCH_2Ph$	Me	CF_3	2
5-0199.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)$-E^6	Me	CF_3	0
5-0200.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)$-E^6	Me	CF_3	1
5-0201.	1	3-CF_3	$CO_2CH(Me)$-E^6	Me	CF_3	2
5-0202.	1	3-CF_3	COO-E^7	Me	CF_3	0
5-0203.	1	3-CF_2	COO-E^7	Me	CF_3	1
5-0204.	1	3-CF_3	COO-E^7	Me	CF_3	2
5-0205.	1	3-CF_3	COS-i-Pr	Me	CF_3	0
5-0206.	1	3-CF_3	COS-i-Pr	Me	CF_3	1
5-0207.	1	3-CF_3	COS-i-Pr	Me	CF_3	2
5-0208.	1	3-CF_3	COS-t-Bu	Me	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0209.	1	3-CF_3	COS-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0210.	1	3-CF_3	COS-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0211.	1	3-CF_3	COS-c-Hex	Me	CF_3	0
5-0212.	1	3-CF_3	COS-c-Hex	Me	CF_3	1
5-0213.	1	3-CF_3	COS-c-Hex	Me	CF_3	2
5-0214.	1	3-CF_3	CONHMe	Me	CF_3	2
5-0215.	1	3-CF_3	CONH-i-Pr	Me	CF_3	2
5-0216.	1	3-CF_3	$CONHCONH_2$	Me	CF_3	0
5-0217.	1	3-CF_3	$CONHCONH_2$	Me	CF_3	1
5-0218.	1	3-CF_3	$CONHCONH_2$	Me	CF_3	2
5-0219.	1	3-CF_3	CONHCONHMe	Me	CF_3	0
5-0220.	1	3-CF_3	$CON(Me)CONH_2$	Me	CF_3	0
5-0221.	1	3-CF_3	$CON(Me)CONH_2$	Me	CF_3	2
5-0222.	1	3-CF_3	CON(Me)CONHMe	Me	CF_3	0
5-0223.	1	3-CF_3	CON(Me)CONHMe	Me	CF_3	2
5-0224.	1	3-CF_3	CN	H	CF_3	0
5-0225.	1	3-CF_3	CN	Me	CF_3	0
5-0226.	1	3-CF_3	CN	Me	CF_3	1
5-0227.	1	3-CF_3	CN	Me	CF_3	2
5-0228.	1	3-CF_3	CHO	Me	CF_3	0
5-0229.	1	3-CF_3	Ac	H	CF_3	0
5-0230.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_3	0
5-0231.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_3	1
5-0232.	1	3-CF_3	Ac	Me	CF_3	2
5-0233.	1	3-CF_3	CO-i-Pr	Me	CF_3	0
5-0234.	1	3-CF_3	CO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0235.	1	3-CF_3	CO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0236.	1	3-CF_3	CO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0237.	1	3-CF_3	CH=N-OH	Me	CF_3	0
5-0238.	1	3-CF_3	CH=N-OH	Me	CF_3	1
5-0239.	1	3-CF_3	CH=N-OH	Me	CF_3	2
5-0240.	1	3-CF_3	CH=N-OMe	Me	CF_3	0
5-0241.	1	3-CF_3	CH=N-OMe	Me	CF_3	1
5-0242.	1	3-CF_3	CH=N-OMe	Me	CF_3	2
5-0243.	1	3-CF_3	C(Me)=N-OH	Me	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0244.	1	3-CF_3	C(Me)=N-OH	Me	CF_3	1
5-0245.	1	3-CF_3	C(Me)=N-OH	Me	CF_3	2
5-0246.	1	3-CF_3	C(Me)=N-OMe	H	CF_3	0
5-0247.	1	3-CF_3	C(Me)=N-OMe	H	CF_3	1
5-0248.	1	3-CF_3	C(Me)=N-OMe	H	CF_3	2
5-0249.	1	3-CF_3	C(Me)=N-i-Pr	Me	CF_3	0
5-0250.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0251.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0252.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0253.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0254.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0255.	1	3-CF_3-5-Me	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0256.	1	3-CF_3-5-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0257.	1	3-CF_3-5-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0258.	1	3-CF_3-5-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0259.	1	3-CF_3-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0260.	1	3-CF_3-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0261.	1	3-CF_3-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0262.	1	3-CF_3-5-NH_2	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0263.	1	3-CF_3-5-NH_2	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0264.	1	3-CF_3-5-NH_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0265.	1	3-CF_3-5-NH_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0266.	1	3-CF_3-5-NMe_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0267.	1	3-CF_3-5-NMe_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0268.	1	3-CF_3-5-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0269.	1	3-CF_3-5-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0270.	1	3-CF_3-5-SMe	COOEt	H	CF_3	0
5-0271.	1	3-CF_3-5-SMe	COOEt	H	CF_3	1
5-0272.	1	3-CF_3-5-SMe	COOEt	Me	CF_3	0
5-0273.	1	3-CF_3-5-SMe	COOEt	Me	CF_3	1
5-0274.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	COOEt	Me	CF_3	2
5-0275.	1	3-CF_3-5-SMe	COO-i-Pr	Me	CF_3	0
5-0276.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	COO-i-Pr	Me	CF_3	2
5-0277.	1	3-CF_3-5-SMe	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0278.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	COO-t-Bu	H	CF_3	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
5-0279.	1	3-CF_3-5-SMe	COO-i-Bu	Me	CF_3	0
5-0280.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	COO-i-Bu	Me	CF_3	2
5-0281.	1	3-CF_3-5-SMe	COO-s-Bu	Me	CF_3	0
5-0282.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	COO-s-Bu	Me	CF_3	2
5-0283.	1	3-CF_3-5-SMe	$CO_2CH_2CH_2OMe$	H	CF_3	0
5-0284.	1	3-CF_3-5-SMe	$CO_2CH_2CH_2OMe$	Me	CF_3	0
5-0285.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	$CO_2CH_2CH_2OMe$	Me	CF_3	2
5-0286.	1	3-CF_3-5-SMe	$CO_2CH_2CONH_2$	H	CF_3	0
5-0287.	1	3-CF_3-5-SMe	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	0
5-0288.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	$CO_2CH_2CONH_2$	Me	CF_3	2
5-0289.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	Me	H	CF_3	2
5-0290.	1	3-CF_3-5-SMe	Ac	H	CF_3	0
5-0291.	1	3-CF_3-5-SMe	Ac	Me	CF_3	0
5-0292.	1	3-CF_3-5-SO_2Me	Ac	Me	CF_3	2
5-0293.	1	3-CF_3-5-SEt	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0294.	1	3-CF_3-5-SEt	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0295.	1	3-CF_3-5-SO_2Et	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0296.	1	3-CF_3-5-S-Pr	COOEt	H	CF_3	0
5-0297.	1	3-CF_3-5-S-Pr	COOEt	Me	CF_3	0
5-0298.	1	3-CF_3-5-SO_2-Pr	COOEt	Me	CF_3	2
5-0299.	1	3-CF_3-5-SO_2-Pr	Me	H	CF_3	2
5-0300.	1	3-CF_3-5-S-i-Pr	COOEt	H	CF_3	0
5-0301.	1	3-CF_3-5-S-i-Pr	COOEt	Me	CF_3	0
5-0302.	1	3-CF_3-5-SO_2-i-Pr	COOEt	Me	CF_3	2
5-0303.	1	3-CF_3-5-SO_2-i-Pr	Me	H	CF_3	2
5-0304.	1	3-CF_3-5-S-Bu	COOMe	H	CF_3	0
5-0305.	1	3-CF_3-5-S-Bu	COOMe	Me	CF_3	0
5-0306.	1	3-CF_3-5-SO_2-Bu	COOMe	Me	CF_3	2
5-0307.	1	3-CF_3-5-S-i-Bu	COOMe	H	CF_3	0
5-0308.	1	3-CF_3-5-S-i-Bu	COOMe	Me	CF_3	0
5-0309.	1	3-CF_3-5-SO_2-i-Bu	COOMe	Me	CF_3	2
5-0310.	1	3-CF_3-5-S-s-Bu	COOMe	H	CF_3	0
5-0311.	1	3-CF_3-5-S-s-Bu	COOMe	Me	CF_3	0
5-0312.	1	3-CF_3-5-SO_2-s-Bu	COOMe	Me	CF_3	2
5-0313.	1	3-CF_3-5-S-c-Pen	COOMe	H	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0314.	1	3-CF_3-5-S-c-Pen	COOMe	Me	CF_3	0
5-0315.	1	3-CF_3-5-SO_2-c-Pen	COOMe	Me	CF_3	2
5-0316.	1	3-CF_3-5-SCH_2-c-Pr	COOMe	H	CF_3	0
5-0317.	1	3-CF_3-5-SCH_2-c-Pr	COOMe	Me	CF_3	0
5-0318.	1	3-CF_3-5-SO_2CH_2-c-Pr	COOMe	Me	CF_3	2
5-0319.	1	3-CF_3-5-SCH_2CF_3	COOEt	H	CF_3	0
5-0320.	1	3-CF_3-5-SCH_2CF_3	COOEt	Me	CF_3	0
5-0321.	1	3-CF_3-5-SCH_2CF_3	COOEt	Me	CF_3	1
5-0322.	1	3-CF_3-5-$SOCH_2CF_3$	COOEt	Me	CF_3	2
5-0323.	1	3-CF_3-5-$S(CH_2)_2CF_3$	COOMe	Me	CF_3	0
5-0324.	1	3-CF_3-5-$SO_2(CH_2)_2CF_3$	COOMe	Me	CF_3	2
5-0325.	1	3-CF_3-5-$S(CH_2)_2OMe$	COOEt	H	CF_3	0
5-0326.	1	3-CF_3-5-$SO_2(CH_2)_2OMe$	COOEt	H	CF_3	2
5-0327.	1	3-CF_3-5-$S(CH_2)_2OMe$	COOEt	Me	CF_3	0
5-0328.	1	3-CF_3-5-$SO_2(CH_2)_2OMe$	COOEt	Me	CF_3	2
5-0329.	1	3-CF_3-5-$S(CH_2)_2OEt$	COOMe	H	CF_3	0
5-0330.	1	3-CF_3-5-$S(CH_2)_2OEt$	COOMe	Me	CF_3	0
5-0331.	1	3-CF_3-5-$SO_2(CH_2)_2OEt$	COOMe	Me	CF_3	2
5-0332.	1	3-CF_3-5-$S(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	COOEt	H	CF_3	0
5-0333.	1	3-CF_3-5-$S(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	COOEt	Me	CF_3	0
5-0334.	1	3-CF_3-5-$SO_2(CH_2)_2O(CH_2)_2OMe$	COOEt	Me	CF_3	2
5-0335.	1	3-CF_3-5-SCH_2-E^1	COOEt	H	CF_3	0
5-0336.	1	3-CF_3-5-SCH_2-E^1	COOEt	Me	CF_3	0
5-0337.	1	3-CF_2-5-SO_2CH_2-E^1	COOEt	Me	CF_3	2
5-0338.	1	3-CF_3-5-SCH_2Ph	COOEt	H	CF_3	0
5-0339.	1	3-CF_3-5-SO_2CH_2Ph	COOEt	H	CF_3	2
5-0340.	1	3-CF_2-5-SCH_2Ph	COOEt	Me	CF_3	0
5-0341.	1	3-CF_2-5-SO_2CH_2Ph	COOEt	Me	CF_3	2
5-0342.	1	3-CF_3-5-F	COOMe	H	CF_3	0
5-0343.	1	3-CF_3-5-F	COOMe	H	CF_3	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
5-0344.	1	3-CF_3-5-F	COOMe	Me	CF_3	0
5-0345.	1	3-CF_3-5-F	COOMe	Me	CF_3	2
5-0346.	1	3-CF_3-5-Cl	COOMe	H	CF_3	0
5-0347.	1	3-CF_3-5-Cl	COOMe	H	CF_3	2
5-0348.	1	3-CF_3-5-Cl	COOMe	Me	CF_3	0
5-0349.	1	3-CF_3-5-Cl	COOMe	Me	CF_3	2
5-0350.	1	3-CF_3-5-Br	COOMe	H	CF_3	0
5-0351.	1	3-CF_3-5-Br	COOMe	H	CF_3	2
5-0352.	1	3-CF_3-5-Br	COOMe	Me	CF_3	0
5-0353.	1	3-CF_3-5-Br	COOMe	Me	CF_3	2
5-0354.	1	3-CF_3-5-COOEt	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0355.	1	3-CF_3-5-COOEt	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0356.	1	3-CF_3-5-COOEt	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0357.	1	3-CF_3-5-CN	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0358.	1	3-CF_3-5-CN	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0359.	1	3-CF_3-5-CN	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0360.	1	3-t-Bu	Me	H	CF_3	0
5-0361.	1	3-t-Bu	Me	H	CF_3	1
5-0362.	1	3-t-Bu	Me	H	CF_3	2
5-0363.	1	3-t-Bu	COOH	Me	CF_3	0
5-0364.	1	3-t-Bu	COOMe	H	CF_3	0
5-0365.	1	3-t-Bu	COOMe	Me	CF_3	0
5-0366.	1	3-t-Bu	COOMe	Me	CF_3	2
5-0367.	1	3-t-Bu	COOEt	Me	CF_3	0
5-0368.	1	3-t-Bu	COOEt	Me	CF_3	2
5-0369.	1	3-t-Bu	COO-i-Pr	Me	CF_3	0
5-0370.	1	3-t-Bu	COO-i-Pr	Me	CF_3	2
5-0371.	1	3-t-Bu	$COOCH_2CH_2OMe$	Me	CF_3	0
5-0372.	1	3-t-Bu	$COOCH_2CH_2OMe$	Me	CF_3	2
5-0373.	1	3-t-Bu	$COOCH_2CONH_2$	Me	CF_3	0
5-0374.	1	3-t-Bu	$COOCH_2CONH_2$	Me	CF_3	2
5-0375.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0376.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0377.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0378.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0379.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0380.	1	3-t-Bu	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0381.	1	3-t-Bu-5-SMe	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0382.	1	3-t-Bu-5-SO_2Me	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0383.	1	3-t-Bu-5-F	COOEt	H	CF_3	0
5-0384.	1	3-t-Bu-5-F	COOEt	H	CF_3	2
5-0385.	1	3-t-Bu-5-F	COOEt	Me	CF_3	0
5-0386.	1	3-t-Bu-5-F	COOEt	Me	CF_3	2
5-0387.	1	3-t-Bu-5-Cl	COOEt	H	CF_3	0
5-0388.	1	3-t-Bu-5-Cl	COOEt	H	CF_3	2
5-0389.	1	3-t-Bu-5-Cl	COOEt	Me	CF_3	0
5-0390.	1	3-t-Bu-5-Cl	COOEt	Me	CF_3	2
5-0391.	1	3-t-Bu-5-Br	COOEt	H	CF_3	0
5-0392.	1	3-t-Bu-5-Br	COOEt	H	CF_3	2
5-0393.	1	3-t-Bu-5-Br	COOEt	Me	CF_3	0
5-0394.	1	3-t-Bu-5-Br	COOEt	Me	CF_3	2
5-0395.	1	3-c-Pr	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0396.	1	3-c-Pr	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0397.	1	3-c-Pr	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0398.	1	3-c-Pr	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0399.	1	3-c-Pr	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0400.	1	3-c-Pr	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0401.	1	5-c-Pr	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0402.	1	3-CHF_2	COOEt	H	CF_3	0
5-0403.	1	3-CHF_2	COOEt	H	CF_3	1
5-0404.	1	3-CHF_2	COOEt	H	CF_3	2
5-0405.	1	3-CHF_2	COOEt	Me	CF_3	0
5-0406.	1	3-CHF_2	COOEt	Me	CF_3	1
5-0407.	1	3-CHF_2	COOEt	Me	CF_3	2
5-0408.	1	3-CF_2CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0409.	1	3-CF_2CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0410.	1	3-CF_2CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0411.	1	3-CF_2CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0412.	1	S-CF_2CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0413.	1	3-CF_2CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0414.	1	3-CF_2CF_3	Me	H	CF_3	0
5-0415.	1	S-CF_2CF_3	Me	H	CF_3	1
5-0416.	1	3-CF_2CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0417.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0418.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0419.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0420.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0421.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0422.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0423.	1	3-$CH(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	0
5-0424.	1	3-$CH(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	1
5-0425.	1	3-$CH(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	2
5-0426.	1	-	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0427.	1	-	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0428.	1	-	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0429.	1	-	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0430.	1	-	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0431.	1	-	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0432.	1	3-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0433.	1	3-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0434.	1	3-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0435.	1	3-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0436.	1	3-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0437.	1	3-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0438.	1	3-SCF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0439.	1	3-SCF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0440.	1	3-$SOCF_3$	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0441.	1	3-SMe	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0442.	1	3-SMe	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0443.	1	3-SO_2Me	Me	H	CF_3	2
5-0444.	1	3,5-$(SMe)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0445.	1	3,5-$(SO_2Me)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0446.	1	3,5-$(SMe)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0447.	1	3,5-$(SO_2Me)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0448.	1	3-SMe-5-CF_2	COOEt	H	CF_3	0

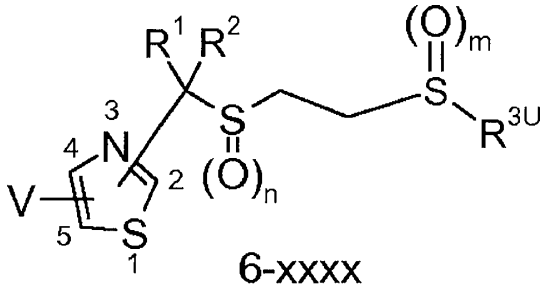
No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
5-0414.	1	3-CF_2CF_3	Me	H	CF_3	0
5-0415.	1	S-CF_2CF_3	Me	H	CF_3	1
5-0416.	1	3-CF_2CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0417.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0418.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0419.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0420.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0421.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0422.	1	3-$CH(CF_3)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0423.	1	3-$CH(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	0
5-0424.	1	3-$CH(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	1
5-0425.	1	3-$CH(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	2
5-0426.	1	-	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0427.	1	-	COO-t-Bu	H	CF_3	1
5-0428.	1	-	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0429.	1	-	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0430.	1	-	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0431.	1	-	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0432.	1	3-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0433.	1	3-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0434.	1	3-NO_2	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0435.	1	3-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0436.	1	3-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	1
5-0437.	1	3-NHAc	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0438.	1	3-SCF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0439.	1	3-SCF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0440.	1	3-$SOCF_3$	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0441.	1	3-SMe	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0442.	1	3-SMe	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0443.	1	3-SO_2Me	Me	H	CF_3	2
5-0444.	1	3,5-$(SMe)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0445.	1	3,5-$(SO_2Me)_2$	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0446.	1	3,5-$(SMe)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0447.	1	3,5-$(SO_2Me)_2$	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0448.	1	3-SMe-5-CF_2	COOEt	H	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{30}	n
5-0449.	1	3-SMe-5-CF_3	COOEt	Me	CF_3	0
5-0450.	1	3-SO_2Me-5-CF_3	COOEt	Me	CF_3	2
5-0451.	1	3-SO_2Me-5-CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0452.	1	3-SEt-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0453.	1	3-SO_2Et-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0454.	1	3-SO_2Et-5-CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0455.	1	3-S-Pr-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0456.	1	3-SO_2-Pr-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0457.	1	3-SO_2-Pr-5-CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0458.	1	3-$SO_2(CH_2)_2CF_3$-5-CF_3	COOMe	Me	CF_3	2
5-0459.	1	3-$SO_2(CH_2)_2CF_3$-5-CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0460.	1	3-COOEt-5-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	0
5-0461.	1	3-COOEt-5-CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0462.	1	3-COOEt-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	0
5-0463.	1	3-COOEt-5-CF_3	COO-t-Bu	Me	CF_3	2
5-0464.	3	1-Me-5-CF_3	H	H	CF_3	0
5-0465.	3	1-Me-5-CF_3	H	H	CF_3	1
5-0466.	3	1-Me-5-CF_3	H	H	CF_3	2
5-0467.	3	1-Me-5-CF_3	Me	H	CF_3	0
5-0468.	3	1-Me-5-CF_3	Me	H	CF_3	1
5-0469.	3	1-Me-5-CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0470.	5	1-Me-3-CF_3	H	H	CF_3	0
5-0471.	5	1-Me-3-CF_3	H	H	CF_3	1
5-0472.	5	1-Me-3-CF_3	H	H	CF_3	2
5-0473.	5	1-Me-3-CF_3	Me	H	CF_3	0
5-0474.	5	1-Me-3-CF_3	Me	H	CF_3	1
5-0475.	5	1-Me-3-CF_3	Me	H	CF_3	2
5-0476.	5	1-Me-3-CF_3	Me	Me	CF_3	2
5-0477.	1	3-CF_3-5-COOEt	COO-t-Bu	H	CF_3	2
5-0478.	1	3-CF_3-5-$SCH_2CH=CH_2$	COOMe	H	CF_3	0
5-0479.	1	3-CF_3-5-$SCH_2CH=CH_2$	COOMe	Me	CF_3	0
5-0480.	1	3-CF_3-5-$SO_2CH_2CH=CH_2$	COOMe	Me	CF_3	2
5-0481.	1	3-CF_3-5-$SCH_2CH=CHCl$	COOMe	H	CF_3	0
5-0482.	1	3-CF_3-5-$SCH_2CH=CHCl$	COOMe	Me	CF_3	0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
5-0483.	1	3-CF_3-5-SO_2CH_2CH=CHCl	COOMe	Me	CF_3	2
5-0484.	1	3-CF_3-5-$SCH_2CH\equiv$ CH	COOMe	H	CF_3	0
5-0485.	1	3-CF_3-5-$SCH_2CH\equiv$ CH	COOMe	Me	CF_3	0
5-0486.	1	3-CF_3-5-$SO_2CH_2CH\equiv$ CH	COOMe	Me	CF_3	2

Em analogia com a tabela acima, exemplos adicionais são os compostos numerados de 5-0487 a 5-0973, em que R^3U é CF_2H e todas as outras variáveis têm o mesmo significado tal como representado em cada linha da tabela 5. De forma análoga aos compostos numerados de 5-01 a 5-0973, são os compostos numerados de 5-1 a 5-973, em que as variáveis têm o mesmo significado exceto por m ser 1, em vez de 0.

Tabela 6: Exemplos com compostos de número do tipo 6-xxxx, como representado na fórmula seguinte:

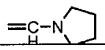


6-xxxx

Compostos de número 6-01 a 6-0267: m = 0

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
6-01.	2	4-CF_3	H	H	CF_3	0
6-02.	2	4-CF_3	H	H	CF_3	1
6-03.	2	4-CF_3	H	H	CF_3	2
6-04.	2	4-CF_3	Me	H	CF_3	0
6-05.	2	4-CF_3	Me	H	CF_3	1
6-06.	2	4-CF_3	Me	H	CF_3	2
6-07.	2	4-CF_3	Me	F	CF_3	2
6-08.	2	4-CF_3	Me	Cl	CF_3	2
6-09.	2	4-CF_3	Me	CH_2CH_2Cl	CF_3	2
6-010.	2	4-CF_3	Me	CH_2OMe	CF_3	2
6-011.	2	4-CF_3	Me	CH_2CH_2OMe	CF_3	2
6-012.	2	4-CF_3	Me	CH_2OH	CF_3	2
6-013.	2	4-CF_3	Me	CH_2F	CF_3	2

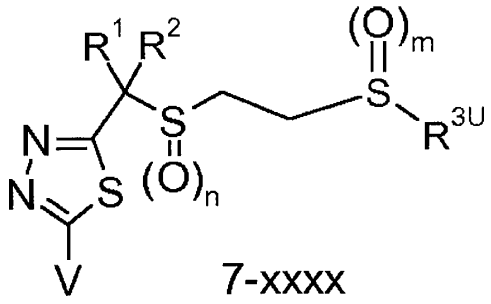
No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
6-048.	5	2-CF_3	Me	H	CF_3	2
6-049.	5	2-CF_3	Me	Me	CF_3	2
6-050.	5	2-CF_3	Et	H	CF_3	2
6-051.	5	2-CF_3	Et	Et	CF_3	2
6-052.	5	2-CF_3	i-Pr	H	CF_3	2
6-053.	5	2-CF_3	Pr	H	CF_3	2
6-054.	5	2-CF_3	Pr	Pr	CF_3	2
6-055.	5	2-CF_3	s-Bu	H	CF_3	2
6-056.	5	2-CF_3	i-Bu	H	CF_3	2
6-057.	5	2-CF_3	Bu	H	CF_3	2
6-058.	5	2-CF_3	CH_2-c-Pr	H	CF_3	2
6-059.	5	2-CF_3	$CH_2CH=CH_2$	H	CF_3	2
6-060.	5	2-CF_3	$CH_2CH=CH_2$	$CH_2CH=CH_2$	CF_3	2
6-061.	5	2-CF_3	$CH_2C\equiv CH$	H	CF_3	2
6-062.	5	2-CF_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH_2C\equiv CH$	CF_3	2
6-063.	5	2-CF_3	$CH_2C(Cl)=CH_2$	H	CF_3	2
6-064.	5	2-CF_3	F	H	CF_3	2
6-065.	5	2-CF_3	F	F	CF_3	2
6-066.	5	2-CF_3	Cl	H	CF_3	2
6-067.	5	2-CF_3	Cl	Cl	CF_3	2
6-068.	5	2-CF_3	COOMe	H	CF_3	2
6-069.	5	2-CF_3	COOEt	H	CF_3	2
6-070.	5	2-CF_3	CH_2CN	H	CF_3	2
6-071.	5	2-CF_3	CH_2COOMe	H	CF_3	2
6-072.	5	2-CF_3	$CONH_2$	H	CF_3	2
6-073.	5	2-CF_3	CONHEt	H	CF_3	2
6-074.	5	2-CF_3	CSNHMe	H	CF_3	2
6-075.	5	2-CF_3	$CON(Me)_2$	H	CF_3	2
6-076.	5	2-CF_3	CHO	H	CF_3	2
6-077.	5	2-CF_3	Ac	H	CF_3	2
6-078.	5	2-CF_3	COEt	H	CF_3	2
6-079.	5	2-CF_3	CO-i-Pr	H	CF_3	2
6-080.	5	2-CF_3	$COCH_2Cl$	H	CF_3	2
6-081.	5	2-CF_3	$-CH_2-CH_2-$		CF_3	2
6-082.	5	2-CF_3	$-CH_2-CH_2-CH_2-$		CF_3	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
6-083.	5	2-CF_3	-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-		CF_3	2
6-084.	5	2-CF_3	=CH-$N(Me)_2$		CF_3	2
6-085.	5	2-CF_3	=CH-NHMe		CF_3	2
6-086.	5	2-CF_3	=CH-NH_2		CF_3	2
6-087.	5	2-CF_3			CF_3	2
6-088.	5	2-CF_3	=CH-OMe		CF_3	2
6-089.	5	2-CF_3	=CH-OEt		CF_3	2
6-090.	5	2-CF_3	=C(Me)-OEt		CF_3	2
6-091.	5	2-CF_3	=N-OH		2-CF_3	0
6-092.	5	2-CF_3	=N-OMe		2-CF_3	0
6-093.	5	2-CF_3	=N-OMe		2-CF_3	1
6-094.	5	2-CF_3	=N-OMe		2-CF_3	2
6-095.	5	2-CF_3	=N-OEt		2-CF_3	0
6-096.	5	2-CF_3	=N-OEt		2-CF_3	1
6-097.	5	2-CF_3	=N-OEt		2-CF_3	2
6-098.	5	2-CF_3	H	H	CF_2CF_3	0
6-099.	5	2-CF_3	H	H	CF_2CF_3	1
6-0100.	5	2-CF_3	H	H	CF_2CF_3	2
6-0101.	5	2-CF_3	H	H	$CF_2CF_2CF_3$	0
6-0102.	5	2-CF_3	H	H	$CF_2CF_2CF_3$	1
6-0103.	5	2-CF_3	H	H	$CF_2CF_2CF_3$	2
6-0104.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_3	0
6-0105.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_3	1
6-0106.	5	2-CF_3-4-Me	H	H	CF_3	2
6-0107.	5	2-CF_3-4-Me	Me	H	CF_3	2
6-0108.	5	2-Cl	H	H	CF_3	0
6-0109.	5	2-Cl	H	H	CF_3	1
6-0110.	5	2-Cl	H	H	CF_3	2
6-0111.	5	2-Cl	Me	H	CF_3	2
6-0112.	5	2-Cl	H	H	CF_3	0
6-0113.	5	2-Cl	H	H	CF_3	1
6-0114.	5	2-Cl	H	H	CF_3	2
6-0115.	5	2-Cl	H	H	$CF_2CF_2CF_3$	0
6-0116.	5	2-Cl	H	H	$CF_2CF_2CF_3$	1
6-0117.	5	2-Cl	H	H	$CF_2CF_2CF_3$	2

No.	Posição	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
6-0118.	5	2-Me	H	H	CF_3	0
6-0119.	5	2-Me	H	H	CF_3	1
6-0120.	5	2-Me	H	H	CF_3	2
6-0121.	5	2-Et	H	H	CF_3	0
6-0122.	5	2-Et	H	H	CF_3	1
6-0123.	5	2-Et	H	H	CF_3	2
6-0124.	5	2-i-Pr	H	H	CF_3	0
6-0125.	5	2-i-Pr	H	H	CF_3	1
6-0126.	5	2-i-Pr	H	H	CF_3	2
6-0127.	5	2-c-Pr	H	H	CF_3	0
6-0128.	5	2-c-Pr	H	H	CF_3	1
6-0129.	5	2-c-Pr	H	H	CF_3	2
6-0130.	5	2-t-Bu	H	H	CF_3	0
6-0131.	5	2-t-Bu	H	H	CF_3	1
6-0132.	5	2-t-Bu	H	H	CF_3	2
6-0133.	4	2-CF_3	Me	H	CF_3	2

Em analogia com a tabela acima, exemplos adicionais são os compostos numerados de 6-0134 a 6-0267, em que R^3U é CF_2H e todas as outras variáveis têm o mesmo significado, tal como representado em cada linha da tabela 6. De modo análogo aos compostos numerados de 6-01 a 6-0267 são os compostos numerados de 6-1 a 6-267, em que as variáveis têm o mesmo significado, exceto por m ser 1 em vez de 0.

