

(19)



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS
ESPAÑA



(11) Número de publicación: **2 651 074**

(51) Int. Cl.:

A01N 43/56	(2006.01)	C07D 231/56	(2006.01)
A01N 43/58	(2006.01)	C07D 249/06	(2006.01)
A01N 43/647	(2006.01)	C07D 401/04	(2006.01)
A01N 43/76	(2006.01)	C07D 401/12	(2006.01)
A01N 43/78	(2006.01)	C07D 403/04	(2006.01)
A01N 43/82	(2006.01)	C07D 403/12	(2006.01)
C07D 231/06	(2006.01)	C07D 405/12	(2006.01)
C07D 231/22	(2006.01)	C07D 409/12	(2006.01)
C07D 231/40	(2006.01)	C07D 417/12	(2006.01)
C07D 231/52	(2006.01)	A01P 7/00	(2006.01)

(12)

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

(86) Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **30.09.2013 PCT/EP2013/070371**

(87) Fecha y número de publicación internacional: **10.04.2014 WO14053450**

(96) Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **30.09.2013 E 13770492 (0)**

(97) Fecha y número de publicación de la concesión europea: **06.09.2017 EP 2903440**

(54) Título: **Compuestos heterocíclicos como plaguicidas**

(30) Prioridad:

**02.10.2012 EP 12186946
05.06.2013 EP 13170565**

(45) Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
24.01.2018

(73) Titular/es:

**BAYER CROPSCIENCE AG (100.0%)
Alfred-Nobel-Strasse 50
40789 Monheim am Rhein, DE**

(72) Inventor/es:

**HEILMANN, EIKE KEVIN;
GREUL, JÖRG;
TRAUTWEIN, AXEL;
SCHWARZ, HANS-GEORG;
ADELT, ISABELLE;
ANDREE, ROLAND;
LÜMMEN, PETER;
HINK, MAIKE;
ADAMCZEWSKI, MARTIN;
DREWES, MARK;
BECKER, ANGELA;
VOERSTE, ARND;
GÖRGENS, ULRICH;
ILG, KERSTIN;
JANSEN, JOHANNES-RUDOLF y
PORTZ, DANIELA**

(74) Agente/Representante:

CARPINTERO LÓPEZ, Mario

ES 2 651 074 T3

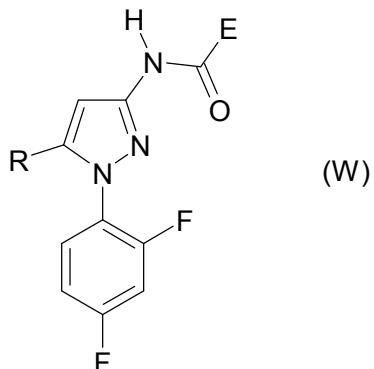
Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar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

DESCRIPCIÓN

Compuestos heterocíclicos como plaguicidas

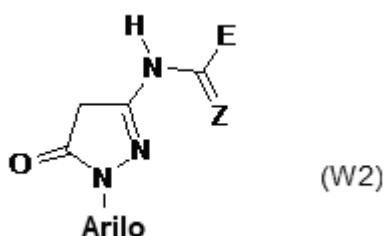
La presente solicitud se refiere al uso no terapéutico de compuestos heterocíclicos para combatir plagas animales, entre los que se cuentan artrópodos, insectos y nematodos, a nuevos compuestos heterocíclicos, a procedimientos para su preparación, así como a productos intermedios para la preparación de compuestos heterocíclicos.

5 Los compuestos heterocíclicos de las fórmulas (W) y (W2) son conocidos (véase para los compuestos de la fórmula (W) números de registro 1189645-25-7, 1189474-83-6, 1193202-69-5, 1172407-07-6, 1185158-40-0, 1185036-12-7, 1170986-74-9, 1193179-17-7, 1189458-68-1, 1189956-23-7, 1189915-26-1, 1170047-96-7). No se ha descrito un uso para estos compuestos.



10

Nº	R	E
W-1	etilo	2-(trifluorometil)fenilo
W-2	etilo	2-bromofenilo
W-3	etilo	2-fluorofenilo
W-4	etilo	3-metil-2-tienilo
W-5	etilo	2,5-dimetil-3-furanilo
W-6	H	2,4-dimetoxifenilo
W-7	H	2-(trifluorometil)fenilo
W-8	H	2,4-difluorofenilo
W-9	metilo	2-bromofenilo
W-10	etilo	2,4-difluorofenilo
W-11	H	2,5-dimetil-3-furanilo
W-12	metilo	2,4-dimetoxifenilo



Nº	Nº CAS	Referencia	Z	E	arilo
W2-1	74202-18-9	Research Disclosure 1980 , 193011, 165.)	O	2-nitrofenilo	3,4-dicloro-2,5-dimetoxifenilo
W2-2	612092-81-6	Bioorg. Med. Chem. 2003 , 2285.	S	2,4-dihidroxifenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-3	111243-44-8	JP 62-090657	O	2-cloro-4-aminofenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-4	101750-33-8	JP 60-218646	O	2-cloro-5-(acriolilamino)fenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-5	87756-39-6	DE 3226163	O	2-cloro-5-aminofenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-6	87756-30-7	DD159875	O	2-cloro-5-nitrofenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-7	86025-05-0	DE 3226163	O	2-cloro-5-(metacriolilamino)fenilo	2,4,6-triclorofenilo

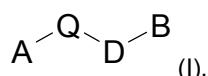
En el documento DE 10 2008 041216 A1 se desvelan indol-carboxamidas insecticidas.

Los derivados de pirazol-4-carboxamidas se conocen por el documento JP2010-202649. Los compuestos descritos en dicho documento presentan una acción bactericida contra bacterias que dañan las plantas. Los productos intermedios para su preparación se describen en el documento JP2010-202648.

Las composiciones para protección de cultivos, que también incluyen plaguicidas, tienen que cumplir muchas exigencias en relación con, por ejemplo, la eficacia, la persistencia y el espectro de su acción y posible uso. Las cuestiones de toxicidad, la capacidad de combinación con otros compuestos o adyuvantes de la formulación desempeñan un papel, como también lo hace la cuestión de los gastos que requiere la síntesis de un compuesto activo. Además, pueden aparecer resistencias. Por todos estos motivos, la búsqueda de nuevas composiciones para la protección de cultivos no se puede considerar completa y existen una necesidad constante de compuestos nuevos que tengan propiedades que, en comparación con los compuestos conocidos, sean mejores al menos en lo que respecta a aspectos individuales.

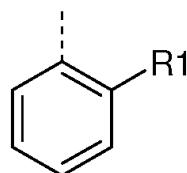
Era objetivo de la presente invención proporcionar compuestos que amplíen el espectro de los plaguicidas en distintos aspectos.

Este objeto, y objetos adicionales que no se indican explícitamente pero que se pueden discernir o derivar de las relaciones tratadas en el presente documento, mediante el uso no terapéutico de compuestos nuevos y conocidos de la fórmula (I)

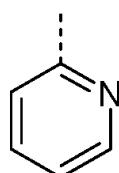


en donde

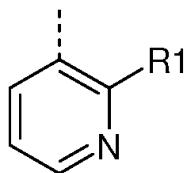
A representa un radical del grupo que consiste en



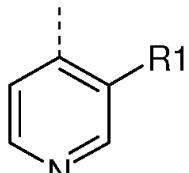
A-1



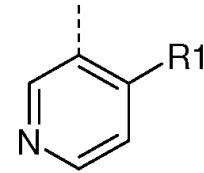
A-2



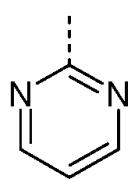
A-3



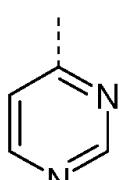
A-4



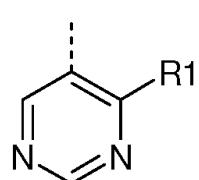
A-5



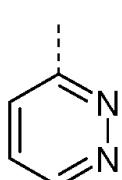
A-6



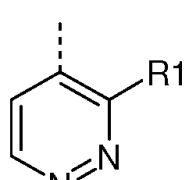
A-7



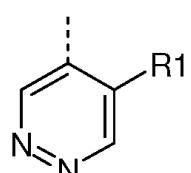
A-8



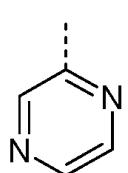
A-9



A-10



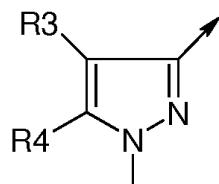
A-11



A-12

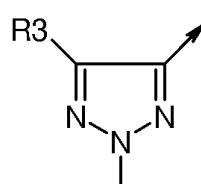
en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2,

Q representa un radical del grupo que consiste en

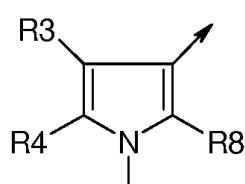


5

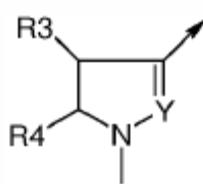
Q-1



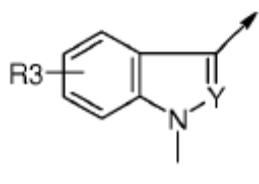
Q-2



Q-3



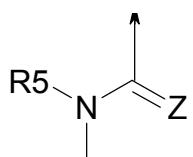
Q-4



Q-5

en donde el nitrógeno está ligado con el anillo A y la flecha significa en cada caso el enlace con D, y

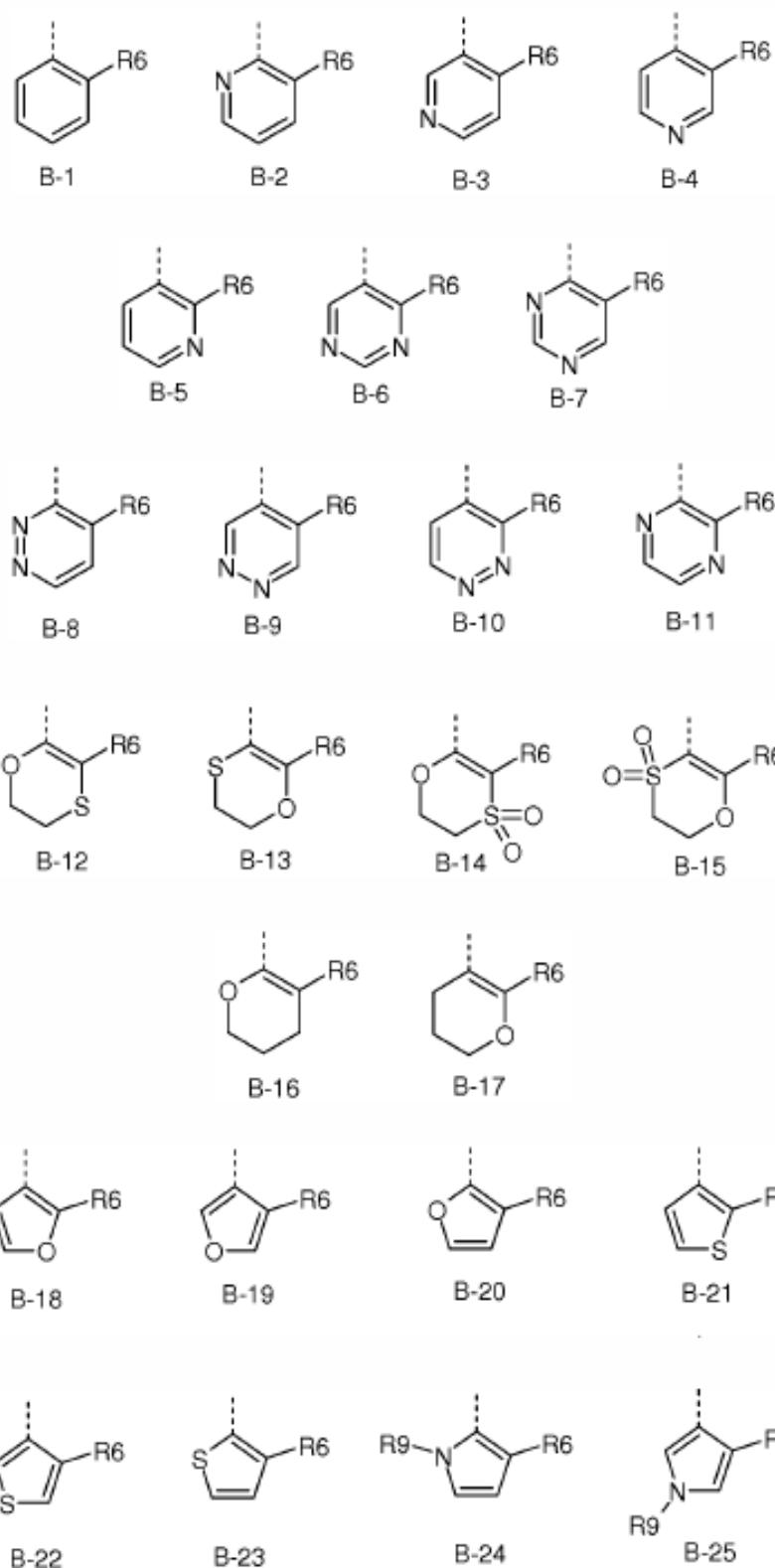
D representa el radical de la fórmula

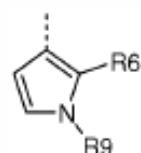


10

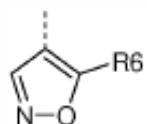
en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B,

B representa un radical del grupo que consiste en

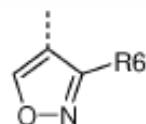




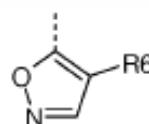
B-26



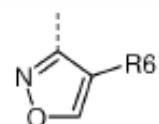
B-27



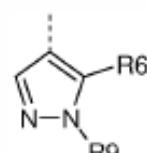
B-28



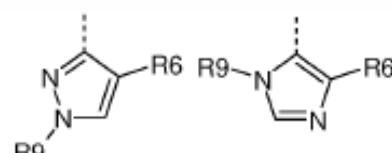
B-29



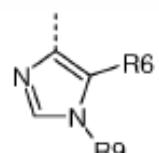
B-30



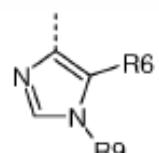
B-31



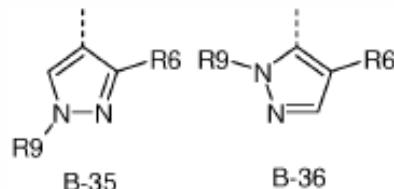
B-32



B-33

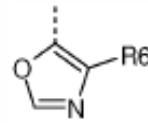


B-34

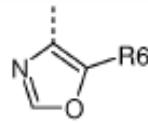


B-35

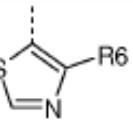
B-36



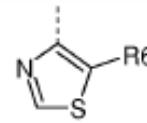
B-37



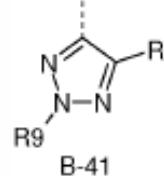
B-38



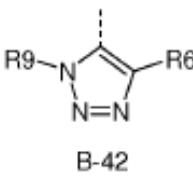
B-39



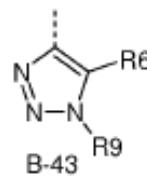
B-40



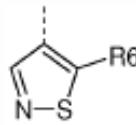
B-41



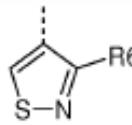
B-42



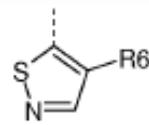
B-43



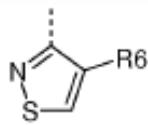
B-44



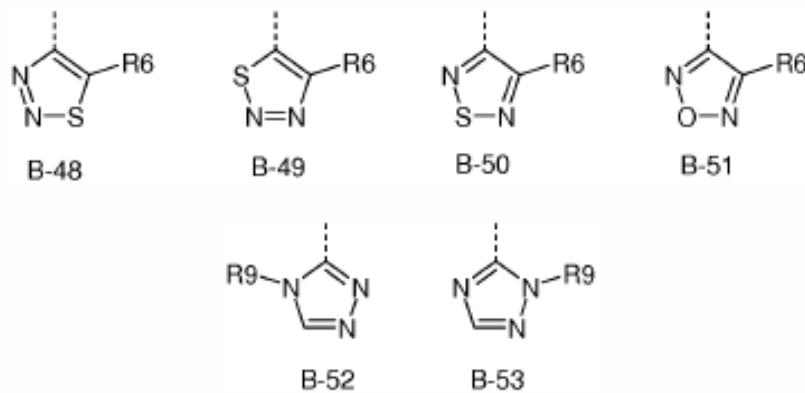
B-45



B-46



B-47



en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7,

Y en el resto Q-4 representa CR8 o representa nitrógeno,

Y en el resto Q-5 representa nitrógeno,

5 Z representa oxígeno o azufre,

R1 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquil C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquil C₁-C₆-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquil C₃-C₆-amino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, cicloalquil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquil C₃-C₆-tio, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-tiocarbonilamino, bicicloalquilo C₄-C₁₂, arilo, ariloxi, arilamino, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi, heteroarilamino y heteroariltio opcionalmente mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₁-C₆-tio, arilo, ariloxi, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi y heteroariltio,

20 R2 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalcoxi C₃-C₆, alquenil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquinil C₁-C₆-amino, di-(alquenil C₁-C₆)-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquil C₃-C₆-amino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquenil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquinil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-tiocarbonilamino, bicicloalquilo C₄-C₁₂, arilo, ariloxi, arilamino, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi, heteroarilamino y heteroariltio opcionalmente mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆ y alquenil C₁-C₆-tio, arilo, ariloxi, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi y heteroariltio,

35 R3 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

R4 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

40 R5 representa un radical de la serie hidrógeno, alquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquil C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo y haloalquilo C₁-C₆-sulfonilo o representa C(=O)-B,

R6 representa un radical de la serie hidrógeno (sólo en los radicales B-26, B-33, B-36 y B-42), halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, carboxilo, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆,

5 alquen C₃-C₆-oxi, alquin C₃-C₆-oxi, cicloalcoxi C₃-C₆, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, cicloalquil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquill C₁-C₆-tio, alquill C₁-C₆-sulfinito, alquill C₁-C₆-sulfonilo, alquill C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquillo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquill C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquill C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquill C₁-C₆-aminosulfonilo, alquill C₁-C₆-sulfonilamino, alquill C₁-C₆-carbonilamino, haloalquill C₁-C₆-carbonilamino, alquill C₁-C₆-tiocarbonilamino, bicicloalquilo C₄-C₁₂, arilo, ariloxi, heteroarilo, heteroariloxi opcionalmente mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆ y alquill C₁-C₆-tio,

10 R7 representa un radical de la serie halógeno, nitro, ciano, amino, hidroxi, alquillo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆, alquen C₃-C₆-oxi, alquin C₃-C₆-oxi, cicloalcoxi C₃-C₆, alquill C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquill C₁-C₆-sulfoniloxi, alquill C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, cicloalquill C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquill C₁-C₆-sulfonilamino, alquill C₁-C₆-carbonilamino, haloalquill C₁-C₆-carbonilamino, alquill C₁-C₆-tiocarbonilamino, bicicloalquilo C₄-C₁₂, arilo, ariloxi, heteroarilo, heteroariloxi, opcionalmente mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alquillo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆ y alquill C₁-C₆-tio,

15 R8 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquillo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquillo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

20 R9 representa un radical de la serie hidrógeno, alquillo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo, alquenilo C₃-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquillo C₁-C₆, ciano-alquillo C₁-C₆, alquill C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquill C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquillo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquill C₁-C₆-sulfonilo y haloalquill C₁-C₆-sufonilo,

25 m representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1 los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes y

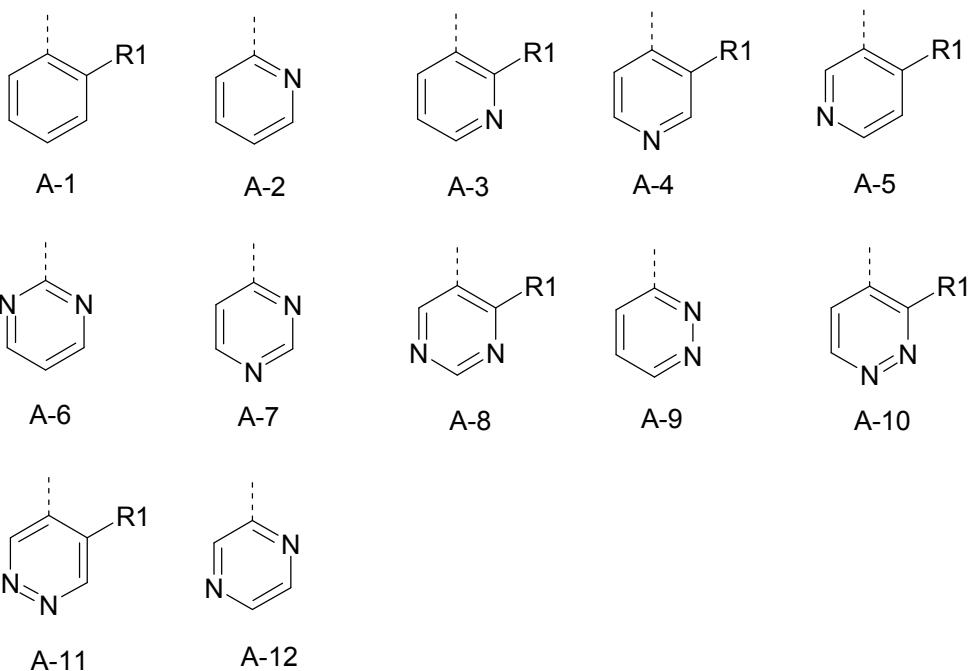
30 n representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1 los radicales R7 pueden ser iguales o diferentes, para combatir plagas animales.

35 Se ha descubierto que los compuestos de la fórmula (I) conocidos y los nuevos poseen propiedades biológicas muy marcadas y son adecuados especialmente para combatir de modo no terapéutico plagas animales, en especial insectos, arácnidos y nematodos, que se presentan en la agricultura, en la silvicultura, en la protección de existencias y de materiales almacenados, así como en el sector de la higiene.

Cuando sea adecuado, los compuestos de la fórmula general (I) pueden, en función de la naturaleza de los sustituyentes, estar en forma de isómeros geométricos y/u opcionalmente activos o las correspondientes mezclas de isómeros de composición variable. La invención se refiere tanto al uso de los isómeros puros como también al de las mezclas isoméricas.

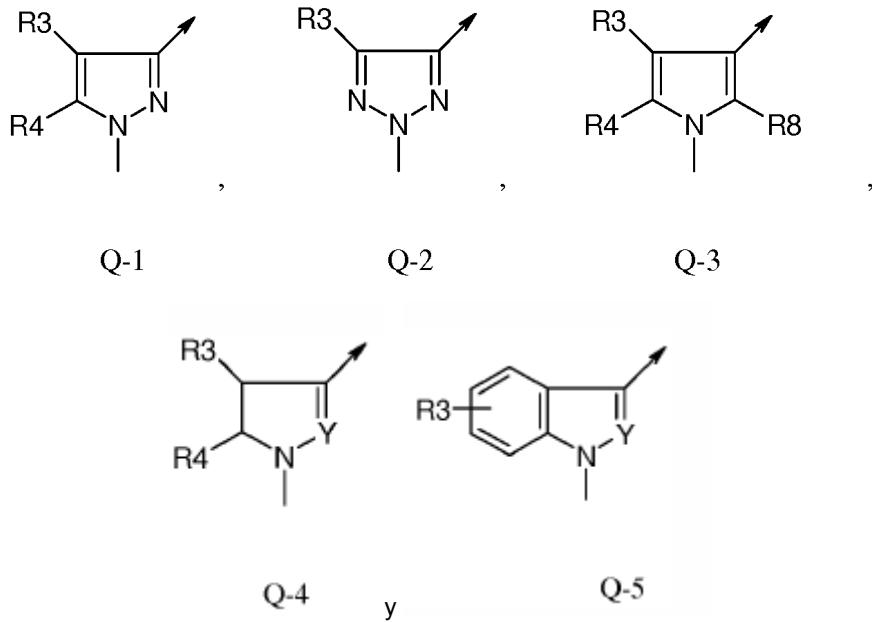
40 Los sustituyentes o intervalos preferidos para los radicales mostrados en los compuestos de la fórmula (I) se ilustran a continuación.

A representa un radical del grupo que consiste en



en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2.

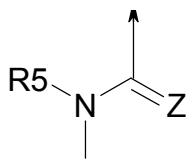
Q representa un radical del grupo que consiste en



5

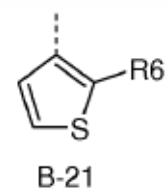
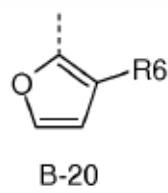
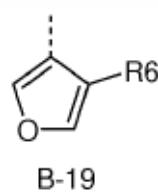
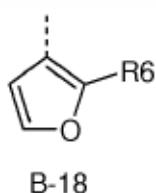
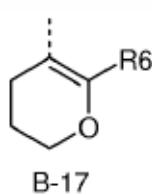
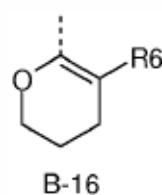
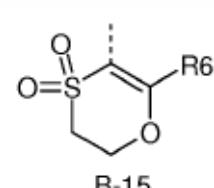
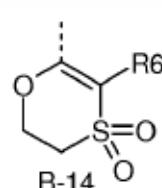
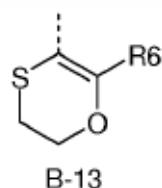
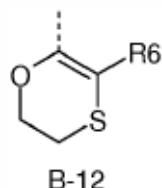
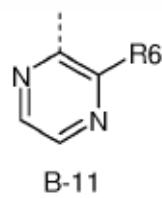
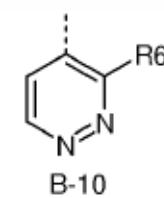
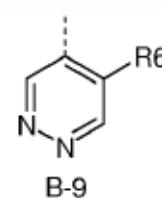
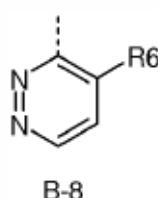
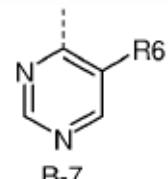
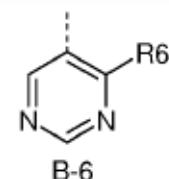
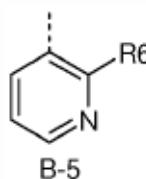
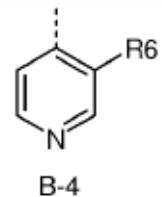
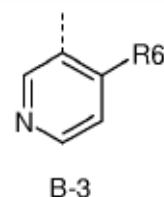
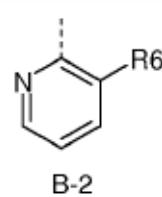
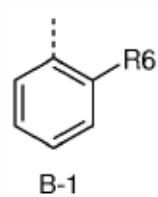
en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa el enlace con D.

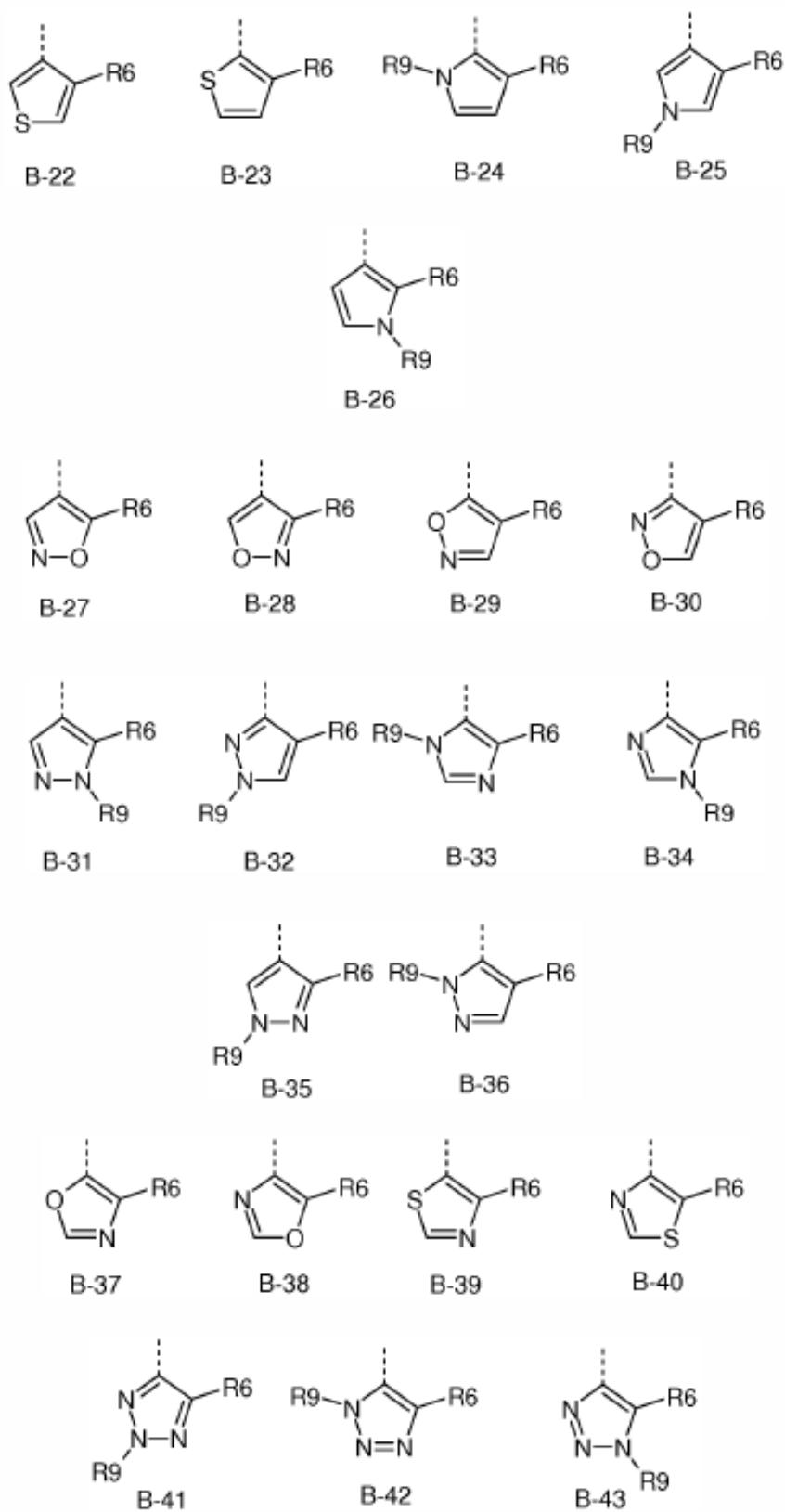
D representa el radical de la fórmula

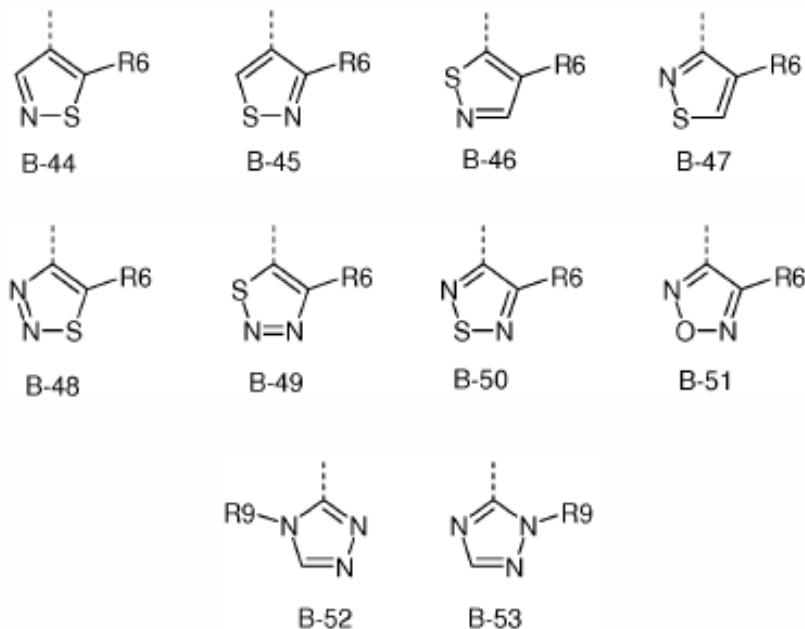


en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B.

10 B representa un radical del grupo que consiste en







en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7.

Y en el resto Q-4 representa CR8 o representa nitrógeno.

5 Y en el resto Q-5 representa nitrógeno.

Z representa oxígeno o azufre.

R1 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquilo C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquil C₁-C₆-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquilo C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquilo C₃-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfinito, alquil C₁-C₆-sulfonilo, alquil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi.

R2 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquilo C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquil C₁-C₆-amino, di-(alquil C₁-C₆)-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquilo C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquilo C₃-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfinito, alquil C₁-C₆-sulfonilo, alquil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi.

R3 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₆ y haloalquilo C₁-C₆.

R4 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆.

R5 representa un radical de la serie hidrógeno, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilo C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alquil C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquilo C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilo, haloalquilo C₁-C₆-sulfonilo y C(=O)-B.

R6 representa un radical de la serie hidrógeno (sólo en los radicales B-26, B-33, B-36 y B-42), halógeno, ciano,

5 nitro, amino, hidroxi, carboxilo, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquil C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquinil C₁-C₆-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquil C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquil C₃-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfinilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, haloalquilo C₁-C₄-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y 10 heteroariloxi.

15 R7 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquil C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquenil C₁-C₆-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquil C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquil C₃-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfinilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, haloalquilo C₁-C₄-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y 20 heteroariloxi.

R8 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆.

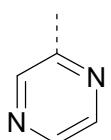
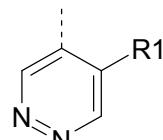
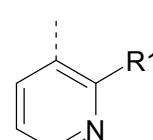
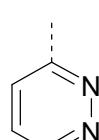
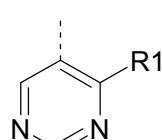
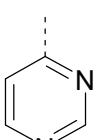
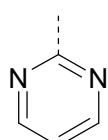
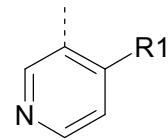
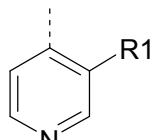
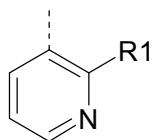
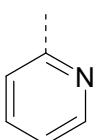
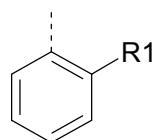
25 R9 representa un radical de la serie hidrógeno, alquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₆, alquenilo C₃-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquilo C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilo y haloalquilo C₁-C₆-sufonilo.

30 m representa un número del grupo que consiste en 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1, los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes.

n representa un número del grupo que consiste en 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1 los radicales R7 pueden ser iguales o diferentes.

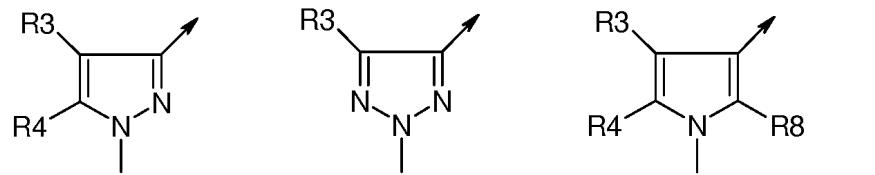
Sustituyentes o intervalos particularmente preferidos para los radicales mostrados en los compuestos de la fórmula (I) se ilustran a continuación.

A representa un radical del grupo que consiste en



en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2.

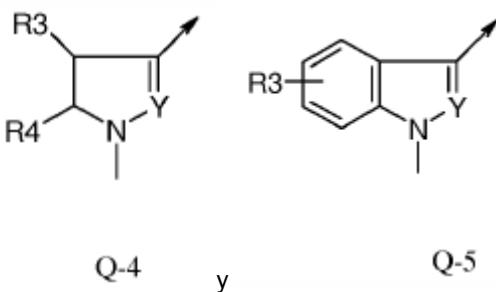
Q representa un radical del grupo que consiste en



Q-1

Q-2

Q-3



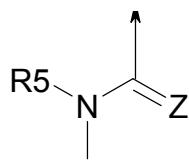
Q-4

y

Q-5

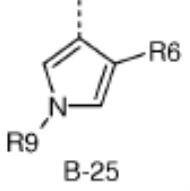
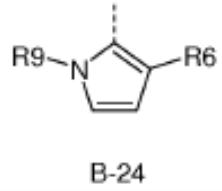
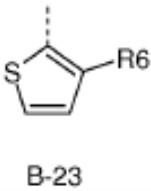
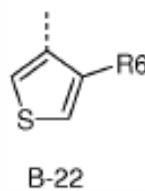
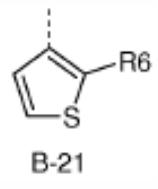
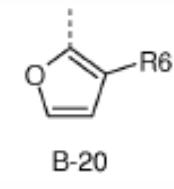
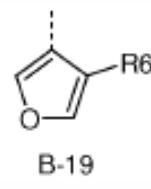
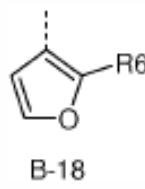
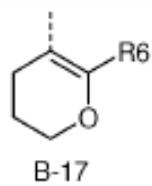
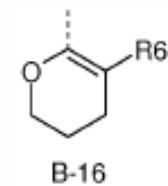
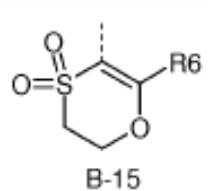
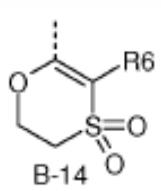
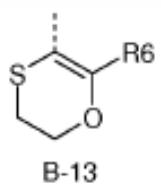
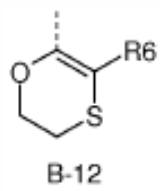
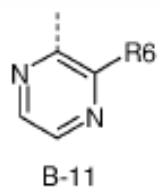
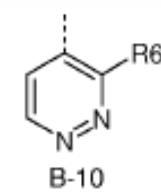
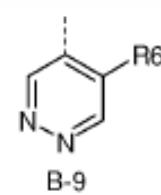
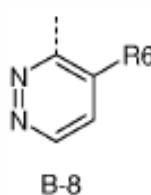
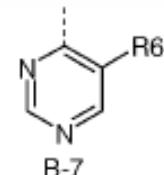
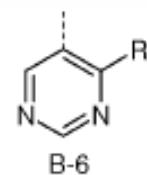
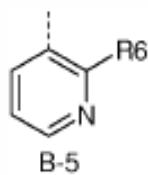
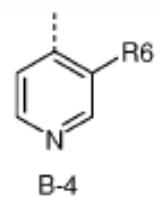
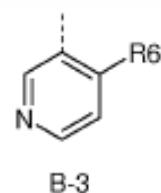
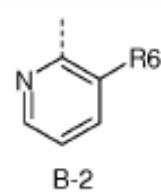
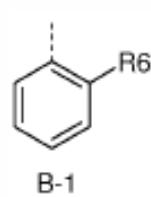
5 en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa el enlace con D.

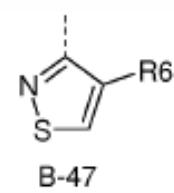
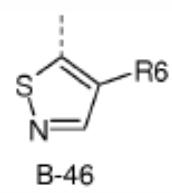
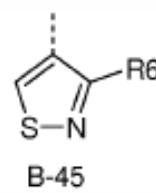
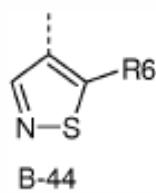
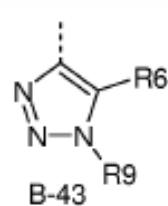
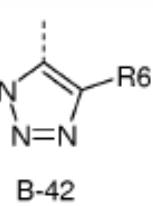
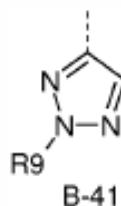
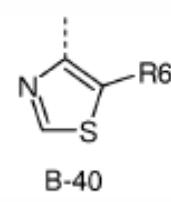
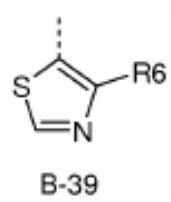
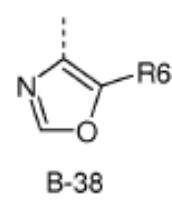
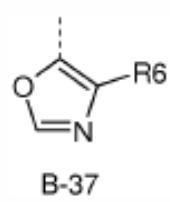
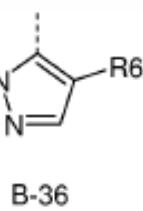
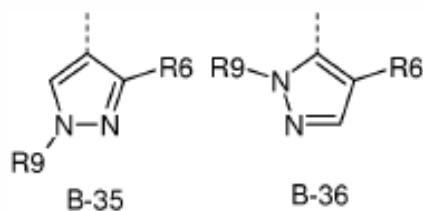
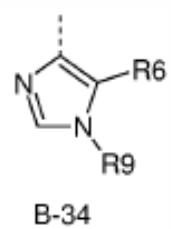
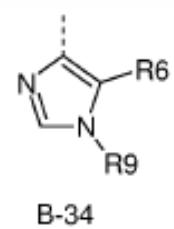
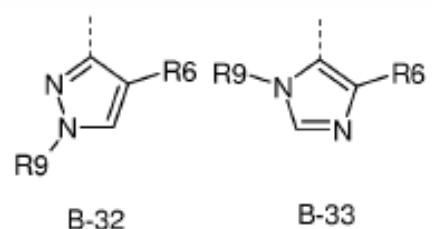
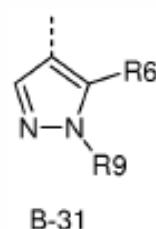
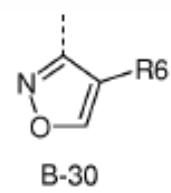
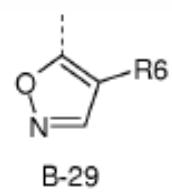
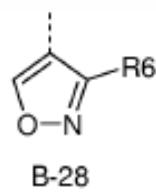
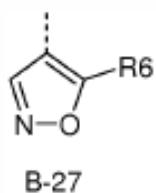
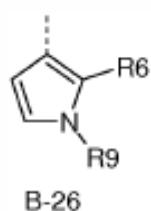
D representa el radical de la fórmula

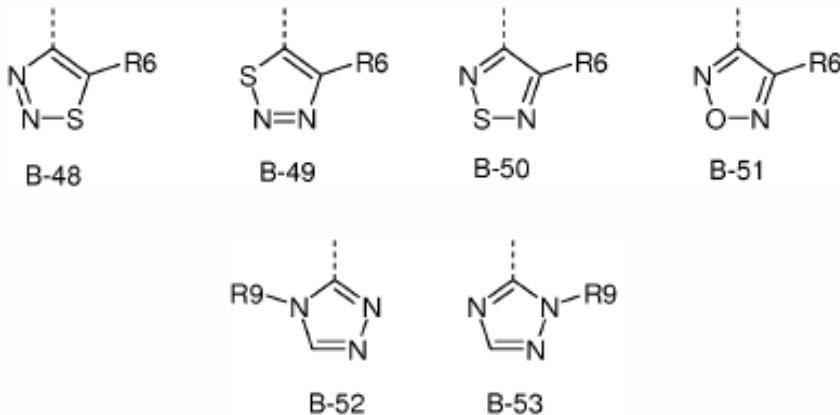


en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B.

B representa un radical del grupo que consiste en







en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7.

Y en el resto Q-4 representa CR8 o representa nitrógeno.

Y en el resto Q-5 representa nitrógeno.

5 Z representa oxígeno o azufre.

R1 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquilo C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquilo C₁-C₆-sulfinilo, alquilo C₁-C₆-sulfonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi.

10 R2 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquilo C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquilo C₁-C₆-sulfinilo, alquilo C₁-C₆-sulfonilo, alquilo C₁-C₆-carbonilo, di-(alquilo C₁-C₆)-amino, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi.

15 R3 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₆ y haloalquilo C₁-C₆.

R4 representa un radical de la serie hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆.

20 R5 representa un radical de la serie hidrógeno, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alquilo C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquilo C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquilo C₁-C₆-sulfonilo, haloalquilo C₁-C₆-sulfonilo y C(=O)-B.

25 R6 representa un radical de la serie hidrógeno (sólo en los radicales B-26, B-33, B-36 y B-42), halógeno, ciano, nitro, hidroxi, carboxilo, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquilo C₁-C₆-sulfinilo, alquilo C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquilo C₁-C₆-sulfonilo, alquilo C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alquilo C₁-C₆-carbonilamino, haloalquilo C₁-C₆-carbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi.

30 R7 representa un radical de la serie halógeno, ciano, nitro, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquilo C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquilo C₁-C₆-sulfinilo, alquilo C₁-C₆-sulfonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi.

R8 representa un radical de la serie hidrógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆.

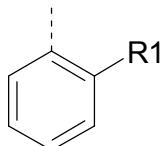
R9 representa un radical de la serie hidrógeno, alquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆ y haloalquilo C₁-C₆.

35 m representa un número del grupo que consiste en 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1, los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes.

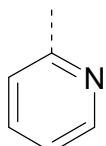
n representa un número del grupo que consiste en 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1 los radicales R7 pueden ser iguales o diferentes.

Sustituyentes o intervalos muy particularmente preferidos para los radicales mostrados en los compuestos de la fórmula (I) se aclaran a continuación.

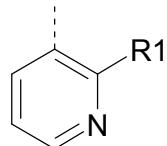
A representa un radical del grupo que consiste en



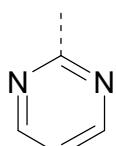
A-1



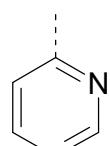
A-2



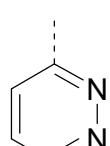
A-3



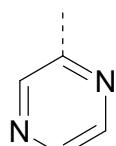
A-6



A-7



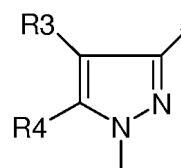
A-9



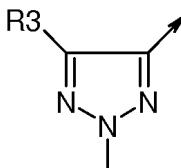
A-12

5 en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2.

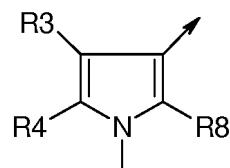
Q representa un radical del grupo que consiste en



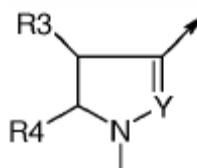
Q-1



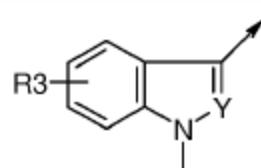
Q-2



Q-3



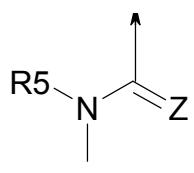
Q-4



Q-5

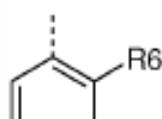
en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa en cada caso el enlace con D.

10 D representa el radical de la fórmula

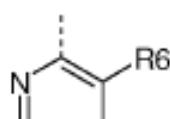


en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B.

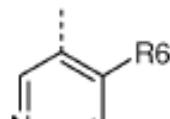
B representa un radical del grupo que consiste en



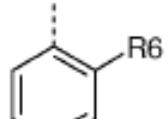
B-1



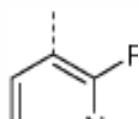
B-2



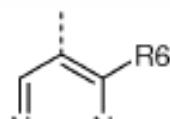
B-3



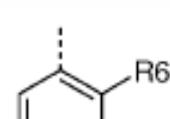
B-4



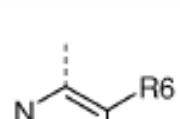
B-5



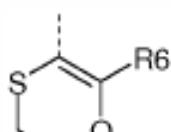
B-6



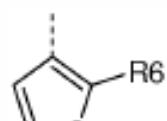
B-10



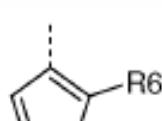
B-11



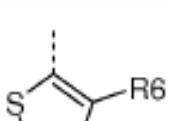
B-13



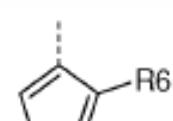
B-18



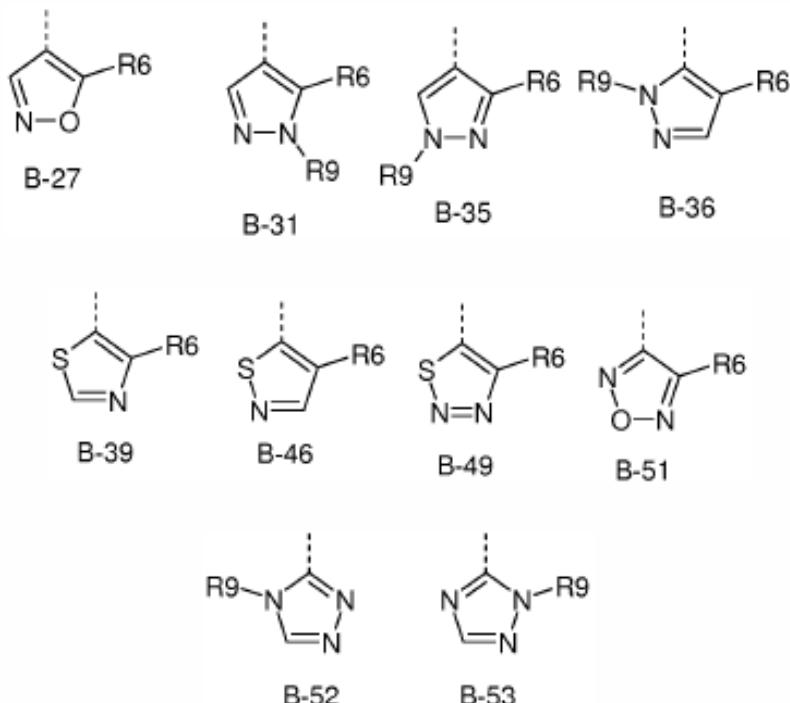
B-21



B-23



R9 B-25



en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7.

Z representa oxígeno o azufre.

5 R1 representa un radical del grupo que consiste en halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄ y alquil C₁-C₄-sulfonilo.

R2 representa un radical del grupo que consiste en halógeno, alquilo C₁-C₄ y alcoxi C₁-C₄.

R3 representa un radical del grupo que consiste en hidrógeno y halógeno.

R4 representa un radical del grupo que consiste en hidrógeno y alquilo C₁-C₄.

10 R5 representa un radical del grupo que consiste en hidrógeno, alquilo C₁-C₄, alquenilo C₃-C₄, alquinilo C₃-C₄, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₄, alquil C₁-C₄-carbonilo, ciano-alquilo C₁-C₄ y C(=O)-B.

R6 representa un radical del grupo que consiste en halógeno, nitro, hidroxi, alquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄, alquil C₁-C₄-tio, alquil C₁-C₄-sulfonilo, haloalquilo C₁-C₄, haloalcoxi C₁-C₄, haloalquil C₁-C₄-tio y heteroarilo.

R7 representa un radical del grupo que consiste en halógeno, alquilo C₁-C₄ y haloalquilo C₁-C₄.

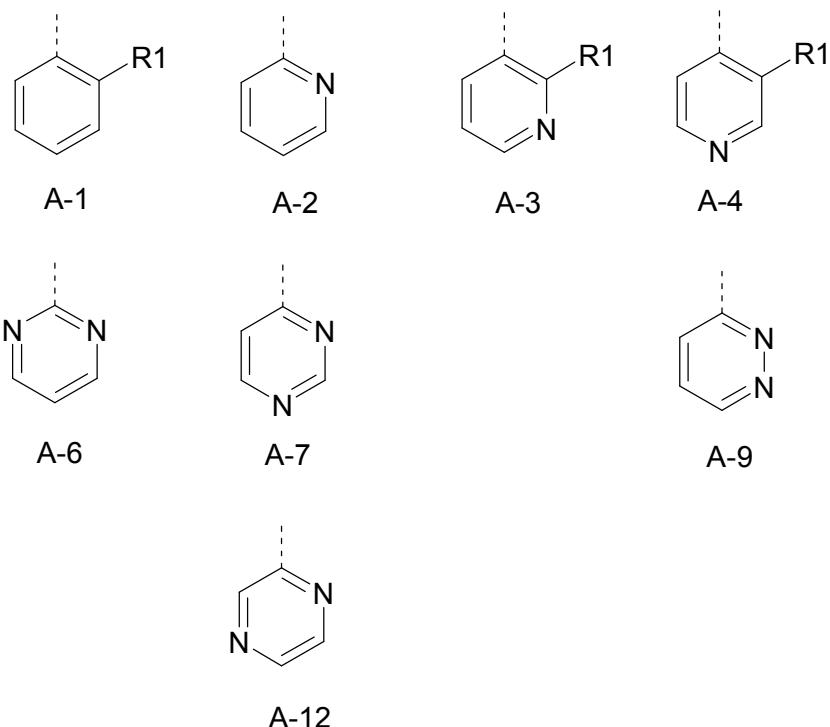
R9 representa un radical del grupo que consiste en alquilo C₁-C₄.

15 m representa un número del grupo que consiste en 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1, los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes.

n representa un número del grupo que consiste en 0 y 1.

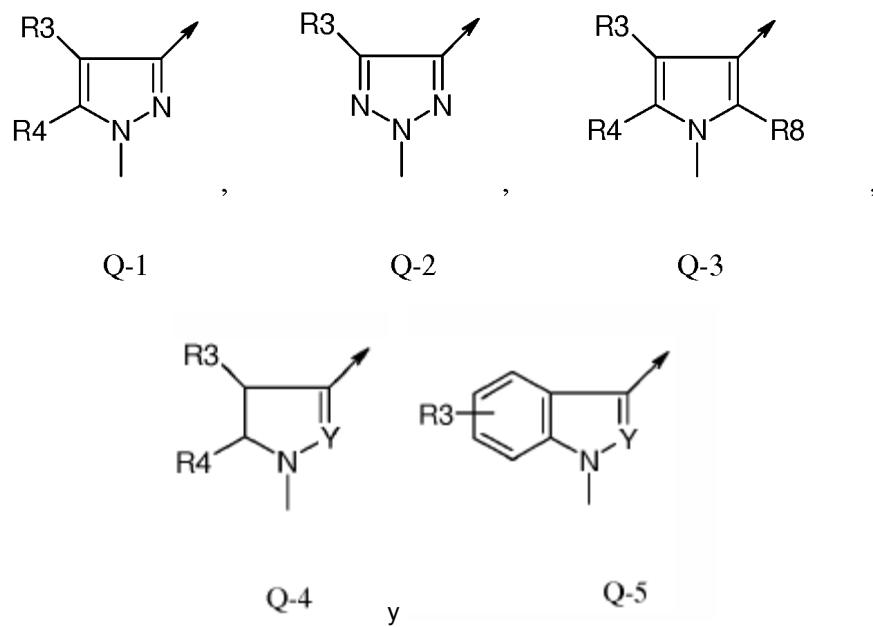
Otro grupo de sustituyentes o intervalos muy particularmente preferidos de los radicales mostrados en los compuestos de la fórmula (I) se ilustra a continuación.

20 A representa un radical del grupo que consiste en



en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2.

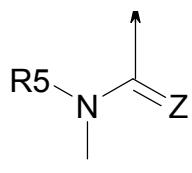
Q representa un radical del grupo que consiste en



5

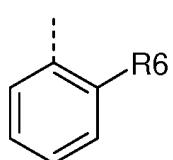
en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa el enlace con D.

D representa el radical de la fórmula

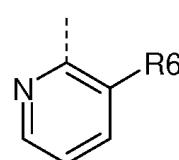


en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha representa el enlace con B.

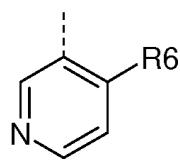
B representa un radical del grupo que consiste en



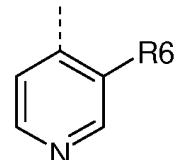
B-1



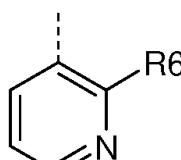
B-2



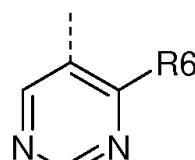
B-3



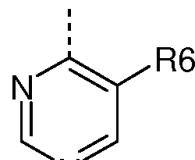
B-4



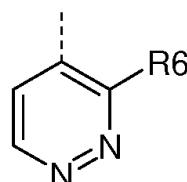
B-5



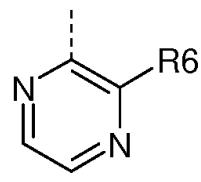
B-6



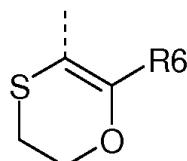
B-7



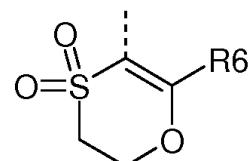
B-10



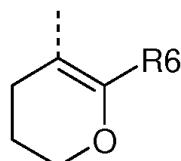
B-11



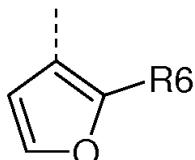
B-13



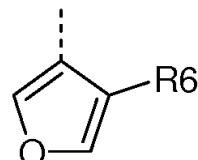
B-15



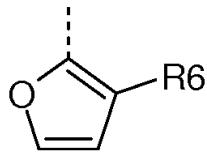
B-17



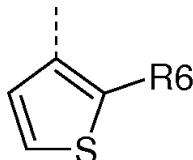
B-18



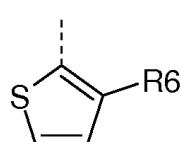
B-19



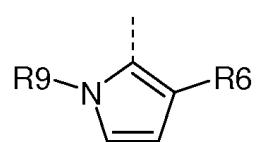
B-20



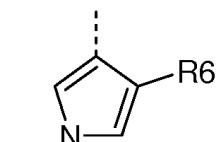
B-21



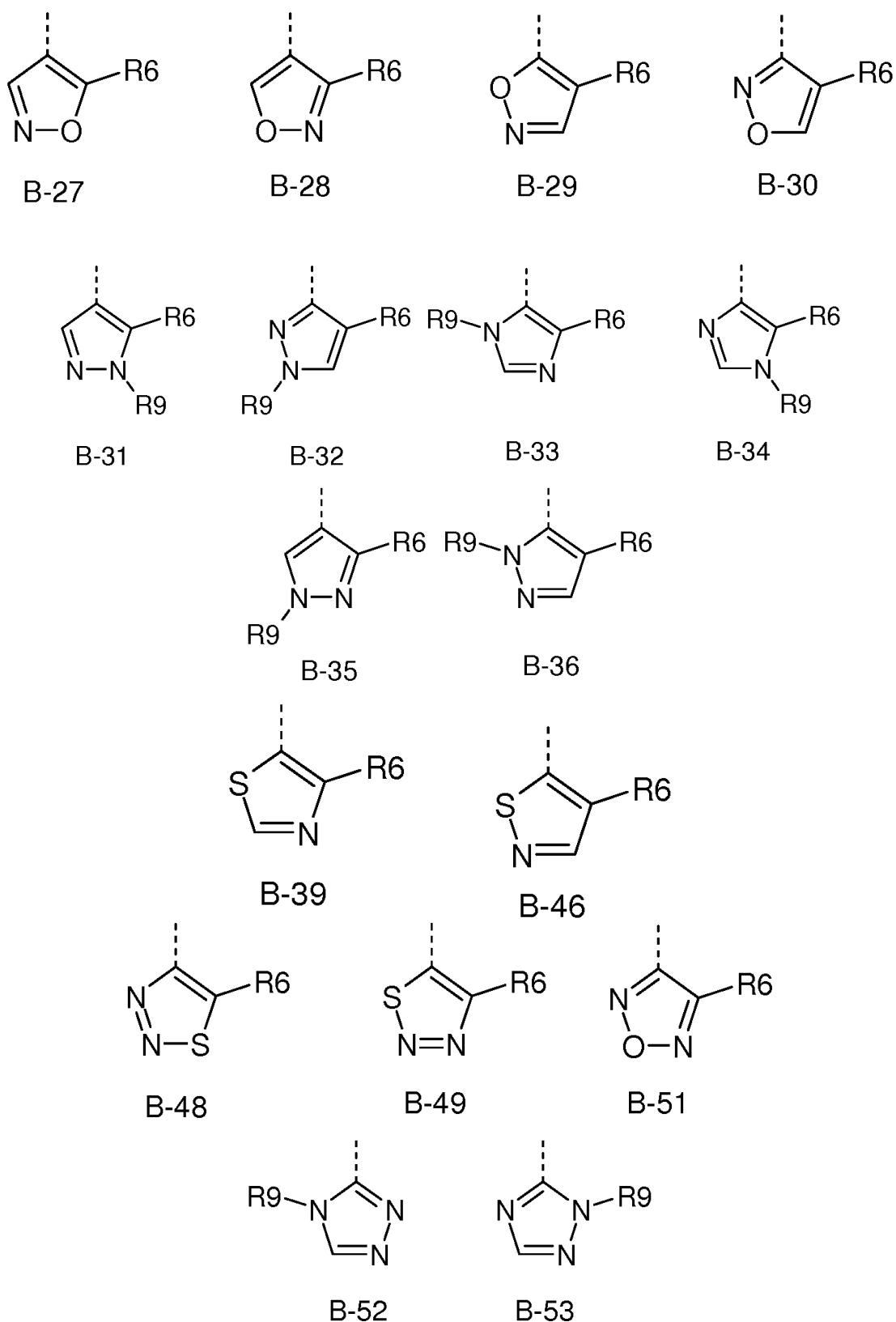
B-23



B-24



B-25



en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7.

Z representa oxígeno o azufre.

10 R1 representa un radical del grupo que consiste en halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄ y alquil C₁-C₄-sulfonilo.

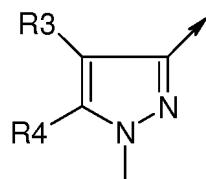
- R2 representa un radical del grupo que consiste en halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₄, di-(alquil C₁-C₆)-amino, acetilo, arilo.
- R3 representa un radical del grupo que consiste en hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₄.
- R4 representa un radical del grupo que consiste en hidrógeno, amino, alquilo C₁-C₄.
- 5 R5 representa un radical del grupo que consiste en hidrógeno, alquilo C₁-C₄, alquenilo C₃-C₄, alquinilo C₃-C₄, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₄, alquil C₁-C₄-carbonilo, ciano-alquilo C₁-C₄ y C(=O)-B.
- 10 R6 representa un radical del grupo que consiste en hidrógeno (sólo en los radicales B-33 y B-36), halógeno, ciano, nitro, hidroxi, carboxilo, alquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄, alquil C₁-C₄-tio, alquil C₁-C₄-sulfonilo, haloalquilo C₁-C₄, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₄, haloalquil C₁-C₄-tio, acetilo, alquil C₁-C₄-carbonilamino, haloalquil C₁-C₄-carbonilamino y heteroarilo.
- 15 R7 representa un radical del grupo que consiste en halógeno, ciano, nitro, hidroxi, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄ y alcoxi C₁-C₄.
- R9 representa un radical del grupo que consiste en alquilo C₁-C₄ y haloalquilo C₁-C₄.
- 15 m representa un número del grupo que consiste en 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1, los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes.
- n representa un número del grupo que consiste en 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1 los radicales R7 pueden ser iguales o diferentes.
- 20 En las definiciones preferidas, a menos que se indique lo contrario, halógeno está seleccionado del grupo que consiste en flúor, cloro, bromo y yodo, a su vez preferentemente del grupo de flúor, cloro y bromo, arilo (también como parte de una unidad más grande como, por ejemplo, arilalquilo) está seleccionado del grupo fenilo, naftilo, antrilo, fenantrenilo y representa, a su vez, preferentemente fenilo, hetarilo (que tiene el mismo significado que heteroarilo, también como parte de una unidad más grande tal como, por ejemplo, heteroariloxi) está seleccionado del grupo furilo, tienilo, pirrolilo, pirazolilo, imidazolilo, 1,2,3-triazolilo, 1,2,4-triazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, tiazolilo, isotiazolilo, 1,2,3-oxadiazolilo, 1,2,4-oxadiazolilo, 1,3,4-oxadiazolilo, 1,2,5-oxadiazolilo, 1,2,3-tdiazolilo, 1,2,4-tdiazolilo, 1,3,4-tdiazolilo, 1,2,5-tdiazolilo, piridilo, pirimidinilo, piridazinilo y pirazinilo.
- 25 En las definiciones particularmente preferidas, a menos que se indique lo contrario, halógeno está seleccionado del grupo flúor, cloro, bromo y yodo, preferentemente a su vez, del grupo flúor, cloro y bromo, arilo (también como parte de una unidad más grande como, por ejemplo, arilalquilo) está seleccionado del grupo fenilo, naftilo, antrilo, fenantrenilo y representa, a su vez, preferentemente fenilo, het(ero)arilo (también como parte de una unidad más grande como, por ejemplo, heteroariloxi) está seleccionado del grupo que consiste en furilo, tienilo, pirrolilo, pirazolilo, imidazolilo, oxadiazolilo, 1,2,3-triazolilo, 1,2,4-triazolilo, oxazolilo, isoxazolilo y tiazolilo.
- 30 En las definiciones muy particularmente preferidas, a menos que se indique lo contrario, halógeno seleccionado del grupo que consiste en flúor, cloro, bromo y yodo, preferentemente, a su vez, del grupo que consiste en flúor, cloro y bromo, y het(ero)arilo (también como parte de una unidad más grande como, por ejemplo, heteroariloxi) representa 1,2,4-triazolilo.
- 35 Los radicales sustituidos con halógeno, por ejemplo, haloalquilo (= haloalquilo), están mono- o polihalogenados hasta el número máximo posible de sustituyentes. En el caso de una polihalogenación, los átomos de halógeno pueden ser iguales o diferentes. El halógeno representa en este caso flúor, cloro, bromo y yodo, en especial flúor, cloro y bromo.
- 40 Los radicales hidrocarbilo saturados o insaturados, tales como alquilo o alquenilo, pueden ser, en cada caso, de cadena lineal o ramificada cuanto sea posible, incluidos en combinación con heteroátomos como, por ejemplo, en alcoxi.
- Los radicales opcionalmente sustituidos pueden estar mono- o polisustituidos, en donde en el caso de polisustituciones, los sustituyentes pueden ser iguales o diferentes.
- 45 Las definiciones de radicales o las explicaciones mencionadas en lo que antecede en general o mencionadas en áreas de preferencia se aplican a los productos finales y correspondientemente a los materiales de partida y a los productos intermedios. Estas definiciones de radicales se pueden combinar entre sí según se deseé, es decir, incluyendo combinaciones entre los respectivos intervalos preferidos.
- 50 De acuerdo con la invención se da preferencia al uso de compuestos de la fórmula (I) que contienen una combinación de los significados mencionados anteriormente como preferidos.
- De acuerdo con la invención se da particular preferencia al uso de compuestos de la fórmula (I), que contienen una combinación de los significados mencionados previamente como particularmente preferidos.

De acuerdo con la invención se da muy particular preferencia a compuestos de la fórmula (I) que contienen una combinación de los significados mencionados previamente como muy particularmente preferidos.

5 La presente invención también proporciona nuevos compuestos de la fórmula (I), en los que A, Q, D y B tienen los significados mencionados anteriormente, salvo los compuestos W y W2 descritos anteriormente, en especial W-1 a W-12, W2-1 a W2-3, W2-5 y W2-6. Las definiciones o explicaciones de radicales generales o preferidas mencionadas anteriormente también se aplican a los nuevos compuestos de la fórmula (I). Si en la presente solicitud se mencionan compuestos para usar según la invención, se incluyen, a menos que se indique lo contrario, en cada caso tanto los compuestos de la fórmula (I) como también los nuevos compuestos de la fórmula (I).

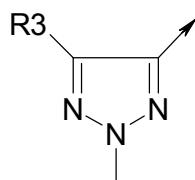
10 En los siguientes grupos de compuestos, cada uno de los radicales R y Z tienen los significados indicados con anterioridad.

En un grupo particular de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, Q representa Q-1



Q-1

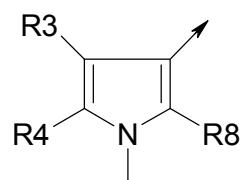
En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, Q representa Q-2



15

Q-2

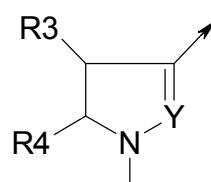
En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, Q representa Q-3



20

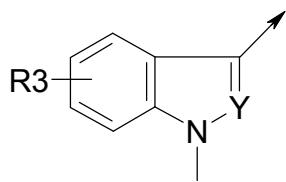
Q-3

En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, Q representa Q-4



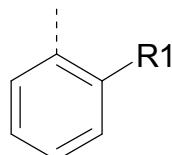
Q-4

25 En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, Q representa Q-5



Q-5

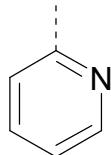
En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, A representa



,

- 5 en donde este radical lleva m sustituyentes R2.

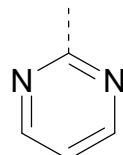
En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, A representa



,

en donde este radical lleva m sustituyentes R2.

En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) para usar según la invención, A representa



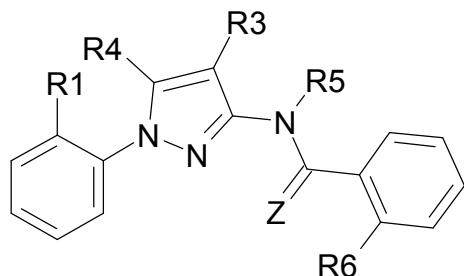
,

10

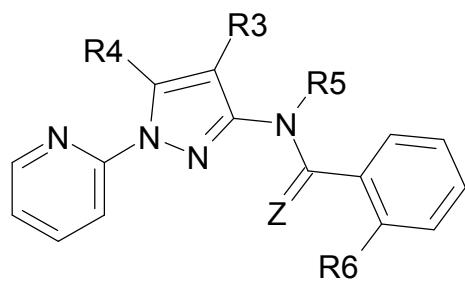
en donde este radical lleva m sustituyentes R2.

En los grupos particulares de compuestos de la fórmula (I) siguientes, que representan todos ellos realizaciones preferidas, los radicales A o B pueden llevar otros sustituyentes R2 o R7 respectivamente, como se ha especificado anteriormente.

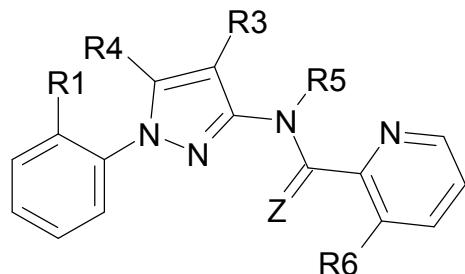
- 15 Un grupo destacado de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-1)



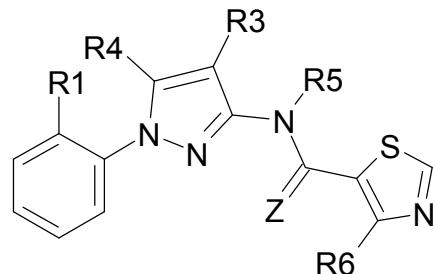
Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-1)



Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-2)

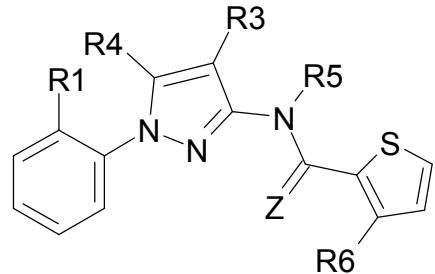


Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-39)

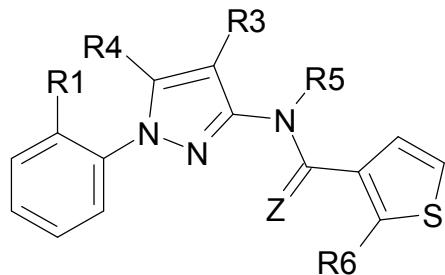


5

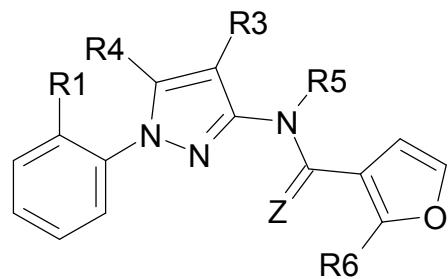
Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-23)



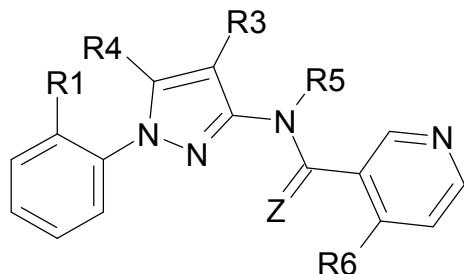
Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-21)



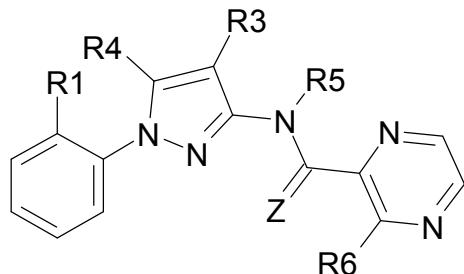
- 10 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-18)



Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-3)

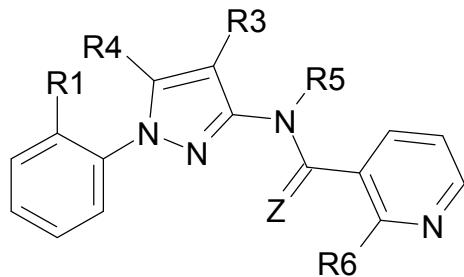


En un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-11)

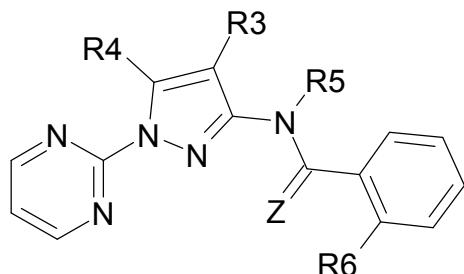


5

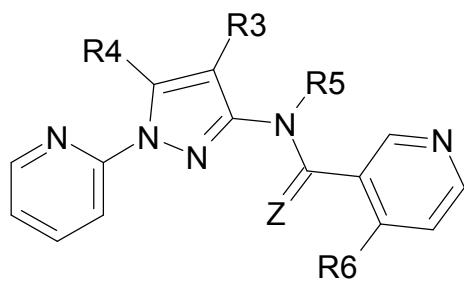
Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-5)



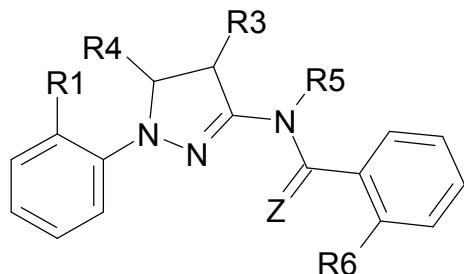
Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-6)-(Q-1)-D-(B-1)



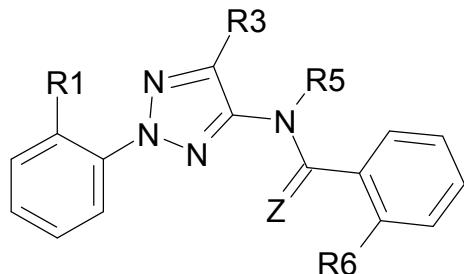
- 10 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-3)



Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-4)-D-(B-1)

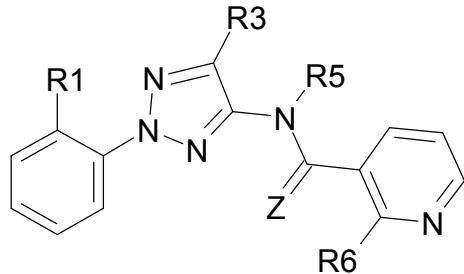


Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-2)-D-(B-1)

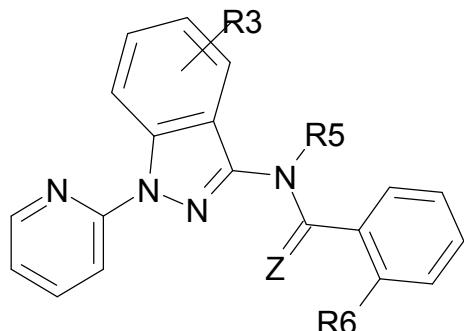


5

Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-2)-D-(B-5)



Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-5)-D-(B-1)



- 10 De la misma manera que en los grupos particulares de compuestos anteriores, se pueden construir respectivas

fórmulas estructurales de un modo simple para los grupos de compuestos siguientes.