Tabela 7: Descreve exemplos com compostos de número do tipo 7-xxxx como representado na seguinte fórmula:



7-xxxx

Número de compostos de 7-01 a 7-0207

No.	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
7-01.	CF_3	H	H	CF_3	0
7-02.	CF_3	H	H	CF_3	1
7-03.	CF_3	H	H	CF_3	2

No.	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
7-04.	CF_3	Me	H	CF_3	0
7-05.	CF_3	Me	H	CF_3	1
7-06.	CF_3	Me	H	CF_3	2
7-07.	CF_3	Me	Me	CF_3	2
7-08.	CF_3	Me	F	CF_3	2
7-09.	CF_3	Me	Cl	CF_3	2
7-010.	CF_3	Me	CH_2OMe	CF_3	2
7-011.	CF_3	Me	CH_2OH	CF_3	2
7-012.	CF_3	Me	CH_2F	CF_3	2
7-013.	CF_3	Me	$CH_2N(Me)_2$	CF_3	2
7-014.	CF_3	Me	CH_2CN	CF_3	2
7-015.	CF_3	Et	H	CF_3	0
7-016.	CF_3	Et	H	CF_3	1
7-017.	CF_3	Et	H	CF_3	2
7-018.	CF_3	i-Pr	H	CF_3	0
7-019.	CF_3	i-Pr	H	CF_3	1
7-020.	CF_3	i-Pr	H	CF_3	2
7-021.	CF_3	Pr	H	CF_3	2
7-022.	CF_3	s-Bu	H	CF_3	2
7-023.	CF_3	i-Bu	H	CF_3	2
7-024.	CF_3	Bu	H	CF_3	2
7-025.	CF_3	CH_2-c-Pr	H	CF_3	2
7-026.	CF_3	$CH_2CH=CH_2$	H	CF_3	2
7-027.	CF_3	$CH_2CH=CH_2$	$CH_2CH=CH_2$	CF_3	2
7-028.	CF_3	$CH_2C\equiv CH$	H	CF_3	2
7-029.	CF_3	$CH_2C\equiv CH$	$CH_2C\equiv CH$	CF_3	2
7-030.	CF_3	COOMe	H	CF_3	2
7-031.	CF_3	COOMe	Me	CF_3	2
7-032.	CF_3	COOMe	F	CF_3	2
7-033.	CF_3	COOMe	Cl	CF_3	2
7-034.	CF_3	COOEt	H	CF_3	2
7-035.	CF_3	CN	H	CF_3	2
7-036.	CF_3	CHO	H	CF_3	2
7-037.	CF_3	Ac	H	CF_3	2
7-038.	CF_3	COEt	H	CF_3	2

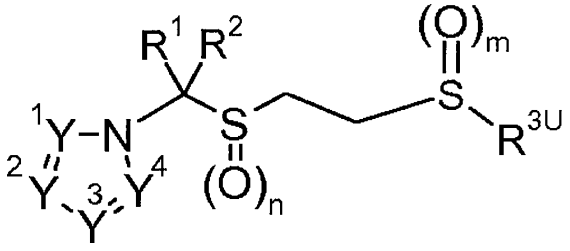
No.	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
7-039.	CF_3	CO-i-Pr	H	CF_3	2
7-040.	CF_3	$COCH_2Cl$	H	CF_3	2
7-041.	CF_3	$CON(Me)_2$	H	CF_3	2
7-042.	CF_3	F	H	CF_3	2
7-043.	CF_3	F	F	CF_3	2
7-044.	CF_3	Cl	H	CF_3	2
7-045.	CF_3	Cl	Cl	CF_3	2
7-046.	CF_3	=CH-OMe		CF_3	2
7-047.	CF_3	=CH-OEt		CF_3	2
7-048.	CF_3	=C(Me)-OEt		CF_3	2
7-049.	CF_3	$=CH-N(Me)_2$		CF_3	2
7-050.	CF_3	=N-OH		CF_3	0
7-051.	CF_3	=N-OMe		CF_3	0
7-052.	CF_3	=N-OMe		CF_3	1
7-053.	CF_3	=N-OMe		CF_3	2
7-054.	CF_3	=N-OEt		CF_3	0
7-055.	CF_3	=N-OEt		CF_3	1
7-056.	CF_3	=N-OEt		CF_3	2
7-057.	CF_2CF_3	Me	H	CF_3	0
7-058.	CF_2CF_3	Me	H	CF_3	1
7-059.	CF_2CF_3	Me	H	CF_3	2
7-060.	$CF(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	0
7-061.	$CF(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	1
7-062.	$CF(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	2
7-063.	$C(Me)(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	0
7-064.	$C(Me)(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	1
7-065.	$C(Me)(CF_3)_2$	Me	H	CF_3	2
7-066.	NH_2	Me	H	CF_3	0
7-067.	Cl	Me	H	CF_3	0
7-068.	Cl	Me	H	CF_3	1
7-069.	Cl	Me	H	CF_3	2
7-070.	Br	Me	H	CF_3	0
7-071.	Br	Me	H	CF_3	1
7-072.	Br	Me	H	CF_3	2
7-073.	I	Me	H	CF_3	0

No.	V	R^1	R^2	R^{3U}	n
7-074.	I	Me	H	CF_3	1
7-075.	I	Me	H	CF_3	2
7-076.	Me	Me	H	CF_3	0
7-077.	Me	Me	H	CF_3	1
7-078.	Me	Me	H	CF_3	2
7-079.	Et	Me	H	CF_3	0
7-080.	Et	Me	H	CF_3	1
7-081.	Et	Me	H	CF_3	2
7-082.	i-Pr	Me	H	CF_3	0
7-083.	i-Pr	Me	H	CF_3	1
7-084.	i-Pr	Me	H	CF_3	2
7-085.	c-Pr	Me	H	CF_3	0
7-086.	c-Pr	Me	H	CF_3	1
7-087.	c-Pr	Me	H	CF_3	2
7-088.	t-Bu	Me	H	CF_3	0
7-089.	t-Bu	Me	H	CF_3	1
7-090.	t-Bu	Me	H	CF_3	2
7-091.	CF_3	Cl	H	CF_3	0
7-092.	CF_3	Cl	H	CF_3	1
7-093.	CF_3	COO-t-Bu	H	CF_3	2
7-094.	CF_3	CH_2Cl	Cl	CF_3	0
7-095.	CF_3	Me	CH_2OH	CF_3	0
7-096.	CF_3	Me	CH_2OH	CF_3	1
7-097.	CF_3	Et	CH_2OH	CF_3	0
7-098.	CF_3	Et	CH_2OH	CF_3	1
7-099.	CF_3	Et	CH_2OH	CF_3	2
7-0100.	CF_3	Et	CH_2OMe	CF_3	2
7-0101.	CF_3	Et	F	CF_3	2
7-0102.	CF_3	Et	Cl	CF_3	2
7-0103.	CF_3	Et	CH_2F	CF_3	2

Em analogia com a tabela acima, exemplos adicionais são os compostos numerados de 7-0104 a 7-0207, em que R^3U é CF_2H e todas as outras variáveis têm o mesmo significado, tal como representado em cada linha da tabela 7.

De modo análogo aos compostos numerados de 7-01 a 7-0207 são os compostos numerados de 7-1 a 7-207, em que as variáveis têm o mesmo significado, exceto por m ser 1, em vez de 0.

Tabela 8: Descreve exemplos com compostos de número do tipo 8-xxxx, como representado na seguinte fórmula:



8-xxxx

Compostos de número 8-01 a 8-0245: m = 0

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{3U}	n
8-01.	C-H	$C-NO_2$	C-H	C-H	H	H	CF_3	0
8-02.	C-H	$C-NO_2$	C-H	C-H	H	H	CF_3	1
8-03.	C-H	$C-NO_2$	C-H	C-H	H	H	CF_3	2
8-04.	C-Me	C-Ac	C-Me	C-H	H	H	CF_3	0
8-05.	C-Me	C-Ac	C-Me	C-H	H	H	CF_3	1
8-06.	C-Me	C-Ac	C-Me	C-H	H	H	CF_3	2
8-07.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	H	H	CF_3	0
8-08.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	H	H	CF_3	1
8-09.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	H	H	CF_3	2
8-010.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Me	H	CF_3	0
8-011.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Me	H	CF_3	1
8-012.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Me	H	CF_3	2
8-013.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Et	H	CF_3	0
8-014.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Et	H	CF_3	1
8-015.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Et	H	CF_3	2
8-016.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	i-Pr	H	CF_3	0
8-017.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	i-Pr	H	CF_3	1
8-018.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	i-Pr	H	CF_3	2
8-019.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	c-Pr	H	CF_3	0
8-020.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	c-Pr	H	CF_3	1
8-021.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	c-Pr	H	CF_3	2
8-022.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Pr	H	CF_3	0
8-023.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Pr	H	CF_3	1
8-024.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	Pr	H	CF_3	2
8-025.	C-H	N	$C-CF_3$	C-H	s-Bu	H	CF_3	0

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{30}	n
8-026.	C-H	N	C-CF_3	C-H	s-Bu	H	CF_3	1
8-027.	C-H	N	C-CF_3	C-H	s-Bu	H	CF_3	2
8-028.	C-H	N	C-CF_3	C-H	i-Bu	H	CF_3	0
8-029.	C-H	N	C-CF_3	C-H	i-Bu	H	CF_3	1
8-030.	C-H	N	C-CF_3	C-H	i-Bu	H	CF_3	2
8-031.	C-H	N	C-CF_3	C-H	Bu	H	CF_3	0
8-032.	C-H	N	C-CF_3	C-H	Bu	H	CF_3	1
8-033.	C-H	N	C-CF_3	C-H	Bu	H	CF_3	2
8-034.	C-H	N	C-CF_3	C-H	2-Pen	H	CF_3	0
8-035.	C-H	N	C-CF_3	C-H	2-Pen	H	CF_3	1
8-036.	C-H	N	C-CF_3	C-H	2-Pen	H	CF_3	2
8-037.	C-H	N	C-CF_3	C-H	3-Pen	H	CF_3	0
8-038.	C-H	N	C-CF_3	C-H	3-Pen	H	CF_3	1
8-039.	C-H	N	C-CF_3	C-H	3-Pen	H	CF_3	2
8-040.	C-H	N	C-CF_3	C-H	c-Pen	H	CF_3	0
8-041.	C-H	N	C-CF_3	C-H	c-Pen	H	CF_3	1
8-042.	C-H	N	C-CF_3	C-H	c-Pen	H	CF_3	2
8-043.	C-H	N	C-CF_3	C-H	c-Hex	H	CF_3	0
8-044.	C-H	N	C-CF_3	C-H	c-Hex	H	CF_3	1
8-045.	C-H	N	C-CF_3	C-H	c-Hex	H	CF_3	2
8-046.	C-H	N	C-CF_3	C-H	CN	H	CF_3	0
8-047.	C-H	N	C-CF_3	C-H	CN	H	CF_3	1
8-048.	C-H	N	C-CF_3	C-H	CN	H	CF_3	2
8-049.	C-H	N	C-CF_3	C-H	COOMe	H	CF_3	0
8-050.	C-H	N	C-CF_3	C-H	COOMe	H	CF_3	1
8-051.	C-H	N	C-CF_3	C-H	COOMe	H	CF_3	2
8-052.	C-H	N	C-CF_3	C-H	COOEt	H	CF_3	0
8-053.	C-H	N	C-CF_3	C-H	COOEt	H	CF_3	1
8-054.	C-H	N	C-CF_3	C-H	COOEt	H	CF_3	2
8-055.	N	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	0
8-056.	N	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	1
8-057.	N	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	2
8-058.	N	N	C-CF_3	N	H	H	CF_3	0
8-059.	N	N	C-CF_3	N	H	H	CF_3	1
8-060.	N	N	C-CF_3	N	H	H	CF_3	2

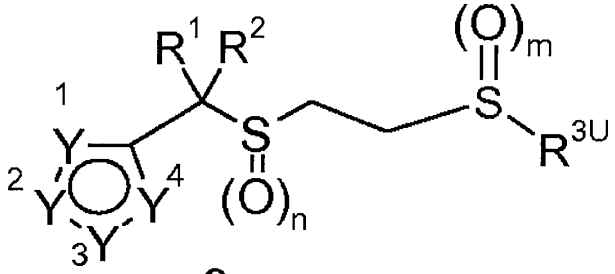
No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{30}	n
8-061.	N	N	C-CF_3	N	Me	H	CF_3	0
8-062.	N	N	C-CF_3	N	Me	H	CF_3	1
8-063.	N	N	C-CF_3	N	Me	H	CF_3	2
8-064.	N	N	C-CF_3	N	Et	H	CF_3	0
8-065.	N	N	C-CF_3	N	Et	H	CF_3	1
8-066.	N	N	C-CF_3	N	Et	H	CF_3	2
8-067.	N	N	C-CF_3	N	i-Pr	H	CF_3	0
8-068.	N	N	C-CF_3	N	i-Pr	H	CF_3	1
8-069.	N	N	C-CF_3	N	i-Pr	H	CF_3	2
8-070.	N	N	C-CF_3	N	c-Pr	H	CF_3	0
8-071.	N	N	C-CF_3	N	c-Pr	H	CF_3	1
8-072.	N	N	C-CF_3	N	c-Pr	H	CF_3	2
8-073.	N	N	C-CF_3	N	Pr	H	CF_3	0
8-074.	N	N	C-CF_3	N	Pr	H	CF_3	1
8-075.	N	N	C-CF_3	N	Pr	H	CF_3	2
8-076.	N	N	C-CF_3	N	s-Bu	H	CF_3	0
8-077.	N	N	C-CF_3	N	s-Bu	H	CF_3	1
8-078.	N	N	C-CF_3	N	s-Bu	H	CF_3	2
8-079.	N	N	C-CF_3	N	i-Bu	H	CF_3	0
8-080.	N	N	C-CF_3	N	i-Bu	H	CF_3	1
8-081.	N	N	C-CF_3	N	i-Bu	H	CF_3	2
8-082.	N	N	C-CF_3	N	Bu	H	CF_3	0
8-083.	N	N	C-CF_3	N	Bu	H	CF_3	1
8-084.	N	N	C-CF_3	N	Bu	H	CF_3	2
8-085.	N	N	C-CF_3	N	2-Pen	H	CF_3	0
8-086.	N	N	C-CF_3	N	2-Pen	H	CF_3	1
8-087.	N	N	C-CF_3	N	2-Pen	H	CF_3	2
8-088.	N	N	C-CF_3	N	3-Pen	H	CF_3	0
8-089.	N	N	C-CF_3	N	3-Pen	H	CF_3	1
8-090.	N	N	C-CF_3	N	3-Pen	H	CF_3	2
8-091.	N	N	C-CF_3	N	c-Pen	H	CF_3	0
8-092.	N	N	C-CF_3	N	c-Pen	H	CF_3	1
8-093.	N	N	C-CF_3	N	c-Pen	H	CF_3	2
8-094.	N	N	C-CF_3	N	c-Hex	H	CF_3	0
8-095.	N	N	C-CF_3	N	c-Hex	H	CF_3	1

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{30}	n
8-096.	N	N	C-CF_3	N	c-Hex	H	CF_3	2
8-097.	N	N	C-CF_3	N	CN	H	CF_3	0
8-098.	N	N	C-CF_3	N	CN	H	CF_3	1
8-099.	N	N	C-CF_3	N	CN	H	CF_3	2
8-0100.	N	N	C-CF_3	N	CO_2Me	H	CF_3	0
8-0101.	N	N	C-CF_3	N	CO_2Me	H	CF_3	1
8-0102.	N	N	C-CF_3	N	CO_2Me	H	CF_3	2
8-0103.	N	N	C-CF_3	N	CO_2Et	H	CF_3	0
8-0104.	N	N	C-CF_3	N	CO_2Et	H	CF_3	1
8-0105.	N	N	C-CF_3	N	CO_2Et	H	CF_3	2
8-0106.	N	N	C-CF_3	C-H	CO_2-t-Bu	H	CF_3	0
8-0107.	N	N	C-CF_3	C-H	CO_2-t-Bu	H	CF_3	1
8-0108.	N	N	C-CF_3	C-H	CO_2-t-Bu	H	CF_3	2
8-0109.	C-CF_3	N	C-Et	C-H	CO_2Me	H	CF_3	2
8-0110.	C-H	N	C-H	C-CF_3	Me	H	CF_3	2
8-0111.	C-Me	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	0
8-0112.	C-Me	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	1
8-0113.	C-Me	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	2
8-0114.	C-CF_3	N	C-t-Bu	C-H	CO_2-t-Bu	H	CF_3	0
8-0115.	C-CF_3	N	C-t-Bu	C-H	CO_2-t-Bu	H	CF_3	1
8-0116.	C-CF_3	N	C-t-Bu	C-H	CO_2-t-Bu	H	CF_3	2
8-0117.	C-H	N	C-t-Bu	C-H	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	0
8-0118.	C-H	N	C-t-Bu	C-H	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	1
8-0119.	C-H	N	C-t-Bu	C-H	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	2
8-0120.	C-H	C-NO_2	C-H	C-H	CO_2-t-Bu	H	CF_3	0
8-0121.	C-H	C-NO_2	C-H	C-H	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	0
8-0122.	C-H	C-NO_2	C-H	C-H	CO_2-t-Bu	Me	CF_3	2

Em analogia com a tabela acima, exemplos adicionais são os compostos numerados de 8-0123 a 8-0245, em que R^{3U} é CF_2H e todas as outras variáveis têm o mesmo significado, tal como representado em cada linha da tabela 8.

De modo análogo aos compostos numerados de 8-01 a 8-0245 são os compostos numerados de 8-1 a 8-245, em que as variáveis têm o mesmo significado, exceto por m ser 1, em vez de 0.

Tabela 9: Exemplos com compostos de número do tipo 9-xxxx, como representado na seguinte fórmula:



9-xxxx

Compostos de número 9-01 a 9-0205: m = 0

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{3U}	n
9-01.	O	C-CF_3	C-H	C-H	H	H	CF_3	0
9-02.	O	C-CF_3	C-H	C-H	H	H	CF_3	1
9-03.	O	C-CF_3	C-H	C-H	H	H	CF_3	2
9-04.	O	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	0
9-05.	O	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	1
9-06.	O	N	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	2
9-07.	O	C-CF_3	N	N	H	H	CF_3	0
9-08.	O	C-CF_3	N	N	H	H	CF_3	1
9-09.	O	C-CF_3	N	N	H	H	CF_3	2
9-010.	O	N	C-CF_3	N	H	H	CF_3	0
9-011.	O	N	C-CF_3	N	H	H	CF_3	1
9-012.	O	N	C-CF_3	N	H	H	CF_3	2
9-013.	O	C-CF_3	C-CN	N	H	H	CF_3	0
9-014.	O	C-CF_3	C-CN	N	H	H	CF_3	1
9-015.	O	C-CF_3	C-CN	N	H	H	CF_3	2
9-016.	S	C-Cl	C-H	C-H	H	H	CF_3	0
9-017.	S	C-Cl	C-H	C-H	H	H	CF_3	1
9-018.	S	C-Cl	C-H	C-H	H	H	CF_3	2
9-019.	S	C-Cl	C-H	C-H	Me	H	CF_3	0
9-020.	S	C-Cl	C-H	C-H	Me	H	CF_3	1
9-021.	S	C-Cl	C-H	C-H	Me	H	CF_3	2
9-022.	S	C-H	C-H	C-H	COOMe	H	CF_3	0
9-023.	S	C-H	C-H	C-H	COOMe	H	CF_3	1
9-024.	S	C-H	C-H	C-H	COOMe	H	CF_3	2

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{3U}	n
9-025.	S	C-H	C-H	C-H	COOH	H	CF_3	0
9-026.	S	C-H	C-H	C-H	$CON(Me)_2$	H	CF_3	0
9-027.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	0
9-028.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	1
9-029.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	2
9-030.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	Me	H	CF_3	0
9-031.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	Me	H	CF_3	1
9-032.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	Me	H	CF_3	2
9-033.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	0
9-034.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	1
9-035.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	2
9-036.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	Me	H	CF_3	0
9-037.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	Me	H	CF_3	1
9-038.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	Me	H	CF_3	2
9-039.	N-H	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	0
9-040.	N-H	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	1
9-041.	N-H	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	2
9-042.	N-Me	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	0
9-043.	N-Me	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	1
9-044.	N-Me	C-CH=CH-CH=CH-C		C-H	H	H	CF_3	2
9-045.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	0
9-046.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	1
9-047.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	2
9-048.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	0
9-049.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	1
9-050.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	2
9-051.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	0
9-052.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	1
9-053.	S	C-CH=CH-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	2
9-054.	N-H	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	0
9-055.	N-H	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	1
9-056.	N-H	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	2
9-057.	N-Me	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	0
9-058.	N-Me	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	1

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{3U}	n
9-059.	N-Me	C-CH=CH-CH=CH-C		N	H	H	CF_3	2
9-060.	S	C-Cl	N	C-CF_3	H	H	CF_3	0
9-061.	S	C-Cl	N	C-CF_3	H	H	CF_3	1
9-062.	S	C-Cl	N	C-CF_3	H	H	CF_3	2
9-063.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	0
9-064.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	1
9-065.	O	C-CH=CH-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	2
9-066.	O	N	C-CF_3	C-H	Me	H	CF_3	0
9-067.	O	N	C-CF_3	C-H	Me	H	CF_3	1
9-068.	O	N	C-CF_3	C-H	Me	H	CF_3	2
9-069.	O	N	C-t-Bu	C-H	Me	H	CF_3	0
9-070.	O	N	C-t-Bu	C-H	Me	H	CF_3	1
9-071.	O	N	C-t-Bu	C-H	Me	H	CF_3	2
9-072.	O	C-CH=CF-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	0
9-073.	O	C-CH=CF-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	1
9-074.	O	C-CH=CF-CH=CH-C		N	Me	H	CF_3	2
9-075.	O	C-CH=CH-CF=CH-C		N	Me	H	CF_3	0
9-076.	O	C-CH=CH-CF=CH-C		N	Me	H	CF_3	1
9-077.	O	C-CH=CH-CF=CH-C		N	Me	H	CF_3	2
9-078.	O	C-CH=CH-C(CF_3)=CH-C		N	Me	H	CF_3	0
9-079.	O	C-CH=CH-C(CF_3)=CH-C		N	Me	H	CF_3	1
9-080.	O	C-CH=CH-C(CF_3)=CH-C		N	Me	H	CF_3	2
9-081.	O	C-CF=CF-CF=CF-C		N	Me	H	CF_3	0
9-082.	O	C-CF=CF-CF=CF-C		N	Me	H	CF_3	1
9-083.	O	C-CF=CF-CF=CF-C		N	Me	H	CF_3	2
9-084.	N	O	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	0
9-085.	N	O	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	1
9-086.	N	O	C-CF_3	C-H	H	H	CF_3	2
9-087.	N	O	C-CF_3	C-H	Me	H	CF_3	2
9-088.	C-H	O	C-Cl	N	H	H	CF_3	0
9-089.	C-H	O	C-Cl	N	H	H	CF_3	1
9-090.	C-H	O	C-Cl	N	H	H	CF_3	2
9-091.	C-H	O	C-Cl	N	Me	H	CF_3	2
9-092.	C-Cl	S	C-Cl	C-H	Me	H	CF_3	0

No.	Y^1	Y^2	Y^3	Y^4	R^1	R^2	R^{3U}	n
9-093.	C-Cl	S	C-Cl	C-H	Me	H	CF_3	1
9-094.	C-Cl	S	C-Cl	C-H	Me	H	CF_3	2
9-095.	C-H	N-t-Bu	N	N	H	H	CF_3	0
9-096.	C-H	N-t-Bu	N	N	H	H	CF_3	1
9-097.	C-H	N-t-Bu	N	N	H	H	CF_3	2
9-098.	N	N-CH=CH_2	N	N	H	H	CF_3	0
9-099.	N	N-CH=CH_2	N	N	H	H	CF_3	1
9-0100.	N	N-CH=CH_2	N	N	H	H	CF_3	2
9-0101.	N	O	C-CF_3	C-H	Me	H	CF_3	0
9-0102.	N	O	C-CF_3	C-H	Me	H	CF_3	1

Em analogia com a tabela acima, exemplos adicionais são os compostos numerados 9-0103 a 9-205, em que R^3U é CF_2H e todas as outras variáveis têm o mesmo significado, tal como representado em cada linha da tabela 9.

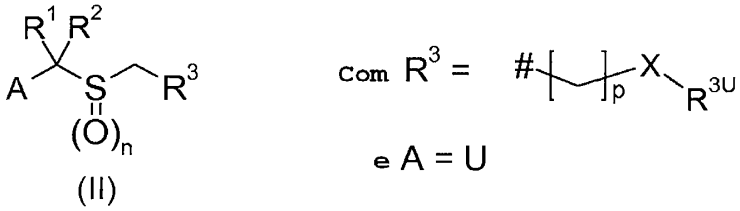
De modo análogo aos compostos numerados de 9-01 a 9-205 são os compostos numerados de 9-1 a 9-205, em que as variáveis têm o mesmo significado, exceto por m ser 1 em vez de 0.

Em analogia com os compostos acima referidos, numerados de 1-01 a 9-205, exemplos adicionais de compostos de acordo com a presente invenção são, quando não explicitamente listados nas tabelas, compostos em que n é 0 ou 1, em vez de 2.

Os compostos de fórmula (I) podem ser preparados por processos adaptados dos descritos nos documentos WO

2009/075080, WO 2009/025397 ou WO 2009/028727, que são aqui incorporados por referência na sua totalidade. Os compostos de acordo com a presente invenção, representados pela fórmula geral [I] podem ser obtidos de acordo com processos de produção a seguir determinados, mas a presente invenção não será limitada por estes processos. As variáveis utilizadas nas diferentes estruturas para os diferentes exemplos de síntese, se não explicitamente definidas, são as mesmos que na fórmula (I). Será entendido pelos técnicos no assunto que certos grupos funcionais nos compostos e intermediários podem ser desprotegidos ou protegidos por grupos de proteção adequados, como ensinado por Greene e cols., *Protective Groups in Organic Synthesis*, John Wiley and Sons, Inc., 3a edição, 1999. Além disso, será evidente para os técnicos no assunto que os compostos e intermediários podem ser isolados por condições padrão aquosas de trabalho e, opcionalmente, purificados. Por exemplo, os compostos ou intermediários podem ser purificados por métodos cromatográficos ou cristalizados para dar o produto desejado na pureza adequada.

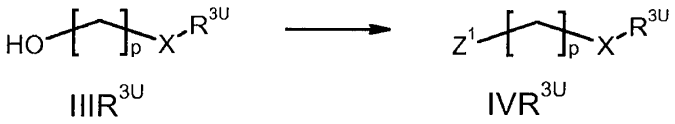
Os compostos da presente invenção podem ser também representados pela seguinte fórmula (II)



em que # é o local de ligação na fórmula (II) e as outras variáveis na fórmula (II) e R^3 têm o mesmo significado que acima mencionado.

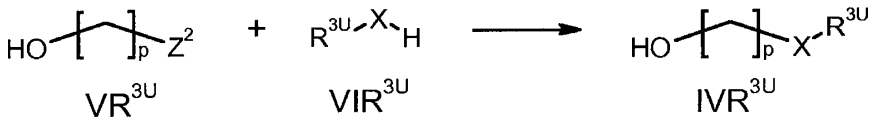
Os compostos do tipo R^3 ligados a um grupo de saída Z^1 podem ser preparados, por exemplo, como se segue e encontram-se descritos, por exemplo, nos documentos WO 2007/071609 e WO 2007/147888 para posterior utilização na síntese de compostos de fórmula (I).

Em geral, os compostos (IVR^{3U}), se não comercialmente disponíveis, podem ser sintetizados a partir de álcoois ($IIIR^{3U}$) via conversão para os respectivos tosilatos, mesilatos ou halogenetos em analogia com os métodos mencionados em J. March, *Advanced Organic Chemistry*, 4a edição, Wiley.



Os compostos ($IIIR^{3U}$) podem ser obtidos através de alquilação de compostos (VR^{3U}) onde Z^2 é um grupo de saída

adequado tal como um átomo de halogênio, metanossulfonato, trifluorometanossulfonato ou tolueno-sulfonato, com compostos (VI R^{3U}), que são adequadamente substituídos por tióis ou álcoois ou sais dos mesmos, em analogia com os procedimentos descritos em *Can. J. Chem.* 1979, 57, p. 1958-1966 e *J. Am.Chem. Soc.* 1924, 46, p. 1503.



VR^{3U} VIR^{3U} IVR^{3U}

Especificamente, os compostos (IVR^{3U}) em que p = 2, R^{3U} é CF_3, X é enxofre e Z^1 é halogênio podem também ser obtidos por reação de CF_3-SH com vinil halogenetos CH_2CH-Z^1, tal como descrito em *J. Am. Chem. Soc.* 1962, 84, p. 3148-3153.

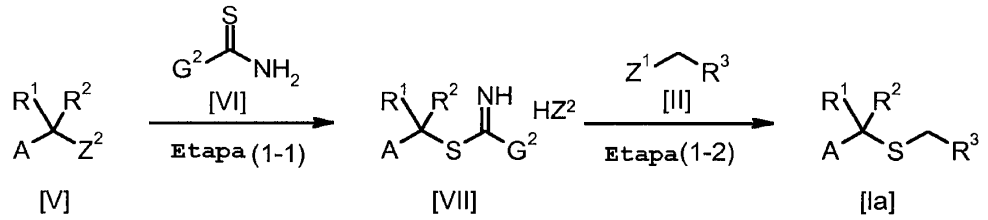
Os compostos ($IIIR^{3U}$) em que R^{3U} é CF_3 e X é enxofre podem ser preparados por exemplo por alquilação de mercapto álcoois HO-$(CH_2)_n$-SH, em condições de irradiação como descrito no documento WO 2001/36410; p.19.

Os compostos (IVR^{3U}) em que R^{3U} é CF_3 e X é oxigênio podem ser obtidos como descrito em *J. Fluorine Chemistry* 1982, 21, p. 133-143 ou *J. Org. Chem.* 2001, 66, p. 1061 - 1063.

Processo de Fabricação 1

Um composto representado pela fórmula geral [Ia] pode ser fabricado de acordo com o processo abaixo:

Esquema 1:



Na fórmula, A, R^1, R^2, R^3, Z^1 e Z^2 representam os mesmos significados que os acima mencionados, e G^2 representa um grupo metila ou um grupo amino.

Etapa (1 -1)

Um composto [VII] pode ser produzido por reação de um composto [V] e um composto [VI] num solvente. As quantidades utilizadas de um composto [VI] podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 1 a 3 equivalentes, de preferência de 1 a 2 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [V]. Exemplos de solventes que podem ser utilizados nesta reação são: hidrocarbonetos halogenados tais como diclorometano e clorofórmio e álcoois tais como metanol, etanol e propanol, ou misturas dos mesmos. As quantidades dos solventes acima mencionados são normalmente de 0,1 a 10 litros, de preferência de 0,2 a 3,0 litros por 1 mole de um composto

[V]. A temperatura de reação é qualquer temperatura entre 0 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na temperatura compreendida entre 10 °C e 120 °C. O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades na reação, mas é normalmente na faixa de 0,5 a 72 horas. Após a reação ter sido completada, o composto [VII] pode ser isolado através da realização de operações tais como concentração. O composto isolado [VII] pode ser adicionalmente purificado por meio de recristalização, conforme necessário.

Etapa (1 -2)

Um composto representado pela fórmula [Ia] pode ser produzido por reação de um composto [VII] e um composto [II] num solvente, na presença de uma base. As quantidades utilizadas de um composto [II], aqui utilizado, podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 0,8 a 5 equivalentes, de preferência 0,8 a 2 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [VII]. Exemplos dos solventes que podem ser utilizados nesta reação são: éteres tais como éter dietílico, 1,2-dimetoxietano e tetra-hidrofurano, amidas, tais como N,N-dimetilacetamida, N,N-dimetilformamida, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona e N-metil-2-pirrolidinona, compostos de

enxofre tais como dimetilsulfóxido e sulfolano, nitrilas tais como acetonitrila e propionitrila, álcoois tais como metanol, etanol e propanol, hidrocarbonetos alifáticos tais como hexano e heptano, hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno e xileno, hidrocarbonetos halogenados tais como 1,2-dicloroetano e clorobenzeno; e água; ou misturas dos mesmos. As quantidades dos solventes acima mencionados são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 10 litros por 1 mole de um composto [VII]. Exemplos de bases que podem ser utilizadas nesta reação são bases inorgânicas, tais como: hidróxidos de metais alcalinos, por exemplo, hidróxido de sódio e hidróxido de potássio, hidróxidos de metais alcalino-terrosos, por exemplo, hidróxido de cálcio e hidróxido de magnésio, ou sais de metal de álcoois, por exemplo, etóxido de sódio, metóxido de sódio e terc-butóxido de potássio. As quantidades de uma base utilizadas podem, normalmente, ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 20 equivalentes, de preferência de 1 a 10 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [VII].

A reação pode ser realizada utilizando-se um catalisador de transferência de fase tal como brometo de tetra-n-butilamônio. As quantidades de um catalisador de transferência de fase utilizadas podem ser adequadamente

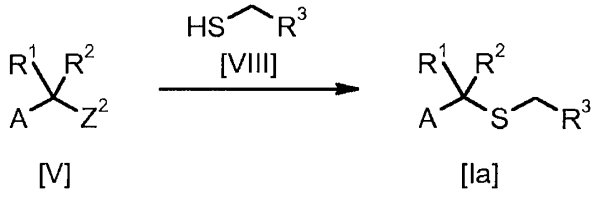
selecionadas a partir de uma faixa de 0 a 1,0 equivalente, por 1 equivalente de um composto [VII]. A temperatura de reação é qualquer temperatura desde -50 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura entre -10 °C e 100 °C.

O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas é normalmente na faixa de 1 a 48 horas. Após a reação ter sido completada, o composto [Ia] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [Ia] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia de coluna e recristalização, conforme necessário.

Processo de Fabricação 2

Um composto representado pela fórmula geral [la] pode ser fabricado de acordo com o processo abaixo ilustrado.

Esquema 2:



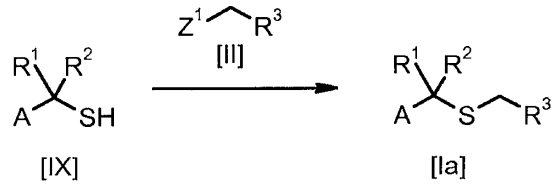
Na fórmulas, A, R^1, R^2, R^3 e Z^2 representam os mesmos significados que os acima referidos. Um composto representado pela fórmula [Ia] pode ser produzido pela reação de um composto [V] e um composto [VIII] num solvente, na presença de uma base. As quantidades utilizadas de um composto [VIII], aqui utilizado, podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 0,8 a 5 equivalentes, de preferência de 0,8 a 2 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [V]. Os solventes que podem ser utilizados nesta reação são os mesmos que aqueles na etapa (1-2) do processo de fabricação 1. As quantidades dos solventes acima mencionados são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 10 litros por 1 mole de um composto [V]. Exemplos de bases que podem ser utilizadas nesta reação são: bases orgânicas tais como trietilamina e 1,8-diazabiciclo[5.4.0]-7-undeceno, bases inorgânicas, tais como: hidróxidos de metais alcalinos, por exemplo, hidróxido de sódio e hidróxido de potássio, hidróxidos de metais alcalino-terrosos, por exemplo, hidróxido de cálcio e hidróxido de magnésio, carbonatos de metais alcalinos, por exemplo, carbonato de sódio e carbonato de potássio e hidrogênio, carbonatos de metais alcalinos, por exemplo, carbonato de hidrogênio, sódio e hidrogenocarbonato de potássio, sais de metal de

álcoois, por exemplo, metóxido de sódio, etóxido de sódio e terc-butóxido de potássio, ou hidretos de metais alcalinos, por exemplo, hidreto de sódio. As quantidades de uma base podem, normalmente, ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 10 equivalentes, de preferência de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [V]. A temperatura de reação é qualquer temperatura desde -50 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de -10 °C a 100 °C. O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas se encontra normalmente no intervalo de 1 a 24 horas. Após a reação ter sido completada, o composto [Ia] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [Ia] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia em coluna e recristalização, conforme necessário.

Processo de Fabricação 3

Um composto representado pela fórmula [Ia] pode ser fabricado de acordo com o processo abaixo ilustrado.

Esquema 3:



Na fórmula, A, R^1, R^2, R^3 e Z^1 representam os mesmos significados que os acima referidos.

Um composto representado pela fórmula [Ia] pode ser produzido pela reação de um composto [IX] e um composto [II] num solvente, na presença de uma base. As quantidades utilizadas de um composto [II], aqui utilizado, podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 0,8 a 5 equivalentes, de preferência de 0,8 a 2 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [IX]. Os solventes que podem ser utilizados nesta reação são os mesmos que aqueles na etapa (1 -2) do processo de fabricação 1. As quantidades dos solventes acima mencionados são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 10 litros por 1 mole de um composto [IX]. Exemplos de bases que podem ser utilizadas nesta reação são os mesmos que aqueles do processo de fabricação 2. As quantidades de uma base utilizada podem normalmente ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 10 equivalentes, preferivelmente de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [IX]. A temperatura de reação

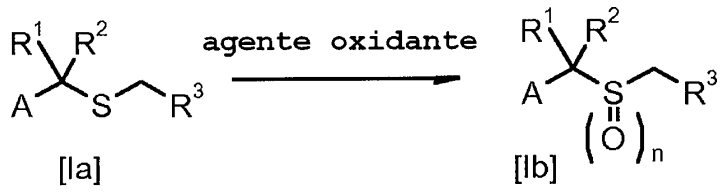
é qualquer temperatura desde -50 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de -10 °C a 100 °C. O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas se encontra normalmente na faixa de 1 a 48 horas. Após a reação ter sido completada, o composto [Ia] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [Ia] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia em coluna e recristalização, conforme necessário.

O composto acima mencionado [VIII] e o composto [IX] também podem ser fabricados de acordo com os processos descritos em *Journal of Organic Chemistry*, páginas 93 a 95 (1962) e em *Heterocicles*, páginas 1331 a 1346 (1986).

Processo de Fabricação 4

Os compostos representados pela fórmula geral [I] e os compostos representados pela fórmula geral [Ib], em que n é 1 ou 2, podem ser fabricados de acordo com o processo ilustrado abaixo:

Esquema 4:



Na fórmula, A, R^1, R^2 e R^3 representam os mesmos significados que os acima mencionados, e n representa 1 ou 2.

Um composto representado pela fórmula [Ib] pode ser produzido pela reação de um composto representado pela fórmula geral [Ia] e um agente oxidante, em um solvente. Exemplos dos agentes oxidantes que podem ser utilizados na reação são: peróxidos orgânicos tais como ácido meta-cloroperoxibenzóico, ácido perfórmico ou ácido peracético, oxona (nome comercial Dupont, 2 $KHSO_5 \cdot KHSO_4 \cdot K_2SO_4$); imidas contendo halogênio, tais como N-clorossuccinimida; e peróxidos inorgânicos tais como peróxido de hidrogênio, permanganato de potássio ou periodato de sódio. As quantidades de agente oxidante para uso no presente documento podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 0,8 a 10 equivalentes, de preferência de 0,8 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [Ia].

Exemplos dos solventes que podem ser utilizados nesta reação são: hidrocarbonetos halogenados tais como

diclorometano, clorofórmio, 1,2-dicloroetano e clorobenzeno, álcoois tais como metanol, etanol e propanol, hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno e xileno, cetonas tais como acetona e 2-butanona, nitrilas tais como acetonitrila, ésteres tais como acetato de etila, ácidos carboxílicos alifáticos tais como ácido acético e ácido trifluoroacético; água; ou misturas dos mesmos. As quantidades dos solventes acima mencionados são, normalmente, de 0,1 a 50 litros, preferivelmente de 0,2 a 10 litros por 1 mole de um composto [Ia]. A temperatura de reação é qualquer temperatura desde -50 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de -10 °C a 60 °C

O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas se encontra normalmente no intervalo de 1 a 24 horas. Após a reação ter sido concluída, um composto [Ib] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [Ib] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia de coluna e recristalização, conforme necessário.

Os métodos preferidos para a conversão seletiva de

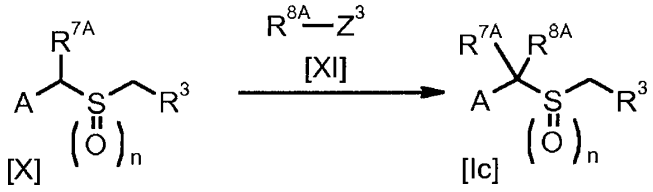
sulfetos (Ia) para sulfóxidos (Ib), para o qual n é 1, são o uso de peróxido de hidrogênio como agente oxidante na presença de hexafluoroisopropanol, tal como descrito em *Tetrahedron Lett.* 1998, 39, 3141 -3144, ou o uso de ácido meta-cloroperbenzóico, como agente oxidante na presença ou ausência de uma base num solvente aprótico tal como clorofórmio ou diclorometano, em temperaturas inferiores a temperatura ambiente.

Outros métodos para a oxidação de compostos sulfetos a sulfóxidos e aos produtos sulfona são bem conhecidos na arte, e qualquer procedimento adequado conhecido na arte pode ser utilizado (por exemplo, para a síntese de sulfóxidos ver Varma e cols., *Org. Lett.*, 1999, 1, 189-191; Kim e cols, *Synthesis*, 2002, 2484-2486; Qian e cols, *Synlett*, 2006, 709-712;. Matteucci e cols, *Org. Lett*, 2003, 5, 235 -237; Mba e cols, *Org. Lett*, 2007, 9, 21 -24; Karimi e cols, *Org. Lett*, 2005, 7, 625-628; para a preparação de sulfonas, ver Varma e cols. *Org. Lett*, 1999, 1, 189-191; Jana e cols, *Org. Lett,* 2003, 5, 3787-3790; Karimi e cols, *Org. Lett*, 2005, 7, 625-628; Shaabania e cols, *Tetrahedron*, 2004, 60, 1 1415-1 1420).

Processo de Fabricação 5

Um composto representado pela fórmula [Ic] pode ser fabricado de acordo com o processo abaixo ilustrado:

Esquema 5:



Na fórmula, [X] e [Ic], A, R^3 e n representam os mesmos significados que o acima mencionado e:

R^{7A} nas fórmulas [X] e [Ic] denota halogênio, C_1-C_6-alquil que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alquiltio, por C_1-C_4-alquilsulfinila, por C_1-C_6-alquilsulfonila, por CN, por $C(=O)R^{9A}$, ou por di(C_1-C_3-alquil)amino, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio, CN, $C(=O)R^{10A}$;

R^{8A} nas fórmulas [X] e [Ic] denota C_1-C_6-alquil que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alquiltio, por CN, por $C(=O)R^{9A}$, ou por hidroxila, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que podem ser substituídos por átomos de halogênio, ou $C(=O)R^{11A}$;

R^{9A} nas fórmulas [X] e [Ic] denota C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_1-C_6-alcoxi, amino, mono-(C_1-C_6-alquil)amino,

di-(C_1-C_4-alquil)amino, C_2-C_5-amino cíclico;

R^{10A} na fórmula [X] e [Ic] denota C_1-C_6-alcoxi, di-(C_1-C_4-alquil)amino, C_2-C_5-amino cíclico;

R^{11A} nas fórmulas [X] e [Ic] denota C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_1-C_6-alcoxi, di-(C_1-C_4-alquil)amino, C_2-C_5-amino cíclico;

Z^3 representa um grupo de saída tal como um átomo de cloro, átomo de bromo, um átomo de iodo, grupo metanosulfoniloxi ou grupo trifluorometanossulfoniloxi.

Um composto representado pela fórmula [Ic] pode ser produzido por reação de um composto [X] e um composto [XI] em um solvente, na presença de uma base. As quantidades utilizadas de um composto [XI] aqui utilizadas podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 1 a 10 equivalentes, de preferência de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [X]. Exemplos dos solventes que podem ser utilizados nesta reação são: éteres tais como éter dietílico, 1,2-dimetóxietano e tetra-hidrofurano, amidas, tais como N,N-dimetilacetamida, N,N-dimetilformamida, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona e N-metil-2-pirrolidinona; compostos de enxofre tais como dimetil-sulfóxido e sulfolano; nitrilas tais como acetonitrila e propionitrila e hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno e xileno, ou misturas

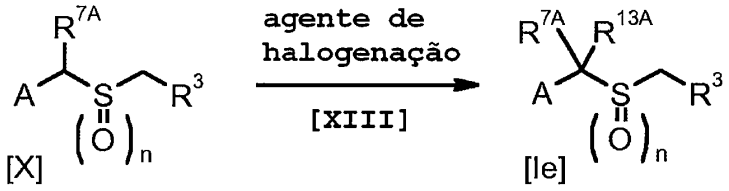
dos mesmos. As quantidades dos solventes acima mencionados são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 10 litros por 1 mole de um composto [X]. Exemplos de bases que podem utilizadas nesta reação são: bases orgânicas tais como trietilamina e 1,8-diazabiciclo[5.4.0]-7-undeceno, bases inorgânicas, tais como: hidróxidos de metais alcalinos, por exemplo hidróxido de sódio, e hidróxido de potássio, hidróxidos de metais alcalino-terrosos, por exemplo, hidróxido de cálcio e hidróxido de magnésio, carbonatos de metais alcalinos, por exemplo, carbonato de sódio, e carbonato de potássio e hidrogênio, carbonatos de metais alcalinos, por exemplo, hidrogenocarbonato de sódio e hidrogenocarbonato de potássio, sais metálicos de álcoois, por exemplo, metóxido de sódio, etóxido de sódio e terc-butóxido de potássio, hidretos de metais alcalinos, por exemplo hidreto de sódio ou compostos de organolítio tais como n-butil-lítio e diisopropilamida de lítio. As quantidades de uma base utilizadas podem normalmente ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 10 equivalentes, preferivelmente de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [X]. A temperatura da reação é qualquer temperatura desde -100 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de -78 °C a 100 °C. O tempo de reação irá

variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas se encontra normalmente no intervalo de 1 a 24 horas. Após a reação ter sido completada, o composto [Ic] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [Ic] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia em coluna e recristalização, conforme necessário.

Processo de fabricação 6

Um composto representado pela fórmula [Ie] pode ser fabricado de acordo com o processo abaixo ilustrado, a partir de um composto [X].

Esquema 6:



nas fórmulas [X] e [Ie], A, R^3, R^{7A} e n representam os mesmos significados que anteriormente citados; R^{13A} na fórmula [Ie] representa um átomo de halogênio.

Um composto representado pela fórmula [Ie] pode ser produzido por reação de um composto [X] e um agente de

halogenação [XIII], num solvente, na presença de uma base. Exemplos dos agentes de halogenação [XIII] que podem ser utilizados na reação são: hidrocarbonetos halogenados tais como tetracloreto de carbono e hexacloroetano, imidas contendo halogênio, tais como N-fluorobenzenossulfonimida, N-clorossuccinimida e N-bromossuccinimida; compostos de enxofre halogenados tais como cloreto de sulfurila e cloreto de tionila, compostos de fósforo halogenados tais como pentacloreto de fósforo e oxicloreto de fósforo, sais de N-fluoropiridínio, tais como 1-fluoro-2,4,6-trimetilapiridínio trifluorometanossulfonato, 1-(clorometil)-4-fluoro-1,4-diazoniabiciclo[2.2.2]octano bis (tetrafluoroborato); halogênios tais como flúor, cloro, bromo e iodo; ou halogenetos de cobre, como cloreto de cobre (II) e brometo de cobre (II). As quantidades para a utilização de um agente de halogenação [XIII] aqui utilizado podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 1 a 10 equivalentes, de preferência de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [X]. Exemplos dos solventes que podem ser utilizados nesta reação são: éteres tais como éter dietílico, 1,2-dimetóxietano e tetra-hidrofurano, amidas, tais como N, N-dimetilacetamida, N, N-dimetilformamida, 1,3-dimetil-2-imidazolidinona e N-metil-2-pirrolidinona,

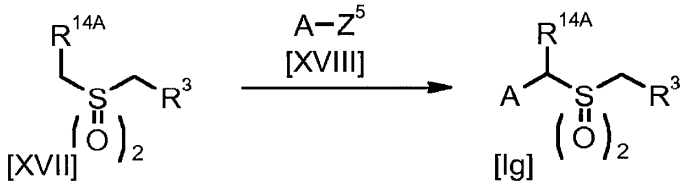
compostos de enxofre tais como dimetilsulfóxido e sulfolano, nitrilas tais como acetonitrila e propionitrila, hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno e xileno, hidrocarbonetos halogenados tais como diclorometano, 1,2-dicloroetano e clorobenzeno; água ou misturas dos mesmos. As quantidades dos solventes acima mencionados são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 20 litros por 1 mole de um composto [X]. Exemplos de bases que podem ser utilizados para esta reação são os mesmos que os do exemplo de fabricação 5. As quantidades de uma base utilizada podem, normalmente, ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 10 equivalentes, de preferência de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [X]. A temperatura de reação é qualquer temperatura desde -100 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de -78 °C a 100 °C. O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, o substrato de reação e as quantidades de reação, mas se encontra normalmente no intervalo de 1 a 24 horas. Após a reação ter sido completada, o composto [Ie] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico e, em seguida, concentração. O composto isolado

[Ie] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia em coluna e recristalização, conforme necessário.

Processo de fabricação 7

Um composto representado pela fórmula [Ig] pode ser obtido de acordo com o processo abaixo ilustrado.

Esquema 7:



nas fórmulas [XVII] e [Ig], A e R^3 representam os mesmos significados acima mencionados, R^{14A} nas fórmulas [XVII] e [Ig] denota um grupo ciano ou um grupo $C(=O)R^{10A}$, em que o grupo R^{10A} representa o mesmo significado já mencionado nas fórmulas [X] e [Ic]

Z^5 representa um grupo de saída tal como um átomo de cloro, átomo de bromo, um átomo de iodo, ou um grupo trifluorometanossulfoniloxi.

Um composto representado pela fórmula [Ig] pode ser produzido pela reação de um composto [XVII] e um composto [XVIII], em um solvente, na presença de uma base e um catalisador de metal de transição. Esta reação pode ser efetuada com a adição de um ligante fosfina tal como

trifenilfosfina ou tri-terc-butilfosfina, como requerido.

As quantidades para a utilização do composto [XVIII] aqui utilizado podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 1 a 5 equivalentes, de preferência de 1 a 3 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XVII]. Exemplos dos solventes que podem ser utilizados nesta reação são: éteres tais como tetra-hidrofurano, 1,4-dioxano e 1,2-dimetóxietano; nitrilas tais como acetonitrila e propionitrila; amidas, tais como N,N-dimetilformamida e N,N-dimetilacetamida; e hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno e xileno ou misturas dos mesmos. As quantidades de um solvente, acima mencionado, são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 20 litros, por 1 mole de um composto (XVII). Exemplos de bases que podem utilizadas nesta reação são: bases orgânicas tais como trietilamina, diisopropiletilamina e 1,8-diazabiciclo[5.4.0]-7-undeceno; bases inorgânicas tais como: hidróxidos de metais alcalinos, por exemplo hidróxido de sódio e hidróxido de potássio; carbonatos de metais alcalinos, por exemplo carbonato de sódio e carbonato de potássio; e hidrogeno carbonatos de metais alcalinos, por exemplo, hidrogenocarbonato de sódio e hidrogenocarbonato de potássio; sais metálicos de álcoois, tais como metóxido de

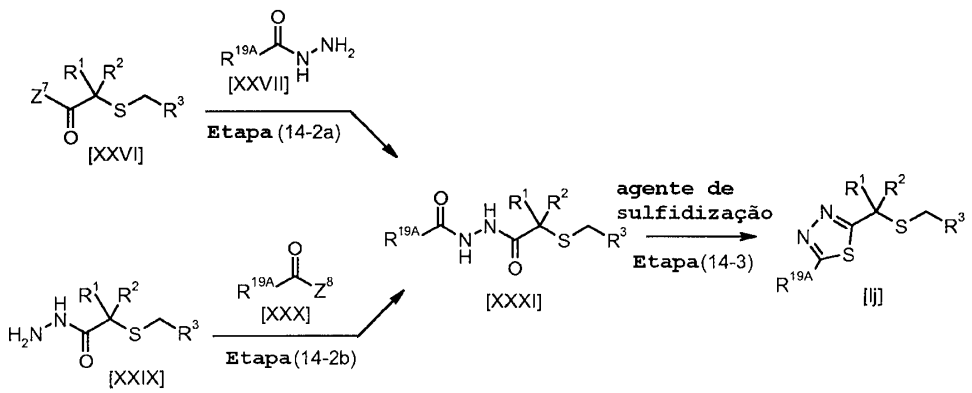
sódio; e fosfatos, tais como fosfato de potássio, terc-butóxido de sódio e terc-butóxido de potássio; ou hidretos de metais alcalinos tais como hidreto de sódio. As quantidades de uma base utilizadas podem, normalmente, ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 10 equivalentes, de preferência de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XVII]. Exemplos dos compostos de metais de transição que podem ser utilizados de acordo com a presente invenção são compostos de paládio, tais como acetato de paládio, diclorobis(trifenilfosfina) paládio, tetraquis(trifenilfosfina)paládio e tris (dibenzilidenoacetona)dipaládio-clorofórmio. As quantidades de um composto de metal de transição utilizadas podem ser normalmente, adequadamente selecionadas a partir faixa de 0,01 a 0,5 equivalentes, de preferência de 0,02 a 0,2 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XVII]. As quantidades de um ligante fosfina utilizados podem ser adequadamente selecionadas a partir do intervalo de 0 a 1,5 equivalentes por 1 equivalente de um composto [XVII]. A temperatura de reação é qualquer temperatura de 0 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de 20 °C a 120 °C. O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades

de reação, mas se encontra normalmente na faixa de 1 a 48 horas. Após a reação ter sido concluída, um composto [Ig] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [Ig] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia de coluna, como requerido. Um composto [XVII] também pode ser fabricado de acordo com os processos descritos nos processo de fabricação 3 e 4.