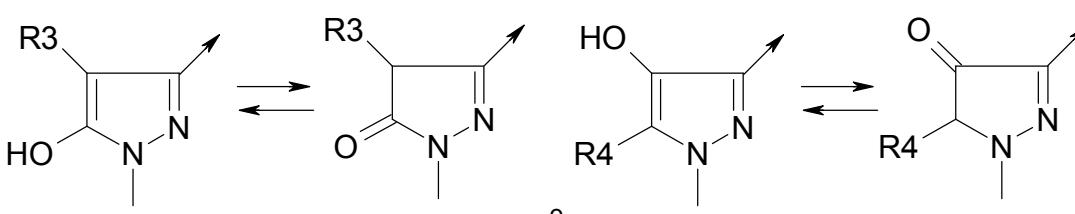
Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-3)-(Q-1)-D-(B-1).

Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-36).

Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-46).

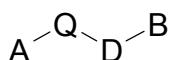
- 5 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-1).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-27).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-51).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-4).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-13).
 10 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-31).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-35).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-1)-(Q-1)-D-(B-10).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-12)-(Q-1)-D-(B-1).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-12)-(Q-1)-D-(B-2).
 15 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-49).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-46).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-13).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-4).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-6).
 20 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-25).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-31).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-35).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-2)-(Q-1)-D-(B-27).
 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-7)-(Q-1)-D-(B-1).
 25 Un grupo particular adicional de compuestos de la fórmula (I) son compuestos de la fórmula (A-9)-(Q-1)-D-(B-1).

Cuando R4 o R3 en el grupo Q-1 representa hidroxi, Q-1 también puede estar en forma ceto:



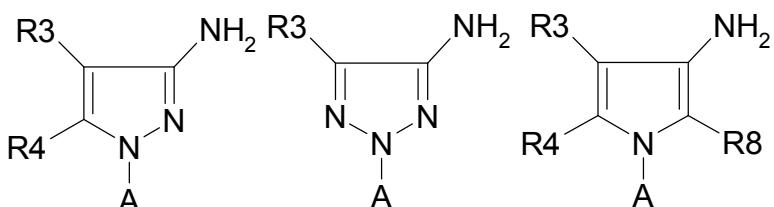
- 30 Adicionalmente se ha descubierto que los compuestos de la fórmula (I) se pueden obtener mediante procedimientos descritos a continuación.

De acuerdo con lo anterior, la invención se refiere también a procedimientos para la preparación de compuestos de la fórmula (I), en los que Z representa O,



(I)

en donde A, Q, D y B tienen los significados descritos anteriormente,
mediante la reacción de aminas de las fórmulas (II-1) a (II-5)

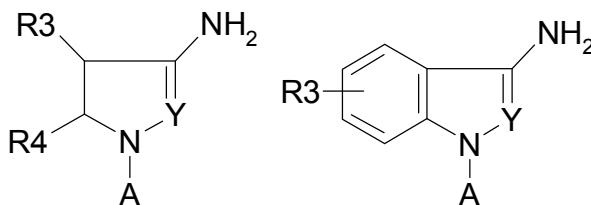


5

(II-1)

(II-2)

(II-3)

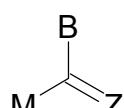


(II-4)

y

(II-5)

con ácidos carboxílicos o haluros de ácido carboxílico de la fórmula (III),



(III)

10 en donde

M representa halógeno, hidroxi, alcoxi, alquilsufanilo, aciloxi, sulfoniloxi, N-heterociclico (por ejemplo, imidazolilo) o hidroxi,

B tiene los significados indicados anteriormente y

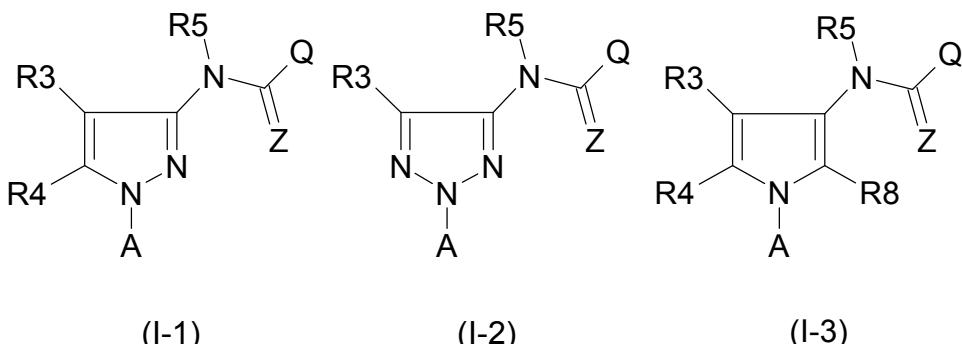
Z representa O.

15 En el presente documento, los compuestos de la fórmula (III) pueden preactivarse o activarse in situ. Por ejemplo, los compuestos de la fórmula (III) se pueden usar como haluros de ácido (por ejemplo, M = cloro). En este caso, la reacción se lleva a cabo ventajosamente en presencia de una base como, por ejemplo, trietilamina o hidróxido de sodio. pero también se pueden usar ácidos carboxílicos (M = OH) en presencia de reactivos de acoplamiento tales como, por ejemplo, diciclohexilcarbodiimida y aditivos tales como 1-hidroxi-1-H-benzotriazol (W. König, R. Geiger, Chem. Ber. 1970, 103, 788). También se pueden usar reactivos de acoplamiento tales como 1-etil-3-(3-dimetilaminopropil)carbodiimida, 1,1'-carbonil-1H-imidazol, hexafluorofosfato de O-(benzotriazol-1-il)-N,N,N',N'-tetrametiluronio y compuestos similares. Como reactivos de acoplamiento para la realización del procedimiento de preparación son apropiados básicamente todos los compuestos que permiten la formación de un enlace amida (véase por ejemplo, E. Valeur, M. Bradley Chem. Soc. Rev. 2009, 38, 606; S.-I. Han, I.-A. Kim Tetrahedron 2004, 60, 2447). También se pueden usar anhídridos simétricos o mixtos para la obtención de compuestos de la fórmula (I) (G. W. Anderson, J. E. Zimmerman, F. M. Calahan, J. Am. Chem. Soc. 1967, 89, 5012.). En este caso, se pueden usar

distintos ésteres de ácidos clorofórmicos como, por ejemplo, éster isobutilo de ácido clorofórmico y éster sec-butílico de ácido clorofórmico. Asimismo se pueden usar, por ejemplo, cloruro de isoávalerilo y cloruro de pivaloilo.

b) Opcionalmente se pueden hacer reaccionar después los compuestos de la fórmula (I), en los que Z representa O (átomo de oxígeno), con un agente de sulfuración como, por ejemplo, pentasulfuro difosfórico o reactivo de Lawesson (véase C. P. Dell en Comprehensive Organic functional Group Transformations, Vol. 5, ed.: A. L. Katritzky, O. Met-Cohn, C. W. Rees, pergamón, Oxford, 1995, S. 565; M. Jesberger, T. P. Davis, L. Barner, Synthesis 2003, 13, 1929), en compuestos de la fórmula (I), en los que Z representa S (átomo de azufre).

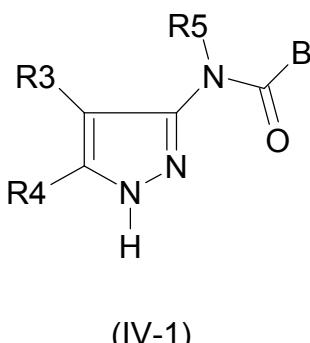
c) Compuestos de las fórmulas (I-1), (I-2) y (I-3)



en los que R3 representa halógeno, se pueden obtener ya sea según la vía de preparación descrita con anterioridad a partir de las correspondientes aminas de las fórmulas (II-1), (II-2) y (II-3), en las que R3 representa halógeno (F, Cl, Br o I) o se pueden sintetizar a partir de las amidas de las fórmulas (I-1), (I-2) y (I-3), en donde R3 representa H (hidrógeno), por reacción con un reactivo de halogenación como, por ejemplo, N-halosuccinimidas (véase por ejemplo, documento WO 2008/092888, Z.-G. Zhao, Z.-X. Wang, Synth. Comm. 2007, 37, 137) o 1-clorometil-4-fluorodiazoniabicielo[2.2.2]octanobis(tetrafluoroborato) (P. T. Niffeler, S. González Durón, M. D. Burkart, S. P. Vincent, C.-H. Wong, Angew. Chem. Int. Ed. 2005, 44, 192).

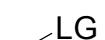
d) Compuestos de las fórmulas (I-1), (I-2) y (I-3) en los que R5 representa hidrógeno, se pueden hacer reaccionar en presencia de una base (por ejemplo, hidruro de sodio) y un agente de alquilación (por ejemplo, yoduro de metilo) o acilación (por ejemplo, acetanilídro) en compuestos de las fórmulas (I-1), (I-2) y (I-3), en los que R5 representa alquilo o acilo (véase por ejemplo, documento WO 2005/092863).

e) Los compuestos de la fórmula (I-1) se pueden obtener alternativamente haciendo reaccionar 1H-pirazoles de la fórmula (IV-1)



(IV-1)

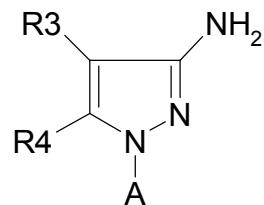
con compuestos aromáticos o heteroaromáticos de la fórmula (V)



(V)

que están sustituidos con un grupo LG apropiado. La reacción se puede llevar a cabo en presencia de una base (por ejemplo, carbonato de potasio para, por ejemplo, LG = flúor (véase el documento WO 2011/060035) u opcionalmente de un catalizador (por ejemplo, Cul/1,2-ciclohexandiamina, carbonato de potasio para, por ejemplo, LG = bromo (véase documento WO 2007/039146) o Cu(OAc)₂/piridina para, por ejemplo, LG = B(OH)₂ (véase WO 2005/092863)).

Las aminas de la fórmula (II-1)

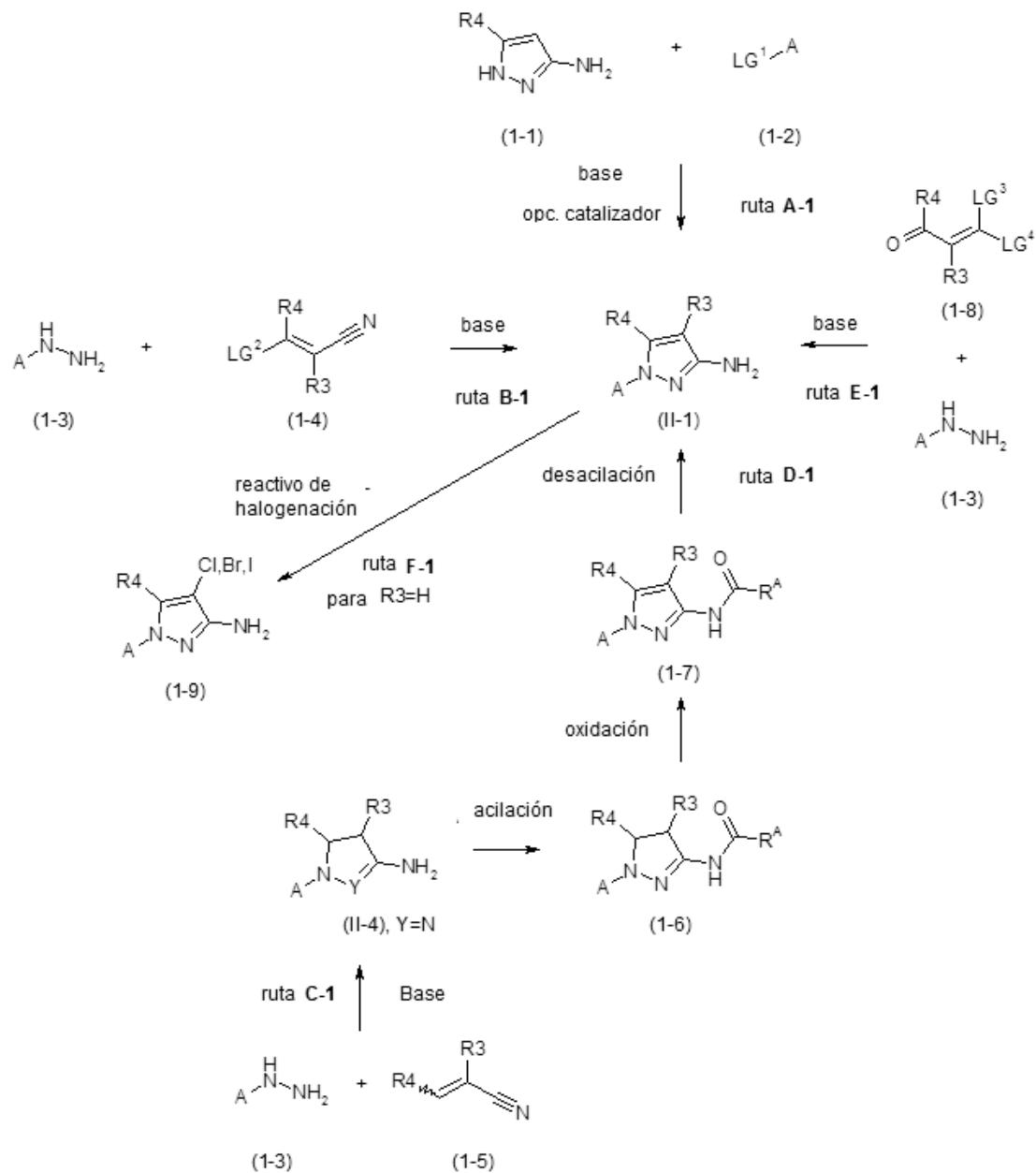


(II-1)

se obtienen comercialmente, se conocen de la literatura o se pueden sintetizar por medio de procedimientos conocidos de la literatura. ejemplos que se pueden mencionar son:

- 5 1-(2-metilfenil)-1H-pirazol-3-amina (WO 2004/037794),
1-(2-metoxifenil)-1H-pirazol-3-amina (WO 2004/037794),
1-(2-(trifluorometil)fenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2-cianofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2-fluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (WO 2004/037794),
- 10 1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-amina (C. Albert, C. Tironi, *Pharmacol Sci.* 1964, 19, 618),
1-(2-clorofenil)-5-metil-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente)
1-(2-bromofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2,4-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2,5-diclorofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
- 15 1-(piridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (WO 2004/037794),
1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(3-fluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(pirimidin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(piridazin-3-il)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
- 20 1-[2-(metilsulfonil)fenilo]-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2,3-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2,4,5-trifluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2,4-diclorofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(2,5-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
- 25 1-(2,4-difluorofenil)-5-etil-1H-pirazol-3-amina(disponible comercialmente),
1-(2,4-difluorofenil)-5-metil-1H-pirazol-3-amina(disponible comercialmente),
1-(2-nitrofenil)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-[3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-il]-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-[3-(trifluorometil)piridin-2-il]-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
- 30 1-(3,5-dicloropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
1-(3-bromopiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente),
2-(3-amino-1H-pirazol-1-il)nicotinonitrilo (disponible comercialmente),
3-(3-amino-1H-pirazol-1-il)pirazin-2-carbonitrilo (disponible comercialmente),
2-(3-amino-1H-pirazol-1-il)-6-metilnicotinonitrilo (disponible comercialmente),
- 35 2-(3-amino-1H-pirazol-1-il)-4,6-dimetilnicotinonitrilo (disponible comercialmente),
1-(5-fluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (disponible comercialmente).

Se pueden obtener nuevas 1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (II-1) como se representa en el Esquema de síntesis 1.

Esquema de síntesis 1

De acuerdo con la ruta A-1, se pueden hacer reaccionar 1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (1-1) con compuestos aromáticos o heteroaromáticos de la fórmula (1-2), que están sustituidos con un grupo LG¹ apropiado, en presencia

- 5 de una base (por ejemplo, ter-butóxido de potasio para, por ejemplo, LG¹ = cloro (véase WO 2009/012482) o, por ejemplo, carbonato de cesio para, por ejemplo, LG¹ = cloro (véase WO 2007/056155)) y opcionalmente un catalizador (por ejemplo, CuI/N,N-dimetiletan-1,2-diamina, carbonato de potasio para, por ejemplo, LG¹ = yodo (véase WO 2008/153042) o Pd₂(dba)₃/Xantphos, carbonato de sodio para, por ejemplo, LG¹ = cloro (véase Z. Shen, I. Hong, X. He, W. Mo, B. Hu, N. Sun, X. Hu, Org. Lett. 2010, 12, 552)) en compuestos de la fórmula (II-1).

- 10 En una ruta B-1 alternativa, se puede hacer reaccionar una aril- o hetarilhidrazina de la fórmula (1-3), que está presente como hidracina libre o como sal (por ejemplo, como clorhidrato), con un acrilnitrilo de la fórmula (1-4), que está sustituido con un grupo saliente LG² (por ejemplo, LG² = OR con R = alquilo, acilo, sulfonilo, etc.; LG² = SR con R = alquilo, acilo, etc.; LG² = NHR o NR₂ con R = alquilo, acilo, sulfonilo; LG² = halógeno o ciano), en presencia de una base apropiada (por ejemplo, etilato de sodio, comp. por ejemplo, WO 2004/037794 o ter-butóxido de potasio, comp. por ejemplo, WO 2008/046527) en la 1H-pirazol-3-amina de la fórmula (II-1).
- 15

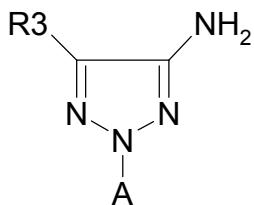
Se obtienen 4,5-dihidro-1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (II-4), en las que Y es N, de acuerdo con la ruta C-1 a partir de aril- o hetarilhidrazinas (1-3), que pueden estar presentes como hidracinas libres o sales (por ejemplo, como

clorhidratos), con acrilnitrilos de la fórmula (1-5) en presencia de una base apropiada (por ejemplo, colina) (véase C. Albert, C. Tironi, *Pharmac Sci.* 1964, 19, 618). Los compuestos de la fórmula (II-4), en los que Y representa N, se pueden hacer reaccionar en una secuencia de acilación con reactivo de acilación apropiado (por ejemplo, acetanhidrido para R^A = metilo), oxidación con un agente de oxidación apropiado (por ejemplo, 2,3-dicloro-5,6-diciano-1,4-benzoquinona) y separación del grupo acilo por medio de métodos apropiados (por ejemplo, calentamiento en ácido clorhídrico comp. Greene's protective groups in organic synthesis, 4th ed., P.G.M. Wuts, T.W. Greene, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007) asimismo en 1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (II-1).

Hay otro acceso a las 1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (II-1) según la ruta E-1 a partir de compuestos ceto de la fórmula (1-8), que están sustituido con un grupo saliente LG^{3/4} (por ejemplo, LG^{3/4} = OR con R = alquilo, acilo, sulfonilo, etc.; LG^{3/4} = SR con R = alquilo, acilo, etc.; LG^{3/4} = NHR o NR₂ con R = hidrógeno, alquilo, acilo, sulfonilo; LG^{3/4} = halógeno). Se activan primero con amoníaco a través de β-enaminocetonas (LG³ = NH₂/LG⁴ = alcoxi) (véase M. A. P. Martins, W. Cunico, S. Brondani, R. L. Peres, N. Zimmermann, F. A. Rosa, G. F. Fiss, N. Zanatta, H. G. Bonacorso *Synthesis* 2006, 1485) para luego hacerlas reaccionar en presencia de bases apropiadas (por ejemplo, trietilamina) con hidracinas libres o sus sales (por ejemplo, clorhidratos) en 1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (II-1).

1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (II-1) se pueden haloar opcionalmente según la ruta F-1, cuando R3 representa H (hidrógeno), por medio de reactivos de halogenación apropiados (por ejemplo, N-halosuccinimidas) en la posición 3 en compuestos de la fórmula (1-8), en los que R3 representa cloro, bromo o yodo (véase J. Velcicky, R. Feifel, S. Hawtin, R. Heng, C. Huppertz, G. Koch, M. Kroemer, H. Moebitz, L. Revesz, C. Scheufler, A. Schlapbach *Bioorg. Med. Chem. Letters* 2010, 20, 1293).

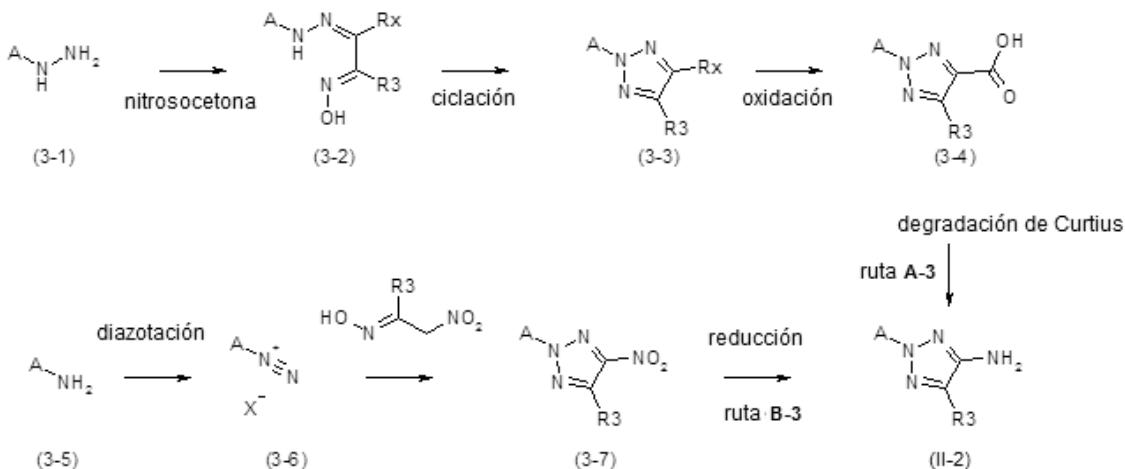
Las aminas de la fórmula (II-2)



(II-2)

también se pueden obtener en comercios. Como ejemplos, se han de mencionar:

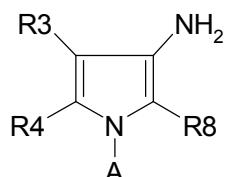
- 2-(2-bromofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (disponible comercialmente)
- 25 2-(2-clorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (disponible comercialmente)
- 2-(2-bromofenil)-5-cloro-2H-1,2,3-triazol-4-amina (disponible comercialmente)
- 2-(3-cloropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (disponible comercialmente)
- 2-(3-bromopiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (disponible comercialmente)
- 5-cloro-2-(3-cloropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (disponible comercialmente)
- 30 Nuevas aminas de la fórmula (II-2) se pueden obtener según el Esquema de síntesis 3:

Esquema de síntesis 3

Según la ruta A-3 se pueden hacer reaccionar hidracinas aromáticas de la fórmula (3-1), por ejemplo, con una nitrosocetona (por ejemplo, nitrosoacetona para R3 = H, comp. M. Begtrup, J. Holm J. Chem. Soc., perkin Trans. 1, 1981, 503.), que luego se ciclan con ayuda de agentes de condensación (por ejemplo, acetanilidrido comp. D. L. Swartz, A. R. Karash, L. A. Berri, D. L. Jaeger J. Heterocyclic Chem. 1983, 20, 1561) en 2H-1,2,3-triazoles de la fórmula (3-3). La oxidación (por ejemplo, con cromato de sodio (VI) comp. Comprehensive Organic Transformations: A Guide to functional Group Preparations; Larock, R. C., Ed.; Wiley-VCH: New York, 1999) de (3-3) proporciona el ácido carboxílico (3-4), que luego se puede convertir por degradación de Curtius en el 4-amino-2H-1,2,3-triazol (II-2) (véase P. A. Scon Org. React. 1946, 337).

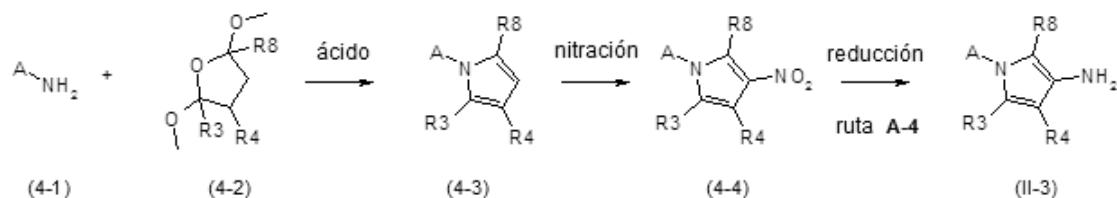
Alternativamente, se puede seguir también la ruta B-3 para la obtención de los 4-amino-2H-1,2,3-triazoles (II-2) (véase V. M. Nikitin, A. V. Zavodov, L.I. Vereshchagin Zhurnal Organicheskoi Khimii 1992, 28, 2334.). Para ello, se diazota una amina aromática (3-5) y la sal de diazonio (3-6) se hace reaccionar, por ejemplo, con ácido metazoníco (para R3 = H). El 4-nitro-2H-1,2,3-triazol (3-7) obtenido se puede reducir luego, por ejemplo, con cloruro de estaño (II) en 4-amino-2H-1,2,3-triazol (II-2).

Las aminas de la fórmula (II-3)



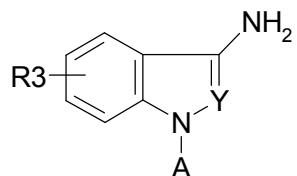
(II-3)

se pueden obtener según el Esquema de síntesis 4.

Esquema de síntesis 4

Para ello, se hacen reaccionar aminas aromáticas de la fórmula (4-1), por ejemplo, con acetales cíclicos de la fórmula (4-2) en condiciones ácidas en el pirrol (4-3) (por ejemplo, FeCl₃ comp. N. Azizi, A. Khajeh-Amiria, H. Ghafurib, M. Bolourchiana, M. R. Saidy Synlett 2009, 14, 2245). La nitración del pirrol (4-3) zum 3-nitro-1H-pirrol (4-4) (por ejemplo, por medio de acetonitrato de hierro (III) comp. D. Korakas, G. Varvounis J. Heterocyclic Chem. 1996, 33, 611) y posterior reducción (por ejemplo, con SnCl₂ comp. WO 2009/136995) proporciona el 3-amino-1H-pirrol (II-3).

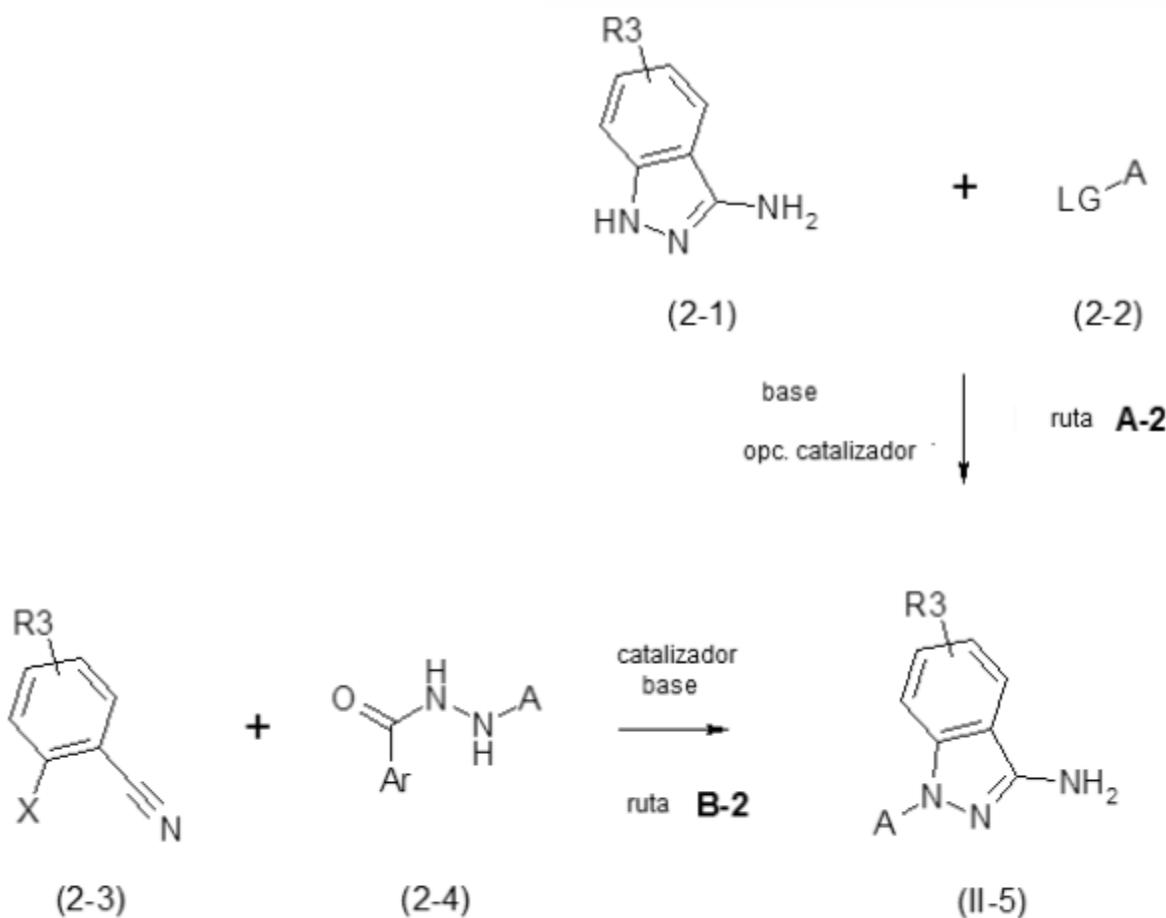
Las aminas de la fórmula (II-5)



(II-5)

también se pueden adquirir en comercios. Nuevas 1H-Indazol-3-aminas de la fórmula (II-5) se pueden obtener según el Esquema de síntesis 2.

5 Esquema de síntesis 2



En este caso, se hacen reaccionar compuestos de la fórmula (2-1) según la ruta A-2 con compuestos aromáticos o heteroaromáticos de la fórmula (2-2), que están sustituidos con un grupo saliente LG apropiado, a fin de hacer reaccionar en presencia de una base (por ejemplo, hidruro de sodio para, por ejemplo, LG = cloro (véase WO 2008/068171)) y opcionalmente un catalizador (por ejemplo, CuI/N,N-dimetiletan-1,2-diamina, carbonato de potasio para, por ejemplo, LG = bromo (véase WO 2010/098367) o Pd₂(dba)₃/X-Phos, carbonato de cesio para, por ejemplo, LG = cloro (véase DE 10 2009/004245)) en compuestos de la fórmula (II-5). 1H-Indazol-3-aminas de la fórmula (2-1) así como compuestos aromáticos o heteroaromáticos de la fórmula (2-2) son asequibles en comercios o se pueden obtener según procedimientos conocidos.

Según la ruta B-2, se pueden hacer reaccionar alternativamente orto-halobenzonitrilos de la fórmula (2-3) con hidrazidas de la fórmula (2-4) en presencia de un catalizador y una base (por ejemplo, bromuro de cobre (I)) /4/.

hidroxi-L-prolina; carbonato de potasio para X = Br o I y Ar = fenilo comp. L. Xu, I. Peng, Q. Pan, I. Jiang, D. Ma J. Org. Chem. 2013, 78, 3400) en 1H-indazol-3-aminas de la fórmula (II-5).

Los procedimientos según la invención para preparar los nuevos compuestos de la fórmula (I) se llevan a cabo preferentemente usando un diluyente. Como diluyentes para realizar los procedimientos según la invención se tienen en cuenta, además de agua, todos los disolventes inertes. Como ejemplos se han de mencionar: hidrocarburos halogenados (por ejemplo, hidrocarburos clorados tales como tetracloroetileno, tetracloroetano, dicloropropano, cloruro de metileno, diclorobutano, cloroformo, tetracloruro de carbono, tricloroetano, tricloroetileno, pentacloroetano, difluorobenceno, 1,2-dicloroetano, clorobenceno, bromobenceno, diclorobenceno, clorotolueno, triclorobenceno), alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol, isopropanol, butanol), éteres (por ejemplo, éter etilpropílico, éter metil-ter-butílico, anisol, fenetol, éter ciclohexilmétílico, éter dimetílico, éter dietílico, éter dipropílico, éter diisopropílico, éter din-butílico, éter diisobutílico, éter diisoamílico, etilenglicoldimetyléter, tetrahidrofurano, 1,4-dioxano, éter diclorodietílico y poliéster de óxido de etileno y/u óxido de propileno), aminas (por ejemplo, trimetil-, trietil-, tripripil-, tributilamina, N-metilmorfolina, piridina y tetrametilendiamina), hidrocarburos nitrados (por ejemplo, nitrometano, nitroetano, nitropropano, nitrobenceno, cloronitrobenceno, o-nitrotolueno); nitrilos (como, por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo, butironitrilo, isobutironitrilo, benzonitrilo, m-clorobenzonitrilo), dióxido de tetrahidrotiopheno, dimetilsulfóxido, tetrametilsulfóxido, dipropilsulfóxido, bencilmethylsulfóxido, diisobutylsulfóxido, dibutylsulfóxido, diisoamilsulfóxido, sulfonas (por ejemplo, dimetil-, dietil-, dipropil-, dibutil-, difenilo-, dihexil-, metiletil-, etilpropil-, etilisobutil- y pentametilsulfona), hidrocarburos alifáticos, cicloalifáticos o aromáticos (por ejemplo, pentano, hexano, heptano, octano, nonano e hidrocarburos técnicos), también los llamados "White Spirits" con componentes con puntos de ebullición en el intervalo de por ejemplo 40 °C a 250 °C, cimeno, fracciones de nafta dentro de un intervalo de ebullición de 70 °C a 190 °C, ciclohexano, metilciclohexano, éter de petróleo, ligroína, benceno, tolueno, xileno, ésteres (por ejemplo, metil-, etil-, butil-, isobutilacetato, dimetil-, dibutil-, etilencarbonato); amidas (por ejemplo, triamida de ácido hexametilenfosfórico, formamida, N-metilformamida, N,N-dimetilformamida, N,N-dipropilformamida, N,N-dibutilformamida, N-metilpirrolidina, N-metilcaprolactama, 1,3-dimetil-3,4,5,6-tetrahidro-2(1H)-pirimidina, octilpirrolidona, octilcaprolactama, 1,3-dimetil-2-imidazolindiona, N-formilpiperidina, N,N'-diformilpiperazina) y cetonas (por ejemplo, acetona, acetofenona, metiletilcetona, metilbutilcetona).

De hecho, el procedimiento según la invención también se puede llevar a cabo en mezclas de los disolventes y diluyentes mencionados.

Las temperaturas de reacción se pueden variar en la realización del procedimiento según la invención en un amplio rango. En general, se trabaja a temperaturas de entre -30 °C y +150 °C, preferentemente entre -10 °C y +100 °C.

El procedimiento según la invención se lleva a cabo en general bajo presión normal. Sin embargo, también es posible llevar a cabo el procedimiento según la invención a presión elevada o reducida, en general, a presiones absolutas de entre 0,1 bar y 15 bar.

Para realizar el procedimiento según la invención, se usan las sustancias de partida en general en cantidades casi equimolares. Sin embargo, también es posible usar uno de los componentes en un mayor exceso. La reacción se lleva a cabo en general en un diluyente apropiado en presencia de un agente auxiliar de reacción, opcionalmente también bajo una atmósfera de gas de protección (por ejemplo, bajo nitrógeno, argón o helio) y la mezcla de reacción se agitó en general durante varias horas a una temperatura necesaria. La elaboración se lleva a cabo según métodos usuales (véase los ejemplos de preparación).

Como agentes auxiliares de reacción básicos para la realización de los procedimientos según la invención se pueden usar todos los aglutinantes de ácidos apropiados. Como ejemplos se han de mencionar: compuestos de metales alcalinos o alcalinotérreos (por ejemplo, hidróxidos, hidruros, óxidos y carbonatos de litio, sodio, potasio, magnesio, calcio y bario), bases de amidina o bases de guanidina (por ejemplo, 7-metil-1,5,7-triaza-biciclo(4.4.0)dec-5-eno (MTBD); diazabiciclo(4.3.0)noneno (DBN), diazabiciclo(2.2.2)-octano (DABCO), 1,8-diazabiciclo(5.4.0)undeceno (DBU), ciclohexiltetrabutil-guanidina (CyTBG), ciclohexiltetrametilguanidina (CyTMG), N,N,N,N-tetrametil-1,8-naftalindiamina, pentametil-piperidina) y aminas, en especial aminas terciarias (por ejemplo, trietilamina, trimetilamina, tribencilamina, triisopropilamina, tributilamina, triciclohexilamina, triamilamina, trihexilamina, N,N-dimetilanilina, N,N-dimetiltoluidina, N,N-dimetil-p-aminopiridina, N-metil-pirrolidina, N-metilpiperidina, N-metil-imidazol, N-metil-pirazol, N-metil-morfolina, N-metil-hexametilendiamina, piridina, 4-pirrolidinopiridina, 4-dimetilamino-piridina, quinolina, 2-picolina, 3-picolina, pirimidina, acridina, N,N,N',N'-tetrametilendiamina, N,N,N',N'-tetraetilendiamina, quinoxalina, N-propildiisopropilamina, N-etyl-disopropilamina, N,N'-dimetil-ciclohexilamina, 2,6-lutidina, 2,4-lutidina o trietildiamina).

Como agentes auxiliares de reacción ácidos para la realización de los procedimientos según la invención, se pueden usar todos los ácidos minerales (por ejemplo, ácidos halohídricos tales como ácido fluorhídrico, ácido clorhídrico, ácido bromhídrico o ácido yodhídrico, así como ácido sulfúrico, ácido fosfórico, ácido fosforoso, ácido nítrico), ácidos de Lewis (por ejemplo, cloruro de aluminio (III), trifluoruro de boro o su eterato, cloruro de titanio (IV), cloruro de estaño (IV)) y ácidos orgánicos (por ejemplo, ácido fórmico, ácido acético, ácido propiónico, ácido malónico, ácido láctico, ácido oxálico, ácido fumárico, ácido adípico, ácido esteárico, ácido tartárico, ácido oleico, ácido metansulfónico, ácido benzoico, ácido bencensulfónico o ácido para-toluensulfónico).

Los compuestos activos de la invención o para usar según la invención son apropiados con una buena tolerancia en plantas, favorable toxicidad de animales de sangre caliente y buena tolerancia ambiental para la protección de plantas y órganos de plantas, para aumentar los productos de la cosecha, mejorar la calidad el producto cosechado y para combatir plagas animales, en especial insectos, arácnidos, helmintos, nematodos y moluscos, que se presentan en agricultura, en jardinería, en la cría de animales, en bosques, en jardines e instalaciones de tiempo libre, en la protección de existencias y materiales, así como en el sector de higiene. Se pueden usar preferentemente como agentes fitosanitarios. Son activos contra especies normales sensibles y resistentes así como contra todos y cada uno de los estados evolutivos. Entre los parásitos antes mencionados, se cuentan:

- 5 parásitos del filum Arthropoda, en especial de la clase Arachnida, por ejemplo, *Acarus spp.*, *aceria sheldoni*, *Aculops spp.*, *Aculus spp.*, *Amblyomma spp.*, *Amphitetranychus viennensis*, *Argas spp.*, *Boophilus spp.*, *Brevipalpus spp.*, *Bryobia graminum*, *Bryobia praetiosa*, *Centruroides spp.*, *Chorioptes spp.*, *Dermanyssus gallinae*, *Dermatophagoides pteronyssinus*, *Dermatophagoides farinae*, *Dermacentor spp.*, *Eotetranychus spp.*, *Epitrimerus pyri*, *Eutetranychus spp.*, *Eriophyes spp.*, *Glycyphagus domesticus*, *Halotydeus destructor*, *Hemitarsonemus spp.*, *Hyalomma spp.*, *Ixodes spp.*, *Latrodectus spp.*, *Loxosceles spp.*, *Metatetranychus spp.*, *Neutrombicula autumnalis*, *Nuphersa spp.*, *Oligonychus spp.*, *Ornithodoros spp.*, *Ornithonyssus spp.*, *Panonychus spp.*, *Phyllocoptura oleivora*, *Polyphagotarsonemus latus*, *Psoroptes spp.*, *Rhipicephalus spp.*, *Rhizoglyphus spp.*, *Sarcopites spp.*, *Scorpio maurus*, *Steneotarsonemus spp.*, *Steneotarsonemus spinki*, *Tarsonemus spp.*, *Tetranychus spp.*, *Trombicula alfreddugesi*, *Vaejovis spp.*, *Vasates lycopersici*; ;
- 10 de la clase Chilopoda, por ejemplo, *Geophilus spp.*, *Scutigera spp.*; ;
- 15 del orden o de la clase Collembola, por ejemplo, *Onychiurus armatus*; ;
- 20 de la clase Diplopoda por ejemplo, *Blaniulus guttulatus*; ;
- 25 de la clase Insecta, por ejemplo, del orden Blattodea, por ejemplo, *Blattella asahinai*, *Blattella germanica*, *Blatta orientalis*, *Leucophaea maderae*, *Panchlora spp.*, *Parcoblatta spp.*, *periplaneta spp.*, *Supella longipalpa*; ;
- 30 del orden Coleoptera, por ejemplo, *Acalymma vittatum*, *Acanthoscelides obtectus*, *Adoretus spp.*, *Agelastica alni*, *Agriotes spp.*, *Alphitobius diaperinus*, *Amphimallon solstitialis*, *Anobium punctatum*, *Anoplophora spp.*, *Anthonomus spp.*, *Anthrenus spp.*, *Apion spp.*, *Apogonia spp.*, *Atomaria spp.*, *Attagenus spp.*, *Bruchidius obtectus*, *Bruchus spp.*, *Cassida spp.*, *Cerotoma trifurcata*, *Ceutorhynchus spp.*, *Chaetocnema spp.*, *Cleonus mendicus*, *Conoderus spp.*, *Cosmopolites spp.*, *Costelytra zealandica*, *Ctenicera spp.*, *Curculio spp.*, *Cryptolestes ferrugineus*, *Cryptorhynchus lapathi*, *Cylindrocopturus spp.*, *Dermestes spp.*, *Diabrotica spp.*, *Dichocrocis spp.*, *Dicladispa armigera*, *Diloboderus spp.*, *Epilachna spp.*, *Epitrix spp.*, *Faustinus spp.*, *Gibbium psylloides*, *Gnathocerus cornutus*, *Hellula undalis*, *Heteronychus arator*, *Heteronyx spp.*, *Hylamorpha elegans*, *Hylotrupes bajulus*, *Hypera postica*, *Hypomeces squamosus*, *Hypothenemus spp.*, *Lachnostenra consanguinea*, *Lasioderma serricorne*, *Latheticus oryzae*, *Lathridius spp.*, *Lema spp.*, *Leptinotarsa decemlineata*, *Leucoptera spp.*, *Lissorhoptrus oryzophilus*, *Lixus spp.*, *Luperodes spp.*, *Lycus spp.*, *Megascelis spp.*, *Melanotus spp.*, *Meligethes aeneus*, *Melolontha spp.*, *Migdolus spp.*, *Monochamus spp.*, *Naupactus xanthographus*, *Necrobia spp.*, *Niptus hololeucus*, *Oryctes rhinoceros*, *Oryzaephilus surinamensis*, *Oryzaphagus oryzae*, *Otiorrhynchus spp.*, *Oxycontona jucunda*, *Phaedon cochleariae*, *Phyllophaga spp.*, *Phyllophaga helleri*, *Phylloreta spp.*, *Popillia japonica*, *Premnotypes spp.*, *Prostephanus truncatus*, *Psylliodes spp.*, *Ptinus spp.*, *Rhizobius ventralis*, *Rhizopertha dominica*, *Sitophilus spp.*, *Sitophilus oryzae*, *Sphenophorus spp.*, *Stegobium paniceum*, *Sternechus spp.*, *Symplyctes spp.*, *Tanymecus spp.*, *Tenebrio molitor*, *Tenebrioides mauretanicus*, *Tribolium spp.*, *Trogoderma spp.*, *Tychius spp.*, *Xylotrechus spp.*, *Zabrus spp.*; ;
- 40 del orden Diptera, por ejemplo, *Aedes spp.*, *Agromyza spp.*, *Anastrepha spp.*, *Anopheles spp.*, *Asphondyla spp.*, *Bactrocera spp.*, *bibio hortulanus*, *Calliphora erythrocephala*, *Calliphora vicina*, *Ceratitis capitata*, *Chironomus spp.*, *Chrysomya spp.*, *Chrysops spp.*, *Chrysozona pluvialis*, *Cochliomyia spp.*, *Contarinia spp.*, *Cordylobia anthropophaga*, *Cricotopus sylvestris*, *Culex spp.*, *Culicoides spp.*, *Culiseta spp.*, *Cuterebra spp.*, *Dacus oleae*, *Dasyneura spp.*, *Delia spp.*, *Dermatobia hominis*, *Drosophila spp.*, *Echinocnemus spp.*, *Fannia spp.*, *Gasterophilus spp.*, *Glossina spp.*, *Haematopota spp.*, *Hydrellia spp.*, *Hydrellia griseola*, *Hylemya spp.*, *Hippobosca spp.*, *Hypoderma spp.*, *Liriomyza spp.*, *Lucilia spp.*, *Lutzomyia spp.*, *Mansonia spp.*, *Musca spp.*, *Oestrus spp.*, *Oscinella frit*, *Paratanytarsus spp.*, *Paralauterborniella subcincta*, *Pegomyia spp.*, *Phlebotomus spp.*, *Phorbia spp.*, *Phormia spp.*, *Piophila casei*, *Propidiplosis spp.*, *Psila rosae*, *Rhagoletis spp.*, *Sarcophaga spp.*, *Simulium spp.*, *Stomoxys spp.*, *Tabanus spp.*, *Tetanops spp.*, *Tipula spp.*; ;
- 45 del orden Heteroptera, por ejemplo, *Anasa tristis*, *Antestiopsis spp.*, *Boisea spp.*, *Blissus spp.*, *Calocoris spp.*, *Campylomma livida*, *Cavalerius spp.*, *cimex spp.*, *Collaria spp.*, *Creontiades dilutus*, *Dasynus piperis*, *Dichelops furcatus*, *Diconocoris hewetti*, *Dysdercus spp.*, *Euschistus spp.*, *Eurygaster spp.*, *Helopeltis spp.*, *Horcius nobilellus*, *Leptocorisa spp.*, *Leptocorisa varicornis*, *Leptoglossus phyllopus*, *Lygus spp.*, *Macropes excavatus*, *Miridae*, *Monalonion atratum*, *Nezara spp.*, *Oebalus spp.*, *Pentomidae*, *Piesma quadrata*, *Piezodorus spp.*, *Psallus spp.*, *Pseudacysta perseae*, *Rhodnius spp.*, *Sahlbergella singularis*, *Scaptocoris castanea*, *Scotinophora spp.*, *Stephanitis nashi*, *Tibraca spp.*, *Triatoma spp.*; ;
- 50
- 55

- 5 del orden Homoptera, por ejemplo, *Acizzia acaciae**baileyanae*, *Acizzia dodonaeae*, *Acizzia uncatooides*, *Acrida turrita*, *Acyrtosipon* spp., *Acrogonia* spp., *Aeneolamia* spp., *Agonoscena* spp., *Aleyrodes proletella*, *Aleurolobus barodensis*, *Aleurothrixus floccosus*, *Allocaridara malayensis*, *Amrasca* spp., *Anuraphis cardui*, *Aonidiella* spp., *Aphanostigma piri*, *Aphis* spp., *Arboridia apicalis*, *Arytainilla* spp., *Aspidiella* spp., *Aspidiotus* spp., *Atanus* spp., *Aulacorthum solani*, *Bemisia tabaci*, *Blastopsylla occidentalis*, *Boreioglycaspis melaleucae*, *Brachycaudus helichrysi*, *Brachycolus* spp., *Brevicoryne brassicae*, *Cacopsylla* spp., *Calligypona marginata*, *Carneocephala fulgida*, *Ceratovacuna lanigera*, *Cercopidae*, *Ceroplastes* spp., *Chaetosiphon fragaefolii*, *Chionaspis tegalensis*, *Chlorita onukii*, *Chondracris rosea*, *Chromaphis juglandicola*, *Chrysomphalus ficus*, *cicadulina mbila*, *Coccomytilus halli*, *Coccus* spp., *Cryptomyzus ribis*, *Cryptoneossa* spp., *Ctenarytaina* spp., *Dalbulus* spp., *Dialeurodes citri*, *Diaphorina citri*, *Diaspis* spp., *Drosicha* spp., *Dysaphis* spp., *Dysmicoccus* spp., *Emoasca* spp., *Eriosoma* spp., *Erythroneura* spp., *Eucalyptolyma* spp., *Euphyllura* spp., *Euscelis bilobatus*, *Ferrisia* spp., *Geococcus coffeae*, *Glycaspis* spp., *Heteropsylla cubana*, *Heteropsylla spinulosa*, *Homalodisca coagulata*, *Hyalopterus arundinis*, *Icerya* spp., *Idiocerus* spp., *Idioscopus* spp., *Laodelphax striatellus*, *Lecanium* spp., *Lepidosaphes* spp., *Lipaphis erysimi*, *Macrosiphum* spp., *Macrosteles facifrons*, *Mahanarva* spp., *Melanaphis sacchari*, *Metcalfiella* spp., *Metopolophium dirhodum*, *Monellia costalis*, *Monelliopsis pecanis*, *Myzus* spp., *Nasonovia ribisnigri*, *Nephrotettix* spp., *Nettigonella spectra*, *Nilaparvata lugens*, *Oncometopia* spp., *Orthezia praelonga*, *Oxya chinensis*, *Pachypsylla* spp., *Parabemisia myricae*, *Paratriozza* spp., *Parlatoria* spp., *Pemphigus* spp., *peregrinus maidis*, *Phenacoccus* spp., *Phloeomyzus passerinii*, *Phorodon humuli*, *Phylloxera* spp., *Pinnaspis aspidistrae*, *Planococcus* spp., *Prosopidopsylla flava*, *Protopulvinaria pyriformis*, *Pseudaulacaspis pentagona*, *Pseudococcus* spp., *Psyllopsis* spp., *Psylla* spp., *Pteromalus* spp., *Pyrilla* spp., *Quadraspisiotus* spp., *Quesada gigas*, *Rastrococcus* spp., *Rhopalosiphum* spp., *Saissetia* spp., *Scaphoideus titanus*, *Schizaphis graminum*, *Selenaspidus articulatus*, *Sogata* spp., *Sogatella furcifera*, *Sogatodes* spp., *Stictocephala festina*, *Siphoninus phillyreae*, *Tenalaphara malayensis*, *Tetragonocephela* spp., *Tinocallis caryaefoliae*, *Tomaspis* spp., *Toxoptera* spp., *Trialeurodes vaporariorum*, *Trioza* spp., *Typhlocyba* spp., *Unaspis* spp., *Viteus vitifolii*, *Zygina* spp.;
- 10 del orden Hymenoptera, por ejemplo, *Acromyrmex* spp., *Athalia* spp., *Atta* spp., *Diprion* spp., *Hoplocampa* spp., *Lasius* spp., *Monomorium pharaonis*, *Sirex* spp., *Solenopsis invicta*, *Tapinoma* spp., *Urocerus* spp., *Vespa* spp., *Xeris* spp.;
- 15 del orden Isopoda, por ejemplo, *Armadillidium vulgare*, *Oniscus asellus*, *Porcellio scaber*;
- 20 30 del orden Isoptera, por ejemplo, *Coptotermes* spp., *Cornitermes cumulans*, *Cryptotermes* spp., *Incisitermes* spp., *Microtermes obesi*, *Odontotermes* spp., *Reticulitermes* spp.;
- 25 del orden Lepidoptera, por ejemplo, *Achroia grisella*, *Acronicta major*, *Adoxophyes* spp., *Aedia leucomelas*, *Agrotis* spp., *Alabama* spp., *Amyleois transitella*, *Anarsia* spp., *Anticarsia* spp., *Argyroploce* spp., *Barathra brassicae*, *Borbo cinnara*, *Bucculatrix thurberiella*, *Bupalus piniarius*, *Busseola* spp., *Cacoecia* spp., *Caloptilia theivora*, *Capua reticulana*, *Carpocapsa pomonella*, *Carposina nipponensis*, *Cheimatobia brumata*, *Chilo* spp., *Choristoneura* spp., *Clysia ambiguella*, *Cnaphalocerus* spp., *Cnaphalocrocis medinalis*, *Cnephasia* spp., *Conopomorpha* spp., *Conotrachelus* spp., *Copitarsia* spp., *Cydia* spp., *Dalaca noctuides*, *Diaphania* spp., *Diatraea saccharalis*, *Earias* spp., *Ecdytolopha aurantium*, *Elasmopalpus lignosellus*, *Eldana saccharina*, *Ephestia* spp., *Epinotia* spp., *Epiphyas postvittana*, *Etiella* spp., *Eulia* spp., *Eupoecilia ambiguella*, *Euproctis* spp., *Euxoa* spp., *Feltia* spp., *Galleria mellonella*, *Gracillaria* spp., *Grapholitha* spp., *Hedylepta* spp., *Helicoverpa* spp., *Heliothis* spp., *Hofmannophila pseudospretella*, *Homoeosoma* spp., *Homona* spp., *Hyponomeuta padella*, *Kakivoria flavofasciata*, *Laphyagma* spp., *Laspeyresia molesta*, *Leucinodes orbonalis*, *Leucoptera* spp., *Lithocolletis* spp., *Lithophane antennata*, *Lobesia* spp., *Loxagrotis albicosta*, *Lymantria* spp., *Lyonetia* spp., *Malacosoma neustria*, *Maruca testulalis*, *Mamstra brassicae*, *Melanitis leda*, *Mocis* spp., *Monopis obviella*, *Mythimna separata*, *Nemapogon cloacellus*, *Nymphula* spp., *Oiketicus* spp., *Oria* spp., *Orthaga* spp., *Ostrinia* spp., *Oulema oryzae*, *Panolis flammea*, *Parnara* spp., *Pectinophora* spp., *perileucoptera* spp., *Phthorimaea* spp., *Phylloconistis citrella*, *Phyllonorycter* spp., *Pieris* spp., *Platynota stultana*, *Plodia interpunctella*, *Plusia* spp., *Plutella xylostella*, *Prays* spp., *Prodenia* spp., *Protoparce* spp., *Pseudaletia* spp., *Pseudaleitia unipuncta*, *Pseudoplusia includens*, *Pyrausta nubilalis*, *Rachiplusia nu*, *Schoenobius* spp., *Scirpophaga* spp., *Scirpophaga innotata*, *Scotia segetum*, *Sesamia* spp., *Sesamia inferens*, *Sparganothis* spp., *Spodoptera* spp., *Spodoptera praefica*, *Stathmopoda* spp., *Stomopteryx subsecivella*, *Synanthedon* spp., *Tecia solanivora*, *Thermesia gemmatalis*, *Tinea cloacella*, *Tinea pellionella*, *Tineola bisselliella*, *Tortrix* spp., *Trichophaga tapetzella*, *Trichoplusia* spp., *Tryporyza incertulas*, *Tuta absoluta*, *Virachola* spp.;
- 40 45 50 55 del orden Orthoptera o Saltatoria, por ejemplo, *Acheta domesticus*, *Dichroplus* spp., *Gryllotalpa* spp., *Hieroglyphus* spp., *Locusta* spp., *Melanoplus* spp., *Schistocerca gregaria*;
- 55 del orden Phthiraptera, por ejemplo, *Damalinia* spp., *Haematopinus* spp., *Linognathus* spp., *Pediculus* spp., *Phylloera vastatrix*, *Phtirus pubis*, *Trichodectes* spp.;
- del orden de Psocoptera, por ejemplo, *Lepinotus* spp., *Liposcelis* spp.;
- del orden Siphonaptera, por ejemplo, *Ceratophyllus* spp., *Ctenocephalides* spp., *Pulex irritans*, *Tunga penetrans*,

Xenopsylla cheopsis;

del orden Thysanoptera por ejemplo, Anaphothrips obscurus, Bاليothrips biformis, Drepanothrips reuteri, En,neothrips flavens, Frankliniella spp., Heliothrips spp., Hercinothrips femoralis, Rhipiphorothrips cruentatus, Scirtothrips spp., Taeniothrips cardamomi, Thrips spp.;

5 del orden Zygentoma (= Thysanura), z. B. Ctenolepisma spp., Lepisma saccharina, Lepismodes inquilinus, Thermobia domestica;

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

parásitos del filum Mollusca, en especial de la clase Bivalvia, por ejemplo, Dreissena spp., así como de la clase Gastropoda, por ejemplo, Arion spp., biomphalaria spp., Bulinus spp., Deroceras spp., Galba spp., Lymnaea spp., 10 Oncomelania spp., Pomacea spp., Succinea spp.;

parásitos animales de los fila de los platelmintos y nematodos, por ejemplo, Ancylostoma duodenale, Ancylostoma ceylanicum, Acyllostoma braziliensis, Ancylostoma spp., Ascaris spp., Brugia malayi, Brugia timori, Bunostomum spp., Chabertia spp., Clonorchis spp., Cooperia spp., Dicrocoelium spp., Dictyocaulus filaria, Diphyllolothrium latum, Dracunculus medinensis, Echinococcus granulosus, Echinococcus multilocularis, Enterobius vermicularis, Faciola spp., Haemonchus spp., Heterakis spp., Hymenolepis nana, Hyostrongylus spp., Loa Loa, Nematodirus spp., Oesophagostomum spp., Opisthorchis spp., Onchocerca volvulus, Ostertagia spp., Paragonimus spp., Schistosomen spp., Strongyloides fuelleborni, Strongyloides stercoralis, Strongyloides spp., 15 Taenia saginata, Taenia solium, Trichinella spiralis, Trichinella nativa, Trichinella britovi, Trichinella nelsoni, Trichinella pseudospiralis, Trichostrongylus spp., Trichuris trichuria, Wuchereria bancrofti;

20 parásitos de plantas del filum de los nematodos, es decir, nematodos fitoparásitos,, en especial Aphelenchoides spp., Bursaphelenchus spp., Ditylenchus spp., Globodera spp., Heterodera spp., Longidorus spp., Meloidogyne spp., Pratylenchus spp., Radopholus spp., Trichodorus spp., Tylenchulus spp., Xiphinema spp., Helicotylenchus spp., Tylenchorhynchus spp., Scutellonema spp., Paratrichodorus spp., Meloinema spp., Paraphelenchus spp., Aglenchus spp., Belonolaimus spp., Nacobbus spp., Rotylenchulus spp., Rotylenchus spp., Neotylenchus spp., 25 Paraphelenchus spp., Dolichodorus spp., Hoplolaimus spp., Punctodera spp., Criconemella spp., Quinisulcius spp., Hemicycliophora spp., Anguina spp., Subanguina spp., Hemicriconemoides spp., Psilenchus spp., Pseudohalenchus spp., Criconemoides spp., Cacopaurus spp.

También se puede combatir del subreino de los protozoos, el orden de Coccidia, por ejemplo, Eimeria spp.

La presente invención se refiere también a formulaciones y formas de aplicación preparadas a partir de ellas como agentes fitosanitarios y/o agentes de combate de insectos tales como, por ejemplo, caldos de empapado, de inmersión y de pulverización, que comprenden al menos uno de los compuestos activos según la invención. Opcionalmente, las formas de aplicación contienen otros agentes fitosanitarios y/o agentes de combate de parásitos y/o adyuvantes que mejoran la acción como estimuladores de la penetración, por ejemplo, aceites vegetales como, por ejemplo, aceite de colza, aceite de girasol, aceites minerales como, por ejemplo, aceites parafínicos, ésteres de alquilo de ácidos grasos vegetales como, por ejemplo, éster metílico de aceite de colza o de soja o alcoxilatos de alcanos y/o agentes de dispersión como, por ejemplo, alquilsiloxanos y/o sales, por ejemplo, sales de amonio o fosfonio orgánicas o inorgánicas como, por ejemplo, sulfato de amonio o hidrógeno-fosfato de diamonio y/o agentes que estimulan la retención como, por ejemplo, dioctilsulfosuccinato o polímeros de hidroxipropil-guar y/o humectantes como, por ejemplo, glicerina y/o fertilizantes como, por ejemplo, fertilizantes con contenido de amonio, potasio o fósforo.

Las formulaciones usuales son, por ejemplo, líquidos solubles en agua (SL), concentrados en emulsión (EC), emulsiones en agua (EW), concentrados en suspensión (SC, SE, FS, OD), granulados dispersables en agua (WG), granulados (GR) y concentrados en cápsula (CS); estos y otros tipos de formulaciones posibles se describen, por ejemplo, por Crop Life International y en Pesticide Specifications, Manual on development and use of FAO and WHO specifications for pesticides, FAO Plant Production and Protection Papers – 173, preparada por la FAO/WHO Joint Meeting on Pesticide Specifications, 2004, ISBN: 9251048576. Opcionalmente, las formulaciones contienen además de uno o varios compuestos activos según la invención otros compuestos activos agroquímicos.

Preferentemente se trata de formulaciones o formas de aplicación que contienen excipientes tales como, por ejemplo, agentes de extensión, disolventes, estimuladores de la espontaneidad, vehículos, emulsionantes, dispersantes, agentes anticongelantes, biocidas, espesantes y/u otros excipientes tales como, por ejemplo, adyuvantes. Un adyuvante en este contexto es un componente que mejora la acción biológica de la formulación sin que el componente en sí tenga un efecto biológico. Los ejemplos de adyuvantes son agentes que estimulan la retención, el comportamiento de dispersión, la adherencia a la superficie de las hojas o la penetración.

Estas formulaciones se preparan de manera conocida, por ejemplo, por mezcla de los compuestos activos con excipientes como, por ejemplo, agentes de dispersión, disolventes y/o vehículos sólidos y/u otros excipientes tales como, por ejemplo, sustancias tensioactivas. La preparación de las formulaciones se realiza ya sea en instalaciones apropiadas o también antes o durante la aplicación.

Como adyuvantes se pueden usar aquellas sustancias que son apropiadas para otorgar propiedades particulares a la formulación del principio activo o las formas de aplicación derivadas de estas formulaciones (como, por ejemplo, agentes fitosanitarios listos para usar como caldos de pulverización o desinfección de simientes), como propiedades técnicas determinadas y/o también propiedades biológicas especiales.

- 5 Como diluyentes son apropiados, por ejemplo, agua, fluidos químicos orgánicos polares y no polares, por ejemplo, de las clases de los hidrocarburos aromáticos y no aromáticos (tales como parafinas, alquilbencenos, alquinaltafinas, clorobencenos), los alcoholes y polioles (que eventualmente también pueden estar sustituidos, eterificados y/o esterificados), las cetonas (tales como acetona, ciclohexanona), ésteres (también grasas y aceites) y (poli)éteres, las aminas simples y sustituidas, amidas, lactamas (como N-alquilpirrolidona) y lactonas, sulfonas y sulfóxidos (como dimetilsulfóxido).

En el caso de usar agua como diluyente, también se pueden usar, por ejemplo, disolventes orgánicos como disolventes auxiliares. Como disolventes líquidos se tienen esencialmente en cuenta: compuestos aromáticos, tales como xileno, tolueno o alquinaltafinas, compuestos aromáticos clorados e hidrocarburos alifáticos clorados, tales como clorobencenos, cloroetilenos o cloruro de metileno, hidrocarburos alifáticos tales como ciclohexano o parafinas, por ejemplo, fracciones de petróleo, aceites minerales y vegetales, alcoholes tales como butanol o glicol, así como sus éteres y ésteres, cetonas tales como acetona, metiletilcetona, metilisobutilcetona o ciclohexanona, disolventes fuertemente polares, como dimetilsulfóxido, así como agua.

20 Básicamente se pueden usar todos los disolventes apropiados. Disolventes apropiados son, por ejemplo, hidrocarburos aromáticos tales como, por ejemplo, xileno, tolueno o alquinaltafinas, hidrocarburos aromáticos o alifáticos clorados tales como, por ejemplo, clorobenceno, cloroetileno o cloruro de metileno, hidrocarburos alifáticos tales como, por ejemplo, ciclohexano, parafina, fracciones de petróleo, aceites minerales y vegetales, alcoholes tales como, por ejemplo, metanol, etanol, isopropanol, butanol o glicol, así como sus éteres y ésteres, cetonas tales como, por ejemplo, acetona, metiletilcetona, metilisobutilcetona o ciclohexanona, disolventes fuertemente polares tal como dimetilsulfóxido, así como agua.

25 Básicamente se pueden usar todos los portadores apropiados. Como portadores se tienen en cuenta en especial: por ejemplo, sales de amonio y harinas naturales tales como caolines, arcillas, talco, tiza, cuarzo, atapulgita, montmorilonita o tierra de diatomeas y harinas sintéticas, tales como ácido silílico muy disperso, óxido de aluminio y silicatos naturales o sintéticos, resinas, ceras y/o fertilizantes. También se pueden usar mezclas de estos portadores. 30 Como vehículos sólidos para granulados se tienen en cuenta: por ejemplo, piedras naturales rotas y fraccionadas tales como calcita, mármol, piedra pómez, sepiolita, dolomita, así como granulados sintéticos de harinas inorgánicas y orgánicas, así como granulados de material orgánico como papel, aserrín, cáscara de coco, mazorca de maíz y tallos de tabaco.

35 También se pueden usar diluyentes o disolventes gaseosos licuados. En especial, son apropiados aquellos diluyentes o portadores que, a temperatura normal y a presión normal, son gaseosos, por ejemplo, gases propelentes en aerosol tales como hidrocarburos halogenados, así como butano, propano, nitrógeno y dióxido de carbono.

40 Los ejemplos de agentes emulsionantes y/o espumantes, dispersantes o humectantes con propiedades iónicas o no iónicas o mezclas de estos agentes tensioactos son sales de ácido poliacrílico, sales de ácido lignosulfónico, sales de ácido fenolsulfónico o ácido naftalensulfónico, policondensados de óxido de etileno con alcoholes grasos o con ácidos grasos o con aminas grasas con fenoles sustituidos (preferentemente alquilfenoles o arilfenoles), sales de ésteres de ácido sulfosuccínico, derivados de taurina (con preferencia tauratos de alquilo), ésteres de ácido fosfórico de alcoholes o fenoles polietoxilados, ésteres de ácido graso de polioles y derivados de los compuestos que contienen sulfatos, sulfonatos y fosfatos, por ejemplo, alquilarilpoliglicoléteres, alquilsulfonatos, alquilsulfatos, arilsulfonatos, hidrolizados de albúmina, lejías de lignina-sulfito y metilcelulosa. La presencia de una sustancia tensioactiva es ventajosa cuando uno de los compuestos activos y/o uno de los portadores inertes no es soluble en agua y cuando la aplicación se produce en agua.

45 Como otros auxiliares puede haber en las formulaciones y las formas de aplicación derivadas de ellas colorantes como pigmentos inorgánicos, por ejemplo, óxido de hierro, óxido de titanio, azul ferrociano y colorantes orgánicos tales como colorantes de alizarina, azoicos y de metaloftalocianina y nutrientes y oligoelementos como sales de hierro, de manganeso, de boro, de cobre, de cobalto, de molibdeno y de cinc.

50 Además, pueden estar contenidos estabilizantes como agentes estabilizantes del frío, agentes conservantes, agentes antioxidantes, agentes fotoprotectores u otros agentes que mejoran la estabilidad química y/o física. Además, pueden estar contenidos agentes generadores de espuma o antiespumantes.

55 Las formulaciones y las formas de aplicación derivadas de ellas también pueden contener como auxiliares adicionales adhesivos como carboximetilcelulosa, polímeros naturales y sintéticos, pulverulentos, granulados o en forma de látex, como goma arábiga, alcohol polivinílico, acetato de polivinilo, así como fosfolípidos naturales como céfalina y lecitina, y fosfolípidos sintéticos. Otros auxiliares pueden ser aceites minerales y vegetales.

Eventualmente, también pueden estar contenidos otros auxiliares en las formulaciones y las formas de aplicación derivadas de ellas. Estos aditivos son, por ejemplo, aromatizantes, coloides de protección, aglutinantes, adhesivos, espesantes, sustancias tixotrópicas, estimuladores de la penetración, estimuladores de la retención, estabilizantes, agentes secuestrantes, formadores de complejos, humectantes, dispersantes. En general, los compuestos activos se pueden combinar con cualquier aditivo sólido o líquido que se usa habitualmente para fines de formulación.

Como estimuladores de la retención se tienen en cuenta aquellas sustancias que reducen la tensión superficial dinámica como, por ejemplo, dioctilsulfosuccinato o que aumentan la viscoelasticidad como, por ejemplo, los polímeros de hidroxipropil-guar.

Como estimuladores de la penetración se tienen en cuenta en el presente contexto todas aquellas sustancias que se emplean usualmente para mejorar la penetración de compuestos activos agroquímicos en plantas. Los estimuladores de la penetración se definen en este contexto por el hecho de que penetran en la cutícula de la planta desde el caldo de pulverización (por lo general, acuoso) y/o de la capa rociada y así pueden aumentar la movilidad de los compuestos activos en la cutícula. El método descrito en la literatura (Baur et al., 1997, *Pesticide Science* 51, 131-152) se puede usar para determinar esta propiedad. A modo de ejemplo, se mencionan alcoholalcoxilatos como, por ejemplo, etoxilato graso de coco (10) o isotrideciletoxitato (12), ésteres de ácidos grasos tales como, por ejemplo, éster metílico de aceite de colza o de soja, alcoxilatos de aminas grasas tales como, por ejemplo, etoxilato de amina de cebo (15) o sales de amonio y/o fosfonio tales como, por ejemplo, sulfato de amonio o hidrógeno-fosfato de diamonio.

Las formulaciones contienen preferentemente entre el 0,00000001 y el 98 % en peso de principio activo o, con preferencia especial, entre el 0,01 y el 95 % en peso de principio activo, con preferencia particular, entre el 0,5 y el 90 % en peso de principio activo, referido al peso de la formulación.

El contenido de principio activo de las formas de aplicación preparadas a partir de las formulaciones (agentes fitosanitarios) puede variar en amplios rangos. La concentración de principio activo de las formas de aplicación puede ser usualmente de entre el 0,00000001 y el 95 % en peso de principio activo, preferentemente de entre el 0,00001 y el 1 % en peso, referido al peso de la forma de aplicación. La aplicación se realiza en una forma usual adaptada a las formas de aplicación.