Processo de fabricação de 8

Os compostos representados pela fórmula geral [I], e um composto [Ij], podem ser fabricados de acordo com o processo abaixo ilustrado.

Esquema 8:



nas fórmulas no Esquema 8, R^1, R^2 e R^3 representam os mesmos significados acima mencionados,

R^{19A} representa C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil;

Z^7 representa um átomo de halogênio tal como um átomo de cloro ou um átomo de bromo. Z^8 representa um grupo de saída tal como um átomo de cloro, átomo de bromo, ou $OC(=O)R^{19A}$.

Etapa (8-2a)

Um composto [XXXI] pode ser produzido pela reação de um composto [XXVI] e um composto [XXVII] num solvente, na presença de uma base. As quantidades utilizadas de um composto [XXVII] aqui utilizado podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente, da faixa de 1 a 5 equivalentes, de preferência de 1 a 2 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XXVI]. Exemplos dos solventes que podem ser utilizados nesta reação são: éteres tais como éter dietílico, 1,2-dimetóxietano e tetra-hidrofurano; nitrilas tais como acetonitrila e propionitrila; hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno e xileno; hidrocarbonetos halogenados tais como diclorometano, 1,2-dicloroetano e clorobenzeno; álcoois tais como metanol, etanol, propanol; ou água; ou misturas dos mesmos. As quantidades de solventes acima mencionados

se encontram normalmente entre 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 20 litros por 1 mole de um composto [XXVI]. Exemplos de bases que podem ser utilizados nesta reação são: bases orgânicas tais como trietilamina e 1,8-diazabiciclo[5.4.0]-7-undeceno; bases inorgânicas, tais como: hidróxidos de metais alcalinos, por exemplo hidróxido de sódio e hidróxido de potássio; hidróxidos de metais alcalino-terrosos, por exemplo hidróxido de cálcio e hidróxido de magnésio; carbonatos de metais alcalinos, por exemplo carbonato de sódio e carbonato de potássio e hidrogeno carbonatos de metais alcalinos, por exemplo hidrogenocarbonato de sódio e hidrogenocarbonato de potássio. As quantidades de uma base utilizada podem normalmente ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 10 equivalentes, de preferência de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XXVI]. A temperatura de reação é qualquer temperatura desde -50 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de -20 °C a 100 °C. O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas normalmente se encontra no intervalo de 1 a 24 horas. Após a reação ter sido concluída, um composto [XXXI] pode ser isolado através da realização de operações

tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [XXXI] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia em coluna e recristalização, conforme necessário.

Etapa (8-2b)

Um composto [XXXI] pode ser produzido por reação de um composto [XXIX] e um composto [XXX] num solvente, na presença de uma base. As quantidades utilizadas de um composto [XXX] aqui utilizada podem ser adequadamente selecionadas a partir, normalmente na faixa de 1 a 5 equivalentes, preferivelmente 1 a 2 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XXIX]. Exemplos dos solventes e bases que podem ser utilizados nesta reação são os mesmos que para a Etapa (8-2a). As quantidades de solventes acima mencionadas são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 20 litros por 1 mole de um composto [XXIX]. As quantidades de uma base para utilização podem normalmente ser adequadamente selecionadas a partir de uma faixa de 1 a 10 equivalentes, de preferência 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XXIX]. A temperatura de reação é qualquer temperatura desde -50 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de -20°C a 100 °C.

O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas é normalmente no intervalo de 1 a 24 horas. Após a reação ter sido concluída, um composto [XXXI] pode ser isolado através da realização de operações tais como adição da mistura de reação à água e extração com um solvente orgânico, seguida de concentração. O composto isolado [XXXI] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia em coluna e recristalização, conforme necessário.

Etapa (8-3)

Um composto representado pela fórmula [Ij] pode ser produzido por reação de um composto [XXXI] e um agente de sulfidização em um solvente. Exemplos dos solventes que podem ser utilizados nesta reação são: éteres tais como tetra-hidrofurano e 1,4-dioxano; hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, o tolueno e o xileno; hidrocarbonetos halogenados tais como clorofórmio, 1,2-dicloroetano e clorobenzeno; nitrilas tais como acetonitrila e propionitrila; ou misturas dos mesmos. As quantidades de solventes na acima mencionada são normalmente de 0,1 a 50 litros, de preferência de 0,2 a 20 litros por 1 mole de um composto [XXXI]. Exemplos dos agentes de sulfidização que podem ser utilizados na reação são reagente 2,4-bis(4-

metóxifenil)-1,3-ditia-2,4-difosfetano-2,4-dissulfureto, ou pentassulfeto de fósforo. As quantidades utilizadas de um agente de sulfidização aqui utilizados podem ser adequadamente selecionadas a partir normalmente da faixa de 0,5 a 10 equivalentes, de preferência de 1 a 5 equivalentes, por 1 equivalente de um composto [XXXI]. A temperatura reacional é normalmente de qualquer temperatura de 0 °C até a temperatura de refluxo no sistema reacional, preferivelmente na faixa de temperatura de 20 °C a 180 °C. O tempo de reação irá variar de acordo com, por exemplo, a temperatura da reação, substrato de reação e as quantidades de reação, mas é normalmente no intervalo de 1 a 72 horas. Após a reação ter sido concluída, um composto [Ij] pode ser isolado por filtração da mistura de reação, em seguida, a realização de uma operação tal como a concentração. O composto isolado [Ij] pode ser adicionalmente purificado por meio de cromatografia de coluna, como requerido.

O composto [XXVII] pode ser fabricado, por exemplo, de acordo com o processo descrito no *Journal of Organic Chemistry*, pgs 102 a 105 (1960).

Se os compostos individuais não puderem ser preparados pelas vias acima descritas, estes podem ser preparados por derivatização de outros compostos I ou por modificações habituais das vias de síntese descritas.

As misturas reacionais são manipuladas de modo habitual, por exemplo, por mistura com água, separação das fases, e, se apropriado, pela purificação dos produtos brutos por cromatografia, por exemplo, sobre alumina ou sílica-gel. Alguns dos intermediários e produtos finais podem ser obtidos sob a forma de óleos viscosos incolores ou castanho pálido , que são libertados ou purificados a partir de componentes voláteis sob pressão reduzida e a temperatura moderadamente elevada. Se os intermediários e produtos finais são obtidos como sólidos, eles podem ser purificados por recristalização ou digestão.

A presente invenção também fornece um método para controlar pragas invertebradas em que o método compreende tratar as pragas, a sua oferta de alimentos, o seu habitat ou a sua base de procriação ou uma planta cultivada, material de propagação de plantas (tal como sementes), o solo, área, material ou ambiente no qual as pragas estão a crescer ou podem crescer, ou os materiais, plantas cultivadas, materiais de propagação de plantas (tal como semente), solos, superfícies ou espaços a proteger do ataque ou infestação de pragas com uma quantidade pesticidamente efetiva de um composto de fórmula I ou um sal ou N-óxido dos mesmos ou de uma composição tal como definida acima.

De preferência, o método da invenção serve para proteger o material de propagação de plantas (tais como sementes) e a planta que cresce a partir dela do ataque de pragas invertebradas ou infestação e compreende o tratamento do material de propagação de plantas (tais como sementes) com uma quantidade pesticidamente efetiva de um composto de fórmula I ou um sal agricolamente aceitável ou um N-óxido do mesmo tal como definido acima ou com uma quantidade pesticidamente efetiva de uma composição agrícola, tal como definido acima e abaixo. O método da presente invenção não está limitado para a proteção do "substrato" (planta, os materiais de propagação de plantas, material de solo, etc), que foi tratado de acordo com a invenção, mas também tem um efeito preventivo, assim, por exemplo, de acordo com a presente invenção há a proteção de uma planta que cresce a partir de um material de propagação de planta tratado (tal como semente), apesar da própria planta não ter sido tratada.

No sentido da presente invenção, "pragas invertebradas" são de preferência selecionados a partir de artropodes e nematóides, mais preferivelmente de insetos nocivos, aracnídeos e nematóides, e ainda mais preferivelmente de insetos, ácaros e nematóides. No sentido da presente invenção, "pragas invertebradas" são mais

preferencialmente insetos.

A invenção proporciona ainda uma composição agrícola para combater tais pragas invertebradas, que compreende uma quantidade de pelo menos um composto de fórmula geral I ou pelo menos um sal ou N-óxido agricolamente útil do mesmo e, pelo menos, um líquido inerte e/ou veículo sólido agronomicamente aceitável que tem uma ação pesticida e, se desejado, pelo menos um agente tensoativo.

Tal composição pode conter um único composto ativo da fórmula I ou um sal ou N-óxido do mesmo ou uma mistura de vários compostos ativos I ou dos seus sais de acordo com a presente invenção. A composição de acordo com a presente invenção pode compreender um isômero individual ou de misturas de isômeros, bem como tautômeros individuais ou misturas de tautômeros.

Os compostos da fórmula I e as composições pestidicidas que os compreendem são agentes eficazes para o controle de pragas de artrópodes e nematóides. Pragas invertebradas controladas pelos compostos de fórmula I incluem, por exemplo:

Insetos da ordem dos lepidópteros (Lepidoptera), por exemplo *Agrotis ypsilon, Agrotis segetum, Alabama argillacea, Anticarsia gemmatalis, Argyresthia conjugella, Autographa gamma, Bupalus piniarius, Cacoecia murinana,*

Capua reticulana, Cheimatobia brumata, Choristoneura fumiferana, Choristoneura occidentalis , Cirphis unipuncta, Cydia pomonella, Dendrolimus pini, Diaphania nitidalis, Diatraea grandiosella, Earias insulana, Elasmopalpus lignosellus, Eupoecilia ambiguella, Evetria bouliana, Feltia subterranea, Galleria mellonella, Grapholitha funebrana, Grapholitha molesta, Heliothis armigera, Heliothis virescens, Heliothis zea, Hellula undalis, Hibernia defoliaria, Hyphantria cunea, Hyponomeuta malinellus, Keiferia lycopersicella, Lambdina fiscellaria, Laphygma exigua, Leucoptera coffeella, Leucoptera scitella, Litocolletis blancardella, Lobesia botrana, Loxostege sticticalis, Lymantria dispar, Lymantria monacha, Lyonetia clerkella, Malacosoma Neustria, Mamestra brassicae, Orgyia pseudotsugata, Ostrinia nubilalis, Panolis flammea, Pectinophora gossypiella, Peridroma saucia, Phalera Bucephala, Phtorimaea operculella, Phillocnistis citrella, Pieris brassicae, Plathypena scabra, Plutella xylostella, Pseudoplusia includens, Rhyacionia frustrana, Scrobipalpula absoluta, Sitotroga cerealella, Sparganothis pilleriana, Spodoptera frugiperda, Spodoptera littoralis, Spodoptera litura, Thaumatopoea pityocampa, Tortrix viridana, Trichoplusiani e Zeiraphera canadensis.

Besouros (Coleoptera), por exemplo *Agrilus sinuatus,*

Agriotes lineatus, Agriotes obscurus, Amphimallus solstitialis, Anisandrus dispar, Antonomus grandis, Antonomus pomorum, Atomaria linearis, Blastophagus piniperda, Blitophaga undata, Bruchus rufimanus, Bruchus pisorum, Bruchus lentis, Byctiscus betulae, Cassida nebulosa, Cerotoma trifurcata, Ceutorrhynchus assimilis, Ceutorrhynchus napi, Chaetocnema tibialis, Conoderus vespertinus, Crioceris asparagi, Diabrotica longicornis, Diabrotica 12 punctata, Diabrotica virgifera, Epilachna varivestis, Epitrix hirtipennis, Eutinobothrus brasiliensis, Hilobius abietis, Hypera brunneipennis, Hypera postica, Ips typographus, Lema bilineata, Lema melanopus, Leptinotarsa decemlineata, Limonius californicus, Lissorhoptrus oryzophilus, Melanotus communis, Meligethes aeneus, Melolontha hippocastani, Melolontha Melolontha, Oulema oryzae, Ortiorrhynchus sulcatus, Otiorrhynchus ovatus, Phaedon cochleariae, Phillotreta chrysocephala, Phyllophaga sp, Phyllopertha horticola, Phyllotreta nemorum, Phyllotreta striolata, Popillia japonica, Sitona lineatus e Sitophilus Granaria.

Dípteros (Diptera), por exemplo, *Aedes aegypti, Aedes vexans, Anastrepha ludens, Anopheles maculipennis, Ceratitis capitata, Chrysomya bezziana, Chrysomya hominivorax, Chrysomya macellaria, Contarinia sorghicola,*

Cordylobia anthropophaga, Culex pipiens, Dacus cucurbitae, Dacus oleae, Dasineura brassicae, Fannia canicularis, Gasterophilus intestinalis, Glossina morsitans, Haematobia irritans, Haplodiplosis equestris, Hilemyia platura, Hypoderma lineata, Liriomyza sativae, Liriomyza trifolii, Lucilia caprina, Lucilia cuprina, Lucilia sericata, Lycoria pectoralis, Mayetiola destructor, Musca domestica, Muscina stabulans, Oestrus ovis, Oscinella frit, Pegomya hyso-cyami, Phorbia antiqua, Phorbia brassicae, Phorbia coarctata, Rhagoletis cerasi, Rhagoletis pomonella, Tabanus bovinus, Tipula oleracea e *Tipula paludosa*.

Tripos (Thysanoptera), por exemplo, *Dichromotrips corbetti, Frankliniella fusca, Frankliniella occidentalis, Frankliniella tritici, Scirtotrips citri, Thrips oryzae, Thrips palmi* e *Thrips tabaci*.

Himenópteros (Hymenoptera), por exemplo, *Athalia rosae, Atta cephalotes, Atta sexdens, Atta texana, Hoplocampa minuta, Hoplocampa testudinea, Monomorium pharaonis, Solenopsis geminata* e *Solenopsis invicta*.

Heterópteros (Heteroptera), por exemplo, *Acrosternum hilare, Blissus leucopterus, Cyrtopeltis notatus, Dysdercus cingulatus, Dysdercus intermedius, Eurygaster integriceps, Euschistus impictiventris, Leptoglossus phyllopus, Lygus lineolaris, Lygus pratensis, Nezara viridula, Piesma*

quadrata, Solubea insularis e *Thyanta perditor.*

Cigarrinhas (Homoptera), por exemplo, *Acyrtosiphon onobrychis, Adelges laricis, Aphidula nasturtii, Aphis fabae, Aphis forbesi, Aphis pomi, Aphis gossypii, Aphis grossulariae, Aphis schneideri, Aphis spiraecola, Aphis sambuci, Acyrtosiphon pisum, Aulacorthum solani, Bemisia argentifolii, Bemisia tabaci, Brachycaudus cardui, Brachycaudus helichrysi, Brachycaudus persicae, Brachycaudus prunicola, Brevicoryne brassicae, Capitophorus horni, Cerosipha gossypii, Chaetosiphon fragaefolii, Cryptomyzus ribis, Dreyfusia nordmannianae, Dreyfusia piceae, Dysaphis radicola, Dysaulacorthum pseudosolani, Dysaphis plantaginea, Dysaphis pýri, Empoasca fabae, Hyalopterus pruni, Hyperomyzus lactucae , Macrosiphum avenae, Macrosiphum euphorbiae, Macrosiphon rosae, Megoura viciae, Melanaphis pirarius, Metopolophium dirhodum, Myzodes persicae, Myzus ascalonicus, Myzus cerasi, Myzus persicae, Myzus varians, Nasonovia ribisnigri, Nilaparvata lugens, Pemphigus bursarius, Perkinsiella saccharicida, Phorodon humuli , Psylla mali, Psylla piri, Rhopalomyzus ascalonicus, Rhopalosiphum maidis, Rhopalosiphum padi, Rhopalosiphum insertum, Sappaphis mala, Sappaphis mali, Schizaphis graminum, Schizoneura lanuginosa, Sitobion avenae, Sogatella furcifera, Trialeurodes vaporariorum,*

Toxoptera aurantiiand e *Viteus vitifolii*.

Cupins (Isoptera), por exemplo, *Calotermes flavicollis, Leucotermes flavipes, Reticulitermes flavipes, Reticulitermes lucifugus* e *Termes natalensis*.

Ortópteros (Ortoptera), por exemplo, *Acheta domestica, Blatta orientalis, Blattella germanica, Forficula auricularia, Gryllotalpa gryllotalpa, Locusta migratoria, Melanoplus bivittatus, Melanoplus femurrubrum, Melanoplus mexicanus, Melanoplus sanguinipes, Melanoplus spretus, Nomadacris septemfasciata, Periplaneta americana, Schistocerca americana, Schistocerca peregrina, Stauronotus maroccanus* e *Tachycines asynamorus*.

Aracnídeos, como aracnídeos (Acarina), por exemplo, das famílias Argasidae, Ixodidae e Sarcoptidae, tais como *Amblyomma americanum, Amblyomma variegatum, Argas persicus, Boophilus annulatus, Boophilus decoloratus, Boophilus microplus, Dermacentor silvarum, Hyalomma truncatum, Ixodes ricinus, Ixodes rubicundus, Ornitodorus moubata, Otobius megnini, Dermanyssus gallinae, Psoroptes ovis, Rhipicephalus appendiculatus, Rhipicephalus evertsi, Sarcoptes scabiei, e Eriophyidae spp. tais como Aculus schlechtendali, Phyllocoptrata oleivora e Eriophyes sheldoni; Tarsonemidae spp. tais como Phytonemus pallidus e Polyphagotarsonemus latus; Tenuipalpidae spp. tais como*

Brevipalpus phoenicis; Tetranychidae spp. tais como Tetranychus cinnabarinus, Tetranychus kanzawai, Tetranychus pacificus, Tetranychus telarius e Tetranychus urticae, Panonychus ulmi, Panonychus citri, e *Oligonychus pratensis;* Sifonátera, por exemplo, *Xenopsylla cheopsis, Ceratophyllus spp.*

As composições e os compostos de fórmula I são úteis para o controle de nematóides, especialmente nemátoides parasitas de plantas tais como os nematóides de raiz do nó, *Meloidogyne hapla, Meloidogyne incognita, Meloidogyne javanica,* e outras espécies de Meloidogyne; nematóides formadores de cisto, *Globodera rostochiensis* e outras espécies Globodera; *Heterodera avenae, Heterodera glicines, Heterodera schachtii, Heterodera trifolii* e outras espécies de Heterodera; nematóides das galhas de sementes, espécies Anguina, nematóides foliares e de caule, espécies Aphelenchoides; nematóides "Sting", *Belonolaimus longicaudatus* e outras espécies Belonolaimus; nematóides de pinho, *Bursaphelenchus xylophilus* e outras espécies de Bursaphelenchus; nematóides de anel, espécies Criconema, espécies Criconemella, espécies Criconemoides, espécies Mesocriconema; nematoides de tronco e bulbo, *Ditylenchus destructor, Ditylenchus dipsaci* e outras espécies de Ditylenchus, espécies de nematóides furadores, espécies de

Dolichodorus; nematóides espiral, *Heliocotylenchus multicinctus* e outras espécies de Helicotylenchus, nematóides de bainha e "sheatoid", espécies Hemicycliophora e espécies Hemicriconemoides, espécies Hirshmanniella; nematóides "lança", espécies Hoploaimus; falsos nematóides "rootknot", espécies Nacobbus; nematóides agulhas, *Longidorus elongatus* e outras espécies Longidorus; nematóides pinos, espécies Paratilenchus; nematóides das lesões, *Pratylenchus neglectus, Pratylenchus penetrans, Pratylenchus curvitatus, Pratylenchus goodeyi* e outras espécies Pratylenchus; nematóides cavadores, *Radopholus similis* e outras espécies Radopholus; nematoides reniformes, *Rotylenchus robustus* e outras espécies *Rotylenchus, espécies Scutellonema;* nematóides "Stubby root", Trichodorus primitivus e outras espécies Trichodorus, espécies Paratrichodorus; nematóides dublês, *Tylenchorhynchus claytoni, Tylenchorhynchus dubius* e outras espécies Tylenchorhynchus; nematóides cítricos, espécies Tylenchulus; nematóides "Dagger", espécies Xiphinema, e outras espécies de nematóides parasitas de plantas.

Em uma forma de realização preferida da invenção, os compostos de fórmula I são utilizados para controlar insetos ou aracnídeos, em particular insetos das ordens Lepidoptera, Coleoptera, Homoptera, Thysanoptera e

aracnídeos da ordem Acarina. Os compostos da fórmula I de acordo com a presente invenção são particularmente úteis para controlar insetos da ordem Thysanoptera e Homoptera.

Os compostos de fórmula fórmula I ou suas composições pesticidas podem ser utilizados para proteger as plantas em crescimento e as culturas de ataque ou infestação por pragas invertebradas, especialmente os de insetos, aracnídeos ou acarídeos por contato da planta/cultura com uma quantidade pesticidamente efetiva de compostos de fórmula I. O termo "cultura" se refere tanto ao crescimento quanto as colheitas.

Os compostos de fórmula I podem ser convertidos nas formulações habituais, por exemplo soluções, emulsões, suspensões, pós, poeiras, pastas e grânulos. A forma de utilização depende do fim particular pretendido, em cada caso, deve-se garantir uma distribuição fina e uniforme do composto de acordo com a invenção.

As formulações são preparadas de uma maneira conhecida (ver por exemplo, os documentos US 3.060.084, EP-A 707445 (para concentrados líquidos), Browning, "Agglomeration", *Chemical Engineering*, 04 de dezembro de 1967, 147-48, "Perry´s Chemical Engineer´s Handbook", 4a ed., McGraw-Hill, New York, 1963, páginas 8-57 e documentos WO 91/13546, US 4.172.714, US 4.144.050, US 3.920.442, US

5.180.587, US 5.232.701, US 5.208.030, GB 2.095.558, US 3.299.566, Klingman, "Weed Control as a Science", John Wiley and Sons, Inc., New York, 1961, Hance e cols., "Weed Control Handbook", 8a Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1989 e Mollet, H., Grubemann, A., "Formulation technologie", Wiley VCH Verlag GmbH, Weinheim (Alemanha), 2001, 2. Knowles AD, "Chemistry and Technology of Agrochemical formulations", Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998 (ISBN 0-7514-0443-8), por exemplo, estendendo o composto ativo com auxiliares adequados para a formulação de agroquímicos, tais como solventes e/ou veículos, se desejado emulsificadores, agentes tensoativos e dispersantes, conservantes, agentes anti-espuma, agentes anti-congelamento, para a formulação de tratamento de sementes também opcionalmente corantes e/ou ligantes e/ou agentes de gelificação.

Exemplos de solventes adequados são a água, solventes aromáticos (por exemplo, produtos "Solvesso", xileno), parafinas (por exemplo, frações de óleo mineral), álcoois (por exemplo metanol, butanol, pentanol, álcool benzílico), cetonas (por exemplo, ciclohexanona , gama-butirolactona), pirrolidonas (N-metil-pirrolidona [NMP], N-octilpirrolidona [NOP]), acetatos (glicol diacetato), Glicóis, dimetilamidas de ácidos graxos, ácidos graxos e ésteres de ácidos graxos.

Em princípio, as misturas de solventes podem também ser utilizados.

Os emulsificantes adequados são emulsificantes não-iônicos e aniônicos (por exemplo, éteres de polioxietileno de álcool graxo, alquilsulfonatos e arilsulfonatos).

Exemplos de dispersantes são licores residuais de lignina-sulfito e metilcelulose.

Os tensoativos adequados utilizados são de metal alcalino, metal alcalino-terroso e sais de amônio dos ácido lignosulfônico, ácido naftalenossulfônico, ácido fenolsulfônico, dibutilnaftaleno-sulfônico, alquilarilsulfonatos, sulfatos de alquil, alquilsulfonatos, sulfatos de álcoois graxos, ácidos graxos e éteres de glicol de álcool sulfatado graxo, além disso, condensados de naftaleno sulfonado e derivados de naftaleno com formaldeído, condensados de naftaleno ou de ácido naftalenossulfônico com fenol e formaldeído, éter de polioxietileno octilfenol, isooctilfenol etóxilado, octil-fenol, nonilfenol, éteres de poliglicol de alquilfenol, éter poliglicólico de tributilfenila, tristearilfenil poliglicol éter, álcoois de poliéter alquilarila, álcool e óxido de etileno de álcool graxo condensado, óleo de rícino etóxilado, éteres alquílicos de polioxietileno, etóxilado polioxipropileno, lauril álcool poliglicol de éter acetal,

ésteres de sorbitol, licores residuais de lignosulfito e metilcelulose.

Substâncias que são adequados para a preparação de soluções diretamente pulverizáveis, emulsões, pastas ou dispersões em óleo são frações de óleos minerais de ponto de ebulição de médio a elevado, tais como querosene ou óleo diesel, além disso, óleos de alcatrão de carvão de origem vegetal ou animal, hidrocarbonetos alifáticos, cíclicos e aromáticos, por exemplo, tolueno, parafina, xileno, tetrahidronaftaleno, naftalenos alquilados ou os seus derivados, metanol, etanol, propanol, butanol, ciclohexanol, ciclo-hexanona, isoforona, solventes altamente polares, por exemplo sulfóxido de dimetila, N-metilpirrolidona ou água.

Também agentes de anti-congelamento, tais como glicerina, etileno glicol, propileno glicol e bactericidas, podem ser adicionado à formulação.

Agentes anti-espuma adequados são, por exemplo, agentes anti-espuma com base em agentes de silício ou estearato de magnésio.

Um conservante adequado é, por exemplo, diclorofena.

As formulações de tratamento de sementes podem compreender adicionalmente ligantes e, opcionalmente, corantes.

Ligantes podem ser adicionados para melhorar a aderência dos materiais ativos sobre as sementes após o tratamento. Os ligantes adequados são copolímeros de bloco de EO/PO tensoativos, mas também polivinilálcoois e polivinilpirrolidonas, poliacrilatos, polimetacrilatos, polibuteno, poliisobutilenos, poliestireno, polietilaeneaminas, polietilaeneamidas, polietilaeneiminas (Lupasol®, Polimin®), poliéteres, poliuretanos, polivinilacetato, tióis e copolímeros derivados destes polímeros.

Opcionalmente, também corantes podem ser incluídos na formulação. Corantes ou tinturas adequados para as formulações de tratamento de sementes são rodamina b, C.I. pigmento vermelho 112, C.I. solvente vermelho 1, pigmento azul 15:4, pigmento azul 15:3, pigmento azul 15:2, pigmento azul 15:1, pigmento azul 80, pigmento amarelo 1, pigmento amarelo 13, pigmento vermelho 112, pigmento vermelho 48:2, pigmento vermelho 48:1, pigmento vermelho 57:1, pigmento vermelho 53:1, pigmento laranja 43, pigmento laranja 34, pigmento laranja 5, pigmento verde 36, pigmento verde 7, pigmento branco 6, pigmento marrom 25, violeta básico 10 violeta básico 49, vermelho ácido 51, vermelho ácido 52, vermelho ácido 14, azul ácido 9, amarelo ácido 23, vermelho básico 10, vermelho básico 108.