Los compuestos activos según la invención o para usar según la invención se pueden usar como tales o en sus formulaciones también en mezcla con uno varios fungicidas, bactericidas, acaricidas, molusquicidas, nemacidas, insecticidas, agentes microbiológicos, agentes beneficiosos, fertilizantes, repelentes de aves, agentes fitotónicos, esterilizantes, sinergistas, protectores, productos semioquímicos y/o reguladores del crecimiento de las plantas apropiados, a fin de ampliar así, por ejemplo, el espectro de acción, prolongar la duración de la acción, aumentar la velocidad de la acción, evitar la repelencia o prevenir desarrollos de resistencias. Además, estas combinaciones de compuestos activos pueden mejorar el crecimiento de las plantas y/o la tolerancia a factores abiotícos como, por ejemplo, altas o bajas temperaturas, contra sequía o contra contenido elevado de agua o sal en el suelo. También se puede mejorar el comportamiento de brotes y frutos, optimizar la capacidad germinativa y el enraizamiento, facilitar la cosecha y aumentar los productos cosechados, influir sobre la maduración, elevar la calidad y/o el valor nutritivo de los productos cosechados, prolongar la capacidad en almacenamiento y/o la procesabilidad de los productos cosechados. Mediante la combinación de los compuestos activos según la invención o para usar según la invención con pares de mezcla se obtienen efectos sinérgicos, es decir, la eficacia de la correspondiente mezcla es mayor que lo esperable debido a las eficacias de los componentes aislados. En general, se pueden usar combinaciones tanto en mezclas previas, en tanque o listas para usar, como también en aplicaciones en simientes.

Los compuestos activos mencionados aquí con su nombre común son conocidos y, por ejemplo, se describen en el manual de pesticidas ("The Pesticide Manual" 14th Ed., British Crop Protection Council 2006) o se puede buscar en la Internet (por ejemplo, <http://www.alanwood.net/pesticides>).

45 Insecticidas / acaricidas / nematicidas apropiados como pares de mezcla son

(1) inhibidores de la acetilcolinesterasa (AChE) como, por ejemplo, carbamatos, por ejemplo, alancarb, aldicarb, bendiocarb, benfuracarb, butocarboxim, butoxicarboxim, carbarilo, carbofurano, carbosulfano, etiofencarb, fenobucarb, formetanato, furatiocarb, isoprocarb, metiocarb, metomil, metolcarb, oxamil, pirimicarb, propoxur, tiocarb, tiofanox, triazamato, trimetacarb, XMC y xilicarb; o organofosfatos, por ejemplo, acefato, azametifos, azinfos-etilo, azinfos-metilo, cadusafos, cloroetoxifos, clorofenvinfos, cloromefos, cloropirifos, cloropirifos-metilo, coumafos, cianofos, demeton-S-metilo, diazinona, diclorovos/DDVP, dicrotofos, dimetoato, dimetilvinfos, disulfoton, EPN, etiona, etoprofos, famfur, fenamifos, fenitrotiona, fentina, fostiazato, heptenofos, imicafos, isofenfos, O-(metoxiaminotio-fosforil) salicilato de isopropilo, isoxationa, malationa, mecarbam, metamidofos, metidationa, mevinfos, monocrotofos, naled, ometoato, oxidemetona-metilo, parationa, parationa-metilo, fentoato, forato, fosalona, fosmet, fosfamidona, foxim, pirimifos-metilo, profenofos, propetanfos, protiofos, piraclofos, piridafenton, quinalfos, sulfotep, tebupirimfos, temefos, terbufos, tetraclorvinfos, tiometona, triazofos, triclorofona y vamidotiona.

(2) antagonistas del canal de cloruro controlado con GABA como, por ejemplo,

- ciclodien-organocloros, por ejemplo, clorodano y endosulfano; o fenilopirazoles (fiproles), por ejemplo, etiprol y fipronil.
- (3) moduladores del canal de sodio / bloqueadores del canal de sodio dependientes de la tensión como, por ejemplo,
- 5 piretroides, por ejemplo, acrinatrina, aletrina, d-cis-trans aletrina, d-trans aletrina, bifentrina, bioaletrina, isómeros de bioaletrina S-ciclopentenilo, bioresmetrina, cicloprotrina, ciflutrina, beta-ciflutrina, cihalotrina, lambda-cihalotrina, gamma-cihalotrina, cipermetrina, alfa-cipermetrina, beta-cipermetrina, teta-cipermetrina, zeta-cipermetrina, cifenotrina [isómeros (1R)-trans], deltametrina, empentrina [isómeros (EZ)-(1R)], esfenvalerato, etofenprox, fenpropatrina, fenvalerato, flucitrinato, flumetrina, tau-fluvalinato, halfenprox, imiprotrina, cadetrina, permetrina, fenotrina [isómero (1R)-trans], praletrina, piretrinas (piretro), resmetrina, silafluofeno, teflutrina, tetrametrina, tetrametrina [isómeros (1R)], tralometrina y transflutrina; o DDT; o metoxicloro.
- (4) agonistas del receptor de acetilcolina nicotinérgico (nAChR), como, por ejemplo neonicotinoides, por ejemplo, acetamiprid, clotianidina, dinotefurano, imidacloprida, nitenpiram, tiacloprida y
- 10 tiameksam; o nicotina; o sulfoxaflor.
- (5) activadores alostéricos del receptor de acetilcolino nicotinérgico (nAChR) como, por ejemplo espinosas, por ejemplo, espinetoram y espinosad.
- 15 (6) activadores del canal de cloruro, como, por ejemplo avermectinas/milbemicinas, por ejemplo, abamectina, benzoato de emamectina, lepimectina y milbemectina.
- (7) imitadores de la hormona juvenil, como, por ejemplo análogos de la hormona juvenil, por ejemplo, hidropreno, quinopreno y metopreno; o fenoxicarb; o piriproxifeno.
- 20 (8) compuestos activos con mecanismos de acción desconocidos o no específicos, como, por ejemplo haluros de alquilo, por ejemplo, bromuro de metilo y otros haluros de alquilo; o cloropicrina; o fluoruro de sulfuro; o bórax; o tártaro emético.
- (9) compuestos antiapetito selectivos, por ejemplo, pimetrozinás; o flonicamida.
- (10) inhibidores del crecimiento de ácaros, por ejemplo, clofentezinas, hexitiazox y diflovidazina; o etoxazol.
- 25 (11) disruptores microbianos de la membrana intestinal de insectos, por ejemplo, *Bacillus thuringiensis* subespecie *israelensis*, *Bacillus thuringiensis* subespecie *aizawai*, *Bacillus thuringiensis* subespecie *kurstaki*, *Bacillus thuringiensis* subespecie *tenebrionis* y proteínas vegetales B.t.: Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1Fa, Cry1A.105, Cry2Ab, Vip3A, mCry3A, Cry3Ab, Cry3Bb, Cry34 Ab1/35Ab1; o *Bacillus sphaericus*.
- 30 (12) inhibidores de la fosforilación oxidativa, disruptores de ATP como, por ejemplo, diafentiurona; o compuestos de organoestaño, por ejemplo, azociclotina, cihexatina y óxido de fenbutatina; o propargita; o tetradiifona.
- (13) desacopladores de la fosforilación oxidativa por interrupción del gradiente de protón H como, por ejemplo, clorofenapir, DNOC y sulfuramida.
- 35 (14) antagonistas del receptor de acetilcolina nicotinérgico como, por ejemplo, bensultap, clorhidrato de cartap, tiociclam y tiosultap sódico.
- (15) inhibidores de la biosíntesis de quitina, tipo 0 como, por ejemplo, bistriflurona, clorofluazurona, diflubenzurona, flucicloxurona, flufenoxurona, hexaflumurona, lufenurona, novalurona, noviflumurona, teflubenzurona y triflumurona.
- 40 (16) inhibidores de la biosíntesis de quitina, tipo 1 como, por ejemplo, buprofezina.
- (17) compuestos activos disruptores de la muda, dípteros como, por ejemplo, ciromazinas.
- (18) agonistas del receptor de ecdisona como, por ejemplo, cromafenozida, halofenozida, metoxifenozida y tebufenozida.
- 45 (19) agonistas octopaminérgicos como, por ejemplo, amitraz.
- (20) inhibidores del transporte de electrones del complejo III como, por ejemplo, hidrametilnona; o acequinocilo; o fluacripirim.

(21) inhibidores del transporte de electrones del complejo I, por ejemplo,

acaricidas METI, por ejemplo, fenazaquina, fenpiroximato, pirimidifeno, piridabeno, tebufenpirad y tolfenpirad; o rotenona (Derris).

(22) bloqueadores del canal de sodio dependientes de la tensión, por ejemplo, indoxacarb; o metaflumizona.

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

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

10 (25) inhibidores del transporte de electrones del complejo II como, por ejemplo, cienopirafeno y cflumetofeno.

(28) efectores del receptor de rianodina como, por ejemplo diamidas, por ejemplo, cloroantraniliprol, ciantraniliprol y flubendiamida.

Otros compuestos activos como, por ejemplo, amidoflumet, azadiractina, benclotiaz, benzoximato, bifenazato, bromopropilato, quinometionato, criolita, dicofol, diflovidazina, fluensulfone, flufennerim, flufiprol, fluopiram, fufenozida, imidaclotiz, iprodiona, meperflutrina, piridalilo, pirifluquinazona, tetrametilflutrina y yodometano; también preparados a base de *Bacillus firmus* (en especial cepa CNCM I-1582, por ejemplo, VOTiVO™, BioNem), así como los siguientes compuestos:

3-bromo-N-{2-bromo-4-cloro-6-[(1-ciclopropiletil)carbamoil]fenilo}-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2005/077934), 4-{{[(6-bromopirid-3-il)metil](2-fluoretil)amino}furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), 4-{{[(6-fluoropirid-3-il)metil](2,2-difluoretil)amino}furan-2(5H)-ona

(conocida del documento WO 2007/115644), 4-[(2-cloro-1,3-tiazol-5-il)metil](2-fluoretil)amino)furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), 4-[(6-cloropirid-3-il)metil](2-fluoretil)amino)furan-2(5H)-ona (conocida del documento WO 2007/115644), flupiradifurona, 4-[(6-cloro-5-fluorpirid-3-il)metil](metil)amino)furan-

ona (conocida del documento EP-A-0 539 588), 4-[(6-cloropiridin-3-il)metil](metilamino)furan-2(5H)-ona (conocida del documento EP-A-0 539 588), [[1-(6-cloropiridin-3-il)etil](metil)oxido- λ^4 -sulfanilidén]cianamida (conocida del documento WO 2007/149134) y sus diastereómeros [[(1R)-1-(6-cloropiridin-3-il)etil](metil)oxido- λ^4 -sulfanilidén]cianamida (A) o [[(1S)-1-(6-cloropiridin-3-il)etil](metil)oxido- λ^4 -sulfanilidén]cianamida (B) (ambas

sulfaniliden}cianamida (A) y [(1S)-1-[6-cloropiridin-3-il]etil](metil)oxido- λ^4 -sulfaniliden)cianamida (B) (también conocida del documento WO 2007/149134), así como diastereómeros [(R)-metil(oxido){(1R)-1-[6-(trifluorometil)piridin-3-il]etil}- λ^4 -sulfaniliden)cianamida (A1) y [(S)-metil(oxido){(1S)-1-[6-(trifluorometil)piridin-3-il]etil}- λ^4 -sulfaniliden)cianamida (A2), bezeichnet als Diastereomerengruppe A (conocida del documento WO 2010/074747, WO 2010/074751). [(R)-metil(oxido){(1S)-1-[6-(trifluorometil)piridin-3-il]etil}- λ^4 -

2010/074747, WO 2010/074751), [(R)-metil(oxido){(1S)-1-[6-(trifluorometil)piridin-3-il]etil}- λ^4 -sulfaniliden]cianamida (B1) y [(S)-metil(oxido){(1R)-1-[6-(trifluorometil)piridin-3-il]etil}- λ^4 -sulfaniliden]cianamida (B2), designada como grupo diastereomérico B (también conocida de los documentos WO 2010/074747, WO 2010/074751), y 11-(4-cloro-2,6-dimetilfenil)-12-hidroxi-1,4-dioxa-9-azadiespri[4,2,2]tetradec-11-en-10-ona

2010/074751) y 11-(4-cloro-2,6-dimetilfenilo)-12-hidroxi-1,4-dioxa-9-azadiespiro[4.2.4.2]tetradec-11-en-10-ona (conocida del documento WO 2006/089633), 3-(4'-fluoro-2,4-dimetilbifenilo-3-il)-4-hidroxi-8-oxa-1-azaspiro[4.5]dec-3-en-2-ona (conocida del documento WO 2008/067911), 1-[2-fluoro-4-metil-5-[2(2,2,2-trifluoretil)sulfinil]fenilo]-3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-triazol-5-amina (conocida del documento WO 2006/043635).

trifluorometil)suministro)-3-(trifluorometil)-1H-1,2,4-trazol-5-amina (conocida del documento WO 2006/043633), afidopiroreno (conocido del documento WO 2008/066153), 2-cian-3-(difluorometoxi)-N,N-dimetilbencensulfonamida (conocida del documento WO 2006/056433), 2-cian-3-(difluorometoxi)-N-metilbencensulfonamida (conocida del documento WO 2006/100288), 2-cian-3-(difluorometoxi)-N-

metilbenzensulfonamida (conocida del documento WO 2000/100288), 2-clor-3-(difluorometoxi)-N-etilbensulfonamida (conocida del documento WO 2005/035486), 4-(difluorometoxi)-N-etil-N-metil-1,2-benzotiazol-3-amina-1,1-dioxido (conocida del documento WO 2007/057407), N-[1-(2,3-dimetilfenil)-2-(3,5-dimetilfenil)etil]-4,5-dihidro-1,3-tiazol-2-amina (conocida del documento WO 2008/104503). {1'-(2E)-3-(4-

clorofenil)prop-2-en-1-il]-5-fluorspiro[indol-3,4'-piperidin]-1(2H)-il]-2-(cloropiridin-4-il)metanona (conocida del documento WO 2003/106457), 3-(2,5-dimetilfenil)-4-hidroxi-8-metoxi-1,8-diazzaespiro[4.5]dec-3-en-2-ona (conocida del documento WO 2009/049851), 3-(2,5-dimetilfenil)-8-metoxi-2-oxo-1,8-diazzaespiro[4.5]dec-3-en-4-il-etylcarbonato (conocido del documento WO 2009/049851), 4-(but-2-in-1-iloxi)-6-(3,5-dimetilpiperidin-1-il)-5-

fluoropirimidina (conocida del documento WO 2003/033171), (2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentil)(3,3,3-trifluoropropil)malononitrilo (conocido del documento WO 2005/063094), (2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentil)(3,3,4,4,4-pentafluorobutil)malononitrilo (conocido del documento WO 2005/063094), 8-[2-

(ciclopropilmetoxi)-4-(trifluorometil)fenoxi]-3-[6-(trifluorometil)piridazin-3-il]-3-azabiciclo[3.2.1]octano (conocido del documento WO 2007/040280), flometoquina, PF1364 (CAS-Reg. N° 1204776-60-2) (conocido del documento JP2010/018586), 5-[5-(3,5-diclorofenil)-5-(trifluorometil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)benzonitrilo (conocido del documento WO 2007/075459), 5-[5-(2-cloropiridin-4-il)-5-(trifluorometil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)benzonitrilo (conocido del documento WO 2007/075459), 4-[5-(3,5-diclorofenil)-5-(trifluorometil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-2-metil-N-{2-oxo-2-[(2,2,2-trifluoretil)amino]etil}benzamida

(conocida del documento WO 2005/085216), 4-{{(6-cloropiridin-3-il)metil}(ciclopropil)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-ona, 4-{{(6-cloropiridin-3-il)metil}(2,2-difluoro-etil)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-ona, 4-{{(6-cloropiridin-3-il)metil}(etil)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-ona, 4-{{(6-cloropiridin-3-il)metil}(metil)amino}-1,3-oxazol-2(5H)-ona (todas conocidas del documento WO 2010/005692), piflubumids (conocida del documento WO 2002/096882), metil-2-[2-{{[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino}-5-cloro-3-metilbenzoi]-2-metilhidrazin-carboxilato (conocido del documento WO 2005/085216), metil-2-[2-{{[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino}-5-cian-3-metilbenzoi]-2-ethylhidrazincarboxilato (conocido del documento WO 2005/085216), metil-2-[2-{{[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino}-5-cian-3-metilbenzoi]-2-metilhidrazincarboxilato (conocido del documento WO 2005/085216), metil-2-[3,5-dibromo-2-{{[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino}benzoi]-1,2-dietil-hidrazincarboxilato (conocido del documento WO 2005/085216), metil-2-[3,5-dibromo-2-{{[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino}benzoi]-2-ethylhidrazincarboxilato (conocido del documento WO 2005/085216), (5RS,7RS;5RS,7SR)-1-(6-cloro-3-piridilmetil)-1,2,3,5,6,7-hexahidro-7-metil-8-nitro-5-propoximidazo[1,2-a]piridina (conocida del documento WO 2007/101369), 2-{6-[2-(5-fluoropiridin-3-il)-1,3-tiazol-5-il]piridin-2-il}pirimidina (conocida del documento WO 2010/006713), 2-{6-[2-(piridin-3-il)-1,3-tiazol-5-il]piridin-2-il}pirimidina (conocida del documento WO 2010/006713), 1-(3-cloropiridin-2-il)-N-[4-cian-2-metil-6-(metilcarbamoil)fenilo]-3-{{[5-(trifluorometil)-1H-tetrazol-1-il]metil}-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2010/069502), 1-(3-cloropiridin-2-il)-N-[4-cian-2-metil-6-(metilcarbamoil)fenilo]-3-{{[5-(trifluorometil)-2H-tetrazol-2-il]metil}-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2010/069502), N-[2-(ter-butilcarbamoil)-4-cian-6-metilfenilo]-1-(3-cloropiridin-2-il)-3-{{[5-(trifluorometil)-1H-tetrazol-1-il]metil}-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2010/069502), N-[2-(ter-butilcarbamoil)-4-cian-6-metilfenilo]-1-(3-cloropiridin-2-il)-3-{{[5-(trifluorometil)-2H-tetrazol-2-il]metil}-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento WO 2010/069502), (1E)-N-[{(6-cloropiridin-3-il)metil}-N'-cian-N-(2,2-difluoretil)etanimidamida (conocida del documento WO 2008/009360), N-[2-(5-amino-1,3,4-tiadiazol-2-il)-4-cloro-6-metilfenilo]-3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-carboxamida (conocida del documento CN102057925), metil-2-[3,5-dibromo-2-{{[3-bromo-1-(3-cloropiridin-2-il)-1H-pirazol-5-il]carbonil}amino}benzoi]-2-ethyl-1-metil-hidrazincarboxilato (conocido del documento WO 2011/049233), heptaflutrina, pirimostrobina, flufenostrobina y 3-cloro-N²-(2-cianpropan-2-il)-N¹-[4-(1,1,2,3,3-heptafluoropropan-2-il)-2-metil-fenilo]ftalamida (conocida del documento WO 2012/034472).

Fungicidas apropiados como pares de mezcla son:

(1) inhibidores de la biosíntesis del ergosterol como, por ejemplo, aldimorf, azaconazol, bitertanol, bromuconazol, ciproconazol, diclobutrazol, difenoconazol, diniconazol, diniconazol-M, dodemorf, acetato de dodemorf, epoxiconazol, etaconazol, fenarimol, fenbuconazol, fenhexamida, fenpropidina, fenpropimorf, fluquinconazol, flurprimidol, flusilazol, flutriafol, furconazol, furconazol-cis, hexaconazol, imazalilo, sulfato de imazalilo, imibenconazol, ipconazol, metconazol, miclobutanilo, naftifina, nuarimol, oxpoconazol, paclobutrazol, pefurazoat, penconazol, piperalina, procloraz, propiconazol, protoconazol, piributicarb, pirifenox, quinconazol, simeconazol, espiroxamina, tebuconazol, terbinafina, tetriconazol, triadimefona, triadimenol, tridemorf, triflumizol, triforina, triticonazol, uniconazol, uniconazol-p, viniconazol, voriconazol, 1-(4-clorofenil)-2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)cicloheptanol, metil-1-(2,2-dimetil-2,3-dihidro-1H-inden-1-il)-1H-imidazol-5-carboxilato, N'-{5-(difluorometil)-2-metil-4-[3-(trimetilsilil)propoxi]fenilo}-N-etyl-N-metilimidoformamida, N-etyl-N-metil-N'-{2-metil-5-(trifluorometil)-4-[3-(trimetilsilil)propoxi]fenilo}imidoformamida y O-[1-(4-metoxifenoxi)-3,3-dimetilbutan-2-il]-1H-imidazol-1-carbotioato.

(2) inhibidores de la respiración (inhibidores de la cadena respiratoria) como, por ejemplo, bixafeno, boscalida, carboxina, diflumetorim, fenfuram, fluopiram, flutolanilo, fluxapiroxad, furametpir, furmeciclox, isopirazam, mezcla del racemato epimérico sin 1RS,4SR,9RS y del racemato antiepimérico 1RS,4SR,9SR, isopirazam (racemato antiepimérico), isopirazam (enantiómero antiepimérico 1R,4S,9S), isopirazam (enantiómero antiepimérico 1S,4R,9R), isopirazam (racemato epimérico sin 1RS,4SR,9RS), isopirazam (enantiómero epimérico sin 1R,4S,9R), isopirazam (enantiómero epimérico sin 1S,4R,9S), mepronilo, oxicarboxina, penflufen, pentiopirad, sedaxano, tifluzamida, 1-metil-N-[2-(1,1,2,2-tetrafluoretoxi)fenilo]-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-carboxamida, 3-(difluorometil)-1-metil-N-[2-(1,1,2,2-tetrafluoretoxi)fenilo]-1H-pirazol-4-carboxamida, 3-(difluorometil)-N-[4-fluoro-2-(1,1,2,3,3-hexafluoropropoxi)fenilo]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, N-[1-(2,4-diclorofenil)-1-metoxipropan-2-il]-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, 5,8-difluoro-N-[2-(2-fluoro-4-[4-(trifluorometil)piridin-2-il]oxi)fenil]etil]quinazolin-4-amina, N-[9-(diclorometilen)-1,2,3,4-tetrahidro-1,4-metanonaftalen-5-il]-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, N-[{(1S,4R)-9-(diclorometilen)-1,2,3,4-tetrahidro-1,4-metanonaftalen-5-il}-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida y N-[(1R,4S)-9-(diclorometilen)-1,2,3,4-tetrahidro-1,4-metanonaftalen-5-il]-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida.

(3) inhibidores de la respiración (inhibidores de la cadena respiratoria) en el complejo III de la cadena respiratoria como, por ejemplo, ametoctradina, amisulbromo, azoxistrobina, ciazofamida, coumetoxistrobina, coumoxistrobina, dimoxistrobina, enestroburina, famoxadona, fenoxistrobina, fluoxastrobina, cresoxim-metilo, metominostrobina, orisastrobina, picoxistrobina, piraclostrobina, piracetostrobina, piraoxistrobina, piribencarb, triclopiricarb, trifloxistrobina, (2E)-2-(2-{{[6-(3-cloro-2-metilfenoxi)-5-fluorpirimidin-4-il]oxi}fenil}-2-(metoxiimino)-N-metiletanamida, (2E)-2-(metoxiimino)-N-metil-2-(2-{{(1E)-1-[3-(trifluorometil)fenilo]etiliden}amino}oxi)metil]fenil)etanamida, (2E)-2-(metoxiimino)-N-metil-2-{{(E)-2-[2-(3-(trifluorometil)fenilo)etoxi]imino}metil}fenil)etanamida, (2E)-2-{2-[[{(1E)-1-(3-[(E)-1-fluoro-2-feniloetenil]oxi)fenil}etiliden]amino}oxi)metil]fenil}-2-(metoxiimino)-N-metiletanamida, (2E)-2-{2-[[{(2E,3E)-4-(2,6-diclorofenil)but-3-en-2-iliden}amino}oxi)metil]fenil}-2-(metoxiimino)-N-metiletanamida, 2-cloro-N-(1,1,3-trimetil-

2,3-dihidro-1H-inden-4-il)piridin-3-carboxamida, 5-metoxi-2-metil-4-(2-[(1E)-1-[3-(trifluorometil)fenilo]etiliden]amino)oxi]metil}fenil)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-ona, metil-(2E)-2-[2-[(ciclopropil[(4-metoxifenil)imino]metil)sulfanil)metil]fenilo]-3-metoxiprop-2-enoato, N-(3-etyl-3,5,5-trimetilciclohexil)-3-(formilamino)-2-hidroxibenzamida, 2-{2-[(2,5-dimetil-fenoxy)metil]fenilo}-2-metoxi-N-metilacetamida y (2R)-2-{2-[(2,5-dimetil-fenoxy)metil]fenilo}-2-metoxi-N-metilacetamida.

- (4) inhibidores de la mitosis y división celular como, por ejemplo, benomilo, carbendazim, clorofenazol, dietofencarb, etaboxam, fluopicolida, fuberidazol, pencicurona, tiabendazol, tiofanato-metilo, tiofanato, zoxamida, 5-cloro-7-(4-metilpiperidin-1-il)-6-(2,4,6-trifluorofenil)[1,2,4]triazolo[1,5-a]pirimidina y 3-cloro-5-(6-cloropiridin-3-il)-6-metil-4-(2,4,6-trifluorofenil)piridazina.

10 (5) compuestos con actividad multisitio como, por ejemplo, mezcla de Bordeaux, captafol, captano, clorotalonilo, preparaciones de cobre como hidróxido de cobre, naftenato de cobre, óxido de cobre, oxicloruro de cobre, sulfato de cobre, diclofluanida, ditianona, dodina, base libre de dodina, ferbam, fluorofolpet, folpet, guazatina, acetato de guazatina, iminoctadina, albesilato de iminoctadina, triacetato de iminoctadina, mancobre, mancozeb, maneb, metiram, metiram de zinc, oxina de cobre, propamidina, propineb, azufre y preparaciones de azufre como, por ejemplo polisulfuro de calcio, tiram, tolifluanida, zineb y ziram.

15 (6) inductores de resistencia como, por ejemplo, acibencenar-S-metilo, isotianilo, probenazol y tiadinilo.

(7) inhibidores de la biosíntesis de aminoácidos y proteínas como, por ejemplo, andoprimb blasticidina-S, ciprodinilo, casugamicina, clorhidrato de casugamicina hidrato, mepanipirim, pirimetanilo y 3-(5-fluoro-3,3,4,4-tetrametil-3,4-dihidroisoquinolin-1-il)quinolina.

20 (8) inhibidores de la producción de ATP como, por ejemplo, acetato de fentina, cloruro de fentina, hidróxido de fentina y siltiofam.

(9) inhibidores de la síntesis de la pared celular como, por ejemplo, bentiavalicarb, dimetomorf, flumorf, iprovalicarb, mandipropamida, polioxinas, polioxorim, validamicina A y valifenalato.

25 (10) inhibidores de la síntesis de lípidos y membrana como, por ejemplo, bifenilo, cloroneb, dchlorano, edifenfos, etridiazol, yodocarb, iprobentos, isoprotiolano, propamocarb, clorhidrato de propamocarb, protiocarb, pirazofos, quintozeno, tecnazeno y tolclofos-metilo.

(11) inhibidores de la biosíntesis de melanina como, por ejemplo, carpropamida, diclocimet, fenoxyanilo, ftalida, piroquilona, triciclazol y {3-metil-1-[{4-metilbenzoil}amino]butan-2-il}carbamato de 2,2,2-trifluoroetilo.

30 (12) inhibidores de la síntesis de ácido nucleico como, por ejemplo, benalaxilo, benalaxilo-M (Kiralaxyl), bupirimato, clozilacona, dimetirimol, etirimol, furalaxilo, himexazol, metalaxilo, metalaxilo-M (mefenoxam), ofurace, oxadixilo y ácido oxolínico.

(13) inhibidores de la transducción de señales como, por ejemplo, clozolinato, fenpiclonilo, fludioxonilo, iprodiona, procimidona, quinoxifeno y vinclozolina.

35 (14) desacopladores como, por ejemplo, binapacril, dinocap, ferimzona, fluazinam y meptildinocap.

(15) Otros compuestos tales como, por ejemplo, bentiazol, betoxazina, capsimicina, carvona, quinometionato, pirofenona (clazafenona), cufraneb, ciflufenamida, cimoxanilo, ciprosulfamida, dazomet, debacarb, diclorofeno, diclomezina, difenzoquat, metilsulfato de difenzoquat, difeniloamina, ecomat, fenpirazamina, flumetover, fluoromida, flusulfamida, flutianilo, fosetyl-aluminio, fosetyl-calcio, fosetyl-sodio, hexaclorobenceno, irumamicina, metasulfocarb, metilisotiocianato, metrafenona, mildiomicina, natamicina, dimetilditiocarbamato de níquel, nitrotal-isopropilo, octilinona, oxamocarb, oxifentína, pentaclorofenol y sus sales, fenotrina, ácido fosfórico y sus sales, fosetylato de propamocarb, propanosina sódica, proquinazida, pirimorf, (2E)-3-(4-ter-butilfenil)-3-(2-cloropiridin-4-il)-1-(morfolin-4-il)prop-2-en-1-ona, (2Z)-3-(4-ter-butilfenil)-3-(2-cloropiridin-4-il)-1-(morfolin-4-il)prop-2-en-1-ona, pirrolnitrina, tebuflouquina, tecloftalam, tolñifanida, triazoxida, triclamida, zarilamida, (3S,6S,7R,8R)-8-bencil-3-[(3-[(isobutiriloxi)metoxi]-4-metoxipiridin-2-il]carbonil)amino]-6-metil-4,9-dioxo-1,5-dioxonan-7-il 2-metilpropanoato, 1-(4-{4-[(5R)-5-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]etanona, 1-(4-{4-[(5S)-5-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluoro-metil)-1H-pirazol-1-il]etanona, 1-(4-{4-[(5-2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]etanona, 1-(4-{4-[(5-2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]etanona, 1-(4-{4-[(5-2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)-2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]etanona, 2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]-1-(4-{4-[(5S)-5-fenilo-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)etanona, 2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]-1-(4-{4-[(5R)-5-fenilo-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il]-1,3-tiazol-2-il}piperidin-1-il)etanona, 2-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]-1-{4-[4-(5-fenilo-4,5-dihidro-1,2-oxazol-3-il)-1,3-tiazol-2-il]piperidin-1-il}etanona, 2-butoxi-6-yodo-3-propil-4H-cromen-4-ona, 2-cloro-5-[2-cloro-1-(2,6-difluoro-4-metoxifenil)-4-metil-1H-imidazol-5-il]piridina, 2-fenilofenol y sus sales, 3-(4,4,5-trifluoro-3,3-dimetil-3,4-dihidroisoquinolin-1-il)quinolina, 3,4,5-tricloropiridin-2,6-dicarbonitrilo, 3-[5-(4-clorofenil)-2,3-dimetil-1,2-oxazolidin-

3-il]piridina, 3-cloro-5-(4-clorofenil)-4-(2,6-difluorofenil)-6-metilpiridazina, 4-(4-clorofenil)-5-(2,6-difluorofenil)-3,6-dimetilpiridazina, 5-amino-1,3,4-tiadiazol-2-tiol, 5-cloro-N'-fenilo-N'-(prop-2-in-1-il)tiopen-2-sulfonohidrazida, 5-fluoro-2-[4-fluorbencilo]oxi]pirimidin-4-amina, 5-fluoro-2-[4-metilbencilo]oxi]pirimidin-4-amina, 5-metil-6-octil[1,2,4]triazolo[1,5-a]pirimidin-7-amina, etil-(2Z)-3-amino-2-cian-3-feniloprop-2-enoato, N'-(4-[3-(4-clorobencil)-1,2,4-tiadiazol-5-il]oxi)-2,5-dimetilfenil)-N-etil-N-metilimidoformamida, N-(4-clorobencil)-3-[3-metoxi-4-(prop-2-in-1-iloxi)fenilo]propanamida, N-[(4-clorofenil)(cian)metil]-3-[3-metoxi-4-(prop-2-in-1-iloxi)fenilo]propanamida, N-[(5-bromo-3-cloropiridin-2-il)metil]-2,4-dicloropiridin-3-carboxamida, N-[1-(5-bromo-3-cloropiridin-2-il)etil]-2,4-dicloropiridin-3-carboxamida, N-[1-(5-bromo-3-cloro-piridin-2-il)etil]-2-fluoro-4-yodopiridin-3-carboxamida, N-{(E)-[(ciclopropilmetoxi)imino][6-(difluorometoxi)-2,3-difluorofenilo]metil]-2-feniloacetamida, N-{(Z)-[(ciclopropilmetoxi)imino][6-(difluorometoxi)-2,3-difluorofenilo]metil]-2-feniloacetamida, N'-{4-[3-Tert-butil-4-ciano-1,2-tiazol-5-il]oxi}-2-cloro-5-metilfenilo)-N-etil-N-metilimidoformamida, N-metil-2-(1-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]acetil)piperidin-4-il)-N-(1,2,3,4-tetrahidro-naftalen-1-il)-1,3-tiazol-4-carboxamida, N-metil-2-(1-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]acetil)piperidin-4-il)-N-[(1R)-1,2,3,4-tetrahidronaftalen-1-il]-1,3-tiazol-4-carboxamida, N-metil-2-(1-[5-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-1-il]acetil)piperidin-4-il)-N-[(1S)-1,2,3,4-tetrahidronaftalen-1-il]-1,3-tiazol-4-carboxamida, pentil-{6-[{[(1-metil-1H-tetrazol-5-il)(fenil)metiliden]amino}oxi]metil}piridin-2-il}carbamato, ácido fenazin-1-carboxílico, quinolin-8-ol, quinolin-8-olsulfato (2: 1) y {6-[{[(1-metil-1H-tetrazol-5-il)(fenil)metiliden]amino}oxi]metil}piridin-2-il}carbamato de ter-butilo.

(16) Otros compuestos tales como, por ejemplo, 1-metil-3-(trifluorometil)-N-[2'-(trifluorometil)bifenilo-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, N-(4'-clorobifenilo-2-il)-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, N-(2',4'-diclorobifenilo-2-il)-3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, 3-(difluorometil)-1-metil-N-[4'-(trifluorometil)bifenilo-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, N-(2',5'-difluorobifenilo-2-il)-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-carboxamida, 3-(difluorometil)-1-metil-N-[4'-(prop-1-in-1-il)bifenilo-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, 5-fluoro-1,3-dimetil-N-[4'-(prop-1-in-1-il)bifenilo-2-il]-1H-pirazol-4-carboxamida, 2-cloro-N-[4'-(prop-1-in-1-il)bifenilo-2-il]piridin-3-carboxamida, 3-(difluorometil)-N-[4'-(3,3-dimetilbut-1-in-1-il)bifenilo-2-il]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, N-[4'-(3,3-dimetilbut-1-in-1-il)bifenilo-2-il]-5-fluoro-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-carboxamida, 3-(difluorometil)-N-(4'-etinilbifenilo-2-il)-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, N-(4'-etinilbifenilo-2-il)-5-fluoro-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-carboxamida, 2-cloro-N-[4'-(3-hidroxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenilo-2-il]piridin-3-carboxamida, 3-(difluorometil)-N-[4'-(3-metoxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenilo-2-il]-1-metil-1H-pirazol-4-carboxamida, 5-fluoro-N-[4'-(3-metoxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenilo-2-il]-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-carboxamida, 2-cloro-N-[4'-(3-metoxi-3-metilbut-1-in-1-il)bifenilo-2-il]piridin-3-carboxamida, (5-bromo-2-metoxi-4-metilpiridin-3-il)(2,3,4-trimetoxi-6-metilfenil)metanona, N-[2-(4-[3-(4-clorofenil)prop-2-in-1-il]oxi)-3-metoxifenil)etil]-N2-(metilsulfonil)valinamida, ácido 4-oxo-4-[{(2-feniloetil)amino}butanoico y {6-[{[(Z)-(1-metil-1H-tetrazol-5-il)(fenil)metiliden]amino}oxi]metil}piridin-2-il}carbamato de but-3-in-1-ilo.

Todos los pares de mezcla de las clases (1) a (16) mencionados pueden formar sales, aun si están en condiciones para ello debido a sus grupos funcionales, opcionalmente con bases o ácidos apropiados.

De acuerdo con la invención es posible tratar todas las plantas y partes de plantas. En este caso, por "plantas" se entienden todas las plantas y poblaciones de plantas tales como plantas silvestres deseadas e indeseadas o plantas de cultivo (inclusive plantas de cultivo que se presentan en la naturaleza). Las plantas de cultivo pueden ser plantas que pueden obtenerse mediante métodos de cultivo selectivo y de optimización convencionales o mediante métodos de tecnología biológica o de tecnología genética o mediante combinaciones de dichos métodos, inclusive las plantas transgénicas e inclusive las especies de plantas protegibles o no protegibles basándose en una legislación de protección de especies. Por "partes de plantas" deben entenderse todas las partes y órganos aéreos y no aéreos de las plantas tales como brotes, frutos, frutas y semillas así como también raíces, tubérculos y rizomas. Entre las partes de plantas también se incluyen materiales cosechables, así como también material de multiplicación vegetativo y generativo como por ejemplo plantones, tubérculos, rizomas, esquejes y semillas.

Como ya se mencionó con anterioridad, de acuerdo con la invención es posible tratar todas las plantas y sus partes. En una forma de realización preferida se tratan tipos de plantas y especies de plantas así como también sus partes que se presentan en la naturaleza u obtenidos mediante métodos de cultivo selectivo biológico convencionales tales como cruce y fusión de protoplastos. En otra forma de realización preferida se tratan plantas y especies de plantas transgénicas, que se han obtenido mediante métodos de tecnología genética eventualmente en combinación con métodos convencionales (Genetically Modified Organisms) y sus partes. Los conceptos "partes" o bien "partes de plantas" se han explicado en lo que precede. De acuerdo con la invención se prefieren especialmente plantas de las especies de plantas que sean usuales en el comercio o en uso. Por "especies de plantas" se entienden plantas con propiedades nuevas (rasgos) que han sido cultivadas de manera selectiva tanto mediante cultivo selectivo convencional, mediante mutagénesis o mediante tecnologías de ADN recombinante. Puede tratarse de especies, razas, biotipos y genotipos.

El tratamiento de las plantas y partes de plantas tiene lugar de manera directa con los compuestos activos de la invención o para emplear de acuerdo con la invención, las combinaciones de compuestos activos o bien agentes, o bien mediante la acción sobre su entorno, espacio vital o ambiente de almacenamiento de acuerdo con los métodos

de tratamiento estándar, por ejemplo mediante inmersión, rociado, aspersión, irrigación, vaporización, pulverización, nebulización, dispersión, espumación, untado, inyección, vertido (empapado), irrigación por goteo, y en el caso del material de multiplicación, en el caso de las semillas, también mediante mordientes en seco, mordientes en húmedo, mordiente en suspensión, incrustación, envuelta con una capa única o con múltiples capas, etc. Además es posible aplicar los compuestos activos de acuerdo con el procedimiento de volumen ultrabajo o inyectar la preparación de principio activo o el principio activo como tal en el suelo.

Un tratamiento directo preferido de las plantas es la aplicación foliar, es decir, el principio activo, las combinaciones de principio activo o bien sus agentes se aplican sobre el follaje, en donde la frecuencia del tratamiento y la cantidad a ser aplicada puede ser adaptada o ajustada a la gravedad del ataque del correspondiente agente patógeno, plaga o bien maleza.

En el caso de los compuestos de acción sistémica los compuestos activos, combinaciones de compuestos activos o bien agentes penetran en el follaje de las plantas. En este caso, el tratamiento de las plantas tiene lugar mediante la acción de los compuestos activos, combinaciones de compuestos activos o bien agentes, sobre el espacio vital de las plantas. Esto puede efectuarse por ejemplo mediante empapado, entremezclado en el suelo o en la solución nutritiva, es decir en el lugar físico de situación física de las plantas (por ejemplo, el suelo o sistemas hidropónicos) con una forma líquida de los compuestos activos, combinaciones de compuestos activos o bien solución acuosa de agente, o mediante una aplicación en el suelo, es decir, los compuestos activos, combinaciones de compuestos activos o bien agentes, de acuerdo con invención, se introducen en forma sólida (por ejemplo en forma de un granulado) en el lugar físico de las plantas. En el caso de cultivos acuáticos de arroz puede efectuarse también una aplicación dosificada de la invención en una forma de uso sólida (por ejemplo, como granulado) en un arrozal inundado.

La lucha contra las plagas animales mediante el tratamiento de las semillas de las plantas es conocida desde hace larga data y es objeto de continuas mejoras. Sin embargo, en el tratamiento de las semillas se presentan una serie de problemas que no siempre pueden ser resueltos de manera satisfactoria. De esta manera se justifica desarrollar procedimientos para proteger las semillas y simientes de las plantas que hagan que sean superfluas o que por lo menos puedan reducirse de manera manifiesta las aplicaciones adicionales de agentes protectores de las plantas durante el almacenamiento, después de la siembra, o después de la emergencia de la planta. Además, a tal efecto se justifica optimizar la cantidad del principio activo para emplear de manera tal que las semillas y las plantas en germinación sean protegidas en el mayor grado posible contra el ataque de plagas de origen animal, pero sin que sin por ello se dañen las plantas propiamente dichas debido al principio activo empleado. En especial, los procedimientos para el tratamiento de las semillas deberían hacer intervenir también las propiedades insecticidas o bien nematicidas de las plantas transgénicas inherentemente resistentes o bien tolerantes a las plagas, a efectos de lograr una protección óptima de las semillas y de las plantas en germinación junto con una aplicación mínima de agentes protectores de las plantas.

Por ello la presente invención se refiere en especial también a un procedimiento para proteger semillas y plantas en germinación contra el ataque de plagas, para lo cual se tratan las semillas con un principio activo de acuerdo con la invención o bien a ser empleada de acuerdo con la invención. El procedimiento de acuerdo con invención para la protección de semillas y de plantas en germinación contra el ataque de plagas abarca un procedimiento en el que la semilla es tratada en una etapa preliminar al mismo tiempo con un principio activo de la fórmula (I) y pares de mezcla. También abarca un procedimiento en el que las semillas son tratadas en diferentes momentos con un principio activo de la fórmula (I) y pares de mezcla.

La invención se refiere también al uso de los compuestos activos de acuerdo con la invención para el tratamiento de semillas a efectos de proteger las semillas y las plantas originadas de ellas contra plagas animales.

Además, la invención se requiere a las semillas que han sido tratadas con una sustancia de acuerdo con la invención para su protección contra plagas de origen animal. La invención se refiere también a semillas que han sido tratadas simultáneamente con un principio activo de la fórmula (I) y pares de mezcla. La invención se refiere también a semillas que han sido tratadas en diferentes momentos con un principio activo de la fórmula (I) y pares de mezcla. En el caso de las semillas que han sido tratadas en diferentes momentos con un principio activo de la fórmula (I) y pares de mezcla, los compuestos activos individuales del agente de acuerdo con la invención pueden estar contenidos en diferentes capas sobre las semillas. En este caso, las capas que contienen un principio activo de la fórmula (I) y pares de mezcla, pueden estar separadas por una capa intermedia. La invención se refiere también a semillas sobre las que se ha aplicado un principio activo de la fórmula (I) y pares de mezcla como parte componente de una envuelta o como una o más capas adicionales a una envuelta.

Además, la invención se refiere a semillas que después del tratamiento con el principio activo de la fórmula (I) o bien con una combinación de compuestos activos que lo contiene han sido sometidas a un procedimiento de recubrimiento en forma de película, a efectos de evitar el desgaste o erosión de las semillas por el roce con polvo.

Una de las ventajas de la presente invención es que debido a las propiedades sistémicas especiales del agente de acuerdo con la invención el tratamiento de las semillas con estos agentes protege contra plagas animales no solamente las semillas como tales, sino también las plantas originadas a partir de ellas después de la emergencia.

De esta manera es posible prescindir del tratamiento directo del cultivo en un momento de la siembra o poco después.

Otra ventaja puede observarse en el hecho de que mediante el tratamiento de las semillas con el principio activo de la fórmula (I) o bien con la combinación de compuestos activos que lo contiene, es posible promover la germinación y emergencia de la semilla tratada.

Otra ventaja que puede observarse es que los compuestos activos de la fórmula (I) y las combinaciones de compuestos activos mencionadas pueden aplicarse en especial también a semillas transgénicas.

También debe mencionarse que los compuestos activos de la fórmula (I) pueden emplearse en combinación con agentes de la tecnología de las señales, mediante lo cual tiene lugar por ejemplo una mejor colonización de simbiontes, tales como por ejemplo ribozoarios, micorriza y/o bacterias endofíticas, y/o se obtiene una mejor fijación de nitrógeno.

Los agentes de acuerdo con la invención son adecuados para proteger las semillas de cualquier tipo de planta, que se emplean en agricultura, invernaderos, silvicultura o en jardinería. En este caso se trata en especial de semillas de cereales (por ejemplo, trigo, cebada, centeno, mijo y avena), maíz, algodón, soja, arroz, patatas, girasol, café, tabaco, canola, colza, nabo (por ejemplo, caña de azúcar y bajo para consumo animal), maní, hortalizas (por ejemplo, tomate, pepino, poroto, coles, cebollas y lechuga), plantas frutales, céspedes y plantas decorativas. Tiene especial significado el tratamiento de semillas de cereales (como trigo, cebada, centeno y avena), maíz, soja, algodón, canola, colza y arroz.

Como ya se mencionó en lo que precede, también tiene especial importancia el tratamiento de semillas transgénicas con compuestos activos de la fórmula (I) o bien con una combinación de compuestos activos. En este caso se trata de semillas de plantas que por lo general contienen por lo menos un gen heterólogo que controla la expresión de un polipéptido con en especial propiedades insecticidas o bien nematicidas. En este caso los genes heterólogos en las semillas transgénicas pueden proceder de microorganismos tales como *Bacillus*, *Rhizobium*, *Pseudomonas*, *Serratia*, *Trichoderma*, *Clavibacter*, *Glomus* o *Gliocladium*. La presente invención es especialmente adecuada para el tratamiento de semillas transgénicas que contienen por lo menos un gen heterólogo que procede de *Bacillus sp.* De manera especialmente preferida en este caso se trata de un gen heterólogo procedente de *Bacillus thuringiensis*.

Dentro de los alcances de la presente invención, el principio activo de la fórmula (I) o bien como combinación de compuestos activos se aplica solo o en una formulación adecuada sobre la semilla. Es preferible que la semilla sea tratada en un estado en el que se halle tan estable que durante el tratamiento no se presenten daños. En términos generales, el tratamiento de la semilla puede tener lugar en cualquier momento entre la cosecha y la siembra. Usualmente se utiliza semilla que ha sido separada de la planta y que ha sido limpia de desechables, cáscaras, tallos, envueltas, pelusa o carne de fruto. Así por ejemplo puede emplearse semilla que ha sido cosechada, limpia y secada hasta un contenido de humedad de inferior a 15 % en peso. Como alternativa es también posible emplear una semilla que después de su secado ha sido tratada por ejemplo con agua y que seguidamente ha sido secada nuevamente.

En términos generales, durante el tratamiento de la semilla debe prestarse atención a que la cantidad de agente y/u otras sustancias aditivas de acuerdo con la invención a ser aplicada sobre la semilla sea elegida manera tal que no se influya (desfavorablemente) sobre la germinación de la semilla o bien de manera tal que la planta originada de la semilla no se dañe. Esto debe tenerse presente en especial en el caso de compuestos activos que en determinadas cantidades de aplicación pueden mostrar efectos fitotóxicos.

Los agentes de acuerdo con la invención pueden aplicarse de manera directa, es decir sin contener otros componentes y sin haber sido diluidos. Por lo general cabe prever la aplicación del agente en forma de una formulación adecuada sobre la semilla. Las formulaciones y procedimientos adecuados para el tratamiento de las semillas son conocidos de la persona experta y han sido descritos por ejemplo en los siguientes documentos: US 4,272,417 A, US 4,245,432 A, US 4,808,430 A, US 5,876,739 A, US 2003/0176428 A1, WO 2002/080675 A1, WO 2002/028186 A2.

Los compuestos activos / combinaciones de compuestos activos que pueden emplearse de acuerdo con la invención pueden ser transformados en las formulaciones de agente mordiente usuales, tales como soluciones, emulsiones, suspensiones, polvos, espumas, lodos u otros materiales de envuelta para semillas, tales como formulaciones ULV.

Estas formulaciones se preparan de la manera conocida, para lo cual se mezclan los compuestos activos / combinaciones de compuestos activos con sustancias aditivas usuales, tales como por ejemplo los agentes de extensión usuales como también agentes solventes o de dilución, colorantes, agentes de humectación, agentes de dispersión, agentes emulsionantes, agentes antiespumantes, agentes de conservación, agentes de espesamiento secundario, adhesivos, giberellina y también agua.

Como agentes colorantes que pueden estar contenidos en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención, se tienen en cuenta todos los colorantes usuales para tales fines. Al respecto pueden emplearse tanto pigmentos poco solubles en agua como también colorantes solubles en agua. A título de ejemplo

puede mencionarse los colorantes conocidos bajo las designaciones Rhodamin B, C.I. Pigment Red 112 y C.I. Solvent Red 1.

Como agentes de humectación que pueden estar contenidos en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención, se tienen en cuenta todos los materiales promotores de la humectación usuales para la formulación de sustancias agroquímicas. Se emplean de manera preferible alquilnaftalensulfonatos tales como disopropil- o diisobutilnaftalensulfonatos.

Como agentes de dispersión y agentes de emulsión, que pueden estar contenidos en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención, se tienen en cuenta todos los agentes de dispersión no iónicos, aniónicos y catiónicos usuales para la formulación de compuestos activos agroquímicos. Se emplean de manera preferible agentes de dispersión no iónicos o aniónicos o mezclas de agente de dispersión no iónicos o aniónicos. Como agentes de dispersión no iónicos puede mencionarse en especial los polímeros de bloque óxido de etileno-óxido de propileno, los alquilfenolpoliglicol éteres así como y triestirilfenolpoliglicoleter y sus derivados fosfatados o sulfatados. Los agentes de dispersión aniónicos adecuados abarcan en especial los sulfonatos de lignina, las sales de ácido poliacrílico y los condensados de arilsulfonato formaldehído.

Como agentes antiespumantes, en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención pueden hallarse contenidos todos los materiales inhibidores de espuma usuales para la formulación de compuestos activos agroquímicos. Se emplean de manera preferible agentes antiespumantes basados en siliconas y estearato de magnesio.

Como agentes de conservación, en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención pueden hallarse contenidas todas las sustancias utilizables para tales fines en agentes agroquímicos. A título de ejemplo se menciona el diclorofeno y el alcohol bencílico hemiformal.

Como agentes de espesamiento secundario, que pueden hallarse contenidos en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención, se tienen en cuenta todos los materiales utilizables para tales fines en los medios agroquímicos. Se tienen especialmente en cuenta los derivados de celulosa, derivados de ácido acrílico, xantano, arcillas modificadas y ácido silícico altamente disperso.

Como adhesivos que pueden estar contenidos en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención, se tienen en cuenta todos los agentes ligantes usualmente utilizables en los agentes mordientes. Se mencionan a título preferencial polivinilpirrolidona, acetato de polivinilo, alcohol polivinílico y tilosa.

Como gibberellina que pueden estar contenida en las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención, se tienen preferentemente en cuenta las gibberellinas A1, A3 (= ácido gibberellínico), A4 y A7; se emplea de manera especialmente preferida el ácido gibberellínico. Las gibberellinas son conocidas (cfs: R. Wegler "Chemie der Pflanzenschutz- y Schädlingsbekämpfungsmittel", Bd. 2, Springer Verlag, 1970, S. 401-412).

Las formulaciones de agente mordiente empleadas de acuerdo con la invención pueden emplearse sea directamente sea después de previa dilución con agua para el tratamiento de las semillas de los tipos más diversos. De esta manera, es posible emplear los concentrados o los preparados obtenibles a partir de los mismos mediante dilución con agua para lograr un efecto mordiente sobre las semillas de cereales tales como trigo, cebada, centeno, avena y triticales, así como también las semillas de maíz, arroz, colza, guisantes, garbanzos, algodón, girasol y nabo y también semillas de hortaliza de las naturalezas más diversas. Las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención, o sus preparados diluidos, también pueden emplearse para lograr un efecto mordiente sobre las semillas de plantas transgénicas. En este caso pueden presentarse también efectos sinérgicos adicionales gracias a la colaboración de las sustancias formadas por la expresión.

Para el tratamiento de las semillas con las formulaciones de mordiente utilizables de acuerdo con la invención o con los preparados obtenidos a partir de las mismas mediante la adición de agua se tienen en cuenta todos los aparatos mezcladores usualmente utilizables para obtener el mordiente. En concreto, para el mordiente se empieza introduciendo la semilla en una mezcladora, se añade la cantidad deseada en cada caso específico de formulaciones de agente mordiente sea como tales sea después de previa dilución con agua, y se mezcla hasta lograr una distribución uniforme de la formulación sobre la semilla. Eventualmente a esto se empalma un proceso de secado.

La cantidad a ser aplicada de las formulaciones de agente mordiente utilizables de acuerdo con la invención puede variar dentro de un gran intervalo. Dicho intervalo está basado en correspondiente contenido del o de los compuestos activos en las formulaciones y la semilla. Las cantidades para aplicar de los compuestos activos / combinaciones de compuestos activos se hallan, por lo general, el intervalo de 0,001 a 50 g por kilogramo de semillas, preferentemente entre 0,01 y 15 gramos por kilogramo de semillas.

En el estado de la técnica no se conoce que los compuestos activos de la fórmula (I) presenten una acción o efecto contra factores de estrés biótico y/o estrés abiótico o desde el punto de vista del crecimiento de las plantas.

Ahora bien, se ha descubierto que los compuestos activos de acuerdo con la invención de la fórmula (I) son adecuados para incrementar la defensa propia de las plantas (resistencia de las plantas contra agentes patógenos).

Es sabido que las plantas reaccionan frente a condiciones de estrés naturales tales como por ejemplo frío, calor, sequía, lesiones, ataques por agentes patógenos (virus, bacterias, hongos), insectos, etc., pero también frente a

5 herbicidas mediante mecanismos de defensa específicos o no específicos (Pflanzenbiochemie, S. 393-462, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, Oxford, Hans W. Heldt, 1996.; Biochemistry and Molecular Biology of Plants, S. 1102-1203, American Society of Plant Physiologists, Rockville, Maryland, eds. Buchanan, Gruissem, Jones, 2000). En este caso, componentes de paredes celulares originadas por la lesión o sustancias señalizadoras procedentes específicamente del agente patógeno sirven como inductores de cadenas de transducción de señalización vegetal, que en última instancia conducen a la formación de mecanismos de defensa 10 orientados contra el factor de estrés. Al respecto, puede tratarse por ejemplo de (a) sustancias de bajo peso molecular como por ejemplo fitoalexina, (b) proteínas no enzimáticas como por ejemplo "Pathogenesis-related proteins (proteínas no relacionadas con patogénesis)" (PR-Proteine), (c) proteínas enzimáticas tales como por ejemplo quitinasas, glucanasas, o (d) proteínas esenciales inhibidoras específicas como por ejemplo inhibidores de 15 proteasa, inhibidores de xilanasa, que atacan el agente patógeno de manera directa o bien inhiben su proliferación (Dangl and Jones, Nature 411, 826-833, 2001; Kessler and Baldwin, Annual Review of Plant Biology, 53, 299-328, 2003).

Un mecanismo de defensa adicional es la denominada reacción hipersensible (HR, hypersensitive reaktion), que es mediada mediante stress oxidante y que conduce a la muerte de tejido de planta en la región de un foco de 20 infección, con lo cual se inhibe una diseminación del agente patógeno de la planta, que está supeditado a células vivas (Pennazio, New Microbiol. 18, 229-240, 1995).

En el desarrollo ulterior de una infección, mediante los materiales mensajero propias de la planta se retransmiten señales a los tejidos no atacados, que allí conducen localmente al desencadenamiento de reacciones de defensa o de rechazo y que impiden la formación de infecciones secundarias (Systemic acquired resistance, SAR) (Ryals et al., 25 The Plant Cell 8, 1809-1819, 1996).

Ya se conoce una serie de materiales señalizadores endógenos de las plantas, que intervienen en la tolerancia al estrés o bien en la defensa contra los agentes patógenos. Al respecto puede mencionarse como ejemplo ácido salicílico, ácido benzoico, ácido jasmónico o etileno (Biochemistry and Molecular Biology of Plants, S. 850-929, American Society of Plant Physiologists, Rockville, Maryland, eds. Buchanan, Gruissem, Jones, 2000). Algunas de 30 estas sustancias, o sus derivados sintéticos estables y estructuras derivadas, aplicados externamente, también actúan sobre las plantas o tienen un efecto mordiente sobre las semillas y activan mecanismos de defensa o rechazo que tienen como consecuencia una mayor tolerancia de las plantas contra estrés o bien agentes patógenos (Sembdner, Parthier, Ann. Rev. Plant Physiol. Plant Mol. Biol. 44, 569-589, 1993). La defensa mediada por salicilato 35 se orienta en especial contra hongos, bacterias y virus fitopatógenos (Ryals et al., The Plant Cell 8, 1809-1819, 1996).

Un producto sintético conocido que adopta una función similar a la del ácido salicílico y que puede mediar un efecto de protección contra hongos, bacterias y virus fitopatógenos es el benzotiadiazol (CGA 245704; Nombre común: Acibenzolar-S-methyl; Nombre comercial: Bion®) (Achuo et al., Plant Pathology 53 (1), 65-72, 2004; Tamblyn et al., Pesticide Science 55 (6), 676-677, 1999; EP-OS 0313512).

40 Otros compuestos que forman parte del grupo de las oxilipinas, tales como por ejemplo el ácido jasmónico, y los mecanismos de protección desencadenados por los mismos, son especialmente efectivos contra insectos dañinos (Walling, J. Plant Growth Regul. 19, 195-216, 2000).

Por otra parte también es sabido que el tratamiento de plantas con insecticidas del grupo que consiste en las neonicotinoides (Chlornicotinyle) conduce a una mayor resistencia de las plantas contra el estrés abiótico. Esto rige 45 en especial para la imidacloprida (Brown et al., Beltwide Cotton Conference Proceedings 2231-2237, 2004). Esta protección tiene lugar mediante una influencia sobre las propiedades fisiológicas y bioquímicas de las células de plantas tales como por ejemplo mediante la mejora de la estabilidad de las membranas, elevación de la concentración de carbohidratos, incremento de la concentración de polioles y actividad antioxidante (Gonias et al., Beltwide Cotton Conference Proceedings 2225-2229, 2004).

50 Además de ello es conocido el efecto de los clornicotinilos contra los factores de estrés bióticos (Crop Protection 19 (5), 349-354, 2000; Journal of Entomological Science 37(1), 101-112, 2002; Annals of Biology (Hisar, India) 19 (2), 179-181, 2003). A título de ejemplo, los insecticidas del grupo que consiste en los neonicotinoides (Chlornicotinyle) conducen a una expresión elevada de genes del grupo que consiste en las "proteínas relacionadas con patogénesis" (proteínas-PR). Las proteínas PR respaldan a las plantas primariamente en la defensa frente a estresores tales como por ejemplo hongos, bacterias y virus fitopatógenos (DE 10 2005 045 174 A; DE 10 2005 022 994 A y WO 2006/122662 A; Thielert Pflanzenschutz-Nachrichten Bayer, 59 (1), 73-86, 2006; Francis et al., European Journal of 55 Plant Pathology, publ. online 23.1.2009).

Además, es sabido que el tratamiento de plantas genéticamente modificadas con insecticidas del grupo que consiste en las neonicotinoides (Chlornicotinyle) conduce a una mejor tolerancia de las plantas frente al estrés (EP 1 731 037 A), por ejemplo también frente al herbicida glifosato (WO 2006/015697 A).

Por lo tanto, es sabido que las plantas disponen de varios mecanismos de reacción endógenos, que pueden tener como efecto una defensa eficaz contra organismos dañinos sumamente diversos (estrés biótico) y/o estrés abiótico.

El cultivo inicial de plantas jóvenes sanas y desarrolladas de manera uniforme constituye un requisito preliminar esencial para el cultivo en gran escala y para la administración económica de plantas de cultivo agronómicas, de interés hortícola, y de interés forestal.

Numerosos procedimientos para el cultivo de plantas jóvenes se han acreditado en la agricultura y silvicultura como también en la horticultura. En estos casos, como sustrato de cultivo se emplean además de tierra de baja densidad también sustratos especiales entre otros, a base de musgo de turba, fibras de coco, lana mineral como por ejemplo Gradan®, piedra pómex, arcilla expandida, como por ejemplo Lecaton® o Lecadan®, granulados de arcilla como por ejemplo Seramis®, espumas como por ejemplo Bayssrat®, vermiculita, perlita, tierras artificiales tales como por ejemplo Hydromull®, o combinaciones de estos sustratos, en los que se siembran semillas mordidas con fungicidas y/o insecticidas o semillas que no han sido mordidas.

En cultivos especiales, como por ejemplo el tabaco, se emplean de manera creciente plantas jóvenes en el denominado "procedimiento float" o "procedimiento floating" (Leal, R. S., The use of Confidor S in the float, a new tobacco seedlings production system in the South of Brazil. Pflanzenschutz-Nachrichten Bayer (Deutsche Ausgabe) (2001), 54(3), Seiten 337 bis 352; Rudolph, R. D.; Rogers, W. D.; The efficacy of imidacloprid treatment for reduction in the severity of insect vectored virus diseases of tobacco. Pflanzenschutz-Nachrichten Bayer (Deutsche Ausgabe) (2001), 54(3), Seiten 311 bis 336). En estos procedimientos se siembra la semilla en recipientes especiales, por ejemplo tabletas perforadas de estiropor, en tierra de cultivo especial basada en sustrato de cultivo de turba y seguidamente se cultiva en contenedores con solución nutritiva adecuada hasta lograr el tamaño deseado para el transplante (Figura 1). En este caso se operan los recipientes sobre la solución nutritiva, de donde se deriva el nombre del método de cultivo (Leal, 2001, ver arriba). En el procedimiento de flotación, para combatir las plagas succionadoras se emplean insecticidas de la clase de los neonicotinoides (cloronicotinilos). Usualmente se rocían las plantas en el procedimiento de flotación poco antes del trasplante con insecticida neonicotinoide (cloronicotinilos) o se vierte sobre ellas inmediatamente antes o durante el trasplante en el campo el insecticida neonicotinoide (cloronicotinilos), lo que lleva la denominación de "drenching" (empapado) (Leal, 2001, ver arriba; Rudolph and Rogers, 2001, ver arriba). Ambos procedimientos de aplicación son relativamente complicados o laboriosos desde el punto de vista técnico.

En este caso, para la protección de la semilla o planta en emergencia contra agentes causantes de enfermedades vegetales y contra plagas, hasta el momento del trasplante se utilizan fungicidas e insecticidas. La elección del agente protector de las plantas, el lugar y el momento del uso así como también la cantidad a ser aplicada del agente se basan en especial en el tipo de las enfermedades fúngicas y plagas que se presenten, de la modalidad específica de acción y de la duración del efecto del agente así como también de la tolerancia de las plantas, y por lo tanto pueden adaptarse de manera directa a los requerimientos específicos de diversos cultivos y regiones.

En este caso, los compuestos activos de la fórmula (I) conducen, independientemente de un control de los insectos, a una buena protección de la planta contra daños ocasionados por agentes patógenos fúngicos, bacterianos o virales.

Si bien no deseamos quedar comprometidos con ninguna teoría, por el momento se parte de la suposición de que la defensa contra los agentes patógenos tiene lugar por la inducción de proteínas PR como consecuencia de un tratamiento con por lo menos un principio activo de la fórmula (I).

En especial, el uso de acuerdo con la invención presenta la ventaja descritas en el tratamiento de las semillas, en el tratamiento del suelo, en procedimientos especiales de cultivo inicial y de cultivación (por ejemplo, caja de flotación, lana mineral, hidropónico), pero también en el tratamiento de troncos y hojas. Las combinaciones de un principio activo de la fórmula (I) entre otros con insecticidas, fungicidas y bactericidas, muestran una acción sinérgica en el control de las enfermedades de las plantas. Además, el uso combinado de los compuestos activos de la fórmula (I) con especies modificadas mediante tecnología genética en relación a una mayor tolerancia al estrés abiótico conduce a un mejoramiento sinérgico del crecimiento.

Finalmente, de acuerdo con la invención también se ha descubierto que los compuestos activos de la fórmula (I) son adecuados no solamente para aumentar la defensa de las plantas contra agentes patógenos, sino también para mejorar el crecimiento de las plantas y/o para aumentar la resistencia de las plantas frente a enfermedades de plantas que son ocasionadas por hongos, bacterias, virus ML (organismos similares a micoplasma) y/o RLO (organismos similares a Rickettsia), en especial contra enfermedades fúngicas en el suelo, y/o para elevar la resistencia de las plantas contra factores de estrés abióticos.

Entre las condiciones de estrés abióticos pueden enumerarse por ejemplo sequía, condiciones de frío y de calor, estrés osmótico, humedad de rocío, elevado contenido de sal en el suelo, elevada exposición a minerales,

condiciones de ozono, condiciones de luz intensa, limitada disponibilidad de nutrientes nitrogenados, limitada disponibilidad de sustancias fosforadas o falta de sombra.

Por lo tanto, el objetivo de la presente mención es en primera instancia el uso de por lo menos un principio activo de la fórmula (1) para incrementar las defensas propias de la planta y/o para mejorar el desarrollo de la planta y/o para aumentar la resistencia de las plantas contra enfermedades vegetales, que son ocasionadas por hongos, bacterias, virus, MLO (organismos similares a micoplasma) y/o PLO (organismos similares a Rickettsia), en especial contra enfermedades fúngicas originadas en el suelo, y/o para aumentar la resistencia de las plantas contra factores de estrés abióticos.

Dentro de los alcances de la presente invención, bajo la designación "crecimiento de la planta" se entienden ventajas de distinto tipo para las plantas, que no están relacionadas en forma directa con la eficacia de los plaguicidas conocidos, preferiblemente de la efectividad insecticida del principio activo de la fórmula (I). Dichas propiedades ventajosas abarcan por ejemplo las características mencionadas a continuación de las plantas: germinación y emergencia aceleradas de las semillas y de las plantas, mejor crecimiento radicular en cuanto a superficie y profundidad, mayor formación de emergencia o retallos, emergentes más fuertes y más productivos e impulso de retallo, mejora del crecimiento de los brotes, mayor estabilidad, mayor diámetro de la base de los brotes, hojas de mayor superficie, hojas más verdes, mayor rendimiento en materiales nutritivos y contenidos, como por ejemplo carbohidratos, grasas, proteínas, vitaminas, sustancias minerales, aceites etéreos, colorantes, fibras, mejor calidad de las fibras, floración más temprana, mayor cantidad de flores, menor contenido de productos tóxicos tales como micotoxinas, menor contenido de materiales residuales o de componentes desventajosos de cualquier tipo o una mejor digeribilidad, mejor estabilidad del material cosechado durante su almacenamiento, mejor tolerancia frente a temperaturas desventajosas, mejor tolerancia contra sequía y sequedad como también contra insuficiencia de oxígeno debido a exceso de agua, mejor tolerancia frente a mayor contenido de sal en el suelo y en el agua, mayor tolerancia frente a la radiación ultravioleta, mayor tolerancia frente al estrés por ozono, mejor tolerancia frente a herbicidas y otros agentes para el tratamiento de las plantas, mejor incorporación de agua y rendimiento de fotosíntesis, propiedades ventajosas de las plantas, tales como por ejemplo aceleración de la maduración, maduración más uniforme, mayor atractivo para animales útiles, mejor espolvoreo u otras ventajas conocidas ampliamente de la persona experta.

Las ventajas de diverso tipo anteriormente descritas para las plantas pueden resumirse parcialmente de manera conocida y fundamentarse mediante conceptos de validez general. Tales nociones o conceptos abarcan por ejemplo las designaciones consignadas a continuación: efecto fitotónico, resistencia contra factores de estrés, menor estrés de la planta, salud de la planta, plantas saludables, estado físico de la planta ("plant fitness"), "bienestar de la planta", "concepto de planta", "efectos de vigor", "escudo contra estrés", "escudo de protección", "salud de la cosecha", "propiedad de salud de la planta de cultivo", "salud de la planta", "propiedades de salud de la planta", "productos para la salud de las plantas", "administración de la salud de las plantas", "terapia de salud de las plantas", "efecto de reverdecimiento (Greening Effect)" o "efecto de reverdecimiento", "frescura", u otros conceptos conocidos del experto.

También se ha descubierto que los compuestos activos de la fórmula (I) conducen a una expresión más elevada de los genes del grupo que consiste en las proteínas relacionadas con patogénesis (proteínas PR). Las proteínas PR respaldan a las plantas primariamente en la defensa contra estresores bióticos tales como por ejemplo hongos, bacterias y virus fitopatógenos. Esto tiene como consecuencia de que las plantas, después de la aplicación de sustancias activas de la fórmula (I) están mejor protegidas contra infecciones causadas por hongos, bacterias y virus fitopatógenos. En el caso de una aplicación necesaria de insecticidas, fungicidas y bactericidas en forma de mezcla así como también en el caso de una aplicación secuencial con compuestos activos de la fórmula (I) se respalda este efecto.

Además de ello de acuerdo con la invención se ha descubierto que el uso de los compuestos activos de la fórmula (I) en combinación con un agente fertilizante como se define más adelante en la presente sobre las plantas o en su entorno tiene un efecto sinérgico que promueve el crecimiento.

En términos generales, los agentes fertilizantes que de acuerdo con la invención pueden utilizarse juntamente con los compuestos activos o agentes explicados con anterioridad con mayor detenimiento son compuestos orgánicos e inorgánicos que contienen nitrógeno como por ejemplo ureas, productos de condensación de urea-formaldehido, aminoácidos, sales y nitratos de amonio, sales de potasio (preferentemente cloruros, sulfatos, nitratos), sales de ácido fosfórico y/o sales de ácido fosforoso (preferentemente sales de potasio y sales de amonio). En este contexto pueden mencionarse en especial los fertilizantes NPK, es decir los agentes fertilizantes que contienen nitrógeno, fósforo y potasio, salitre de calcio amonio, es decir agentes fertilizantes que también contienen calcio, salitre de amonio sulfato (fórmula general: $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 \text{ NH}_4\text{NO}_3$), fosfato de amonio y sulfato de amonio. Estos agentes fertilizantes son generalmente conocidos por la persona experta, véase por ejemplo Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5. Edition, Vol. A 10, Seiten 323 bis 431, Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1987.

Los agentes fertilizantes también pueden contener sales de materiales micronutrientes (preferentemente calcio, azufre, boro, manganeso, magnesio, hierro, boro, cobre, zinc, molibdeno y cobalto) y fitohormonas (por ejemplo vitamina B1 y ácido indol-3-ilacético (IAA) o sus mezclas. Los agentes fertilizantes empleados de acuerdo con la

invención también pueden contener otras sales tales como fosfato de monoamonio (MAP), fosfato de diamonio (DAP), sulfato de calcio, cloruro de potasio o sulfato de magnesio. Las cantidades adecuadas para las sustancias nutritivas secundarias o elementos vestigiales abarcan cantidades de 0,5 a 5 % en peso referido a la totalidad del agente fertilizante. Otras sustancias posiblemente contenidas abarcan agentes protectores de las plantas, insecticidas o fungicidas, reguladores del crecimiento o sus mezclas. A tal efecto se expondrán en la presente formas de realización más detalladas.

Los agentes fertilizantes pueden emplearse por ejemplo en forma de polvos, granulados, gránulos o compactos. Sin embargo, los agentes fertilizantes también pueden emplearse en forma líquida, disuelto en un medio acuoso. En este caso es también posible emplear amoníaco acuoso diluido como medio fertilizante nitrogenado. Otras sustancias posiblemente contenidas para agentes fertilizantes se han descrito por ejemplo en: Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5. ed., 1987, vol. A 10, páginas 363 a 401, DE-A 41 28 828, DE-A 19 05 834 y DE-A 196 31 764.

La composición general de los agentes fertilizantes, de los cuales dentro de los alcances de la presente invención puede tratarse de un fertilizante de una sola sustancia nutritiva y/o de varias sustancias nutritivas, por ejemplo de nitrógeno, potasio o fósforo, puede variar dentro de un amplio intervalo. Por lo general es ventajoso un contenido de 1 a 30 % en peso de nitrógeno (preferiblemente de 5 a 20 % en peso), de 1 a 20 % en peso de potasio (preferiblemente de 3 a 15 % en peso) y un contenido de 1 a 20 % en peso de fósforo (preferiblemente de 3 a 10 %). El contenido de microelementos se halla habitualmente en el intervalo de los ppm, preferiblemente en el intervalo de 1 a 1.000 ppm.