Um exemplo de um agente de gelificação é carragenina (Satiagel®).

Os pós, os materiais para a propagação e os produtos polvilháveis podem ser preparados por mistura ou concomitantemente moagem das substâncias ativas com uma substância veicular sólida.

Grânulos, por exemplo, grânulos revestidos, grânulos impregnados e grânulos homogêneos, podem ser preparados através da ligação dos compostos ativos aos veículos sólidos.

Exemplos de veículos sólidos são terras minerais tais como géis de sílica, silicatos, talco, caulino, "attaclay", calcário, cal, giz, fuste, loess, argila, dolomite, terra de diatomáceas, sulfato de cálcio, sulfato de magnésio, óxido de magnésio, materiais sintéticos de terra, fertilizantes, tais como, por exemplo, sulfato de amônio, fosfato de amônio, nitrato de amônio, ureias, e produtos de origem vegetal, tais como farinha de cereais, farinha de casca de árvore, farinha de madeira e farinha de casca de noz, pó de celulose e outras substâncias veiculares sólidas.

Em geral, as formulações compreendem de 0,01-95% em peso, preferivelmente de 0,1 a 90%, em peso, do composto ativo (s). Neste caso, o composto ativo (s) é utilizado

numa pureza de 90% a 100 em peso, de preferência de 95% a 100%% em peso (de acordo com o espectro RMN).

Para fins de tratamento de sementes, as formulações respectivas podem ser diluídas de 2 a 10 vezes, originando preparações de concentração pronta para uso de 0,01 a 60% em peso de composto ativo, por peso, de preferência de 0,1 a 40% em peso.

Os compostos de fórmula I podem ser utilizados como tais, na forma das suas formulações ou o uso da mesma forma preparado, por exemplo, sob a forma de soluções diretamente pulverizáveis, pós, suspensões ou dispersões, emulsões, dispersões em óleo, pastas, produtos polvilháveis, materiais para disseminação, ou grânulos, por meio de pulverização, atomização, polvilhação, espalhamento ou vazamento. As formas de utilização dependem inteiramente dos fins pretendidos; que se destinam a garantir, em cada caso, a distribuição mais fina possível do composto ativo (s) de acordo com a invenção.

Formas de utilização aquosas podem ser preparados a partir de concentrados de emulsão, pastas ou pós molháveis (pós pulverizáveis, dispersões de óleo) por adição de água. Para preparar emulsões, pastas ou dispersões em óleo, as substâncias, como tal ou dissolvidaso em óleo ou solvente, podem ser homogeneizado em água, por meio de um agente

molhante, agente de pegajosidade, dispersante ou emulsionante. No entanto, é também possível preparar concentrados compostos de substância ativa, agente molhante, agente de pegajosidade, dispersante ou emulsionante e, se apropriado, solvente ou óleo, e tais concentrados são adequados para a diluição com água.

As concentrações de composto ativo na preparação pronta-a-usar pode ser variada dentro de intervalos amplos. Em geral, eles são de 0,0001 a 10%, de preferência de 0,01 a 1% em peso.

O(s) composto(s) ativo(s) pode(m) também ser utilizado(s) com sucesso no processo de ultra-baixo volume (ULV), sendo possível aplicar formulações compreendendo mais de 95% em peso de composto ativo, ou até mesmo para aplicar o composto ativo sem aditivos.

A seguir estão exemplos de formulações:

1. Produtos para diluição com água para aplicações foliares. Para o propósito de tratamento de sementes, tais produtos podem ser aplicados às sementes diluída ou não diluída.

A) concentrado solúvel em água, (SL, LS)

10 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são dissolvidos em 90 partes em peso de água ou um solvente solúvel em água. Como alternativa, agentes molhantes ou

outros auxiliares são adicionados. O(s) composto(s) ativo(s) dissolve-se por diluição com água, segundo o qual uma fórmulação com 10% (p/p) de composto(s) ativo(s) é obtido.

B) concentrado dispersível (DC)

20 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são dissolvidos em 70 partes em peso de ciclohexanona, com a adição de 10 partes em peso de um dispersante, por exemplo, polivinilpirrolidona. A diluição com água dá uma dispersão, em que uma formulação com 20% (p/p) de composto(s) ativo(s) é obtida.

C) concentrados emulsionáveis (EC)

15 partes em peso do do(s) composto(s) ativo(s) são dissolvidos em 7 partes em peso de xileno com adição de dodecilbenzenossulfonato de cálcio e etóxilato de óleo de rícino (em cada caso 5 partes por peso). A diluição com água dá uma emulsão, segundo o qual uma formulação com 15% (p/p) de composto(s) ativo(s) é obtido.

D) emulsões (EW, EO, ES)

25 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são dissolvidos em 35 partes em peso de xileno, com adição de dodecilbenzenossulfonato de cálcio e etóxilato de óleo de rícino (em cada caso, 5 partes por peso). Esta mistura é introduzida em 30 partes em peso de água, por meio de uma

máquina de emulsionante (por exemplo, Ultraturrax) e transformado em uma emulsão homogênea. A diluição com água dá uma emulsão, segundo o qual uma formulação com 25% (p/p) de composto(s) ativo(s) é obtido.

E) Suspensões (SC, OD, FS)

Em um moinho de bolas agitado, 20 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são pulverizados com adição de 10 partes em peso de agentes dispersantes, agentes molhantes e 70 partes em peso de água ou de um solvente orgânico para dar uma suspensão composto(s) ativo(s) fina. A diluição com água dá uma suspensão estável do composto(s) ativo(s), segundo o qual uma formulação com 20% (p/p) de composto(s) ativo(s) é obtida.

F) Grânulos dispersíveis em água e grânulos solúveis em água (WG, SG)

50 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são moídos finamente com adição de 50 partes em peso de agentes dispersantes e agentes molhantes e feito como grânulos dispersívis em água ou solúveis em água por meio de aparelhos técnicos (por exemplo, extrusão, pulverizador de torre, leito fluidizado). A diluição com água dá uma dispersão estável ou solução do composto ativo, através do qual uma formulação com 50% (p/p) de composto ativo é obtida.

G) pós dispersíveis em água e pós solúveis em água (WP, SP, SS, WS)

75 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são moídos num moinho de rotor-estator, com adição de 25 partes em peso de agentes dispersantes, agentes molhantes e gel de sílica. A diluição com água dá uma dispersão estável ou solução do composto ativo segundo o qual uma formulação com 75% (p/p) de composto ativo é obtida.

H) Formulação-Gel (GF)

Em um moinho de bolas agitado, 20 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são pulverizados com a adição de 10 partes em peso de agentes dispersantes, 1 parte em peso de um agente gelificante, agente molhante e 70 partes em peso de água ou de um solvente orgânico para dar uma suspensão de composto ativo fino. A diluição com água dá uma suspensão estável do composto ativo, segundo o qual uma formulação com 20% (p/p) de composto ativo (s) é obtida.

2. Produtos a serem aplicados sem diluição para aplicações foliares. Para fins de tratamento de sementes, esses produtos podem ser aplicados às sementes diluída ou não diluída.

I) pós polvilháveis (DP, DS)

5 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são moídos finamente e misturado intimamente com 95 partes em peso de

caulino finamente dividido. Isto dá um produto polvilhável tendo 5% (p/p) de substâncias ativas.

J) grânulos (GR, FG, GG, MG)

0,5 partes em peso do composto ativo é moído finamente e associado com 95,5 partes em peso de veículos, segundo o qual uma formulação com 0,5% (p/p) de substâncias ativas é obtida. Os métodos atuais são extrusão, secagem por pulverização ou o leito fluidizado. Isto dá grânulos a serem aplicados diretamente para uso foliar.

K) soluções ULV (UL)

10 partes em peso do(s) composto(s) ativo(s) são dissolvidos em 90 partes em peso de um solvente orgânico, por exemplo xileno. Isto dá um produto tendo 10% (p/p) de composto ativo, o qual é aplicado não diluído para uso foliar.

Os compostos de fórmula I são também adequados para o tratamento de materiais de propagação de plantas (tais como sementes). As formulações convencionais de tratamento de sementes incluem, por exemplo, concentrados FS fluido, soluções LS, pós para tratamento seco DS, pós dispersíveis em água para lama de tratamento WS, pó SS solúvel em água e emulsão ES e CE e formulação em gel GF. Estas formulações podem ser aplicadas à semente diluída ou não diluída. Aplicação às sementes é efetuado antes da sementeira, ou

diretamente sobre as sementes ou após a sua pré-germinação.

Em uma forma de realização preferida, uma formulação FS é utilizada para o tratamento de sementes. Tipicamente, uma formulação FS pode compreender de 1 a 800 g/l de ingrediente ativo, de 1 a 200 g/l de tensoativo, 0 a 200 g/l de agente anticongelante, de 0 a 400 g/l de agente ligante, de 0 a 200 g/l de um pigmento, e até 1 litro de um solvente, de preferência água.

Outras formulações FS preferidas de compostos de fórmula I para o tratamento de sementes incluem de 0,5 a 80 em peso do ingrediente ativo, de 0,05 a 5 em peso de um agente molhante, de 0,5 a 15 em peso de um agente de dispersão, de 0,1 a 5 em peso de um espessante, de 5 a 20 em peso de um agente anticongelante, de 0,1 a 2 em peso de um agente anti-espuma, de 1 a 20 em peso de um pigmento e/ou um corante, de 0 a 15 em peso de um adesivo/agente de adesão, de 0 a 75 em peso de um agente de enchimento/veículo e de 0,01 a 1 em peso de um conservante.

Vários tipos de óleos, agentes molhantes, adjuvantes, herbicidas, fungicidas, outros pesticidas ou bactericidas podem ser adicionados aos ingredientes ativos, se apropriado, apenas imediatamente antes da utilização (mistura em tanque). Estes agentes são geralmente misturados com os agentes de acordo com a invenção numa

proporção em peso de 1:10 a 10:1.

Os compostos de fórmula I são eficazes tanto através de contato (via solo, vidro, parede, mosquiteiro, tapete, partes de plantas ou partes de animais), e ingestão (isca, ou parte de planta).

Para uso contra formigas, cupins, vespas, moscas, mosquitos, grilos, ou baratas, compostos de fórmula I são utilizadas preferencialmente em uma composição de isca.

A isca pode ser uma preparação líquida, um sólido ou um semissólido (por exemplo, um gel). Iscas sólidas podem ser formadas em diversos tamanhos e formas adequadas para a respectiva aplicação, por exemplo, grânulos, blocos, bastões, discos. Iscas líquidas podem ser preenchidas em vários dispositivos para assegurar uma aplicação adequada, por exemplo, recipientes abertos, dispositivos de pulverização, fontes de gotículas, ou fontes de evaporação. Os géis podem ser baseados em matrizes aquosas ou oleosas e podem ser formuladas para necessidades particulares em termos de viscosidade, retenção de umidade, ou as características de envelhecimento.

A isca utilizada na composição é um produto, que é suficientemente atraente para estimular insetos, como formigas, cupins, vespas, moscas, mosquitos, grilos, etc. ou baratas a comê-lo. A capacidade de atração pode ser

manipulada usando estimulantes alimentares ou feromônios sexuais. Estimulantes alimentares são escolhidos, por exemplo, mas não exclusivamente, a partir de proteínas animais e/ou proteínas vegetais (carne, farinha de peixe ou de sangue, partes de insetos, gema de ovo), a partir de gorduras e óleos de origem animal e/ou de origem vegetal, especialmente mono-, oligo- ou poliorganosacarídeos, especialmente sacarose, lactose, frutose, dextrose, glicose, amido, pectina, ou mesmo melaço ou mel. Partes frescas ou em decomposição de frutas, culturas, plantas, animais, insetos ou partes específicas dos mesmos também podem servir como um estimulante de alimentação. Feromônios sexuais são conhecidos por serem mais inseto-específico. Feromônios específicos são descritos na literatura e são conhecidos dos técnicos no assunto.

As formulações de compostos de fórmula I como aerossóis (por exemplo, latas de spray), sprays de petróleo ou sprays de bomba são altamente adequados para o utilizador não profissional para controlar pragas tais como moscas, pulgas, carrapatos, mosquitos ou baratas. Receitas de aerossol são preferencialmente constituídos por composto ativo, solventes tais como álcoois inferiores (por exemplo, butanol, metanol, etanol, propanol), cetonas (por exemplo acetona, metil etil cetona), hidrocarbonetos de parafina

(por exemplo, querosenes) com intervalos de ebulição de cerca de 50 a 250 °C, dimetil-formamida, N-metilpirrolidona, dimetilsulfóxido, hidrocarbonetos aromáticos tais como tolueno, xileno, água, além disso, esses dispositivos auxiliares como emulsificantes, tais como monooleato de sorbitol, oleil etóxilato com 3 a 7 mol de óxido de etileno, etóxilato de álcool graxo, óleos de perfume, tais como óleos etéreos, ésteres de ácidos graxos de cadeia média com álcoois inferiores, compostos de carbonila aromáticos, se os estabilizadores adequados, tais como bezoato de sódio, tensoativos anfotéricos, epóxidos inferiores, ortoformato de trietila e, se necessário, propulsores tais como propano, butano, nitrogênio, ar comprimido, éter dimetílico, dióxido de carbono, óxido nitroso, ou misturas destes gases.

As formulações de pulverização de óleo diferem das receitas de aerossóis em que nenhum propulsor é utilizado.

Os compostos de fórmula I e os suas respectivas composições também podem ser utilizados em mata-mosquitos e fumigador, cartuchos de fumaça, vaporizador de placa ou vaporizadores de longo prazo e também em papéis de naftalina, em tapetes de naftalina ou outros sistemas de vaporizador independentes de calor.

Métodos para o controle de doenças infecciosas

transmitidas por insetos (por exemplo, malária, dengue e febre amarela, filariose linfática, e leishmaniose) com compostos de fórmula I e suas respectivas composições também compreendem o tratamento de superfícies de cabanas e casas, pulverização aérea e impregnação de cortinas, tendas, peças de vestuário, mosquiteiros, armadilhas para mosca tsé-tsé ou similares. Composições inseticidas para aplicação a fibras, tecido, malhas, não tecidos, materiais de rede ou de folhas e lonas de preferência compreendem uma mistura, incluindo o inseticida, opcionalmente, um repelente e pelo menos um aglutinante. Repelentes adequados são, por exemplo, N,N-dietil-meta-toluamida (DEET), N,N-dietilafenilaacetamide (DEPA), 1-(3-ciclohexan-1-il-carbonil)-2-metilapiperina, (2-hidroximetilaciclohexil) ácido acético lactona, 2-etil-1,3-hexandiol, indalona, metil neodecanamida (MNDA), um piretróide não utilizado para controle de insetos, tais como {(+/-)-3-alil-2-metil-4-oxociclopent-2-(+)-enil-(+)-trans-crisantemato (Esbiotrin), um repelente derivado de ou idêntico com extratos de plantas como o limoneno, eugenol, (+)-Eucamalol(1),(-)-l-epi-eucamalol ou extratos vegetais brutos de plantas, como o *Eucalyptus maculata*, *Vitex rotundifolia*, *Cymbopogan martinii*, *Cymbopogan citratus* (capim-limão), *Cymbopogan nartdus* (citronela). Os ligantes

adequados são selecionados, por exemplo, a partir de polímeros e copolímeros de ésteres de vinila de ácidos alifáticos (por exemplo, tal como vinila acetato e versatato de vinila), ésteres acrílico e metacrílicos de álcoois, tais como acrilato de butila, 2-etilahexilacrilato, e de acrilato de metila, hidrocarbonetos mono- e dietilênicos insaturados, tais como estireno, e dienos alifáticos, tais como o butadieno.

A impregnação de cortinas e mosquiteiros é feito de um modo geral, por imersão do material têxtil em emulsões ou dispersões dos compostos ativos de fórmula I ou pulverização dos mesmos nas redes.

Métodos que podem ser empregados para o tratamento de sementes são, em princípio, todos os tratamentos de sementes adequados e, especialmente, técnicas conhecidas na arte para revestir sementes, tais como revestimento de sementes (a peletização de sementes, por exemplo), a embebição das sementes e de sementes de pó (por exemplo, de embebição das sementes). Aqui, o termo "tratamento de sementes" refere-se a todos os métodos que trazem sementes e os compostos de fórmula I em contato uns com os outros, e "revestimento de sementes" se refere a métodos de tratamento de sementes que fornecem às sementes uma quantidade de compostos de fórmula I, isto é que gera uma

semente compreendendo o composto de fórmula I. Em princípio, o tratamento pode ser aplicado à semente, a qualquer momento a partir da colheita da semente para a sementeira das sementes. A semente pode ser tratada imediatamente antes, ou durante o plantio da semente, por exemplo, usando o método "plantador de caixa". No entanto, o tratamento pode também ser realizado de várias semanas ou meses, por exemplo, até 12 meses, antes de plantar as sementes, por exemplo, sob a forma de um tratamento de sementes, sem uma eficácia substancialmente reduzida sendo observada.

Vantajosamente, o tratamento é aplicado a uma semente não semeada. Tal como aqui utilizado, o termo "semente não semeada" pretende incluir sementes em qualquer período a partir da colheita da semente para a sementeira das sementes no solo com a finalidade de germinação e crescimento da planta.

Especificamente, um procedimento é seguido no tratamento no qual a semente é misturada em um dispositivo adequado, por exemplo, um dispositivo de mistura para parceiros de mistura sólidos ou sólido/líquido, com a quantidade desejada de formulações de tratamento de sementes, quer como tal ou após a diluição prévia com água, até que a composição seja distribuída uniformemente sobre a

semente. Se apropriado, isto é seguido por um passo de secagem.

Os compostos de fórmula I, ou os enantiômeros, diasteroisômeros ou sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos, são em particular também adequados para serem utilizado para combater parasitas dentro e em animais.

Um objeto da presente invenção é, portanto, também o de proporcionar novos métodos para controlar os parasitas dentro e em animais. Outro objeto da invenção é proporcionar pesticidas mais seguros para os animais. Outro objeto da invenção é, ainda mais, o de fornecer os pesticidas para animais que podem ser utilizados em doses mais baixas do que os pesticidas existentes. E outro objeto da invenção é o de proporcionar os pesticidas para animais, que fornecem um longo controle residual dos parasitas.

A invenção também se relaciona com composições que contêm uma quantidade parasiticidamente eficaz de compostos de fórmula I ou os enantiômeros ou sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos e um transportador aceitável, para o combate de parasitas em e em animais.

A presente invenção também fornece um método para o tratamento, controle, prevenção e proteção dos animais contra a infestação e infecção por parasitas, que compreende administrar oralmente, topicamente ou

parentericamente ou aplicar aos animais uma quantidade eficaz de um composto parasiticida de fórmula I ou enantiômeros ou sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos ou uma composição que o compreenda.

A presente invenção também proporciona um método não terapêutico para o tratamento, controle, prevenção e proteção dos animais contra a infestação e infecção por parasitas, que compreende a aplicação a um local de uma quantidade parasiticidamente eficaz de um composto de fórmula I ou enantiômeros ou sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos ou uma composição que o compreenda.

A invenção também proporciona um processo para a preparação de uma composição para o tratamento, controle, para prevenir ou proteger os animais contra a infestação ou infecção por parasitas que compreende uma quantidade parasiticidamente eficaz de um composto de fórmula I ou os enantiômeros ou sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos em uma composição que compreenda-os.

A invenção refere-se ainda à utilização de compostos de fórmula I para o tratamento, controle, para prevenir ou proteger os animais contra a infestação ou infecção por parasitas.

A invenção também se relaciona com a utilização de um composto de fórmula I, ou uma composição compreendendo o

mesmo, para a produção de um medicamento para o tratamento terapêutico de animais contra a infecção ou infestação por parasitas.

A atividade dos compostos contra pragas agrícolas não sugere a sua adequação para o controle de endo e ectoparasitas em e nos animais que requer, por exemplo, dosagens baixas, não eméticas, no caso de aplicação oral, compatibilidade, metabólica com o animal, baixa toxicidade, e um manuseamento seguro.

Surpreendentemente, foi agora descoberto que os compostos de fórmula I são adequados para o combate de endo e ectoparasitas em animais. Os compostos de fórmula I ou os enantiômeros, ou os sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos e composições que os compreendem são adequados para o controle sistêmico e/ou não sistêmico de ecto e/ou endoparasitas. Eles são ativos contra alguns ou todos os estágios de desenvolvimento.

Os compostos de fórmula I ou os enantiômeros, ou os sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos e composições que os compreendem são de preferência utilizados para controle e prevenção de infestações e infecções por animais, incluindo animais de sangue quente (incluindo humanos) e peixes. Eles são, por exemplo, adequados para controle e prevenção de infestações e infecções em

mamíferos, como bovinos, ovinos, suínos, camelos, veados, cavalos, porcos, aves, coelhos, cabras, cães e gatos, búfalos, burros, corças e renas, e também na pele de animais cobertos por pelos, como a marta, chinchila e guaxinim, aves como galinhas, gansos, perus e patos e peixes como o peixe fresco e de água salgada, como trutas, carpas e enguias.

Os compostos de fórmula I ou os enantiômeros, ou sais veterinariamente aceitáveis dos mesmos e composições que os compreendem são de preferência utilizados para controle e prevenção de infestações e infecções em animais domésticos, tais como cães ou gatos.

Infestações em animais de sangue quente e peixe incluem, mas não estão limitados a piolhos, piolhos mordedores, carrapatos, "nasal bots", "keds", moscas, moscas mordedoras, dípoteros muscóides, larvas de mosca miasítica, larvas de ácaros, borrachudos, mosquitos e pulgas.

Os compostos de fórmula I são especialmente úteis para combater ectoparasitas.

Os compostos de fórmula I são especialmente úteis para combater endoparasitas.

Os compostos de fórmula I são especialmente úteis para o combate de parasitas das ordens e espécies seguintes,

respectivamente:

Pulgas (Siphonaptera), por exemplo, *Ctenocephalides felis, Ctenocephalides canis, Xenopsylla cheopis, Pulex irritans, Tunga penetrans* e *Nosopsillus fasciatus*,

Baratas (Blattaria-Blattodea), por exemplo, *Blattella germanica, Blattella asahinae, Periplaneta americana, Periplaneta japonica, Periplaneta brunnea, Periplaneta fuligginosa, Periplaneta australasiae* e *Blatta orientalis*,

Moscas, mosquitos (Diptera), por exemplo, *Aedes aegypti, Aedes albopictus, Aedes vexans, Anastrepha ludens, Anopheles maculipennis, Anopheles crucians, Anopheles albimanus, Anopheles gambiae, Anopheles freeborni, Anopheles leucosphyrus, Anopheles minimus, Anopheles quadrimaculatus, Calliphora vicina, Chrysomya bezziana, Chrysomya hominivorax, Chrysomya macellaria, Chrysops discalis, Chrysops silacea, Chrysops atlanticus, Cochliomyia hominivorax, Cordylobia anthropophaga, Culicoides furens, Culex pipiens, Culex nigripalpus, Culex quinquefasciatus, Culex tarsalis, Culiseta inornata, Culiseta melanura, Dermatobia hominis, Fannia canicusolaris, Gasterophilus intestinalis, Glossina morsitans, Glossina palpalis, Glossina fuscipes, Glossina tachinoides, Haematobia irritans, Haplodiplosis equestris, Hippelates spp., Hypoderma lineata, Leptoconops torrens,*

Lucilia caprina, Lucilia cuprina, Lucilia sericata, Lycoria pectoralis, Mansonia spp., Musca domestica, Muscina stabulans, Oestrus ovis, Phlebotomus argentipes, Psorophora columbiae, Psorophora discolor, Prosimulium mixtum, Sarcophaga haemorrhoidalis, Sarcophaga sp., Simulium vittatum, Stomoxis calcitrans, Tabanus bovinus, Tabanus atratus, Tabanus lineola, e Tabanus similis.

Piolho (Phthiraptera), por exemplo, Pediculus humanus capitis, Pediculus humanus corporis, Pthirus pubis, Haematopinus eurysternus, Haematopinus suis, Linognathus vituli, Bovicola bovis, Menopon gallinae, Menacanthus straminaus e *Solenopotes capillatus.*

Carrapatos e ácaros parasitários (Parasitiformes): carrapatos (Ixodida), por exemplo, Ixodes scapularis, *Ixodes holocyclus, Ixodes pacificus, Rhiphicephalus sanguineus, Dermacentor andersoni, Dermacentor variabilis, Amblyomma americanum, Ambryomma maculatum, Ornitodorus hermsi, Ornitodorus turicata* e ácaros parasitas (Mesostigmata), por exemplo, *Ornitonyssus bacoti* e *Dermanyssus gallinae;* Actinedida (Prostigmata) e Acaridida (Astigmata), por exemplo *Acarapis spp., Cheyletiella spp., Ornitocheyletia 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., e *Laminosioptes spp.*

Insetos "Bugs" (Heteropterida): *Cimex lectularius, Cimex hemipterus, Reduvius senil, Triatoma spp., Rhodnius spp., Panstrongylus ssp.* e *Arilus critatus*; Anoplurida, por exemplo, *Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phtirus spp.* e *Solenopotes spp., Mallophagida* (subordens *Arnblycerina* e *Ischnocerina)*, por exemplo *Trimenopon spp., Menopon spp., Trinoton spp., Bovicola spp., Werneckiella spp., Lepikentron spp., Trichodectes spp.* e *Felicola spp.*

As lombrigas Nematoda:

Wipeworms e triquinose (Trichosyringida), por exemplo, *Trichinellidae (Trichinella spp.), (Trichuridae) Trichuris spp., Capillaria spp, Rhabditida, por exemplo, Rhabditis spp, Strongiloides spp., Helicephalobus spp, Strongylida, por ex Strongylus spp., Ancylostoma spp., Necator americanus, Bunostomum spp. (Ancilóstomo), Trichostrongylus spp., Haemonchus contortus, Ostertagia spp., Cooperia spp., Nematodirus spp., Dictyocaulus spp., Cyatostoma spp., Oesophagostomum spp., Stephanurus dentatus, Ollulanus spp., Chabertia spp., Stephanurus dentatus, Syngamus trachea, Ancylostoma spp., Uncinaria spp., Globocephalus spp.,*

Necator spp., Metastrongylus spp., Muellerius capillaris, Protostrongylus spp., Angiostrongylus spp., Parelaphostrongylus spp. Aleurostrongylus abstrusus, e *Dioctophyma renale.*

Lombrigas intestinais (Ascaridida), por exemplo *Ascaris lumbricoides, Ascaris suum, Ascaridia galli, Parascaris equorum, Enterobius vermicularis (oxiúro), Toxocara canis, Toxascaris leonina, Skrjabinema spp.,* e *Oxiuris equi.*

Camallanida, por exemplo, *Dracunculus medinensis* (verme da Guiné)

Spirurida, por exemplo, *Thelazia spp., Wuchereria spp., Brugia spp., Onchocerca spp., Dirofilari spp. a, Dipetalonema spp., Setaria spp., Elaeophora spp., Spirocerca lupi,* e *Habronema spp.*.

Vermes de cabeça espinhosas (Acantocephala), por exemplo, *Acantocephalus spp., Macracantorhynchus hirudinaceus* e Oncicola spp.

As planárias (Plathelminthes):

Vermes (Trematoda), por exemplo, *Faciola spp., Fascioloides magna, Paragonimus spp., Dicrocoelium spp., Fasciolopsis buski, Clonorchis sinensis, Schistosoma spp., Trichobilharzia spp., Alaria alata, Paragonimus spp., E Nanocietes spp.*

Cercomeromorpha, em particular, Cestoda (*tênias*), por exemplo, *Diphyllobotrium spp., Tenia spp., Echinococcus spp., Dipylidium caninum, Multiceps spp., Hymenolepis spp., Mesocestoides spp., Vampirolepis spp., Moniezia spp., Anoplocephala spp., Sirometra spp., Anoplocephala spp., e Hymenolepis spp.*

Aplicações:

A presente invenção relaciona-se com o uso terapêutico e não terapêutico dos compostos de fórmula I para controlar e/ou combater parasitas e/ou nos animais.

Os compostos de fórmula I podem ser utilizados para proteger os animais do ataque ou infestação por parasitas, contactando-os com uma quantidade eficaz parasiticamente de compostos de fórmula I. Como tal, o termo "em contato" inclui tanto o contato direto (aplicando os compostos/composições diretamente sobre o parasita, incluindo a aplicação diretamente sobre o animal ou excluindo a aplicação diretamente no animal, por exemplo, ao lócus desse último) e contato indireto (aplicando os compostos/composições no lócus do parasita). O contato do parasita através da aplicação ao seu locus é um exemplo de uma utilização não terapêutica dos compostos de fórmula I.

O termo "lócus", como definido acima, significa o habitat, suprimento alimentar, terreno de criação, área,

material ou ambiente em que um parasita está crescendo ou pode crescer fora do animal. Os compostos da invenção também podem ser aplicados, preventivamente, em locais em que a ocorrência de pragas ou parasitas é esperada.

Os compostos de fórmula I podem ser eficazes, tanto através de contato (via solo, vidro, parede, mosquiteiro, tapete, cobertores ou partes de animais) e ingestão (por exemplo, iscas).

A administração pode ser realizada profilaticamente, terapeuticamente ou não terapeuticamente.

A administração dos compostos ativos é efetuada diretamente ou sob a forma de preparações adequadas, por via oral, tópicamente/dermicamente ou parentericamente.

Em geral, uma "quantidade parasiticamente eficaz" significa a quantidade de ingrediente ativo necessária para alcançar um efeito observável sobre o crescimento, incluindo os efeitos de necrose, morte, retardo, prevenção e remoção, destruição, ou diminuição de ocorrência e atividade do organismo alvo. A quantidade parasiticamente eficaz pode variar para os vários compostos/composições utilizadas na invenção. A quantidade parasiticamente eficaz das composições irão variar conforme as condições prevalecentes tais como efeito parasiticida desejado e sua duração, espécies alvo, modo de aplicação e semelhantes.

Geralmente é favorável aplicar os compostos da fórmula I na quantidade total de 0,5 mg/kg a 100 mg/kg por dia, preferencialmente entre 1 mg/kg a 50 mg/kg por dia.

Formulações

Para administração oral da fórmula I a animais de sangue quente, os compostos podem ser formulados como alimentos para animais, pré-misturas de alimentos para animais, alimentos para animais concentrados, comprimidos, soluções, pastas, suspensões, poções, géis, pílulas, cápsulas e bolus. Além disso, os compostos de fórmula I podem ser administrados aos animais na sua água de beber. Para administração oral, a forma de dosagem escolhida deve fornecer o animal com 0,01 mg/kg a 100 mg/kg de peso corporal do animal por dia do composto de fórmula I, de preferência com de 0,5 mg/kg a 100 mg/kg de peso corporal do animal por dia.

Alternativamente, os compostos de fórmula I podem ser administrados a animais por via parentérica, por exemplo, por vias intraruminal, intramuscular, intravenosa ou injeção subcutânea. Os compostos de fórmula I podem ser dispersos ou dissolvidos num veículo fisiologicamente aceitável para a injeção subcutânea. Alternativamente, os compostos de fórmula I podem ser formulados em um implante para administração subcutânea. Além disso, o composto de

fórmula I pode ser administrado a animais por via transdérmica. Para administração parentérica, a forma de dosagem escolhida deve fornecer o animal com 0,01 mg/kg a 100 mg/kg de peso corporal do animal por dia do composto de fórmula I.

Os compostos de fórmula I podem também ser aplicados topicamente em animais sob a forma de mergulhos, poeiras, pós, colares, medalhões, sprays, shampoos, formulações *spot-on* e *pour-on* e formulações em pomadas ou emulsões óleo-em-água ou água-em-óleo. Para aplicação tópica, mergulhos e sprays geralmente contêm de 0,5 ppm a 5000 ppm e, de preferência, de 1 ppm a 3.000 ppm do composto de fórmula I. Além disso, os compostos de fórmula I podem ser formulados como etiquetas auriculares para animais, particularmente quadrúpedes, tais como gado bovino e ovino.

Preparações adequadas são:

- Soluções, tais como soluções orais, concentrados para administração oral após diluição, soluções para utilização sobre a pele ou nas cavidades corporais, com formulações *pour-on* ou géis;

- Emulsões e suspensões para administração oral ou por via dérmica; preparações semi-sólidas;

- Formulações em que o composto ativo é processado em uma base de unguento ou em uma base de emulsão óleo-em-água

ou água-em-óleo;

- Preparações sólidas tais como pós, pré-misturas ou concentrados, grânulos, precipitados, comprimidos, bolus, cápsulas, aerossóis e inalantes e artigos moldados contendo o composto ativo.

As composições adequadas para injeção são preparadas dissolvendo-se o ingrediente ativo num solvente adequado e, opcionalmente, com a adição de outros ingredientes, tais como ácidos, bases, sais tampão, conservantes, e solubilizantes. As soluções são filtradas e enchimento em condiões estéreis.

Os solventes adequados são fisiologicamente toleráveis solventes tais como água, alcanóis, tais como etanol, butanol, álcool benzílico, glicerina, propileno glicol, polietileno glicóis, N-metil-pirrolidona, 2-pirrolidona, e misturas dos mesmos.

Os compostos ativos podem, opcionalmente, ser dissolvidos em óleo vegetal fisiologicamente tolerável ou óleos sintéticos, que são adequados para injeção.

Solubilizantes adequados são solventes que promovem a dissolução do composto ativo no solvente principal ou previnem a sua precipitação. Exemplos são polivinilpirrolidona, álcool polivinílico, óleo de rícino polioxietilado, e éster de sorbitano polioxietilado.

Os conservantes adequados são o álcool benzílico, triclorobutanol, ésteres de ácido p-hidroxibenzóico, e n-butanol.

As soluções orais são administradas diretamente. Os concentrados são administrados por via oral após diluição prévia para a concentração de utilização. As soluções e concentrados orais são preparados de acordo com o estado da arte e como descritos acima para soluções injetáveis, não sendo necessário procedimentos de esterilização.

Soluções para uso na pele são gotejadas em, espalhadas em, esfregadas em, aspergidas sobre ou pulverizadas sobre a mesma.

Soluções para utilização sobre a pele são preparadas de acordo com o estado da arte e de acordo com o que está descrito acima para soluções injetáveis, não sendo necessários procedimentos de esterilização.

Outros solventes adequados são polipropileno glicol, fenil etanol, fenoxi etanol, ésteres tal como acetato de etila ou butila, benzoato de benzila, éteres tais como alquileneglicol alquiléter, por exemplo dipropilenoglicol monometílico, cetonas tais como acetona, metiletilcetona, hidrocarbonetos aromáticos, óleos vegetais e sintéticos, dimetilformamida, dimetilacetamida, transcutol, solcetal e propilencarbonato, e misturas dos mesmos.

Pode ser vantajoso adicionar-se espessantes durante a preparação. Espessantes adequados são espessantes inorgânicos tais como bentonitas, ácido silicílico coloidal, monoestearato de alumínio, espessantes orgânicos tais como derivados de celulose, álcoois polivinílicos e os seus copolímeros, acrilatos e metacrilatos.

Os géis são aplicados a ou espalhados sobre a pele ou introduzidos em cavidades do corpo. Os géis são preparados por tratamento de soluções que foram preparadas como descrito no caso das soluções para injeção com espessante suficiente para que resulte em um material transparente com uma consistência semelhante a pomada. Os espessantes utilizados são os agentes espessantes dados acima.

Formulações *pour-on* são vertidas ou pulverizadas sobre áreas limitadas da pele, o composto ativo penetrando na pele e no animal sistemicamente.

Formulações *pour-on* são preparadas por dissolução, suspensão ou emulsão do composto ativo em solventes adequados compatível com a pele ou misturas de solventes. Se necessário, outros auxiliares, como corantes, substâncias promotoras de bioabsorção, antioxidantes, estabilizadores de luz e adesivos são adicionados.

Os solventes adequados que são: água, alcanóis, glicóis, glicóis de polietileno, polipropileno glicóis,

glicerol, álcoois aromáticos, tais como álcool benzílico, feniletanol, fenoxietanol, os ésteres tais como acetato de etila, acetato de butila, benzoato de benzila, éteres tais como éteres de alquileno glicol alquil tal como éter dipropileno glicol, dietileno glicol mono-butil éter, cetonas tais como acetona, metil etil cetona, carbonatos cíclicos tais como carbonato de propileno, carbonato de etileno, aromáticos e/ou hidrocarbonetos alifáticos, vegetal ou óleos sintéticos, DMF, dimetilacetamida, N-alquilpirrolidonas tais como metilpirrolidona, N-butilpirrolidona ou n-octilpirrolidona, N-metilpirrolidona, 2-pirrolidona, 2,2-dimetil-4-oxi-metileno-1 ,3-dióxido-olano e formalglicerol.

Corantes adequados são todos os corantes autorizados para utilização em animais e que podem ser dissolvidos ou suspensos.

Promotores da absorção adequados são substâncias, por exemplo, DMSO, óleos de espalhamento, tais como iso-propila, miristato de dipropilenoglicol pelargonato, óleos de silicone e os seus copolímeros com poli-éteres, ésteres de ácidos graxos, triglicéridos e álcoois graxos.

Antioxidantes adequados são sulfitos ou metabissulfitos, como metabissulfito de potássio, ácido ascórbico, butilhidroxitolueno, butilhidroxianisol,

tocoferol.

Estabilizadores de luz adequados são, por exemplo, ácido novantisólico.

Os adesivos adequados são, por exemplo, derivados de celulose, derivados de amido, poliacrilatos, polímeros naturais, tais como alginatos e gelatina dura.

Emulsões podem ser administrados oralmente, dermicamente ou como injeções.

As emulsões são, quer do tipo água-em-óleo ou do tipo óleo-em-água.

Elas são preparadas por dissolução do composto ativo quer na fase hidrofóbica ou na fase de hidrofílica e homogeneização deste com o solvente da outra fase com a ajuda de emulsificantes adequados e, se necessário, outros auxiliares, como corantes, promotor da absorção de substâncias , conservantes, antioxidantes, estabilizadores de luz, substâncias aumentam a viscosidade.

Fases hidrofóbicas adequadas (óleos) são:

Parafinas líquidas, óleos de silicone, óleos vegetais naturais, tais como óleo de sésamo, óleo de amêndoa, óleo de rícino, triglicéridos sintéticos, tais como bigliceridéo caprílico/cáprico, mistura de triglicerídios com ácidos graxos vegetais de comprimento de cadeia C_8-C_{12} ou de outros ácidos graxos naturais especialmente selecionados, misturas

parciais de glicerídeos saturados ou insaturados de ácidos graxos, possivelmente também contendo grupos hidroxila, mono e diglicéridos dos ácidos graxos C_8-C_{10}, ésteres de ácidos graxos tais como estearato de etila, di-n-butirila adipato, hexila laurato, dipropileno perlargonate glicol, ésteres de um ácido graxo ramificado de comprimento de cadeia médio com alcoóis graxos saturados de comprimento de cadeia C_{16}-C_{18}, miristato de isopropila, palmitato de isopropila, ésteres de ácidos caprílico/cáprico de álcoois graxos saturados de comprimento de cadeia C_{12}-C_{18}, estearato de isopropila, oleato de oleílo, oleato de decila, oleato de etila, lactato de etila, ésteres cerosos de ácidos graxos sintéticos, tais como gordura de glândula coccígea de pato, ftalato de dibutila, diisopropil adipato, e misturas de ésteres relacionadas com estes últimos, os álcoois graxos tais como álcool isotridecílico, 2-octildodecanol, álcool, álcool oleílico cetilstearil e ácidos graxos tais como ácido oleico e misturas dos mesmos.

Fases hidrófilas adequadas são: água, álcoois, tais como propileno glicol, sorbitol, glicerol e misturas dos mesmos.

Os emulsificantes adequados são:

Tensoativos não-iônicos, por exemplo óleo de rícino polietóxilado, monooleato de sorbitano polietóxilado,

monoestearato de sorbitano, monoestearato de glicerol, estearato de polioxietila, éter poliglicólico de alquilfenol, tensoativos anfolíticos, tais como di-sódio de N-lauril-p-iminodipropionate ou lecitina.

Agentes tensoativos aniônicos, tais como lauril sulfato de sódio, sulfatos de éter de álcool graxo, mono/dialquil poliglicol éter de ácido ortofosfórico sal éster monoetanolamina, tensoativos cátion-ativos, tais como cloreto de cetiltrimetilamônio.

Auxiliares adicionais adequados são: as substâncias que aumentam a viscosidade e estabilizar a emulsão, tais como metilcelulose, carboximetilcelulose e outros derivados de amido e celulose, poliacrilatos, alginatos, gelatina, goma arábica, polivinilpirrolidona, álcool polivinílico, copolímeros de éter metilvinílico e maleicoanidrido, polietileno glicóis, ceras, ácido silícico coloidal ou misturas das substâncias mencionadas.

Suspensões podem ser administradas oralmente ou topicamente/dermicamente. Elas são preparadas por suspensão do composto ativo em um agente de suspensão, se for caso, com a adição de outras substâncias auxiliares tais como agentes molhantes, corantes, substâncias promotoras de bioabsorção, conservantes, antioxidantes, estabilizadores de luz.

Agentes de suspensão líquidos são todos os solventes e misturas de solventes homogêneos.

Agentes molhantes adequados (dispersantes) são os emulsificantes dados acima.

Outros auxiliares que podem ser mencionados são os indicados acima.

As preparações semi-sólidas podem ser administradas oralmente ou topicamente/dermicamente. Elas diferem das suspensões e emulsões descritas acima apenas pela sua viscosidade mais elevada.

Para a produção de preparações sólidas, o composto ativo é misturado com excipientes adequados, se apropriado, com a adição de auxiliares, e levados para a forma desejada.

Os excipientes adequados são todas as substâncias sólidas inertes toleráveis fisiologicamente. Os utilizados são substâncias inorgânicas e orgânicas. Substâncias inorgânicas são, por exemplo, cloreto de sódio, carbonatos tais como carbonato de cálcio, hidrogenocarbonatos, óxidos de alumínio, óxido de titânio, ácidos silícicos, terras argilosos, sílica precipitada ou coloidal, ou fosfatos. Substâncias orgânicas são, por exemplo, açúcar, celulose, produtos alimentares e alimentos tais como leite em pó, farinha de origem animal, farinha de grãos e amidos.

Auxiliares adequados são conservantes, antioxidantes e/ou corantes que foram mencionados acima.

Outros auxiliares adequados são lubrificantes e deslizantes tais como estearato de magnésio, ácido esteárico, talco, bentonitas, substâncias promotoras de desintegração tais como amido ou polivinilpirrolidona reticulada, ligantes tais como amido, polivinilpirrolidona gelatinosa ou lineares, e ligantes secos tais como celulose microcristalina.

As composições que podem ser utilizadas na invenção podem compreender geralmente de cerca de 0,001 a 95% do composto de fórmula I.

Preparações prontas-para-usar contêm os compostos que atuam contra os parasitas, de preferência ectoparasitas, em concentrações de 10 ppm a 80 por cento, em peso, preferivelmente de 0,1 a 65 por cento, em peso, mais preferivelmente de 1 a 50 por cento em peso, de preferência de 5 a 40 por cento em peso.

Preparações que são diluídas antes da utilização contêm os compostos que atuam contra ectoparasitas em concentrações de 0,5 a 90 por cento, em peso, de preferência de 1 a 50 por cento em peso.

Além disso, as preparações compreendem os compostos de fórmula I contra endoparasitas em concentrações de 10 ppm

até 2 por cento, em peso, de preferência de 0,05 a 0,9 por cento, em peso, muito especialmente de preferência de 0,005 a 0,25 por cento em peso.

As composições que compreendem os compostos de fórmula I podem ser aplicadas por via oral, parentérica ou tópica, respectivamente dermicamente. Por exemplo, opcionalmente a aplicação tópica é conduzida sob a forma de composto contendo artigos moldados tais como os coleiras, medalhões, etiquetas auriculares, bandas de fixação em partes do corpo, e tiras e folhas adesivas.

Geralmente é favorável se aplicar formulações sólidas que liberam compostos de fórmula I em quantidades totais de 10 mg/kg a 300 mg/kg, de preferência de 20 mg/kg a 200 mg/kg, mais preferivelmente de 25 mg/kg a 160 mg/kg de peso do corpo do animal tratado, no decurso de três semanas.

Para a preparação dos artigos moldados, plásticos termoplásticos e flexíveis, bem como elastômeros elastanos e termoplásticos são utilizados. Plásticos e elastômeros adequados são as resinas de polivinila, poliuretano, poliacrilato, resinas epoxi, celulose, derivados de celulose, poliamidas e poliéster que são suficientemente compatíveis com os compostos de fórmula I. Uma lista detalhada de plásticos e elastômeros, bem como os procedimentos de preparação para os artigos moldados é

dada, por exemplo, no documento WO 03/086075.

Os compostos ativos podem ser aplicados isoladamente ou em mistura com agentes sinérgicos ou com outros compostos ativos que atuam contra seres patogênicos endo e ectoparasitas.

Por exemplo, os compostos ativos de fórmula I podem ser aplicados em misturas com compostos sintéticos coccídeos adicionais, como polieterantibióticos Amprolium, Robenidin, Toltrazuril, Monensin, Salinomycin, Maduramicin, Lasalocid, Narasin ou Semduramicin ou com outros pesticidas, que são descritos na lista "M" abaixo.

As composições a serem usadas de acordo com a presente invenção para fins agrícolas ou veterinário também podem conter outros ingredientes ativos, por exemplo, outros pesticidas, inseticidas, herbicidas, fungicidas, bactericidas, fertilizantes, tais como nitrato de amônio, ureia, cloreto de potássio e fosfato, fitoentoxicantes e reguladores de crescimento de plantas seguros e agentes nematicidas. Estes ingredientes adicionais podem ser utilizados sequencialmente ou em combinação com as composições acima descritas, se apropriado, ou também adicionados apenas imediatamente antes da utilização (mistura em tanque). Por exemplo, a planta pode ser pulverizada com uma composição da presente invenção, antes

ou depois de ser tratada com outros ingredientes ativos.

Estes agentes podem ser misturados com os agentes utilizados de acordo com a invenção numa proporção em peso de 1:10 a 10:1. Uma mistura dos compostos de fórmula I ou das composições que os compreendem, sob a forma de utilização como pesticidas com outros pesticidas, resulta frequentemente em um pesticida com mais amplo espectro de ação.

A seguir ee apresentada uma lista M de pesticidas em conjunto com os quais os compostos de acordo com a invenção podem ser usados e com o qual os potenciais efeitos sinérgicos podem ser produzidos, e esta é destinada a ilustrar as combinações possíveis, mas não impor qualquer limitação:

M.1. Compostos organo(tio)fosfatados: acefato, azametifos, azinfos-etila, azinfos-metila, cloretoxifos, clorfenvinfos, clormefos, clorpirifos, clorpirifos-metila, Coumafos, cianofos, demeton-S-metil, diazinon, diclorvos/DDVP, dicrotofos, dimetoato, dimetilavinfos, disulfoton, EPN, etion, etoprofos, famfur, fenamifos, fenitrotion, fention, flupirazofos, fostiazato, heptenofos, isoxation, malation, mecarbam, metamidofos, metidation, mevinfos, monocrotofos, naled, ometoato, oxidemeton-metila, paration, paration-metil, fentoate, forato, fosalona,

fosmete, fosfamidion, foxima, pirimifos-metila, profenofos, propetanfos, protiofos, piraclofos, piridafention, quinalfos, sulfotep, tebupirimfos, temefos, terbufos, tetraclorvinfos, tiometon, triazofos, triclorfom, vamidotion.

M.2. Compostos de carbamato: aldicarbe, alanicarb, bendiocarbe, benfuracarbe, butocarboxim, butoxicarboxim, carbaril, carbofuran, carbosulfan, etiofencarb, fenobucarb, formetanato, furatiocarb, isoprocarb, metiocarbe, metomil, metolcarb, oxamil, pirimicarbe, propoxur, tiodicarbe, tiofanox, trimethacarb, XMC, xililcarb, triazamato.

M.3. Compostos piretróides: acrinatrina, aletrina, d-cis-trans aletrina, d-trans aletrina, bifentrina, bioaletrina, bioaletrina S-cilclopentenila, bioresmetrina, cicloprotrin, ciflutrina, beta-ciflutrina, cialotrina, lambda-cialotrina, faixa-cialotrina, cipermetrina, alfa-cipermetrina, beta-cipermetrina, theta-cipermetrina, zeta-cipermetrina, cifenotrin, deltametrin, empentrin, esfenvalerate, etofenprox, fenpropatrina, fenvalerato, flucitrinato, gripemetrin, taufluvalinato, halfenprox, imiprotrin, metoflutrin, permetrina, fenotrina, praletrina, proflutrin, piretrina (piretro), resmetrina, silafluofen, teflutrina, tetrametrina, tralometrin, transflutrina.

M.4. Imitadores hormonais: hidropreno e quinopreno e

metopreno, fenoxicarbe, piriproxifem.

M.5. compostos agonistas/antagonistas dos receptores nicotínicos: acetamipride, bensultap, hidrocloreto de cartap, clotianidina, dinotefuran, imidaclopride, tiametoxam, nitenpiram, nicotina, spinosad (agonista alostérico), espinetorame (agonista alostérico), tiaclopride, tiociclam, tiosultap de sódio e AKD1022.

M.6. Compostos antagonistas de canais de cloreto GABA fechados: clordano, endosulfan, gamma-HCH (lindano); etiprol, fipronil, pirafluprole e piriprol.

M.7. Ativadores de canais de cloreto: abamectina, benzoato de emamectina, milbemectina, lepimectin.

M.8. Compostos METI I: fenazaquin, fenpiroximato, pirimidifen, piridabem, tebufenpirad, tolfenpirad, flufenerim, rotenona.

M.9. Compostos METI II e III: acequinocil, fluaciprim, hidrametilanon.

M.10. Desacopladores da fosforilação oxidativa: clorfenapir, DNOC.

M.11. Inibidores da fosforilação oxidativa: azociclotin, cihexatin, diafentiurom, óxido de fenbutatin, propargite, tetradifon.

M.12. Disruptores de ecdise: ciromazina, cromafenozida, halofenozide, metóxifenozida, tebufenozide.

M.13. Sinergistas: butóxido de piperonila, tribufos.

M.14. Compostos bloqueadores dos canais de sódio: indoxacarbe, metaflumizona.

M.15. Fumigantes: brometo de metila, cloropicrina fluoreto de sulfurila.

M.16. Bloqueadores de alimentação seletivos: crilotie, pimetrozina, flonicamid.

M.17. Inibidores de crescimento de ácaros: clofentezina, hexitiazox, etoxazol.

M.18. Inibidores da síntese de quitina: buprofezina, bistrifluron, clorfluazuron, diflubenzuron, flucicloxuron, flufenoxuron, hexaflumuron, lufenuron, novaluron, noviflumuron, teflubenzurão, triflumuron.

M.19. Inibidores da biossíntese de lipídios: espirodiclofena, espiromesifena, espirotetramato.

M.20. Agonistas Octapaminérgicos: amitraz.

M.21. Moduladores de receptores de rianodina: flubendiamida,(R)-,(S)-3-cloro-N1-{2-metil-4-[1,2,2,2-tetrafluor-1-(trifluorometil)etil]fenil}-N2-(1-metil-2-metilsulfoniletil)ftalâmico(M21.1).

M.22. Compostos isoxazolina: (4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-trifluorometil-4,5-dihidroisoxazol-3-il]-2-,etil-N-piridina-2-ilmetil-benzamida (M22.1), 4,[5-(3,5-diclorofenil)-5-trifluorometil-4,5-dihidroisoxazol-3-il]-2-

metil-N-(2,2,2-trifluoroetil)-benzamida (M22.2), 4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-trifluorometil-4,5-di-hidroisoxazol-3-il]-2-metil-N-[(2,2,2-trifluoroetilcarbamoil)-metil]-benzamida (M22.3), ácido 4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-trifluormetil-4,5-dihidroisoxazol-3-il]naftaleno-1 carboxílico [(2,2,2-trifluoroetilcarbamoil)-metil]amida (M22.4) e 4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-trifluorometil-4,5-dihidroisoxazol-3-il]-N-[(metoximino)metil]-2-metilbenzamina (M22.5), 4-[5-(3-cloro-5-trifluorometilfenil)5-trifluorometil-4,5dihidroisoxazol-3-il]-2-metil-N-[(2,2,2-trifluoroetilcarbamoil)-metil]-benzamida (M22.6); ácido 4-[5-(3-cloro-5-trifluormetil-fenil)-5-trifluormeyil-4,5-dihidroisoxazol-3-il]-naftaleno-1-carboxílico [(2,2,2-trifluoro-etilcarbamoil)-metil]-amida (M22.7) e 5-[(3,5-dicloro-4-fluoro-fenil)-5-trifluorometil-4,5-dihidroisoxazol-3-il]-2-[1,2,4]triazol-1-il-benzonitrila (M22.8).

M.23. Compostos antranilamida: clorantraniliprole e ciantraniliprole, ácido 5-Bromo-2-(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carboxílico [4-ciano-2-(1-ciclopropil-etilcarbamoil)-6-metil-fenil]-amida (M23.1), ácido 5-bromo-2-(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carboxílico [2-cloro-4-ciano-6-(1-ciclopropil-etilcarbamoil)-fenil]-amida (M23.2), ácido 5-Bromo-2-(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-

3-carboxílico [2-bromo-4-ciano-6-(1-ciclopropil-etilcarbamoil)-fenil]-amida (M23.3), ácido 5-Bromo-2-(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carboxílico [2-bromo-4-cloro-6-(1-ciclopropil-etilcarbamoil)-fenil]-amida (M23.4), ácido 5-Bromo-2-(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carboxílico [2,4-dicloro-6-(1-ciclopropil-etilcarbamoil)-fenil]-amida (M23. 5), ácido 5-Bromo-2-(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carboxílico [4-cloro-2-(1-ciclopropil-etilcarbamoil)-6-metil-fenil]-amida (M23.6), éster metílico do ácido N'-(2-{[5-bromo-2-(3-cloro-priridin-2-il)-2H-pirazol-3-carbonil]-amino}-5-cloro-3-metil-benzoil)-hidrazinecarboxílico (M23.7), éster metílico do ácido N'-(2-{[5-bromo-2(3-cloro-piridin-2il)-2H-pirazol-3-carbonil]-amino}-5-cloro-3-metil-benzoil)-N'-metil-hidrazinecarboxílico (M23.8), éster metílico do ácido N'-(2-{[5-bromo-2(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carbonil]-amino}-5-cloro-3-metil-benzoil)-N,N'-dimetil-hidrazinecarboxílico (M23.9), éster metílico do ácido N'-(3,5-dibromo-2-{[5-bromo-2(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carbonil]-amino}-benzoil)hidrazinecarboxílico (M23.10), éster metílico do ácido N'-(3,5-dibromo-2-(3-cloro-piridin-2-il)-2H-pirazol-3-carbonil]-amino}benzoil-hidrazinecarboxílico (M23.11) e éster metílico do ácido N'-(3,5-dibromo-2-{[5-bromo-2(3-cloro-piridin-2-il)-2H-

pirazol-3-carbonil]-amino}benzoil)-N,N'-dimetil-hidrazinecarboxílico (M23.12).