Dentro de los alcances de la presente invención puede administrarse el agente fertilizante así como también el principio activo de la fórmula (I) de manera simultánea, es decir de manera sincronizada. Sin embargo, también es posible emplear en primera instancia el agente fertilizante y seguidamente el principio activo de la fórmula (I) o en primera instancia el principio activo de la fórmula (I) y después el agente fertilizante. Sin embargo, dentro de los alcances de la presente invención, en caso de un uso no simultáneo del principio activo de la fórmula (I) y del agente fertilizante el uso tiene lugar en una correlación funcional, en especial dentro de un intervalo de tiempo de por lo general 24 horas, preferiblemente 18 horas, más preferiblemente 12 horas, y en especial 6 horas, más especialmente 4 horas, y de manera más preferida todavía dentro de 2 horas. En formas de realización especialmente preferidas de la presente invención, el uso de los compuestos activos de acuerdo con la invención de la fórmula general (I) y del agente fertilizante tiene lugar en un marco temporal de menos de 1 hora, preferiblemente inferior a 30 minutos, preferible menor que 15 minutos.

Además de ello es posible preparar mezclas de forma estable, por ejemplo en forma de varillas, granulados, comprimidos, etc., partiendo de por lo menos un principio activo a ser utilizada de acuerdo con la invención y de por lo menos un agente fertilizante. A efectos de preparar una mezcla de forma estable, es posible mezclar entre sí los correspondientes componentes y eventualmente se los extruye o bien es posible aplicar la por lo menos un principio activo de la Fórmula (I) a ser utilizada de acuerdo con la invención de la fórmula (I) sobre el agente fertilizante. Es eventualmente también posible utilizar agentes adyuvantes para la formulación en las mezclas de forma estable, como por ejemplo agentes de extensión o adhesivos de adherencia, a efecto de lograr una mezcla resultante de forma estable. Para lograr la correspondiente estabilidad de la forma son adecuadas las mezclas correspondientes para ser utilizadas en el ramo "Home & Garden", es decir, para un usuario privado o jardinero aficionado, que puede utilizar la mezcla de forma estable o bien los componentes contenidos en la misma en una cantidad prefijada, claramente definida, y sin agentes adyuvantes especiales.

Independientemente de ello puede haber mezclas líquidas disponibles consistentes en por lo menos uno de los compuestos activos para utilizar de acuerdo con la invención y el por lo menos un agente fertilizante, de manera tal que -por ejemplo, en caso de un usuario profesional en el campo de la agricultura- sea posible aplicar la solución resultante desde la denominada solución de tanque.

Gracias al uso de por lo menos una de las sustancias a ser utilizada de acuerdo con la invención y el por lo menos un agente fertilizante se posibilita un mayor crecimiento de las raíces, lo cual a su vez posibilita una mayor absorción de sustancias nutritivas y con ello se promueve el crecimiento de la planta.

Los compuestos activos para utilizar de acuerdo con la invención pueden, eventualmente en combinación con agentes fertilizantes, ser utilizadas de manera preferible en las siguientes plantas, en donde dicha enumeración no es limitante.

Se prefieren los árboles del grupo de las plantas utilitarias, plantas ornamentales, tipos de céspedes, árboles de uso general que dentro de los campos público y privado encuentran un uso como plantas ornamentales, y los de uso forestal. El uso forestal abarca árboles para la fabricación de madera, celulosa, papel y productos que se fabriquen a partir de partes de los árboles.

La noción de "planta utilitaria" que se utiliza la presente, se refiere a plantas de cultivo que se utilizan como plantas para la obtención de productos alimenticios para uso humano, productos alimenticios para uso animal, combustibles o para fines técnicos.

Entre las plantas útiles figuran por ejemplo los siguientes tipos de plantas: turba, nabo, cereales, por ejemplo trigo, cebada, centeno, avena, triticales, arroz, maíz y mijo, remolacha de azúcar y nabos para consumo animal; frutos, por ejemplo frutos de pepita, frutos con hueso y bayas comestibles, por ejemplo manzanas, peras, ciruelas, damascos, cerezas y bayas, por ejemplo fresas, bayas, zarzamora; frutos de envuelta por ejemplo guisantes, lentejas, garbanzos y soja, cultivo de oleáceos, por ejemplo colza, mostaza, amapola, aceitunas, mirasol, cocos, plantas de aceite de castor, cacao y nueces; cucurbitáceas tales como calabaza, pepinillos y melones; plantas de fibras por ejemplo algodón, lino, cáñamo e yute; frutos cítricos, por ejemplo naranjas, pomelos y mandarinas; especies de hortalizas por ejemplo espinaca, lechuga, espárragos, tipos de col, zanahorias, cebollas, tomates, patatas y párrika; hortalizas, laureles, por ejemplo aguacate, canela, alcanfor, o también plantas tales como tabaco, o nueces, café, mandarinas, caña de azúcar, té, pimienta, vides, lúpulo, bananas, árboles de caucho natural, así como también plantas ornamentales, por ejemplo flores, arbustos, árboles de hoja caduca y árboles coníferos tales como coníferas. Esta enumeración no representa ninguna limitación.

Como plantas de cultivo especialmente adecuadas cabe tener en cuenta las siguientes plantas: algodón, berenjena, frutos de pepita, frutos con hueso, bayas comestibles, maíz, trigo, cebada, pepino, tabaco, vid, arroz, cereales, peras, soja, colza, tomate, párrika, melones, col, papatas y manzanas.

Como árboles se han de mencionar, por ejemplo: *Abies* sp., *Eucalyptus* sp., *Picea* sp., *Pinus* sp., *Aesculus* sp., *Platanus* sp., *Tilia* sp., *Acer* sp., *Tsuga* sp., *Fraxinus* sp., *Sorbus* sp., *Betula* sp., *Crataegus* sp., *Ulmus* sp., *Quercus* sp., *Fagus* sp., *Salix* sp., *Populus* sp.

Como árboles preferidos se pueden mencionar: de la especie de árbol *Aesculus*: *A. hippocastanum*, *A. pariflora*, *A. carnea*; de la especie de árbol *Platanus*: *P. aceriflora*, *P. occidentalis*, *P. racemosa*; de la especie de árbol *Picea*: *P. abies*; de la especie de árbol *Pinus*: *P. radiata*, *P. ponderosa*, *P. contorta*, *P. sylvestre*, *P. elliottii*, *P. monticola*, *P. albicaulis*, *P. resinosa*, *P. palustris*, *P. taeda*, *P. flexilis*, *P. jeffreyi*, *P. balsiana*, *P. strobes*; de la especie de árbol *Eucalyptus*: *E. grandis*, *E. globulus*, *E. camadensis*, *E. nitens*, *E. obliqua*, *E. regnans*, *E. pilularis*.

Como árboles de especial preferencia, se pueden mencionar: de la especie de árbol *Pinus*: *P. radiata*, *P. ponderosa*, *P. contorta*, *P. sylvestre*, *P. strobes*; de la especie de árbol *Eucalyptus*: *E. grandis*, *E. globulus*, *E. camadensis*.

Como árboles de muy especial preferencia, se pueden mencionar: castaño, plátanos, tilos, arce.

La presente invención también se puede llevar a cabo en cualquier tipo de césped ("turfgrasses"), incluyendo "cool season turfgrasses" y "warm season turfgrasses". Ejemplos de tipos de césped para la estación fría son "blue grasses" (*Poa* spp.), como "Kentucky poa" (*Poa pratensis* L.), "rough poa" (*Poa trivialis* L.), "Canada poa" (*Poa compressa* L.), "annual poa" (*Poa annua* L.), "upland poa" (*Poa glauantha* Gaudin), "wood poa" (*Poa nemoralis* L.) y "bulbous poa" (*Poa bulbosa* L.); "Agrostis" (*Agrostis* spp.), como "creeping agrostis" (*Agrostis palustris* Huds.), "colonial agrostis" (*Agrostis tenuis* Sibth.), "velvet agrostis" (*Agrostis canina* L.), "South German Mixed Agrostis" (*Agrostis* spp. incluyendo *Agrostis tenuis* Sibth., *Agrostis canina* L., y *Agrostis palustris* Huds.), y "redtop" (*Agrostis alba* L.); festucos ("Fescues", *Festucu* spp.), como "red fescue" (*Festuca rubra* L. spp. *rubra*), "creeping fescue" (*Festuca rubra* L.), "chewings fescue" (*Festuca rubra commutata* Gaud.), "sheep fescue" (*Festuca ovina* L.), "hard fescue" (*Festuca longifolia* Thuill.), "hair fescue" (*Festuca capillata* Lam.), "tall fescue" (*Festuca arundinacea* Schreb.) y "meadow fescue" (*Festuca elatior* L.); "céspedes" (*Lolium* spp.), como "annual césped" (*Lolium multiflorum* Lam.), "perennial césped" (*Lolium perenne* L.) y "italian césped" (*Lolium multiflorum* Lam.); y pastos de trigo ("wheatgrasses", *Agropyron* spp.), como "fairway wheatgrass" (*Agropyron cristatum* (L.) Gaertn.), "crested wheatgrass" (*Agropyron desertorum* (Fisch.) Schult.) y "western wheatgrass" (*Agropyron smithii* Rydb.).

Ejemplos de otros "cool season turfgrasses" son "beachgrass" (*Ammophila breviligulata* Fern.), "smooth bromegrass" (*Bromus inermis* Leyss.), Schilf ("cattails") como "Timothy" (*Phleum pratense* L.), "sand cattail" (*Phleum subulatum* L.), "orchardgrass" (*Dactylis glomerata* L.), "weeping alkaligrass" (*Puccinellia distans* (L.) Parl.) y "crested dog's-tail" (*Cynosurus cristatus* L.).

Ejemplos de "warm season turfgrasses" son "Bermudagrass" (*Cynodon* spp. L. C. Rich), "zoysiagrass" (*Zoysia* spp. Willd.), "St. Augustine grass" (*Stenotaphrum secundatum* Walt Kuntze), "centipedegrass" (*Eremochloa ophiuroides* Munro Hack.), "carpetgrass" (*Axonopus affinis* Chase), "Bahia grass" (*Paspalum notatum* Flugge), "Kikuyugrass" (*Pennisetum clandestinum* Hochst. ex Chiov.), "buffalo grass" (*Buchloe dactyloids* (Nutt.) Engelm.), "Blue gramma" (*Bouteloua gracilis* (H.B.K.) Lag. ex Griffiths), "seashore paspalum" (*Paspalum vaginatum* Swartz) y "sideoats grama" (*Bouteloua curtipendula* (Michx.) Torr.). Generalmente se prefieren los céspedes artificiales de estación para el uso según la invención. Se da particular preferencia a poa, agrostis y "redtop", festucos y céspedes. Agrostis es especialmente preferida.

Los compuestos activos de la fórmula (I) y sus composiciones son adecuados para combatir plagas animales en el sector de la higiene. En especial, es posible emplear la invención en la protección del hogar, para la higiene y en la protección de víveres, en especial para combatir insectos, arácnidos y ácaros que se encuentran en espacios cerrados, como por ejemplo habitaciones, naves industriales, oficinas, habitáculos de vehículos. Para combatir las plagas animales se utilizan los compuestos activos o composiciones solos o en combinación con otros compuestos activos y/o auxiliares. Es preferible utilizarlos en productos insecticidas para uso doméstico. Los compuestos activos

de acuerdo con la invención son efectivos contra especies sensibles y resistentes así como contra todas las etapas de desarrollo.

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

Se usan en, por ejemplo, aerosoles, productos de pulverización sin presión, por ejemplo pulverizadores con bomba o atomizador, dispositivos automáticos de nebulización, nebulizadores, espumas, geles, productos de vaporización con plaquetas de vaporización de celulosa o de material sintético, evaporadores de líquidos, evaporadores de gel y de membrana, vaporizadores accionados por un propelente, sistemas de vaporización sin energía o bien pasivos, papeles para combatir polillas, bolsitas para combatir polillas y geles para combatir polillas, en forma de granulado o como polvos, en cebos de dispersión o estaciones de cebos.

Además de ello es posible emplear los compuestos activos de la fórmula (I) para combatir una pluralidad de diversas plagas, incluyendo, por ejemplo, insectos succionadores perjudiciales, insectos que muerden y otras plagas que parasitan las plantas, plagas de los alimentos, plagas que destruyen materiales industriales y plagas que afectan la higiene inclusive parásitos en el campo veterinario y para combatirlos como por ejemplo para su exterminio y extinción. En el campo de la salud de los animales, es decir en el campo de la medicina veterinaria, los compuestos activos de acuerdo con la invención son efectivos contra los parásitos de los animales, en especial contra los ectoparásitos o los endoparásitos. El concepto "endoparásito" abarca en especial los helmintos y los protozoarios tales como los coccidios. Los ectoparásitos abarcan normalmente y de manera preferencial artrópodos, en especial insectos y ácaros.

En el campo de la medicina veterinaria, los compuestos de acuerdo con la invención son adecuados, con una toxicidad favorable para los animales de sangre caliente, para combatir parásitos que se presentan en la cría de animales y en los animales domésticos tales como animales útiles, animales de cría, animales de zoológico, animales de laboratorio, animales utilizados en los ensayos y animales domésticos. Son efectivos contra todas y cada una de las etapas de desarrollo de los parásitos.

Entre los animales útiles desde el punto de vista agrícola figuran por ejemplo los mamíferos tales como ovejas, caprinos, caballos, asnos, camellos, búfalos, conejos, renos, ciervos y vacunos y cerdos: o aves de corral tales como pavos, gansos y en especial gallinas, o peces o crustáceos, por ejemplo en acuarismo, y eventualmente también insectos tales como abejas.

Entre los animales domésticos figuran por ejemplo mamíferos tales como hámster, conejillo de Indias, ratas, ratones, chinchilla, hurones o en especial perros, gatos, pájaros domésticos, reptiles; anfibios o peces de acuario.

De acuerdo con una forma de realización preferida se aplican los compuestos de acuerdo con la invención a mamíferos.

35 De acuerdo con otra forma de realización preferida los compuestos de acuerdo con la invención se aplican a aves, específicamente a aves domésticas como en especial aves de corral.

Mediante el uso de los compuestos activos de acuerdo con la invención para combatir los parásitos de los animales deberían reducirse o bien prevenirse enfermedades, mortalidad y reducciones de rendimiento (en carne, leche, lana, pieles, huevos, miel y similares) de manera tal que se posibiliten una ganadería más económica y más sencilla y sea posible lograr un mejor bienestar de los animales.

40 En cuanto a la salud animal, el concepto "combatir" da a entender que mediante el principio activo es posible reducir de manera efectiva la presentación de los correspondientes parásitos en un animal, que está infestado con tales parásitos en una extensión inofensiva. Dicho con más precisión, en el presente contexto la expresión "combatir" significa que el principio activo puede matar los parásitos correspondientes, inhibir su crecimiento o inhibir su multiplicación.

45 Entre los ejemplos de artrópodos, se cuentan, pero sin limitación:

del orden Anoplurida, por ejemplo, Haematopinus spp., Linognathus spp., Pediculus spp., Phtirus spp., Solenopotes spp.; del orden Mallophagida y los subórdenes Amblycerina y Ischnocerina, por ejemplo, Trimenopon spp., Menopon spp., Trinoton spp., Bovicola spp., Werneckiella spp., Lepikentron spp., Damalina spp., Trichodectes spp., Felicola spp.; del orden Diptera y los subórdenes Nematocerina y Brachycerina, por ejemplo, Aedes spp., Anopheles spp., Culex spp., Simulium spp., Eusimulium spp., Phlebotomus spp., Lutzomyia spp., Culicoides spp., Chrysops spp., Odagmia spp., Wilhelmia spp., Hybomitra spp., Atylotus spp., Tabanus spp., Haematopota spp., Philipomyia spp., Braula spp., Musca spp., Hydrotaea spp., Stomoxyx spp., Haematobia spp., Morellia spp., Fannia spp., Glossina spp., Calliphora spp., Lucilia spp., Chrysomya spp., Wohlfahrtia spp., Sarcophaga spp., Oestrus spp., Hypoderma spp., Gasterophilus spp., Hippobosca spp., Lipoptena spp., Melophagus spp., Rhinocerous spp., Tipula spp.; del orden Siphonapterida, por ejemplo, Pulex spp.,

Ctenocephalides spp., Tunga spp., Xenopsylla spp., Ceratophyllus spp.; del orden Heteroptera, por ejemplo, Cimex spp., Triatoma spp., Rhodnius spp., Panstrongylus spp.; así como plagas y parásitos de la higiene del orden Blattaria.

También se han de mencionar entre los artrópodos los siguientes ácaros a modo de ejemplo, pero sin limitación:

- 5 de la subclase ácaros (Acarina) y del orden Metastigmata, por ejemplo, de la familia Argasidae, como Argas spp., Ornithodoros spp., Otobius spp., de la familia Ixodidae, como Ixodes spp., Amblyomma spp., Rhipicephalus (Boophilus) spp. Dermacentor spp., Haemophysalis spp., Hyalomma spp., Rhipicephalus spp. (la especie original de las garrapatas de varios huéspedes); del orden Mesostigmata como Dermanyssus spp., Ornithonyssus spp., Pneumonyssus spp., Raillietia spp., Pneumonyssus spp., Sternostoma spp., Varroa spp., Acarapis spp.; del orden Actinedida (Prostigmata), por ejemplo, Acarapis spp., Cheyletiella spp., Ornithocheyletia spp., Myobia spp., Psorergates spp., Demodex spp., Trombicula spp., Neotrombicula spp., Listrophorus spp.; y del orden Acaridida (Astigmata), por ejemplo, Acarus spp., Tyrophagus spp., Caloglyphus spp., Hypodectes spp., Pterolichus spp., Psoroptes spp., Chorioptes spp., Otodectes spp., Sarcoptes spp., Notoedres spp., Knemidocoptes spp., Cytodites spp., Laminosioptes spp.

- 10 15 Entre los ejemplos de protozoos parasitarios se cuentan, pero sin limitación:

Mastigophora (Flagellata), tales como, por ejemplo, Trypanosomatidae, por ejemplo, Trypanosoma b. brucei, T.b. gambiense, T.b. rhodesiense, T. congolense, T. cruzi, T. evansi, T. equinum, T. lewisi, T. percae, T. simiae, T. vivax, Leishmania brasiliensis, L. donovani, L. tropica, como por ejemplo, Trichomonadidae, por ejemplo, Giardia lamblia, G. canis.

- 20 25 Sarcomastigophora (Rhizopoda), como Entamoebidae, por ejemplo, Entamoeba histolytica, Hartmanellidae, por ejemplo, Acanthamoeba sp., Harmanella sp.

Apicomplexa (Sporozoa), como Eimeridae, por ejemplo, Eimeria acervulina, E. adenoides, E. alabamensis, E. anatis, E. anserina, E. arloingi, E. ashata, E. auburnensis, E. bovis, E. brunetti, E. canis, E. chinchillae, E. clupearum, E. columbae, E. contorta, E. crandalis, E. deblecki, E. dispersa, E. ellipsoidales, E. falciformis, E. faurei, E. flavesrens, E. gallopavonis, E. hagani, E. intestinalis, E. iroquoina, E. irridis, E. labbeana, E. leucarti, E. magna, E. maxima, E. media, E. meleagridis, E. meleagriditis, E. mitis, E. necatrix, E. ninakohlyakimovae, E. ovis, E. parva, E. pavonis, E. perforans, E. phasani, E. piriformis, E. praecox, E. residua, E. scabra, E. spec., E. stiedai, E. suis, E. tenella, E. truncata, E. truttae, E. zuernii, Globidium spec., Isospora belli, I. canis, I. felis, I. ohioensis, I. rivolta, I. spec., I. suis, Cystoisospora spec., Cryptosporidium spec., en especial C. parvum; como Toxoplasmatidae, por ejemplo, Toxoplasma gondii, Hammondia heydornii, Neospora caninum, Besnoitia besnoiti; como Sarcocystidae, por ejemplo, Sarcocystis bovis, S. bovinis, S. ovicanis, S. ovifelis, S. neurona, S. spec., S. suis, como Leucocystidae, por ejemplo, Leucocytozoon simondi, como Plasmodiidae, por ejemplo, Plasmodium berghei, P. falciparum, P. malariae, P. ovale, P. vivax, P. spec., como Piroplasma, por ejemplo, Babesia argentina, B. bovis, B. canis, B. spec., Theileria parva, Theileria spec., como Adeleina, Hepatozoon canis, H. spec.

- 30 35 Entre los ejemplos de endoparásitos patógenos, en cuyo caso se trata de helmintos, se cuentan platelmintos (por ejemplo, Monogenea, Cestodes y Trematodes), gusanos redondos, Acanthocephala y Pentastoma. Entre otros helmintos se cuentan, pero sin limitación:

Monogenea: por ejemplo: Gyrodactylus spp., Dactylogyurus spp., Polystoma spp.

- 40 Cestodes: del orden Pseudophyllidea, por ejemplo: Diphyllobothrium spp., Spirometra spp., Schistocephalus spp., Ligula spp., Bothridium spp., Diplogonoporus spp.

Del orden Cycophyllida, por ejemplo: Mesocestoides spp., Anoplocephala spp., Paranoplocephala spp., Moniezia spp., Thysanosoma spp., Thysaniezia spp., Avitellina spp., Stilesia spp., Cittotaenia spp., Andyra spp., Bertiella spp., Taenia spp., Echinococcus spp., Hydatigera spp., Davainea spp., Raillietina spp., Hymenolepis spp., Echinolepis spp., Echinocotyle spp., Diorchis spp., Dipylidium spp., Joyeuxiella spp., Diplopylidium spp.

- 45 50 Trematodes: de la clase Digenea, por ejemplo: Diplostomum spp., Posthodiplostomum spp., Schistosoma spp., Trichobilharzia spp., Ornithobilharzia spp., Austrobilharzia spp., Gigantobilharzia spp., Leucochloridium spp., Brachylaima spp., Echinostoma spp., Echinoparyphium spp., Echinochasmus spp., Hypoderaeum spp., Fasciola spp., Fascioloides spp., Fasciolopsis spp., Cyclocoelum spp., Typhlocoelum spp., Paramphistomum spp., Calicophoron spp., Cotylophoron spp., Gigantocotyle spp., Fischoderus spp., Gastrothylacus spp., Notocotylus spp., Catatropis spp., Plagiorchis spp., Prosthogonimus spp., Dicrocoelium spp., Eurytrema spp., Troglotrema spp., Paragonimus spp., Collyriclum spp., Nanophyetus spp., Opisthorchis spp., Clonorchis spp., Metorchis spp., Heterophyes spp., Metagonimus spp.

Gusanos redondos: Trichinellida, por ejemplo: Trichuris spp., Capillaria spp., Trichomosoides spp., Trichinella spp.

Del orden Tylenchida, por ejemplo: Micronema spp., Strongyloides spp.

- Del orden Rhabditina, por ejemplo: *Strongylus* spp., *Triodontophorus* spp., *Oesophagodontus* spp., *Trichonema* spp., *Gyalocephalus* spp., *Cylindropharynx* spp., *Poteriostomum* spp., *Cyclocercus* spp., *Cylicostephanus* spp., *Oesophagostomum* spp., *Chabertia* spp., *Stephanurus* spp., *Ancylostoma* spp., *Uncinaria* spp., *Bunostomum* spp., *Globocephalus* spp., *Syngamus* spp., *Cyathostoma* spp., *Metastrongylus* spp., *Dictyocaulus* spp., *Muellerius* spp.,
- 5 *Protostrongylus* spp., *Neostrongylus* spp., *Cystocaulus* spp., *Pneumostrongylus* spp., *Spicocaulus* spp., *Elaphostrongylus* spp., *Parelaphostrongylus* spp., *Crenosoma* spp., *Paracrenosoma* spp., *Angiostrongylus* spp., *Aelurostrongylus* spp., *Filaroides* spp., *Paraflaroides* spp., *Trichostrongylus* spp., *Haemonchus* spp., *Ostertagia* spp., *Marshallagia* spp., *Cooperia* spp., *Nematodirus* spp., *Hyostrongylus* spp., *Obeliscoides* spp., *Amidostomum* spp., *Ollulanus* spp.
- 10 Del orden Spirurida, por ejemplo: *Oxyuris* spp., *Enterobius* spp., *Passalurus* spp., *Syphacia* spp., *Aspiculuris* spp., *Heterakis* spp.; *Ascaris* spp., *Toxascaris* spp., *Toxocara* spp., *Baylisascaris* spp., *Parascaris* spp., *Anisakis* spp., *Ascaridia* spp.; *Gnathostoma* spp., *Physaloptera* spp., *Thelazia* spp., *Gongylonema* spp., *Habronema* spp., *Parabronema* spp., *Draschia* spp., *Dracunculus* spp.; *Stephanofilaria* spp., *Parafilaria* spp., *Setaria* spp., *Loa* spp., *Dirofilaria* spp., *Litomosoides* spp., *Brugia* spp., *Wuchereria* spp., *Onchocerca* spp.
- 15 Acanthocephala: del orden Oligacanthorhynchida, por ejemplo: *Macracanthorhynchus* spp., *Prosthenorchis* spp.; del orden Polymorphida, por ejemplo: *Filicollis* spp.; del orden Moniliformida, por ejemplo: *Moniliformis* spp.,
Del orden Echinorhynchida, por ejemplo, *Acanthocephalus* spp., *Echinorhynchus* spp., *Leptorhynchoides* spp.
Pentastoma: del orden Porocephalida, por ejemplo, *Linguatula* spp.
- 20 En el campo de la medicina veterinaria y de la ganadería la administración de los compuestos activos de acuerdo con la invención tiene lugar mediante procedimientos generalmente conocidos en la especialidad, tal como mediante vía enteral, parenteral, dérmica o nasal, en forma de preparados adecuados. La administración puede tener lugar a título profiláctico o terapéutico.
- Por lo tanto, una forma de realización de la presente invención se refiere a compuestos de acuerdo con la invención para su administración como medicamento.
- 25 Otro aspecto se refiere a compuestos de acuerdo con la invención para su uso contra endoparásitos, en especial como helminticida o como un agente contra protozoarios. Por ejemplo, los compuestos de acuerdo con la invención para su uso como antiedoparasitario, en especial una helminticida o agente contra protozoarios, por ejemplo en la cría de animales, ganadería, en estables o en el sector de la higiene.
- 30 Nuevamente, otro aspecto se refiere a compuestos de acuerdo con la invención para su uso como antiectoparasitario, en especial un agente para combatir artrópodos así como un insecticida o un acaricida. Por ejemplo, los compuestos de acuerdo con la presente invención pueden ser utilizados como antiectoparasitarios, en especial un agente para combatir artrópodos así como insecticida o acaricida, por ejemplo en la cría de animales, ganadería, en establos, en el sector de la higiene.
- 35 Los compuestos activos de la fórmula (I) y las composiciones que los contienen son adecuados para proteger materiales técnicos contra su ataque o destrucción por insectos, por ejemplo, del orden de los coleópteros, himenópteros, isópteros, lepidópteros, psocópteros y zygentoma.
- En el contexto de la presente, bajo la expresión "materiales técnicos" se entienden materiales no vivientes tales como por ejemplo materiales sintéticos, adhesivos, colas, papeles y cartones, cueros, madera, productos de madera elaborada y agentes aplicados a modo de pintura. Se prefiere especialmente la aplicación de la invención para proteger la madera.
- 40 En una forma de realización de acuerdo con la invención, los compuestos o agentes de acuerdo con la invención también contienen por lo menos otro insecticida y/o por lo menos un fungicida.
- 45 En otra forma de realización, esta composición de acuerdo con la invención es una composición lista para ser utilizada (ready-to-use), es decir, se la puede aplicar sin mayor modificación sobre el material correspondiente. A título de insecticida adicional o como fungicida se recurre a los mencionados anteriormente.
- 50 De manera sorprendente se ha comprobado también que las sustancias y composiciones de acuerdo con la invención pueden ser utilizadas para proteger contra la vegetación determinados objetos, en especial cascos de buques, cribas, redes, obras civiles, instalaciones de muelles y de señalización que entran en contacto con agua de mar o con agua salobre. De la misma manera, es posible emplear los compuestos activos y las composiciones de acuerdo con la invención solas o en combinación con otros compuestos activos, como agente antisucedad.

Los siguientes ejemplos de preparación y de uso ilustran la invención.

Ejemplos de preparación

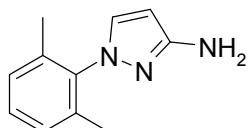
Ejemplo de síntesis 1

2-bromo-N-[1-(2-metilfenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida (compuesto I-1-1 en la tabla 1)

1-(2-metilfenil)-1H-pirazol-3-amina (255 mg) se dispuso en N,N-dimetilformamida (2 ml), se mezcló a temperatura ambiente con hexafluorofosfato de 2-(7-aza-1H-benzotriazol-1-il)-1,1,3,3-tetrametiluronio (482 mg) y diisopropiletilamina (0,59 ml) y se agitó durante 1 hora. Luego se añadió una solución de ácido 2-bromobenzoico (200 mg) en N,N-dimetilformamida (1 ml) y se agitó durante otras 2 horas. Luego la mezcla de reacción se mezcló con agua helada y se extrajo con diclorometano. Las fases orgánicas combinadas se lavaron sucesivamente con solución de hidrógeno-carbonato de sodio, agua y solución saturada de cloruro de sodio, se secaron sobre sulfato de sodio y se secaron al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con éter de petróleo / acetato de etilo como eluyente (isocrático al 12 % de acetato de etilo en éter de petróleo). Se obtuvieron 150 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,79; masa (m/z): 356,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 2,26 (s, 3H), 6,87 (d, 1H), 7,32 – 7,42 (m, 5H), 7,44 – 7,48 (m, 1H), 7,52 – 7,54 (m, 1H), 7,68 – 7,70 (m, 1H), 7,98 (d, 1H), 11,13 (s a, 1H).

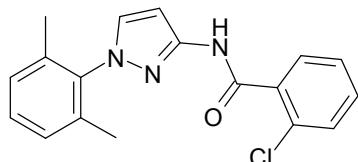
Ejemplo de síntesis 2**2-cloro-N-[1-(2,6-dimetilfenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida** (compuesto I-1-61 en la tabla 1)

Etapa 1: 1-(2,6-dimetilfenil)-1H-pirazol-3-amina (según la ruta B-1)



Clorhidrato de 2,6-dimetilfenilohidrazina (3,50 g) se colocó en etanol (30 ml), se mezcló con solución de metilato de sodio (3,29 g en 20 ml de etanol) y nitrilo de ácido 3-etoxiacrílico (2,95 g), se calentó a refluo durante 9 horas y luego se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se concentró luego al vacío, se extrajo en acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó primero por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo) y luego se cromatógrafió en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 39 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 0,62; masa (m/z): 188,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 2,00 (s, 6H), 4,03 (s a, 2H), 5,57 (d, 1H), 7,21 – 7,23 (m, 2H), 7,30 – 7,33 (m, 1H), 7,36 (d, 1H).

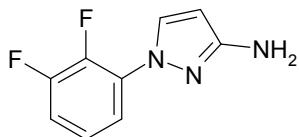
Etapa 2: 2-cloro-N-[1-(2,6-dimetilfenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida



1-(2,6-dimetilfenil)-1H-pirazol-3-amina (37 mg) se dispusieron en diclorometano (2 ml), se mezclaron a 0 °C con trietilamina (0,14 ml) y una solución de cloruro de 2-clorobenzoilo (35 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 15 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,63; masa (m/z): 324,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 1,96 (s, 6H), 6,71 (d, 1H), 7,18 – 7,20 (m, 2H), 7,29 – 7,44 (m, 6H), 7,65 – 7,66 (d, 1H), 8,46 (s a, 1H).

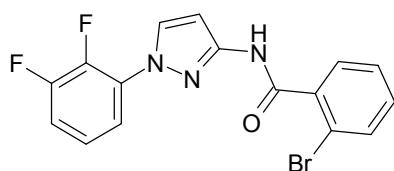
Ejemplo de síntesis 3**2-bromo-N-[1-(2,3-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida** (compuesto I-1-63 en la tabla 1)

Etapa 1: 1-(2,3-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (según la ruta B-1)



Clorhidrato de 2,3-difluorofenilohidrazina (5,00 g) se dispuso en etanol (30 ml), se mezcló con solución de metilato de sodio (4,49 g in 20 ml de etanol) y nitrilo de ácido 3-etoxiacrílico (4,03 g) y se calentó durante la noche a reflujo. La mezcla de reacción se concentró luego al vacío, se extrajo en acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 1,79 g del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,56; masa (m/z): 196,0 ($M+H$)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,26 (s a, 2H), 5,89 (d, 1H), 7,05 – 7,12 (m, 1H), 7,16 – 7,22 (m, 1H), 7,54 – 7,59 (m, 1H), 7,82 – 7,84 (m, 1H). Como subproducto, se obtuvieron 193 mg 1-(2-etoxi-3-fluorofenil)-1H-pirazol-3-amina: HPLC-EM: logP = 2,04; masa (m/z): 222,1 ($M+H$)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 1,32 (t, 3H), 4,08 (c,2H), 4,56 (s a, 2H), 4,65 (d, 1H), 7,00 – 7,11 (m, 3H), 7,46 (d, 1H).

Etapa 2: 2-bromo-N-[1-(2,3-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida

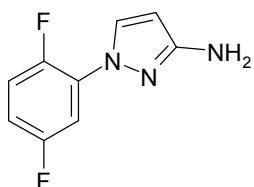


1-(2,3-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (100 mg) se dispuso en diclorometano (2 ml), se mezcló a 0 °C con trietilamina (0,36 ml) y una solución de cloruro de 2-bromobenzoílo (113 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 116 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,97; masa (m/z): 376,0 ($M+H$)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,03 – 7,04 (m, 1H), 7,20 – 7,29 (m, 2H), 7,36 – 7,47 (m, 2H), 7,53 – 7,58 (m, 2H), 7,66 – 7,68 (m, 1H), 8,03 – 8,04 (m, 1H), 9,30 (s a, 1H).

Ejemplo de síntesis 4

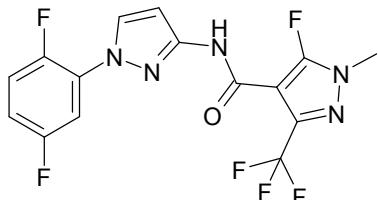
N-[1-(2,5-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-5-fluoro-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-carboxamida (compuesto I-1-72 en la tabla 1)

Etapa 1: 1-(2,5-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (según la ruta B-1)



2,5-difluorofenilohidrazina (3,62 g) se dispuso en etanol (10 ml), se mezcló con solución de metilato de sodio (4,07 g en 10 ml de etanol) y nitrilo de ácido 3-etoxiacrílico (3,66 g) y se calentó durante la noche a reflujo. La mezcla de reacción se concentró luego al vacío, se extrajo en acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 2,88 g del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,58; masa (m/z): 196,1 ($M+H$)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,26 (s a, 2H), 5,87 (d, 1H), 6,87 – 6,93 (m, 1H), 7,21 – 7,28 (m, 1H), 7,53 – 7,58 (m, 1H), 7,86 – 7,88 (m, 1H).

Etapa 2: *N*-[1-(2,5-difluorofenil)-1*H*-pirazol-3-*i*l]-5-fluoro-1-metil-3-(trifluorometil)-1*H*-pirazol-4-carboxamida

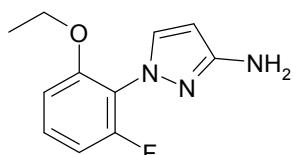


Ácido 5-fluoro-1-metil-3-(trifluorometil)-1*H*-pirazol-4-carboxílico (130 mg) se dispuso en diclorometano (4 ml), se mezcló a 0 °C con 1-etil-3-(3-dimetilaminopropil)carbodiimida (147 mg) y 1-hidroxi-1-H-benzotriazol (104 mg) y se agitó durante 30 min. Luego se añadió una solución de 1-(2,5-difluorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (100 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se cromatógrafió primero en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo) y luego se cromatógrafió en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 16 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 390,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 3,85 (s, 3H), 6,97 (d, 1H), 7,07 – 7,14 (m, 1H), 7,34 – 7,40 (m, 1H), 7,61 – 7,66 (m, 1H), 8,09 – 8,10 (m, 1H), 9,08 (s a, 1H).

Ejemplo de síntesis 5

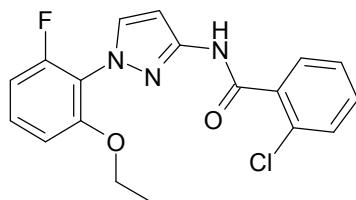
15 **2-cloro-N-[1-(2-etoxy-6-nuorofenil)-1*H*-pirazol-3-*i*l]benzamida** (compuesto I-1-117 en la tabla 1)

Etapa 1: 1-(2-etoxy-6-fluorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (según la ruta B-1)

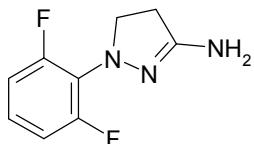


2,6-difluorofenilohidrazina (5,00 g) se dispuso en etanol (30 ml), se mezcló con solución de metilato de sodio (4,49 g en 20 ml de etanol) y nitrilo de ácido 3-etoixacrílico (4,03 g) y se calentó durante la noche a reflujo. La mezcla de reacción se concentró luego al vacío, se extrajo en acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se disolvió luego nuevamente en etanol (50 ml) y se calentó otra noche a reflujo. La mezcla de reacción se concentró luego otra vez al vacío, se extrajo en acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó luego por cromatografía en columna en gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 152 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,47; masa (m/z): 222,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 1,27 (t, 3H), 3,80 – 4,20 (m, 4H), 5,75 (d, 1H), 6,81 – 6,86 (m, 1H), 6,90 – 6,92 (m, 1H), 7,31 – 7,36 (m, 2H).