M.24. Compostos malononitrila: 2-(2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentil)-2-(3,3,3-trifluoro-propil)malononitrila (CF_2H-CF_2-CF_2-CF_2-CH_2-$C(CN)_2$-CH_2-CH_2-CF_3) (M24.1) e 2-(2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentil)-2-(3,3,4,4,4-pentafluorobutil)-malonodinitrila (CF_2H-CF_2-CF_2-CF_2-CH_2-$C(CN)_2$-CH_2-CH_2-CF_2-CF_3) (M24.2).

M.25. Disruptores microbianos: *Bacillus thuringiensis subsp. Israelensi, Bacillus sphaericus, Bacillus thuringiensis subsp. Aizawai, Bacillus thuringiensis subsp.Kurstaki, Bacillus thuringiensis* subsp. Tenebrionis.

M.26. Compostos Aminofuranona:

4-{[(6-bromopirid-3-il)-metil](2-fluoroetil)-amino}furano-2(5H)-ona (M26.1),

4-{[(6-Fluoropirid-3-il)-metil](2,2-difluoroetila)-amino}furano-2(5H)-ona (M26.2),

4-{[(2-Cloro1,3-tiazolo-5-il)-metil](2-fluoroetil)-amino}furano-2(5H)-ona (M26.3),

4-{[(6-cloropirid-3-il)-metil](2-fluoroetil)-amino}furano-2(5H)-ona (M26.4),

4-{[(6-cloropirid-3-il)-metil](2,2-difluoroetila)-amino}furano-2(5H)-ona(M26.5),

4-{[(6-cloro-5-fluoropirid-3-il)-metil]-

(metil)amino}furano-2(5H)-ona (M26.6),

4-{[(5,6-dicloropirid-3-il)-metil](2-fluoroetil)-amino}furano-2(5H)-ona (M26.7),

4-{[(6-cloro-5-fluoropirid-3-il)-metil](ciclopropil)amino}furano-2 (5H)-ona (M26.8),

4-{[(6-cloropirid-3-il)-metil](ciclopropil)amino}furano-2(5H)-ona (M26.9) e

4-{[(6-cloropirid-3-il)-metil]-(metil)amino}furano-2(5H)-ona (M26.10).

M.27. Compostos variados: fosfeto de alumínio, amidoflumet, benclothiaz, benzoximato, bifenazato, bórax, bromopropilato, cianeto, cienopirafen, ciflumetofen, chinometionate, dicofol, fluoroacetato, fosfina, piridalil, pirifluquinazon, enxofre, compostos orgânicos de enxofre, tártaro emético, sulfoxaflor, N-R'-2,2-di-halo-1-R"ciclo-propanocarboxamida-2-(2,6-dicloro-α,α,α-trifluoro-p-tolil)hidrazona ou N-R'-2,2-di (R"')propionamida-2-(2,6-dicloro-a,a,a-trifluoro-p-tolil)-hidrazona, em que R' é metil ou etil, halo é cloro ou bromo, R" é hidrogênio ou metil e R'" é metil ou etil, 4-but-2-iniloxi-6-(3,5-dimetil-piperidin-1-il)-2-fluoro-pirimidina-(M27.1), ácido ciclopropanoacético e éster 1,1'-[(3S,4R,4aR,6S,6aS,12R.12aS,12bS)-4-[[(2-ciclopropilacetil)oxi]metil]-1,3,4,4a,5,6,6a,12,12a,12b-

decahidro-12-hidroxi-4,6a,12b-trimetil-11-oxo-9-(3-piridinil)-2H,11H-naftalo[2,1-b]pirano[3,4-e]piran-3,6-diil](M27.2) e 8-(2-ciclopropilmetoxi-4-trifluorometil-fenoxi)-3-(6-trifluorometil-piridazin-3-il)-3-aza-biciclo[3.2.1]octano (M27.3).

Os compostos comercialmente disponíveis do grupo M podem ser encontrados em "The Pesticide Manual", 14a Edição, British Crop Protection Council (2006).

Paraoxon e a sua preparação foram descritos em "Farm Chemicals Handbook", Volume 88, Meister Publishing Company, 2001. Flupirazofos foram descritos em "Pesticide Science" 54, 1988, p.237-243 e no documento US 4.822.779. AKD 1022 e a sua preparação foram descritos no documento US 6.300.348. Os compostos (M22.6) e (M22.7) são conhecidos a partir do documento WO 2009/126668 e o composto (M22.8) é conhecido do documento WO 2009/051956. As antranilamidas M23.1 a M23.6 foram descritas nos documentos WO 2008/72743 e WO 2008/72783, M23.7 a M23.12 no documento WO 2007/043677. A ftalamida (M21,1) é conhecida a partir do documento WO 2007/101540. O composto alquiniléter (M27.1) é descrito por exemplo no documento JP 2006/131529. Compostos orgânicos de enxofre foram descritos no documento WO 2007/060839. Os compostos de isoxazolina (M22,1) a (M22,5) foram descritos nos, por exemplo documentos WO 2005/085216, WO 2007/079162

e WO 2007/026965. Os compostos aminofuranona (M26,1) a (M26,10) têm sido descritas por exemplo. em WO 2007/115644. O derivado de piripiropene (M27,2) foram descritos nos, por exemplo documentos WO 2008/66153 e WO 2008/108491. O composto piridazina (M27,3) foi descrito no documento JP 2008/115155. Compostos malononitrila como aqueles (M24.1) e (M24.2) foram descritos nos documentos WO 2002/089579, WO 2002/090320, WO 2002/090321, WO 2004/006677, WO 2005/068423, WO 2005/068432 e WO 2005/063694.

A seguinte lista de substâncias ativas, em conjunção com as quais os compostos de acordo com a invenção podem ser usados, destina-se a ilustrar as combinações possíveis, mas não limitar as mesmas:

F.I) Inibidores de respiração:

FI-1) Inibidores do complexo III no sítio de QO (por exemplo, estrobilurinas):

Estrobilurinas: azoxistrobin, coumetoxistrobin, coumoxistrobin, dimoxistrobina, enestroburin, fluoxastrobina, cresoxime-metila, metominostrobin, orysastrobin, picoxistrobina, piraclostrobina, pirametostrobin, piraoxistrobin, piribencarb, triclopiricarb/clorodincarb, trifloxistrobina, éster metílico do ácido 2-[2-(2,5-dimetil-fenoximetil)-fenil]-3-metoxi-acrílico éster metil]-3-metóxi-ácido acrílico e 2(2-

(3-(2,6-diclorofenil)-1-metil-alilideneaminooximetila)-fenil)-2-metóxiimino-N-metil-acetamida.

Oxazolidinedionas e imidazolinonas: famoxadona, fenamidona.

FI-2) Inibidores do complexo II (carboxamidas, por exemplo):

Carboxanilidas: benodanil, bixafen, boscalide, carboxina, fenfuram, fenehexamida, fluopiram, flutolanil, furametpir, isopirazam, isotianil, mepronil, oxicarboxin, penflufen, pentiopirad, sedaxane, tecloftalam, thifluzamide, tiadinil, 2-amino-4-metil-tiazol-5-carboxanilida, N-(3',4',5'trifluorobifenil-2il)-3-difluorometil-1-metil-1H-pirazole-4--carboxamida, N-(4'-trifluorometiltiobifenila-2-il)-3difluorometil-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida e N-(2-(1,3,3-trimetil-butil)-fenil)-1,3-dimetil-5-fluoro-1H-pirazole-4 carboxamida.

FI-3) Inibidores do complexo III no sítio de Qi: ciazofamida, amisulbrom.

FI-4) Outros inibidores da respiração (complexo I, desacopladores):

Diflumetorim; tecnazen; ferimzone; ametoctradin; siltiofame.

Derivados nitrofenila: binapacril, dinobuton, dinocape, fluazinam, nitrthal-isopropil.

Compostos organometálicos: sais de fentina, tais como fentina-acetato, cloreto de fentina ou hidróxido de fentina.

F.II) Inibidores da biossíntese de esteróis (fungicidas SBI):

F.II-1) Inibidores demetilase C14 (DMI fungicidas, por exemplo, triazóis, imidazóis):

Triazóis: azaconazol, bitertanol, bromuconazol, ciproconazol, difenoconazol, diniconazol, diniconazol-M, epoxiconazol, fenbuconazol, fluquinconazol, flusilazol, flutriafol, hexaconazol, imibenconazol, ipconazol, metconazol, miclobutanil, paclobutrazol, penconazol, propiconazol, protioconazol, simeconazol, tebuconazol, tetraconazol, triadimefon, triadimenol, triticonazol, uniconazol.

Imidazóis: imazalil, pefurazoate, oxpoconazol, procloraz, triflumizol.

Pirimidinas, piridinas e piperazinas: fenarimol, nuarimol, pirifenox, triforina.

F.II-2) Inibidores da Delta 14-redutase (Aminas, morfolinas, por exemplo, piperidinas):

Morfolinas: aldimorf, dodemorf, dodemorf-acetato, fenpropimorf, tridemorf.

Piperidinas: fenpropidin, piperalin.

Espirocetalaminas: espiroxamina.

F.II-3) Os inibidores de 3-ceto redutase: hidroxianilidas: fenehexamida.

F.III) Inibidores da síntese de ácidos nucleicos:

F.III-1) RNA, síntese de DNA:

Fenilamidas ou acil fungicidas de aminoácidos: benalaxil, benalaxil-M, kiralaxil, metalaxil, metalaxil-M (mefenoxame), ofurace, oxadixila.

Isoxazóis e iosotiazolonas: himexazol, octhilinone.

F.III-2) Inibidores de DNA topisomerase: ácido oxolínico.

F.III-3) Metabolismo de nucleotídeos (por exemplo, adenosina-desaminase).

Hidroxi(2-amino)-pirimidinas: bupirimato.

F.IV) Inibidores da divisão celular e ou citoesqueleto:

F.IV-1) Inibidores de tubulina: benzimidazóis e tiofanatos: benomil, carbendazim, fuberidazol, tiabendazol, tiofanato-metila.

Triazolopirimidinas: 5-cloro-7 (4-metilpiperidin-1-il)-6-(2,4,6-trifluorfenil)-
[1,2,4]triazolo[1,5a]pirimidina.

F.IV-2) Outros inibidores de divisão celular:

Benzamidas e fenil acetamidas: dietofencarb,

etaboxame, pencicuron, fluopicolida, zoxamida.

F.IV-3) Inibidores de actina: benzofenonas: metrafenona.

F.V) Inibidores da síntese de aminoácidos e proteínas:

F.V-1) Inibidores da síntese de metionina (anilino-pirimidinas):

Anilino-pirimidinas: ciprodinil, mepanipirime, nitrapirina, pirimetanil.

F.V-2) Inibidores da síntese de proteínas (anilino-pirimidinas):

Antibióticos: blasticidina-S, casugamicina, casugamicina hidrocloreto de-hidratado, oxitetraciclina mildiomicin, estreptomicina, polioxine, validamicin A.

F.VI) Inibidores de transdução de sinal:

F.VI-1) Inibidores de MAP quinases e histidina quinases (por exemplo anilino-pirimidinas):

Dicarboximidas: fluoroimid, iprodione, procimidona, vinclozolina.

Fenilapirróis: fenpiclonil, fludioxonil.

F.VI-2) Inibidores da proteína G: quinolinas: quinoxifena.

F.VII) Inibidores de síntese de lipídicos e membrana:

F.VII-1) Inibidores de biossíntese de fosfolipídicos:

Compostos organofosforados: edifenfos e iprobenfos,

pirazofos.

Ditiolanes: isoprotiolano.

F.VII-2) Peroxidação lipídica:

Hidrocarbonetos aromáticos: diclorana, quintozeno, tecnazeno, tolclofos-metil, bifenil, cloroneb, etridiazole.

F.VII-3) Amidas de ácido carboxila (fungicidas CAA):

Amidas de ácidos mandélico ou cinâmico: dimetomorfe, flumorf, mandiproamid, pirimorf.

Carbamatos de valinamida: bentiavalicarbe, iprovalicarbe, piribencarb, valifenalate e N-(1-(1-(4-ciano-fenil)etanossulfonil)-but-2-il) éster de ácido-(4-fluorofenil)carbâmico.

F.VII-4) Compostos que afetam a permeabilidade da membrana celular e ácidos graxos:

Carbamatos: propamocarb, propamocarb-clorídrico.

F.VIII) Inibidores com ação em múltiplos pontos (*Multi site*):

F.VIII-1) Substâncias ativas inorgânicas: mistura Bordeaux, acetato de cobre, hidróxido de cobre, oxicloreto de cobre, sulfato básico de cobre, enxofre.

F.VIII-2) Tio- e ditio-carbamatos: ferbame, mancozebe, manebe, metame, methasulfocarb, metirame, propinebe, thiram, zinebe, zirame.

F.VIII-3) Compostos organoclorados (por exemplo,

ftalimidas, sulfamidas e cloronitrilas):

Anilazina, clorotalonil, captafol, captan, folpet, diclofluanida, diclorofeno, flusulfamida, hexaclorobenzeno, pentaclorfenol e seus sais, ftalida, tolilfluanida, N-(4-cloro-2-nitro-fenil)-N-etil-4-metil-benzeno-sulfonamida.

F.VIII-4) Guanidinas: guanidina, dodina, dodina em base livre, guazatina, guazatina-acetato, iminoctadina, triacetato de iminoctadina, iminoctadina-tris (albesilato).

F.VIII-5) Antraquinonas: ditianona.

F.IX) Inibidores da síntese da parede celular:

F.IX-1) Os inibidores da síntese de glicanas: validamicin, polioxina B.

F.IX-2) Inibidores da síntese de melanina: piroquilon, triciclazol, carpropamide, diciclomet, fenox-anil.

F.X) Indutores de defesa da planta:

FX-1) Via do ácido salicílico: acibenzolar-S-metila.

FX-2) Outros: probenazol, isotianil, tiadinil.

Fosfonatos: Fosetil, fosetil-alumínio, ácido fosforoso e os seus sais.

F.XI) Compostos com modo de ação desconhecido:

Bronopol, quinometinato, ciflufenamida, cimoxanil, dazomete, debacarb, diclomezina, difenzoquat, difenzoquat-metilsulfato, difenilaamin, flumetover, flusulfamida, flutianil, metasulfo-carb, oxincobre, proquinazida,

tebufloquin, tecloftalam, triazoxida, 2-butóxi-6-iodo-3-propilcromo-4-ona, N-(ciclopropilmetoxiimino-(6-difluoro-metóxi-2,3-difluoro-fenil)-metil)-2-fenil-acetamida, N'-(4-(4-cloro-3-trifluorometil-fenoxi)-2,5-dimetil-fenil)-N-etil-N-metil formamidina, N'(4-(4-fluoro-3-trifluorometil-fenoxi)-2,5-dimetil-fenil)-N-etil-N-metil formamidina, N'-(2-metil-5-trifluorometil-4-(3-trimetilsilanil-propoxi)-fenil)-N-etil-N-metil formamidina, N'-(5-difluorometil-2-metil-4-(3-trimetilsilanil-propoxi)-fenil)-N-etil-N-metil formamidina, ácido 2-{1-[2-(5-metil-3-trifluorometil-pirazol-1-il)-acetil]-piperidin-4-il}-tiazol-4-carboxílico metil-(1,2,3,4-tetrahidro-naftalen-1-il)-amida, ácido 2-{1-[2-(5-metil-3-trifluorometil-pirazol-1-il)-acetil]-piperidin-4-il}-tiazol-4-carboxílico metil-(R)-1,2,3,4-tetra-hidro-naftalen-1-il-amida, ácido acético metóxi-6-terc-butil-8-fluoro-2,3-dimetil-quinolin-4-il-éster e N-metil-2-{1-[(5-metil-3-trifluorometil-1H-pirazol-1-il)-acetil]-piperidin-4-il}-N-[(1 R) -1,2,3,4-tetrahidro-1-il]-4-tiazolecarboxamide, 3-[5-(4-cloro-fenil)-2,3-dimetil-isoxazolidin-3il]-piridina (pirisoxa-zole), 3-[5-(4-metil-fenil)-2,3-dimetil-isoxazolidin-3-il]-piridina, 5-amino-2-isopropil-3-oxo-4-orto-tolil-2,3-di-hidro-pirazol-1 ácido carbotioic S-alil éster, N-(6-metóxi-piridin-3-il) amida do ácido ciclopropanocarboxílico, 5-cloro-1(4,6-dimetóxi-

pirimidin-2-il)-2-metil-1H-benzoimidazol, 2-(4-cloro-fenil)-N-[4-(3,4-dimetóxi-fenil)-isoxazol-5-il]-2-prop-2-iniloxi-acetamida.

F.XI) Reguladores de crescimento:

Ácido abscísico, amidoclor, ancimidol, 6-benzilaminopurina, brassinolide, butralina, clormequat (cloreto de clormequat), cloreto de colina, ciclanilida, daminozide, dikegulac, dimetipina, 2,6-dimetilapuridina, ethephon, flumetralin, flurprimidol, flutiacet, forclorfenuron, ácido giberélico, inabenfide, indol-3-acético, ácido hidrazida maleica, mefluidida, de mepiquat (cloreto de mepiquat), ácido naftalenoacético, N 6 benziladenina, paclobutrazol, hexadiona (hexadiona de cálcio-), prohidrojasmon, thidiazuron, triapentenol, tributil fosforotritioato, 2,3,5 triácido iodo-benzóico, trinexapac-etila e uniconazol.

F.XII) Agentes de controle biológico:

Agentes de controle biológico antifúngicos: cepa de *Bacillus substilis* com NRRL No. B-21661 (por exemplo, RHAPSODY®, SERENADE® MAX e SERENADE® ASO, AgraQuest, Inc., EUA.), a cepa de *Bacillus pumilus* com NRRL No. B-30087 (por exemplo, SONATA® e BALADA® Plus, AgraQuest, Inc., EUA), *Ulocladium oudemansii* (por exemplo, o produto BOTRY-ZEN de BotriZen Ltd., Nova Zelândia), Chitosan (por exemplo,

ARMOUR-ZEN de BotriZen Ltd., Nova Zelândia).

As pragas invertebradas, isto é, artrópodes e nematóides, a planta, o solo ou a água em que a planta cresce podem ser contactados com o composto de fórmula I ou com a composição que o contenha, por qualquer método de aplicação conhecido na arte. Como tal, o termo "contactando" inclui tanto contato direto (aplicando os compostos/composições diretamente sobre as pragas invertebradas ou planta - tipicamente na folhagem, caule ou raízes da planta) e contato indireto (aplicando os compostos/composições no locus da praga invertebrada ou planta).

Além disso, as pragas invertebradas podem ser controladas por contato da praga alvo, sua fonte de alimento, habitat, seu viveiro ou seu locus com uma quantidade pesticidamente efetiva de compostos de fórmula I. Como tal, a aplicação pode ser efetuada antes ou depois da infecção do locus, cultivo ou colheitas pela praga.

O termo "locus", em geral, significa um habitat, local de reprodução, plantas cultivadas, material de propagação vegetal (sementes), solo, área, material, ou ambiente em que uma praga ou parasita está a crescer ou pode crescer.

Em geral, o termo "quantidade pesticidamente eficaz" significa a quantidade de ingrediente ativo necessária para

alcançar um efeito observável sobre o crescimento, incluindo os efeitos de necrose, morte, retardo, prevenção e remoção, destruição, ou, de outro modo, diminuir a ocorrência e atividade do organismo alvo. A quantidade pesticidamente efetiva pode variar para os vários compostos/composições utilizadas na invenção. Uma quantidade pesticidamente efetiva das composições também irá variar de acordo com as condições prevalecentes, tais como desejado efeito pesticida e duração do dito efeito, tempo, espécies alvo, locus, modo de aplicação, e semelhantes.

Os compostos de fórmula I e as composições que compreendem os referidos compostos podem ser usados para proteger matérias de madeira, tais como árvores, cercas, dormentes, etc, e construções tais como casas, depósitos, fábricas, mas também materiais de construção, mobiliário, couro, fibras, artigos de vinil, fios elétricos e cabos etc de formigas e/ou cupins, e para controlar formigas e cupins de causar danos às culturas ou ao ser humano (por exemplo, quando as pragas invadem as casas e equipamentos públicos). Os compostos de fórmula I são aplicados não somente na superfície do solo circundante, ou no solo embaixo do chão, a fim de proteger os materiais de madeira mas também pode ser aplicado a artigos pesados como superfícies de concreto

sob o piso, postos alcove, vigas, madeira compensada, móveis, etc., artigos de madeira, tais como painéis de partículas, placas de meio, etc, e artigos de vinila tais como fios elétricos revestidos, folhas de vinila, material de isolamento de calor, tais como espumas de estireno, etc. Em caso de aplicação contra formigas fazendo danos às culturas ou seres humanos, o controlador de formiga da presente invenção é aplicado às culturas ou ao solo circundante, ou é aplicada diretamente ao ninho das formigas ou semelhantes.

Os compostos de fórmula I também podem ser aplicados, preventivamente, em locais em que a ocorrência de pragas é esperada.

Os compostos de fórmula I podem também ser utilizados para proteger as plantas que crescem de ataque ou infestação por pragas por contato da planta com uma quantidade pesticidamente efetiva de compostos de fórmula I. Como tal, o termo "contactando a planta" inclui tanto o contato direto (aplicando os compostos/composições diretamente sobre as pragas e/ou vegetal - tipicamente o contato da haste, folhagem ou raízes da planta) e indireta (aplicando os compostos/composições para o locus da praga e/ou planta).

No caso do tratamento do solo ou de aplicação no lugar

de habitação das pragas ou ninho, a quantidade de ingrediente ativo varia de 0,0001 a 500 g por 100 m^2, de preferência de 0,001 a 20 g por 100 m^2.

As taxas de aplicação habituais na proteção de materiais são, por exemplo, a partir de 0,01 g até 1000 g de composto ativo por m^2 material tratado, desejavelmente a partir de 0,1 g para 50 g por m^2.

Composições inseticidas para utilização na impregnação de materiais contêm tipicamente de 0,001 a 95% em peso, preferivelmente de 0,1 a 45% em peso, e mais preferivelmente de 1 a 25% em peso de, pelo menos, um repelente e/ou inseticida.

Para utilização em composições de isca, o conteúdo típico de ingrediente ativo é de 0,001% em peso a 15% em peso, desejavelmente a partir de 0,001% em peso a 5% em peso de composto ativo.

Para utilização em composições de pulverização, o teor de ingrediente ativo é de 0,001 a 80%, em peso, de preferência de 0,01 a 50% em peso e mais preferencialmente de 0,01 a 15% em peso.

Para utilização em tratamento de colheita de plantas, a taxa de aplicação dos ingredientes ativos deste invento podem estar na faixa de 0,1 g a 4000 g por hectare, desejavelmente a partir de 5 g a 600 g por hectare, mais

desejavelmente a partir de 10 g até 300 g por hectare.

No tratamento de sementes, as taxas de aplicação dos ingredientes ativos são em geral a partir de 0,1 g a 10 kg por 100 kg de semente, de preferência de 1 g a 1 kg por 100 kg de sementes, em especial a partir de 1 g a 250 g por 100 kg de sementes, em especial a partir de 50 g até 150 g por 100 kg de semente.

A presente invenção será agora ilustrada em maior detalhe através dos seguintes exemplos que não se destinam a limitar a invenção aos mesmos.

I. Exemplo de Preparação:

Os produtos foram caracterizados por HPLC-MS (cromatografia Líquida de Alta Eficiência acoplada a Espectrometria de Massa). O HPLC foi efetuado utilizando uma coluna RP-18e analítica (Chromolith Speed ROD da Merck KGaA, Alemanha), que foi operada a 40 °C. Acetonitrila com 0,1% em volume de uma mistura de ácido trifluoroacético/água e 0,1% em volume de ácido trifluoroacético serviu como fase móvel; velocidade do fluxo: 1,8 ml/min e volume de injeção: 2 µL.

As seguintes notações, quando utilizadas no texto, são definidas como segue:

n-BuLi: n-butil-lítio;

m-CPBA: ácido m-cloroperoxibenzóico;

DCM: Diclorometano;

DIPEA: N,N-diisopropiletilamina;

DME: 1,2-dimetóxi etano;

DMP: Dess-Martin periodinano

DMSO: Dimetilsulfóxido;

EtOAc: acetato de etila;

EtOH: Etanol;

M: molar;

NCS: N-clorossuccinimida;

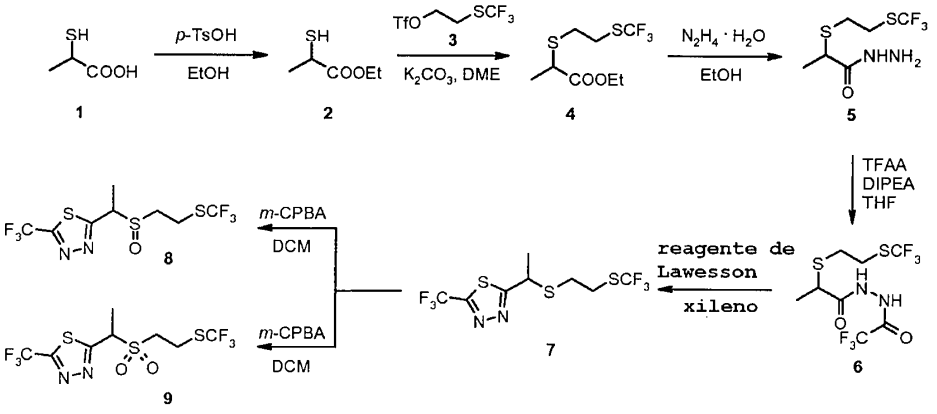
TFAA: anidrido trifluoroacético;

THF: tetrahidrofurano;

TLC: cromatografia em camada fina;

p-TsOH: ácido p-tolueno sulfônico;

Esquema para a preparação dos exemplos representativos 7, 8 e 9:



Preparação de 2-(trifluorometil)-5-{1-[2-

(trifluorometiltio)etiltio]etil}-1,3,4-tiadiazole (7, correspondente ao exemplo 11-1):

A uma solução agitada de hidrazida 6 (0,55 g, 1,59 mmol) em xileno (20 ml) foi adicionado reagente de Lawesson (0,64 g, 1,59 mmol) a temperatura ambiente. A mistura foi então agitada e aquecida a 120 °C durante 2 horas e em refluxo durante 18 h. O solvente foi removido por vácuo, o resíduo bruto foi purificado por cromatografia em coluna (sílica gel, eluente: hexano/EtOAc, gradiente 9:1 a 8:2) para dar o composto do título (0,28 g, 51%) como um óleo amarelo.

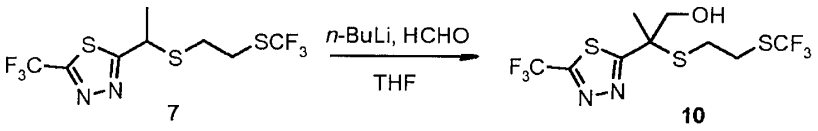
Preparação de 2-(trifluorometil)-5-{1-[2-(trifluorometiltio)etilsulfinil]etil}-1,3,4-tiadiazole (8, correspondente ao exemplo 11-3):

A uma solução agitada e resfriada (0 °C) de tiadiazole 7 (0,50 g, 1,46 mmol) em CH_2Cl_2 anidro (10 ml) foi adicionado m-CPBA (77%, 0,39 g, 1,75 mmol), e a mistura foi agitada a 0 °C durante 30 minutos sob atmosfera de nitrogênio. Mistura de reação foi quelada com $NaHCO_3$ (Sat. aq., 50 ml) e extraída com EtOAc (2x 100 ml). Camadas orgânicas combinadas foram lavadas com $NaHCO_3$ (Sat. aq., 3x50 ml), água (2x 100 ml), salmoura (2x50 ml), seca sobre sulfato de sódio e concentrada no vácuo. O resíduo foi purificado por cromatografia em coluna (sílica gel,

eluente: hexano/EtOAc, gradiente 1:1 a 3:7) para dar o composto do título (0,32 g, 61%) como óleo incolor.

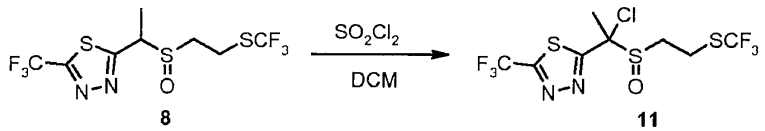
Preparação de 2-(trifluorometil)-5-{1-[2-(trifluorometiltio)etilsulfonil]-etil}-1,3,4-tiadiazole (9, corresponte ao exemplo 11-2):

A uma solução agitada e resfriada (0 °C) de tiadiazol 7 (0,50 g, 1,46 mmol) em CH_2Cl_2 anidro (15 ml) foi adicionado m-CPBA (77%, 0,98 g, 4,38 mmol), e a mistura foi agitada a temperatura ambiente durante 30 minutos sob atmosfera de nitrogênio. A mistura de reação foi quelada com $NaHCO_3$ saturado (100 ml) e extraida com EtOAc (2x 100 ml). Camadas orgânicas combinadas foram lavadas com Na-HCO_3 (sat. aq., 2x 150 ml), água (2x 100 ml), salmoura (2x50 ml), seca sobre sulfato de sódio e concentrada no vácuo. O resíduo foi purificado por cromatografia em coluna (sílica gel, eluente: hexano/EtOAc, gradiente 4:1 a 1:1) para dar o composto do título (0,36 g, 66%) como um sólido branco.



Preparação de 2-[5-(trifluorometil)-1,3,4-tiadiazol-2-il]-2-[2-(trifluorometiltio)etiltio]propan-1-ol (10, correspondente ao exemplo 11-4):

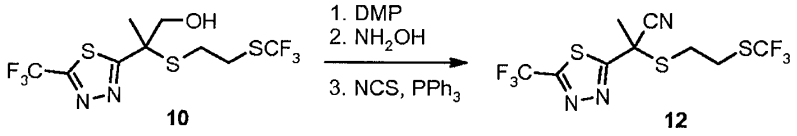
A uma solução agitada e resfriada (-78 °C) de tiadiazole 7 (2,0 g, 5,8 mmol) em THF (20 ml) foi adicionado n-BuLi (1,6 M em hexano, 4,0 ml, 6,4 mmol) gota a gota. A mistura reacional foi agitada a esta temperatura durante 30 min sob atmosfera de nitrogênio. Paraformaldeído (0,52 g, 17,523 mmol) em THF (20 ml) foi adicionado gota a gota e a mistura de reação foi lentamente aquecida até a temperatura ambiente. A agitação continuou durante mais 2 h. A mistura foi quelada com NH_4Cl (sat. aq., 150 ml), e extraída com EtOAc (2x 150 ml). Camadas orgânicas combinadas foram lavadas com água (2 x 100 ml), salmoura (2 x 50 ml), seca sobre sulfato de sódio e concentrada no vácuo. O resíduo foi purificado por cromatografia em coluna (sílica gel, eluente: hexano/EtOAc, gradiente 7:3 a 3:2) para dar o composto do título (1,3 g, 60%) como um óleo amarelo.



8 11

Preparação de 2-{1-cloro-1-[2-(trifluorometiltio)etilsulfinila]etil}-5-(trifluorometil)-1,3,4-tiadiazol (11, correspondente ao exemplo I-8):

A uma solução agitada e resfriada (0 °C) de tiadiazol 8 (0,50 g, 1,4 mmol) em CH_2Cl_2 anidro (5 ml) foi adicionado cloreto de sulfurila (0,11 ml, 1,4 mmol) sob nitrogênio. Mistura de reação foi quelada com $NaHCO_3$ (sat. aq., 30 ml) e extraída com EtOAc (2 x 50 mL). Camadas orgânicas combinadas foram lavadas com salmoura (2 x 50 ml), seca sobre sulfato de sódio e concentrada. O resíduo foi purificado por TLC preparativa (sílica gel, múltiplas corridas; fase móvel: hexano/EtOAc 9:1) para dar o composto do título (0,130 g, 23%) como um óleo amarelo claro.



Preparação de 2-(5-(trifluorometil)-1,3,4-tiadiazol-2-il)-2-(2-(trifluorometiltio)-etiltio)propanonitrila; (12, correspondente ao exemplo 11-9):

A uma solução agitada e resfriada (0 °C) de tiadiazol 10 (0,79 g, 2,1 mmol) em CH_2Cl_2 anidro (10 ml) foi adicionado periodinano de Dess-Martin (1,08 g, 2,5 mmol) sob nitrogênio. A agitação continuou a temperatura ambiente durante 2 h, a mistura de reação foi quelada com água (50 ml) e extraída com CH_2Cl_2 (3x50 ml). Camadas orgânicas combinadas foram lavadas com $NaHCO_3$ (sat. aq., 3

x 50 ml), salmoura (2 x 50 ml), seca sobre sulfato de sódio e concentrada no vácuo para dar o correspondente aldeído (0,65 g, 82%) como xarope amarelo.

A uma solução agitada sob nitrogênio do aldeído bruto (0,65 g, 1,8 mmol) em EtOH (7 ml) foi adicionado hidrocloreto de amina hidroxila (0,366 g, 5,3 mmol), seguido pela adição de acetato de sódio (0,435 g, 5,3 mmol) a temperatura ambiente. Após 12 h de agitação e remoção do solvente, água (50 ml) foi adicionado ao resíduo, e a mistura de reação foi extraída com EtOAc (3 x 50 ml). Camadas orgânicas combinadas foram lavadas com salmoura (2x50 ml), seca sobre sulfato de sódio e concentrada para produzir a oxima correspondente (0,54 g, 80%) como um sólido bege.

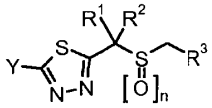
À solução agitada de trifenilfosfina (0,633 g, 2,4 mmol) e N-clorossuccinimida (0,322 g, 2,4 mmol) em CH_2Cl_2 (15 ml) foi adicionado a oxima bruta (0,71 g, 2,0 mmol) em CH_2Cl_2 (5 ml) temperatura ambiente sob atmosfera de nitrogênio. Após 30 minutos de agitação, a camada orgânica foi removida sob pressão reduzida, e o resíduo foi purificado por cromatografia em coluna (sílica gel, eluente: hexano/EtOAc 4:1) para dar o composto do título (0,240 g, 35%) como óleo amarelo claro.

Os procedimentos descritos nos exemplos de síntese

acima foram utilizados para preparar ainda outros compostos por modificação apropriada dos compostos de partida. Os compostos assim obtidos estão listados na tabela abaixo, juntamente com os dados físico-químicos.

Exemplos e Biologia:

exemplos e biologia



(I1-x)

Exemplo	Y	R^1	R^2	R^3	n	Dados físicos: [min] r.t.	/ m/z
I1-1	CF_3	H	Me	CH_2SCF_3	0	4.011	342.4
I1-2	CF_3	H	Me	CH_2SCF_3	2	3.481	374.4
I1-3	CF_3	H	Me	CH_2SCF_3	1	3.161	358.4
I1-4	CF_3	CH_2OH	Me	CH_2SCF_3	0	3.602	372.4
I1-5	CF_3	CH_2OH	Me	CH_2SCF_3	1	3.039	388.4
I1-6	CF_3	Cl	Me	CH_2SCF_3	2	3.811	408.8
I1-7	CF_3	CH_2OH	Me	CH_2SCF_3	2	3.307	404.4
I1-8	CF_3	Cl	Me	CH_2SCF_3	1	3.643	392.8
I1-9	CF_3	CN	Me	CH_2SCF_3	0	3.864	367.4
I1-10	C_2F_5	H	Me	CH_2SCF_3	0	4.273	392.4
I1-11	C_2F_5	H	Me	CH_2SCF_3	1	3.523	408.4
I1-12	C_2F_5	H	Me	CH_2SCF_3	2	3.781	424.4
I1-13	CF_3	H	Me	CH_2OCF_3	0	3.807	327.0
I1-14	CF_3	H	Me	CH_2OCF_3	1	2.959	342.9
I1-15	CF_3	H	Me	CH_2OCF_3	2	3.249	358.9

em que:

r.t.: é o tempo de retenção do HPLC em minutos;

m/z da [M+] dos picos.

II. Avaliação da atividade pesticida:

11,1 Atividade contra pulgão verde (*Myzus persicae*)

A avaliação do controle de pulgão verde (*Myzus persicae*), por meios sistêmicos da unidade de teste consistiu em placas de microtitulação de 96 poços contendo dieta artificial no estado líquido sob uma membrana artificial.

Os compostos foram formulados usando uma solução contendo 75% v/v de água, 25% v/v de DMSO. Diferentes concentrações de compostos formulados foram pipetados para a dieta de pulgões, utilizando uma pipeta automática, em duas replicatas. Após a aplicação, de 5 a 8 pulgões adultos foram colocados sobre a membrana artificial no interior dos poços da placa de microtitulação. Os pulgões foram então permitidos se alimentar da dieta de pulgão tratada e incubados a cerca de 23 + 1 °C e cerca de 50 + 5% de umidade relativa durante 3 dias. Mortalidade e fecundidade do pulgão foram, então, avaliadas visualmente.

Neste teste, os compostos 11-7, 11-11 e 11-14, respectivamente, a 2500 ppm mostrou 100% de mortalidade em comparação com controles não tratados.

II.2 Atividade contra pulgão-caupi (*Aphis craccivora*):

Os compostos ativos foram formulados em 50:50 acetona:água (v/v). A solução de ensaio foi preparada no dia da utilização.

Vasos de plantas de feijão-caupi colonizados com 100-

150 pulgões em vários estágios de desenvolvimento foram pulverizadas após a população da praga tinha sido contada. Redução da população foi monitorada após 24, 72 e 120 horas.

Neste teste, os compostos 11-2, 11-3, 11-6, 11-10, 11-11 e 11-12, respectivamente, a 500 ppm mostraram uma mortalidade de, pelo menos, 75% em comparação com controles não tratados.

11.3 Atividade contra pulgão de ervilhaca (*Megoura viciae*):

Os compostos ativos foram formulados em 1:3 (v/v) de DMSO:água com diferentes concentrações de compostos formulados.

Discos foliares de feijão foram colocados em placas de microtitulação preenchidas com 0,8% de ágar-ágar e 2,5 ppm de OPUS™. Os discos foliares foram pulverizados com 2,5 µL da solução de teste e de 5 a 8 pulgões adultos foram colocados nas placas de microtitulação os quais foram então fechadas e mantidas a 23 ± 1 °C e 50 ± 5% de umidade relativa sob luz fluorescente durante 6 dias. A mortalidade foi avaliada com base na vitais, pulgões reproduzidas. A mortalidade e a fecundidade do pulgão foram, então, avaliadas visualmente.

Neste teste, os compostos 11-1, 11-2, 11-3, 11-6, 11-

7, 11-11 e 11-12, respectivamente, a uma concentração da solução teste de 2500 mg/l mostraram 100% mortalidade em comparação com controles não tratados.

11.4 Atividade contra mosca-branca (*Bemisia argentifolii*, adulto):

Os compostos ativos foram formulados em ciclo-hexanona como uma solução 10.0000 ppm fornecida em tubos ABgene® Com 1,3 ml. Estes tubos foram inseridos em um pulverizador electrostático automatizado equipado com atomização do bocal e serviram como soluções estoque para o qual diluições mais baixas foram feitas em acetona 50%: água 50% (v/v). Um agente tensoativo não iônico (Kinetic®) foi incluído na solução a um volume de 0,01% (v/v).

Plantas de algodão no estágio cotiledonar (uma planta por vaso) foram pulverizadas por um pulverizador electrostático de planta automatizado equipado com um bico de pulverização de atomização. As plantas foram secas por pulverização na capela, em seguida, removidas do pulverizador. Cada vaso foi colocado num copo de plástico e de 10 a 12 adultos de mosca branca (aproximadamente 3-5 dias de idade) foram introduzidos. Os insetos foram coletados usando um aspirador e 0,6 cm de tubos de Tygon® não tóxicos (R-3603) conectado a uma barreira de ponteira de pipeta. A ponteira, contendo os insetos coletados, foi

então suavemente inserida no solo contendo a planta tratada, permitindo que os insetos possam arrastar-se para fora da ponteira para alcançar a folhagem para a alimentação. Copos foram cobertos com uma tampa filtrável reutilizável (malha da tela de poliéster PeCap de Tetko, Inc., de 150-micron).Plantas de teste foram mantidas numa sala de crescimento a 25 °C e umidade relativa 20-40%, durante 3 dias, evitando a exposição direta à luz fluorescente (fotoperíodo de 24 horas) para evitar a captura de calor no interior do copo. A mortalidade foi avaliada 3 dias após o tratamento, em comparação com plantas de controle não tratadas.

Neste teste, o composto 11-2 a 500 ppm e o composto 11-11 a 300 ppm mostraram uma mortalidade de, pelo menos, 75% em comparação com controles não tratados.

11.5 Atividade contra bicudo do algodoeiro (*Antonomus grandis*):

Os compostos foram formulados em 75:25 de água:DMSO (v/v).

Para avaliar o controle de bicudo do algodoeiro (*Antonomus grandis*) a unidade de teste consistiu de microplacas de titulação de 24 poços contendo uma dieta de insetos e 20-30 ovos de *A. grandis*. Diferentes concentrações de compostos da formulação foram pulverizados

sobre a dieta de insetos em 20 µL, usando um micro atomizador construído sob encomenda, em duas replicatas. Após a aplicação, as placas de microtitulação foram incubadas a 23 ± 1 °C e 50 ± 5% de umidade relativa durante 5 dias. Os ovos e a mortalidade larval foram, então, avaliados visualmente.

Neste teste, os compostos 11-1, 11-2, 11-3, 11-6, 11-7, 11-8, 11-10 e 11-11 e 11-12, respectivamente, a uma concentração da solução de ensaio de 2500 mg/l mostraram uma mortalidade de 100% de mortalidade em comparação com controles não tratados.

11.6 Atividade contra tripes Vanda/Orquídea (*Dichromotrips corbetti*):

Os compostos ativos foram formulados como uma solução de água:acetona 50:50 (v/v). Tensoativo (Alkamuls® EL 620 da Rhodia) foi adicionado a uma razão de 0,1% (vol/vol). Pétalas de orquídeas Vanda foram limpas, lavadas e secas ao ar antes da imersão. Pétalas foram mergulhadas na solução de teste durante 3 segundos, seco ao ar, colocado dentro de um plástico hermeticamente fechado e inoculados com 20 adultos. As pétalas tratadas foram mantidas no interior da sala de retenção a 28-29 °C e umidade relativa de 50-60%. A porcentagem de mortalidade foi registada após 72 horas.

Neste teste, os compostos 11-2 e 11-3,

respectivamente, em 500 ppm e o composto 11-11 a 300 ppm mostraram uma mortalidade de, pelo menos, 75% em comparação com controles não tratados.

11.7 Atividade contra *Brown plantopper* (*Nilaparvata lugens*):

Os compostos ativos foram formulados como uma solução de água:acetona 50:50 (v/v). Tensoativo (Alkamuls® EL 620 da Rhodia) foi adicionado a uma razão de 0,1% (vol/vol).

Plântulas de arroz foram limpas e lavadas 24 h antes da pulverização. Plântulas de arroz envasadas foram pulverizadas com solução teste de 5 ml, seco ao ar, colocados em gaiolas e inoculados com 10 adultos. As plantas de arroz tratadas foram mantidas a 28-29 °C e umidade relativa de 50-60%. Mortalidade percentual foi avaliada depois de 72 horas.

Neste teste, os compostos 11-3, 11-8, 11-11 e 11-12, respectivamente, a 500 ppm mostraram uma mortalidade de, pelo menos, 75% em comparação com controles não tratados.

11.8 Atividade contra mosca da fruta do mediterrâneo (*Ceratitis capitata*):

Os compostos ativos foram formulados em 1:3 (v/v) de DMSO:água.

Para avaliar o controle da mosca da fruta mediterrânea a unidade de teste consistiu em placas de microtitulação

contendo uma dieta de insetos e de 50 a 80 ovos de *C. capitata*.

Diferentes concentrações de compostos formulados foram pulverizados sobre a dieta de insetos em 5 µl, usando um micro atomizador personalizado, em duas replicatas. Após a aplicação, placas de microtitulação foram incubadas a 28 ± 1 °C e 80 ± 5% de umidade relativa durante 5 dias. Os ovos e a mortalidade larval foram então avaliados visualmente.

Neste ensaio, os ovos que tenham sido tratados com 2500 ppm de composto 11-2, 11-9 e 11-11, respectivamente mostraram uma mortalidade de, pelo menos, 50%.

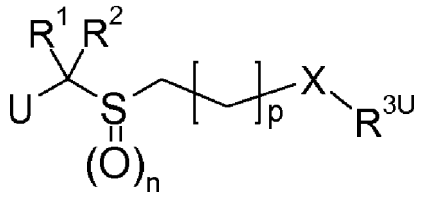
11.9 Atividade contra traça (*Plutella xilostella*):

Os compostos ativos foram formulados em acetona:água 50:50 e 0,1% (vol/vol) de tensoativo Alkamuls® EL 620. Um disco de folha de 6 centímetros de folha de couve foi mergulhado na solução de teste durante 3 segundos e deixou-se secar ao ar sobre uma placa de Petri revestida com papel de filtro umedecido. O disco de folha foi inoculado com 10 larvas de terceira estágio e mantida a 25-27 °C e uma umidade de 50-60% durante 3 dias. A mortalidade foi avaliada após 72 h de tratamento.

Neste teste, o composto 11-3 a uma concentração da solução de teste de 500 ppm mostrou uma mortalidade de, pelo menos, 75% em comparação com controles não tratados.

REIVINDICAÇÕES

1. Composto **caracterizado pelo** fato de ser da fórmula I, seus sais e N-óxidos dos mesmos



(I)

em que

X é O ou $S(=O)_m$;

m é 0, 1, 2;

n é 0, 1 ou 2;

p é 1 ou 2

R^{3U} é C_1-C_4-haloalquil, C_2-C_4-haloalquenil, C_3-C_4-haloalquinil, em que o halogênio é flúor;

U é um sistema de anel de 5- a 10- membros heteroaromático selecionado do grupo que consiste em piridina, pirimidina, pirazina, piridazina, 1,3,5-triazina, quinolina, 1H-indol, 1H-benzoimidazol, benzotiazol, benzooxazol, benzofurano, benzotiofeno, 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-1,2,3-triazol, 1H-tetrazol, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol, em que o anel heteroaromático pode ser substituído por um a quatro substituintes V,

V é, independentemente, halogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_1-C_6-alcoxi, C_1-C_6-haloalcoxi, $C(=O)R^4$, $C(=S)R^4$, $S(O)_oR^{10}$, CN, NO_2, um grupo amino que pode ser substituído ou dissubstituído por C_1-C_4-alquil ou por C_1-C_4-acila;

o é 0, 1 ou 2;

R^1, R^2 são, independentemente, um do outro selecionado dentre o grupo consistindo de hidrogênio, halogênio, C_1-C_6-alquil que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alquiltio, por C_1-C_4-alquilsulfinila , por C_1-C_6-alquilsulfonila, por CN, por $C(=O)R^4$, por $OC(=O)R^4$, por N-(C_1-C_3-alquil)$_2$, ou por OH, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil- C_1-C_3-alquil que pode ser substituído por átomo de halogênio(s), CN, $C(=O)R^7$, $C(=S)R^7$, $C(R^{11})=NR^{12}$, $C(R^{11})=N-OR^{12}$,

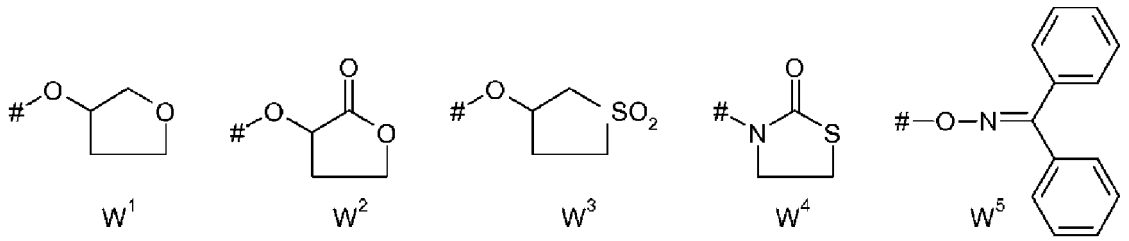
ou R^1 e R^2 podem formar em conjunto com o átomo de carbono para o qual eles estão ligados C_3-C_6-cicloalquil, $C=C(R^5)R^6$ ou $C=N-OR^5$;

R^4 é hidrogênio, hidroxila, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-halogenoalquil, C_1-C_6-alcoxi, NR^8R^9;

R^5 é hidrogênio ou C_1-C_4-alquil;

R^6 é C_1-C_6-alcoxi, NR^8R^9;

R^7 é hidrogênio, C_1-C_6-alquil, C_1-C_6-haloalquil, OH, C_1-C_6-alcoxi que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alcoxi-C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alquiltio, por C_1-C_4-alquilsulfinila, por C_1-C_6-alquilsulfonila, por C_3-C_6-cicloalquil, por tetra-hidrofurila, por fenila, piridila por [em que os dois últimos radicais mencionados podem ser substituídos por halogênio], por CN, por $C(=O)OR^{12}$ ou por $C(=O)NR^{11}R^{12}$, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquilxi que pode ser substituído por halogênio, C_3-C_6-cicloalquiltio que pode ser substituído por halogênio, NR^8R^9, C_1-C_6-alquiltio, $N(R^{13})C(=O)N(R^{14})R^{15}$ ou os seguintes grupos W^1 a W^5:



R^8 e R^9 formam, juntamente com o átomo de nitrogênio ao qual eles estão ligados, um grupo amino, ou mono-(C_1-C_6-alquil)amino ou di-(C_1-C_4-alquil)amino ou grupos amino C_2-C_5-cíclicos

R^{11}, R^{12}, R^{13}, R^{14} e R^{15} são, independentemente de cada um outro hidrogênio, C_1-C_6-alquil; e

R^{10} é C_1-C_6-alquil que pode ser substituído por halogênio, por C_1-C_4-alcoxi, por C_1-C_4-alcoxi-C_1-C_4-alcoxi, por $S(O)_O$-C_1-C_6-alquil, fenila ou por tetra-hidrofurila, C_2-C_6-alquenil, C_2-C_6-haloalquenil, C_2-C_6-alquinil, C_2-C_6-haloalquinil, C_3-C_6-cicloalquil, C_3-C_6-halocicloalquil, C_3-C_6-cicloalquil-C_1-C_3-alquil que pode ser substituído com átomos de halogênio.

2. Composto, de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado pelo** fato de que:

U é um sistema de anel de 5- a 10- membros monocíclico ou bicíclico heteroaromático selecionado dentre o grupo consistindo de: piridina, pirimidina, pirazina, piridazina, 1,3,5-triazina, quinolina, 1H-indol, 1H-benzoimidazol, benzotiazol, benzooxazol, benzofurano, benzotiofeno, 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-1 ,2,3-triazol, 1H-tetrazol, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol, em que o anel heteroaromático pode ser substituído por V;

p é 1

X é $S(=O)_m$ com m sendo 0, 1 ou 2

R^{3U} é C_1-C_3-fluoroalquil.

3. Composto, de acordo com as reivindicações 1 ou 2, **caracterizado pelo** fato de que:

U é um anel heteroaromático de 5 membros selecionado dentre o grupo consistindo de 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-1,2,3-triazol, 1H-tetrazole, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol, em que o anel heteroaromático é substituído por V;

p é 1

X é $S(=O)_m$ com m sendo 0 ou 1

R^{3U} é C_1-C_3-fluoroalquil.

4. Composto, de acordo com as reivindicações 1 a 3, **caracterizado pelo** fato de que:

U é um anel heteroaromático de 5 membros selecionado dentre o grupo consistindo de 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-1,2,3-triazol, 1H-tetrazol, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol, em que o anel heteroaromático é substituído por V e R^1, R^2 são, independentemente, a partir de cada, selecionados a partir do grupo consistindo em H, C_1-C_4-alquil, Cl, CN, C(O)-C_1-C_4-alquil, C(O)-C_1-C_4-alcóxi, $C(O)NH_2$, C(O)NHMe, C(O)NHEt, $C(O)NMe_2$, C(O)NMeEt, $C(O)NEt_2$, $C(S)NH_2$, C(S)NHMe, C(S)NHEt, $C(S)NMe_2$, C(S)NMeEt e $C(S)NEt_2$.

5. Composto, de acordo com as reivindicações 1 a 4, **caracterizado pelo** fato de que:

U é um anel heteroaromático de 5 membros selecionado dentre o grupo consistindo de 1H-pirrol, 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1H-imidazol, 1H-1,2,3-triazol, 1H-tetrazol, tiofeno, tiazol, 1,3,4-tiadiazol, furano, oxazol, isoxazol, 1,2,4-oxadiazol, 1,3,4-oxadiazol e em que o anel heteroaromático é substituído, pelo menos, por um dos grupos selecionados de halogênio, CN, terc-butila e CF_3.

6. Composto, de acordo com as reivindicações 1 a 5, **caracterizado pelo** fato de que:

U é um anel heteroaromático de 5 membros selecionado dentre o grupo consistindo de 1H-pirazol, 1H-1,2,4-triazol, 1,3,4-tiadiazol e em que o anel heteroaromático é substituído por um dos grupos selecionados de Cl, CN, terc-butila e CF_3;

R^1 é selecionado a partir do grupo consistindo de H, CN, C(=O)-Me, C(=O)-Et, C(=O)-NH_2, C(=O)-NMeH, C(=O)-NEtH, C(=O)-NMe_2, C(=O)-NMeEt, C(=O)-NEt_2, C(=S)-NH_2, C(=S)-NMeH, C(=S)-NEtH, C(=S)-NMe_2, C(=S)-NMeEt e C(=S)-NEt_2;

R^2 é selecionado a partir do grupo consistindo de H, Cl, Me e Et;

p é 1;

X é $S(=O)_m$ com m sendo 0 ou 1;

R^{3U} é CF_3 ou CHF_2.

7. Composição agrícola **caracterizada pelo** fato de que compreende, um ou mais de um composto da fórmula I, conforme definido pelas reivindicações 1 a 6, e, um ou mais de um veículo agricolamente aceitável.

8. Composição veterinária **caracterizada pelo** fato de que compreende, um ou mais de um composto da fórmula I, conforme definido pelas reivindicações 1 a 6, e, um ou mais de um veículo veterinariamente aceitável.

9. Uso de um composto conforme definido pelas reivindicações 1 a 6 **caracterizado pelo** fato de ser para combater pragas invertebradas.

10. Método para controlar pragas invertebradas **caracterizado pelo** fato de que o método compreende tratar as pragas, a sua oferta de alimentos, o seu habitat ou a sua base de procriação ou uma planta, de material de propagação de plantas, solo, da área, material ou meio ambiente no qual as pragas crescem ou podem crescer, ou o material, plantas, materiais de propagação de plantas, solos, superfícies ou espaços a proteger do ataque de pragas invertebradas ou infestação com um ou mais de um composto da fórmula I conforme definido pelas reivindicações de 1 a 6.

11. Método, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de ser para proteger as plantas do ataque ou infestação por pragas invertebradas, em que o método compreende tratar as plantas com um ou mais de um composto da fórmula I conforme definido pelas reivindicações de 1 a 6.

12. Método, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de ser para proteger o material de propagação vegetal e/ou as plantas que dele crescem do ataque ou infestação por pragas invertebradas, o método compreendendo o tratamento do material de propagação de plantas com um ou mais de um composto da fórmula I tal como definido pelas reivindicações de 1 a 6.

13. Uso de um composto da fórmula I conforme definido pelas reivindicações de 1 a 6 **caracterizado pelo** fato de ser para a preparação de um medicamento para aplicação terapêutica contra a infecção por parasitas.