Etapa 2: 2-cloro-N-[1-(2-etoxy-6-fluorofenil)-1*H*-pirazol-3-*i*l]benzamida

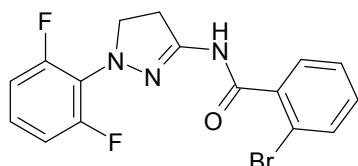


30 1-(2-etoxy-6-fluorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (71 mg) se dispuso en diclorometano (2 ml), se mezcló a 0 °C con trietilamina (0,22 ml) y una solución de cloruro de 2-clorobenzoilo (56 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 60 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,84; masa (m/z): 360,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 1,30 (t, 3H), 4,12 (c, 2H), 6,89 – 7,00 (m, 3H), 7,42 – 7,53 (m, 4H), 7,61 – 7,62 (m, 1H), 7,66 – 7,67 (m, 1H), 9,31 (s a, 1H).

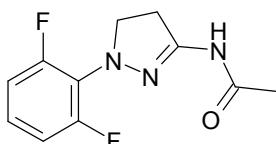
Ejemplo de síntesis 6**2-bromo-N-[1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-il]benzamida** (compuesto I-4-2 en la tabla 2)Etapa 1: *1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-amina* (según la ruta C-1)

- 5 Clorhidrato de 2,6-difluorofenilohidrazina (2,00 g) se dispuso en etanol (20 ml), se añadió gota a gota lentamente a temperatura ambiente etilato de sodio (al 21 % en etanol, 3,02 g), se agitó durante 10 min, se mezcló con nitrilo de ácido acrílico (0,80 ml) y se calentó durante la noche a reflujo. La mezcla de reacción se concentró luego al vacío, se extrajo en diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. Quedaron 1,40 g del producto crudo, que se usó sin ulterior purificación para la siguiente etapa.

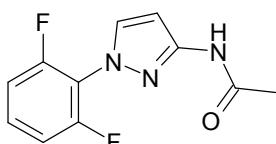
- 10 Etapa 2: *2-bromo-N-[1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-il]benzamida*



- 15 1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-amina (150 mg) se dispuso en diclorometano (2 ml), se mezcló a 0 °C con trietilamina (0,32 ml) y una solución de cloruro de 2-bromobenzoilo (167 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante 6 h a 0 °C así como durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 15 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 380,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 3,45 (t, 2H), 3,79 (t, 2H), 6,93 – 7,01 (m, 2H), 7,10 – 7,18 (m, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 1H), 7,43 – 7,47 (m, 1H), 7,50 – 7,53 (m, 1H), 7,66 – 7,68 (m, 1H), 9,04 (s a, 1H).

Ejemplo de síntesis 7**N-[1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-3-(trifluorometil)piridin-2-carboxamida** (compuesto I-1-91 en la tabla 1)Etapa 1: *N-[1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-il]acetamida*

- 25 1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-amina (1,40 g como mezcla cruda del Ejemplo de síntesis 6, Etapa 1) se disolvió bajo enfriamiento con hielo en acetanhidrido (6 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. Luego se diluyó la preparación con acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 537 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,46; masa (m/z): 240,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 1,99 (s, 3H), 3,26 (t, 2H), 3,65 (t, 2H), 7,04 – 7,10 (m, 2H), 7,11 – 7,18 (m, 1H), 10,59 (s a, 1H).

Etapa 2: *N-[1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]acetamida*

N-[1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-il]acetamida (200 mg) se dispuso en 1,4-dioxano (1 ml), se mezcló con 2,3-dicloro-5,6-diciano-1,4-benzoquinona (209 mg) y se agitó durante 30 min a temperatura ambiente. La mezcla

de reacción se filtró y el filtrado se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 140 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,33; masa (m/z): 238,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 2,07 (s, 3H), 6,84 (d, 1H), 7,14 – 7,20 (m, 2H), 7,47 – 7,53 (m, 1H), 7,65 – 7,66 (m, 1H), 8,76 (s a, 1H).

5

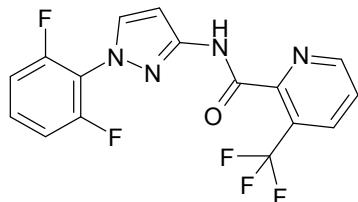
Etapa 3: 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (según la ruta D-1)



N-[1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]acetamida (50 mg) se dispuso en agua (1 ml), se mezcló con ácido clorhídrico concentrado (0,07 ml) y se calentó durante 8 h a reflujo. La mezcla de reacción se alcalinizó luego con lejía de sosa concentrada y se extrajo con diclorometano. La fase orgánica se secó al vacío hasta sequedad. Se obtuvieron 25 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,13; masa (m/z): 196,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,12 (s a, 2H), 5,83 (d, 1H), 7,09 – 7,16 (m, 2H), 7,37 – 7,44 (m, 1H), 7,46 – 7,47 (m, 1H).

10

Etapa 4: N-[1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-3-(trifluorometil)piridin-2-carboxamida



Ácido 3-(trifluorometil)piridin-2-carboxílico (76 mg) se dispuso en diclorometano (2 ml), se mezcló a 0 °C con 1-etyl-3-(3-dimetilaminopropil)carbodiimida (95 mg) y 1-hidroxi-1H-benzotriazol (67 mg) y se agitó durante 1 hora. Luego se añadió una solución de 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina (66 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se chromatografió primero en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo) y luego en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 55 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 369,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 6,98 – 6,99 (m, 1H), 7,17 – 7,21 (m, 2H), 7,48 – 7,55 (m, 1H), 7,66 – 7,73 (m, 1H), 7,76 – 7,77 (m, 1H), 8,08 – 8,10 (m, 1H), 8,80 – 8,82 (m, 1H), 9,30 (s a, 1H).

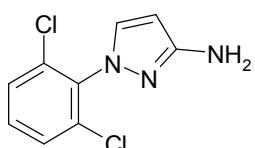
15

20

25

N-[1-(2,6-diclorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-yodobenzamida (compuesto I-1-123 en la tabla 1)

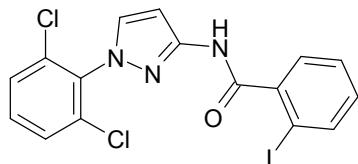
Etapa 1: 1-(2,6-diclorofenil)-1H-pirazol-3-amina (según la ruta B-1)



2,6-diclorofenilohidrazina (10,0 g) se dispuso en etanol (65 ml), se mezcló con solución de metilato de sodio (3,04 g en 35 ml de etanol) y con nitrilo de ácido 3-etoxiacrílico (6,82 g), se agitó durante 12 h a 80 °C y durante 2 d a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se concentró luego al vacío, se extrajo en acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 832 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,47; masa (m/z): 228,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,09 (s a, 2H), 5,81 (d, 1H), 7,35 – 7,43 (m, 2H), 7,51 – 7,53 (m, 2H).

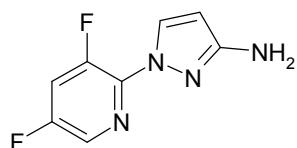
30

35

Etapa 2: *N*-[1-(2,6-diclorofenil)-1*H*-pirazol-3-*i*l]-2-yodobenzamida

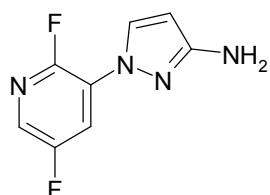
5 1-(2,6-diclorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (150 mg) se dispuso en diclorometano (2 ml), se mezcló 0 °C con trietilamina (0,28 ml) y una solución de cloruro de 2-yodobenzoilo (175 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 150 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,04; masa (m/z): 457,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 6,99 – 7,00 (m, 1H), 7,18 – 7,23 (m, 1H), 7,46 – 7,52 (m, 3H), 7,56 – 7,58 (m, 2H), 7,66 – 7,67 (m, 1H), 7,94 – 7,96 (m, 1H), 9,16 (s a, 1H).

10

Ejemplo de síntesis 9**N-[1-(3,5-difluoropiridin-2-*i*l)-1*H*-pirazol-3-*i*l]-2,6-difluorobenzamida** (compuesto I-1-146 en la tabla 1)Etapa 1: 1-(3,5-difluoropiridin-2-*i*l)-1*H*-pirazol-3-amina (según la ruta A-1)

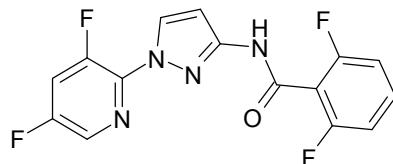
15 1*H*-pirazol-3-amina (1,80 g) se dispuso en acetonitrilo (50 ml), se mezcló con 2,3,5-trifluoropiridina (2,88 g) y carbonato de potasio (5,99 g) y se calentó durante la noche a reflugo. La mezcla de reacción se concentró luego al vacío, se extrajo en diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 610 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 0,81; masa (m/z): 197,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,27 (s a, 2H), 5,88 (d, 1H), 7,56 – 7,62 (m, 1H), 7,99 – 8,00 (m, 1H), 8,17 – 8,18 (m, 1H).

20



Como otro producto, se obtuvieron 410 mg de la 1-(2,5-difluoropiridin-3-*i*l)-1*H*-pirazol-3-amina isomérica. HPLC-EM: logP = 1,15; masa (m/z): 197,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,39 (s a, 2H), 5,92 (d, 1H), 7,80 – 7,82 (m, 1H), 7,94 – 7,95 (m, 1H), 8,02 – 8,07 (m, 1H).

25

Etapa 2: *N*-[1-(3,5-difluoropiridin-2-*i*l)-1*H*-pirazol-3-*i*l]-2,6-difluorobenzamida

30 1-(3,5-difluoropiridin-2-*i*l)-1*H*-pirazol-3-amina (66 mg) se dispuso en diclorometano (2 ml), se mezcló a 0 °C con trietilamina (0,14 ml) y una solución de 2,6-cloruro de difluorobenzoilo (59 mg) en diclorometano (1 ml) y se agitó durante la noche a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 107 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,19; masa (m/z): 337,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,02 – 7,03 (m, 1H), 7,06 – 7,12 (m, 2H), 7,48 – 7,56 (m, 1H), 7,65 – 7,70 (m,

1H), 8,21 – 8,22 (m, 1H), 8,26 – 8,27 (m, 1H), 9,51 (s a, 1H).

Ejemplo de síntesis 10

2-bromo-N-[1-(3,5,6-trifluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]benzamida (compuesto I-1-164 en la tabla 1)

Etapa 1: *1-(3,5,6-trifluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina* (según la ruta A-1)

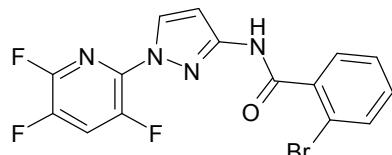


5

Se dispuso 1H-pirazol-3-amina (2,00 g) en acetonitrilo (75 ml), se mezcló con 2,3,5,6-tetrafluoropiridina (3,64 g) y carbonato de potasio (6,65 g) y se calentó durante la noche a reflujo. La mezcla de reacción se trituró luego con éter ter-butilmético y se filtró. El filtrado se secó al vacío hasta sequedad. Quedaron 2,51 g del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,15; masa (m/z): 215,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,35 (s a, 2H), 5,86 (d, 1H), 8,00 (d, 1H), 8,40 – 8,45 (m, 1H).

10

Etapa 2: *2-bromo-N-[1-(3,5,6-trifluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]benzamida*



15

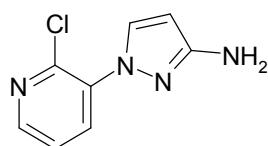
Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2, se hizo reaccionar 1-(3,5,6-trifluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (150 mg) con cloruro de 2-bromobenzoilo (169 mg) y trietilamina (0,29 ml) en diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna, se obtuvieron 145 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 396,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 7,02 (d, 1H), 7,38 – 7,43 (m, 1H), 7,45 – 7,49 (m, 1H), 7,53 – 7,55 (m, 1H), 7,68 – 7,70 (m, 1H), 8,32 (d, 1H), 8,55 – 8,61 (m, 1H), 11,41 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 11

N-[1-(2-cloropiridin-3-il)-1H-pirazol-3-il]-2-yodobenzamida (compuesto I-1-139 en la tabla 1)

20

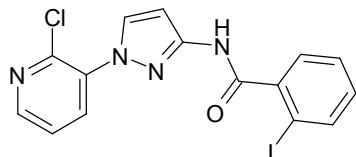
Etapa 1: *1-(2-cloropiridin-3-il)-1H-pirazol-3-amina* (según la ruta A-1)



25

1H-pirazol-3-amina (2,00 g) se dispuso en dimetilsulfóxido (25 ml), se mezcló con 2-cloro-3-fluoropiridina (3,17 g) y carbonato de potasio (6,65 g) y se agitó durante la noche a 120 °C. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 2,16 g del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 0,62; masa (m/z): 179,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,23 (s a, 2H), 5,87 (d, 1H), 7,41 – 7,44 (m, 1H), 7,86 (d, 1H), 7,92 – 7,94 (m, 1H), 8,28 – 8,30 (m, 1H).

Etapa 2: *N-[1-(2-cloropiridin-3-il)-1H-pirazol-3-il]-2-yodobenzamida*



30

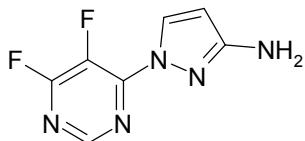
Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2, se hizo reaccionar 1-(2-chloropiridin-3-il)-1H-pirazol-3-amina (100 mg) con cloruro de 2-yodobenzoilo (137 mg) y trietilamina (0,22 ml) en diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna, se obtuvieron 96 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,27; masa (m/z): 424,9

(M+H)⁺; RMN de ¹H [CD₃CN] 7,02 (d, 1H), 7,19 – 7,24 (m, 1H), 7,49 – 7,52 (m, 3H), 7,94 – 7,96 (m, 2H), 8,00 – 8,01 (m, 1H), 8,42 – 8,44 (m, 1H), 9,21 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 12

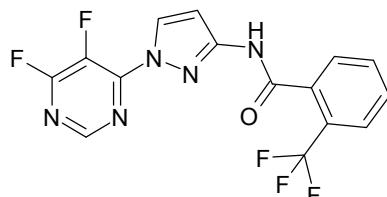
N-[1-(5,6-Difluoropirimidin-4-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-1-169 en la tabla 1)

- 5 Etapa 1: *1-(5,6-Difluoropirimidin-4-il)-1H-pirazol-3-amina* (según la ruta A-1)



1H-pirazol-3-amina (1,25 g) se dispuso en acetonitrilo (75 ml), se mezcló con 4,5,6-trifluoropirimidina (2,02 g) y carbonato de potasio (4,16 g) y se calentó durante la noche a reflujo. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 379 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 0,86; masa (m/z): 198,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,73 (s a, 2H), 6,01(d, 1H), 8,34 (d, 1H), 8,46 (s, 1H).

Etapa 2: *N-[1-(5,6-Difluoropirimidin-4-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida*

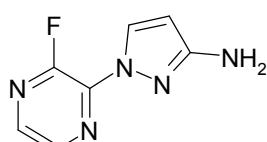


15 Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2, se hizo reaccionar 1-(5,6-difluoropirimidin-4-il)-1H-pirazol-3-amina (62 mg) con cloruro de 2-(trifluorometil)benzoílo (66 mg) y trietilamina (0,13 ml) en diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna, se obtuvieron 6 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,62; masa (m/z): 370,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 7,12 (d, 1H), 7,69 – 7,84 (m, 4H), 8,66 – 8,67 (m, 2H), 11,69 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 13

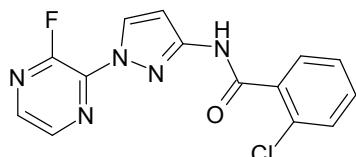
2-cloro-N-[1-(3-fluoropirazin-2-il)-1H-pirazol-3-il]benzamida (compuesto I-1-174 en la tabla 1)

- Etapa 1: *1-(3-fluoropirazin-2-il)-1H-pirazol-3-amina* (según la ruta A-1)



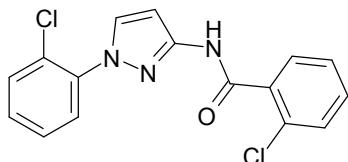
25 1H-pirazol-3-amina (2,00 g) se dispuso en acetonitrilo (75 ml), se mezcló con 2,3-difluoropirazina (2,79 g) y carbonato de potasio (6,65 g) y se calentó durante la noche a reflujo. La mezcla de reacción se diluyó luego con diclorometano, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se trituró con éter ter-butilmético y el sólido producido se separó, se lavó y se secó. Se obtuvieron 2,24 g del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 0,49; masa (m/z): 180,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 5,44 (s a, 2H), 5,92 (d, 1H), 8,07 – 8,09 (m, 1H), 8,22 (d, 1H), 8,52 – 8,54 (s, 1H).

30 Etapa 2: *2-cloro-N-[1-(3-fluoropirazin-2-il)-1H-pirazol-3-il]benzamida*



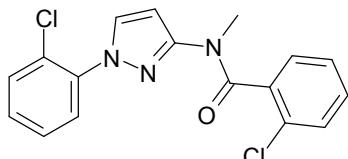
Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2, se hizo reaccionar 1-(3-fluoropirazin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (150 mg) con cloruro de 2-clorobenzoilo (162 mg) y trietilamina (0,35 ml) en diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna, se obtuvieron 188 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,03; masa (m/z): 318,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 7,08 (d, 1H), 7,41 – 7,59 (m, 4H), 8,30 – 8,31 (m, 1H), 8,51 (d, 1H), 8,54 – 8,55 (m, 1H), 11,49 (s, 1H).

5

Ejemplo de síntesis 14**2-cloro-N-[1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida** (compuesto I-1-20 en la tabla 1)

Análogamente al ejemplo de síntesis 9 Etapa 2, se hizo reaccionar 1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-amina (300 mg) con cloruro de 2-clorobenzoilo (271 mg) y trietilamina (1,08 ml) en diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna, se obtuvieron 386 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 332,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 6,97 (d, 1H), 7,34 – 7,55 (m, 6H), 7,58 – 7,61 (m, 2H), 7,88 (d, 1H), 9,22 (s a, 1H).

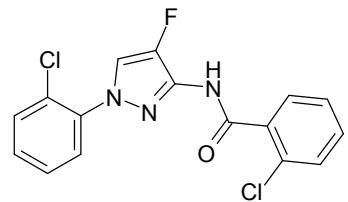
10

Ejemplo de síntesis 15**2-cloro-N-[1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-il]-N-metilbenzamida** (compuesto I-1-21 en la tabla 1)

15

2-cloro-N-[1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida (100 mg) se dispuso en tetrahidrofurano (2 ml), se mezcló a 0 °C con hidruro de sodio (13 mg) y se agitó durante 30 min bajo refrigeración. Luego se añadió yodometano (0,02 ml), durante otras 6 h a 0 °C y durante la noche a temperatura ambiente. Luego se diluyó con acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo). Se obtuvieron 84 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,14; masa (m/z): 346,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) (2 Rotámero ca. 2: 1) 3,28; 3,46 (2 s, 3H), 6,02; 7,94 (2 m, 1H), 7,14 – 7,63 (m, 9H).

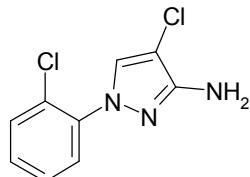
20

Ejemplo de síntesis 16**2-cloro-N-[1-(2-clorofenil)-4-fluoro-1H-pirazol-3-il]benzamida** (compuesto I-1-27 en la tabla 1)

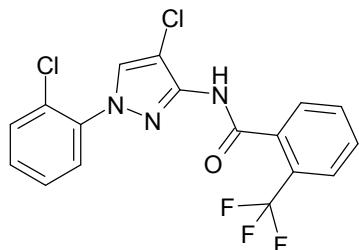
2-cloro-N-[1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-il]benzamida (151 mg) se dispuso bajo argón en acetonitrilo (2 ml), se mezcló con Selectfluor (646 mg) y se agitó durante 2 d a temperatura ambiente. Luego la mezcla de reacción se extrajo en diclorometano, se filtró y el filtrado se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se chromatografió primero en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo) y luego en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 12 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,70; masa (m/z): 350,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,44 – 7,62 (m, 7H), 7,68 – 7,71 (m, 1H), 8,39 (d, 1H), 10,73 (s, 1H).

30

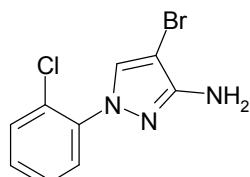
35

Ejemplo de síntesis 17**N-[4-cloro-1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida** (compuesto I-1-15 en la tabla 1)Etapa 1: *4-cloro-1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-amina (según la ruta F-1)*

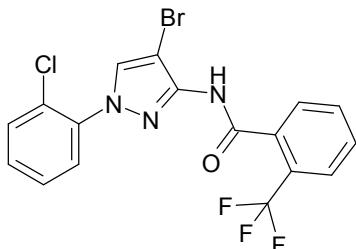
- 5 1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-amina (266 mg) se dispuso en tetrahidrofurano (9 ml), se mezcló con N-clorosuccinimida (202 mg) y se agitó durante 4 h a temperatura ambiente. Luego la mezcla de reacción se vertió en hielo, se agitó vigorosamente y se extrajo con acetato de etilo. La fase orgánica se secó sobre sulfato de sodio y se secaron al vacío hasta sequedad. Se obtuvieron 413 mg del compuesto del título crudo, que se hicieron reaccionar luego sin ulterior purificación. HPLC-EM: logP = 2,14; masa (m/z): 228,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,34 – 7,43 (m, 2H), 7,50 – 7,56 (m, 2H), 7,83 (s, 1H).
- 10

Etapa 2: *N-[4-cloro-1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida*

- 15 4-cloro-1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-amina (66 mg) se dispuso en tolueno (2 ml), se mezcló a 0 °C con trietilamina (0,28 ml) y una solución de cloruro de 2-(trifluorometil)benzoílo (140 mg) en tolueno (1 ml) y se agitó durante la noche a 80 °C. Luego se añadió cianuro de plata (I) (117 mg) y se agitó durante otros 2 días a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se cromatógrafió primero en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo) y luego se cromatógrafió en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 16 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,06; masa (m/z): 399,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,48 – 7,89 (m, 8H), 8,05 (s, 1H), 8,68 (s a, 1H).
- 20

Ejemplo de síntesis 18**N-[4-bromo-1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida** (compuesto I-1-16 en la tabla 1)Etapa 1: *4-bromo-1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-amina (según la ruta F-1)*

- 25 1-(2-clorofenil)-1H-pirazol-3-amina (266 mg) se dispuso en tetrahidrofurano (7 ml), se mezcló con N-bromosuccinimida (269 mg) y se agitó durante 3 h a temperatura ambiente. Luego la mezcla de reacción se vertió en hielo, se agitó vigorosamente y se extrajo con acetato de etilo. La fase orgánica se secó sobre sulfato de sodio y se secaron al vacío hasta sequedad. Se obtuvieron 442 mg del compuesto del título crudo, que se hicieron reaccionar luego sin ulterior purificación. HPLC-EM: logP = 2,23; masa (m/z): 272,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,27 (s a, 2H), 7,35 – 7,43 (m, 2H), 7,50 – 7,56 (m, 2H), 7,83 (s, 1H).
- 30

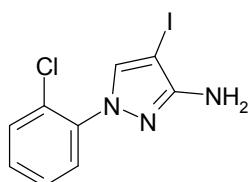
Etapa 2: *N*-[4-bromo-1-(2-clorofenil)-1*H*-pirazol-3-*i*l]-2-(trifluorometil)benzamida

- 5 4-bromo-1-(2-clorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (165 mg) se dispuso en tolueno (2 ml), se mezcló a 0 °C con trietilamina (0,25 ml) y una solución de cloruro de 2-(trifluorometil)benzoilo (126 mg) en tolueno (1 ml) y se agitó durante la noche a 80 °C. Luego se añadió cianuro de plata (I) (97 mg) y se agitó durante otros 2 días a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se chromatografió primero en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo) y luego se chromatografió en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 18 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,11; masa (m/z): 444,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,48 – 7,49 (m, 2H), 7,57 – 7,58 (m, 1H), 7,62 – 7,63 (m, 1H), 7,69 – 7,70 (m, 1H), 7,75 – 7,76 (m, 2H), 7,83 – 7,84 (m, 1H), 8,06 (s, 1H), 8,59 (s a, 1H).
- 10

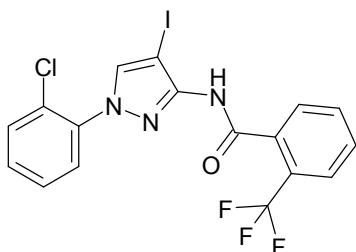
Ejemplo de síntesis 19

N-[4-yodo-1-(2-clorofenil)-1*H*-pirazol-3-*i*l]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-1-17 en la tabla 1)

- 15 Etapa 1: 4-yodo-1-(2-clorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (según la ruta F-1)



- 20 1-(2-clorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (266 mg) se dispuso en tetrahidrofurano (7 ml), se mezcló con N-yodosuccinimida (340 mg) y se agitó durante 3 h a temperatura ambiente. Luego la mezcla de reacción se vertió en hielo, se agitó vigorosamente y se extrajo con acetato de etilo. La fase orgánica se secó sobre sulfato de sodio y se secaron al vacío hasta sequedad. Se obtuvieron 557 mg del compuesto del título crudo, que se hicieron reaccionar luego sin ulterior purificación. HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 320,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,35 – 7,42 (m, 2H), 7,49 – 7,56 (m, 2H), 7,81 (s, 1H).

Etapa 2: *N*-[4-yodo-1-(2-clorofenil)-1*H*-pirazol-3-*i*l]-2-(trifluorometil)benzamida

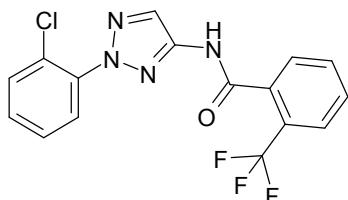
- 25 4-yodo-1-(2-clorofenil)-1*H*-pirazol-3-amina (180 mg) se dispuso en tolueno (3 ml), se mezcló a 0 °C con trietilamina (0,24 ml) y una solución de cloruro de 2-(trifluorometil)benzoilo (117 mg) en tolueno (2 ml) y se agitó durante la noche a 80 °C. Luego se añadió cianuro de plata (I) (91 mg) y se agitó durante otros 2 días a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se diluyó luego con acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se chromatografió primero en columna de gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente (gradiente = 2 h de 100 % de ciclohexano a 100 % de acetato de etilo) y luego se chromatografió en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 11 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,16; masa (m/z): 491,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,48 – 7,49 (m, 2H), 7,56 – 7,57 (m, 1H), 7,61 – 7,64 (m, 1H), 7,68 – 7,71 (m, 1H), 7,75 – 7,78 (m, 2H), 7,83 – 7,85 (m, 1H), 8,05 (s, 1H), 8,60 (s a, 1H).
- 30

Las nuevas 1H-pirazol-3-aminas de la fórmula (II-1) siguientes se obtuvieron análogamente a los ejemplos de síntesis dados: 1-(2,3-diclorofenil)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 3, Etapa 1 a partir de clorhidrato de 2,3-diclorofenilohidrazina: HPLC-EM: logP = 1,97; masa (m/z): 228,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 4,16 (s a, 2H), 5,84 (d, 1H), 7,39 – 7,41 (m, 1H), 7,50 – 7,52 (m, 1H), 7,59 – 7,60 (m, 1H), 7,73 (d, 1H).

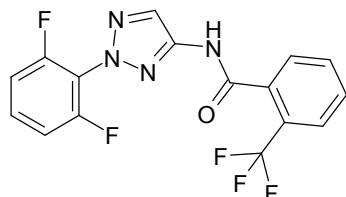
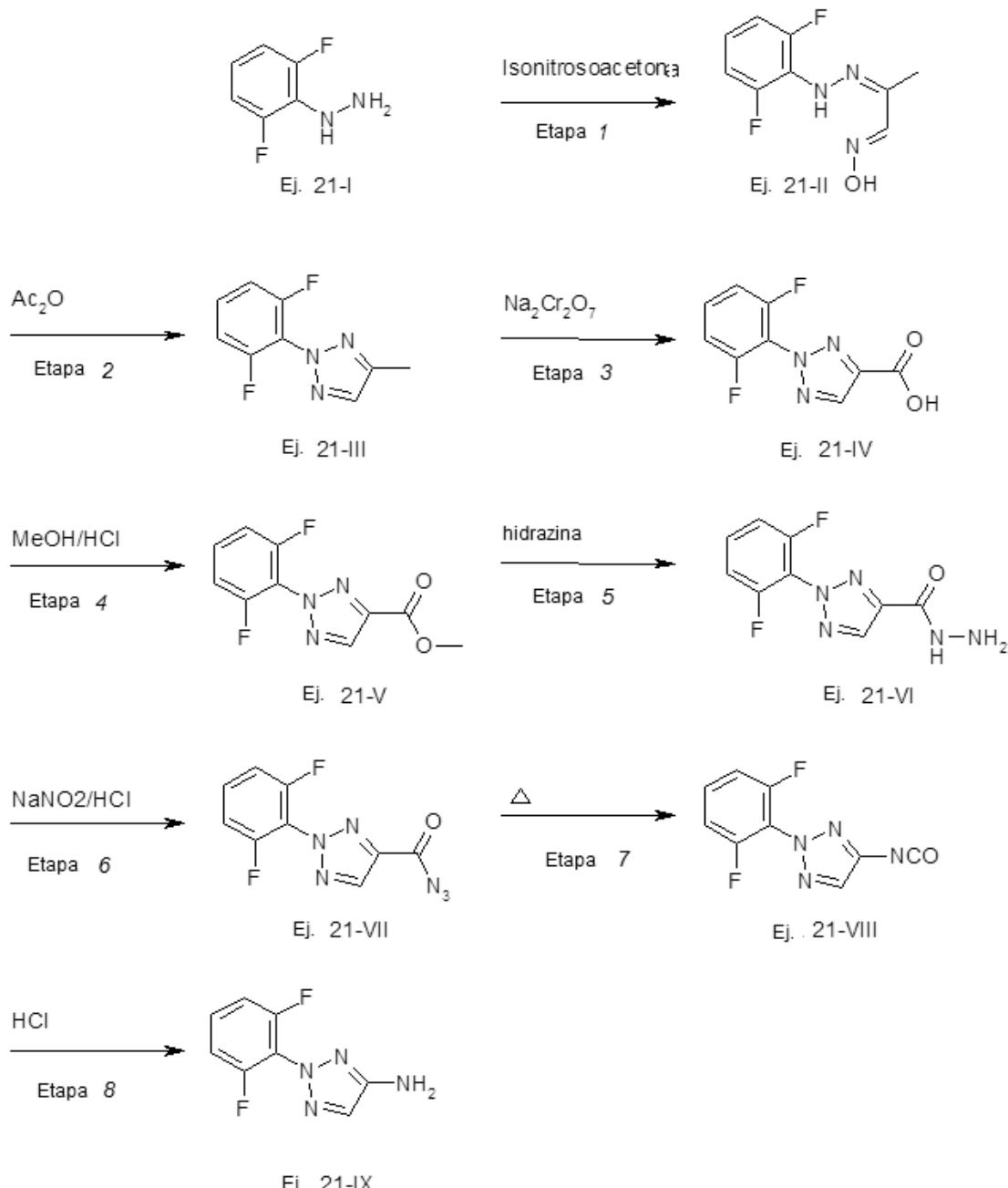
- 5 1-(3-cloro-2-fluorofenil)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 3, Etapa 1 a partir de clorhidrato de 3-cloro-2-fluorofenilohidrazina: HPLC-EM: logP = 1,90; masa (m/z): 212,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,22 (s a, 2H), 5,82 (d, 1H), 7,25 – 7,30 (m, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 1H), 7,67 – 7,71 (m, 1H), 7,90 – 7,10 (m, 1H). Como subproducto se obtuvo 1-(3-cloro-2-etoxifenil)-1H-pirazol-3-amina: HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 238,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 1,24 (t, 3H), 3,78 (c, 2H), 5,08 (s a, 2H), 5,78 (d, 1H), 7,17 – 7,21 (m, 1H), 7,30 – 7,33 (m, 1H), 7,56 – 7,59 (m, 1H), 7,97 (d, 1H).
- 10 1-(2-cloro-6-etoxifenil)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 5, Etapa 1 a partir de clorhidrato de 2-cloro-6-fluorofenilohidrazina: HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 238,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 1,34 (t, 3H), 4,11 (c, 2H), 4,99 (s a, 2H), 7,09 – 7,12 (m, 2H), 7,24 – 7,33 (m, 3H).
- 15 1-(2-cloro-4-metilfenil)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 3, Etapa 1 a partir de clorhidrato de 2-cloro-4-metilfenilohidrazina: HPLC-EM: logP = 1,85; masa (m/z): 208,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 2,35 (s, 3H), 4,08 (s a, 2H), 5,79 (d, 1H), 7,19 – 7,20 (m, 1H), 7,36 – 7,38 (m, 2H), 7,64 (d, 1H).
- 20 1-(3,5-difluoro-6-metilpiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 9, Etapa 1 a partir de 2,3,5-trifluoro-6-metilpiridina: HPLC-EM: logP = 1,25; masa (m/z): 211,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 2,40 – 2,41 (m, 3H), 5,18 (s a, 2H), 5,80 (d, 1H), 7,97 – 8,02 (m, 2H). Como subproducto se obtuvo 1-(2,5-difluoro-6-metilpiridin-3-il)-1H-pirazol-3-amina: HPLC-EM: logP = 1,50; masa (m/z): 211,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 2,36 – 2,37 (m, 3H), 5,34 (s a, 2H), 5,84 (d, 1H), 7,92 – 7,98 (m, 2H).
- 25 1-(5-cloropirazin-2-il)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 13, Etapa 1 a partir de 2,5-dicloropirazina: HPLC-EM: (m/z): 196,1 (M+H)⁺.
- 30 1-(6-fluoropirazin-2-il)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 13, Etapa 1 a partir de 2,6-difluoropirazina: HPLC-EM: logP = 0,90; masa (m/z): 180,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,61 (s a, 2H), 5,94 (d, 1H), 8,18 (d, 1H), 8,36 (d, 1H), 8,78 (d, 1H).
- 35 1-(3-metoxipirazin-2-il)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 13, Etapa 1 a partir de 2-cloro-3-metoxipirazina.
- 40 4-(3-amino-1H-pirazol-1-il)pirimidin-5-carbonitrilo: análogamente al Ejemplo de síntesis 12, Etapa 1 a partir de 4-cloropirimidin-5-carbonitrilo: HPLC-EM: logP = 0,59; masa (m/z): 187,1.
- 45 1-(5-cloro-3-fluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 9, Etapa 1 a partir de 5-cloro-2,3-difluoropiridina: HPLC-EM: logP = 1,27; masa (m/z): 213,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,30 (s, 2H), 5,86 (d, 1H), 8,12 (d, 1H), 8,17 – 8,20 (m, 1H), 8,31 (d, 1H).
- 50 1-(3-cloro-5-fluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina: análogamente al Ejemplo de síntesis 9, Etapa 1 a partir de 3-cloro-2,5-difluoropiridina: HPLC-EM: logP = 0,98; masa (m/z): 213,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,11 (s, 2H), 5,76 – 5,78 (m, 1H), 7,91 – 7,92 (m, 1H), 8,23 – 8,26 (m, 1H), 8,47 – 8,48 (m, 1H).

Ejemplo de síntesis 20

N-[2-(2-clorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-2-1 en la tabla 3)



- 40 Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2 se hizo reaccionar 2-(2-clorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (150 mg) con cloruro de 2-(trifluorometil)benzoílo (160 mg) y trietilamina (0,32 ml) en diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna y HPLC preparativa se obtuvieron 171 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,02; masa (m/z): 367,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,48 – 7,55 (m, 2H), 7,60 – 7,66 (m, 2H), 7,68 – 7,77 (m, 3H), 7,83 – 7,85 (m, 1H), 8,36 (s, 1H), 9,54 (s a, 1H).

Ejemplo de síntesis 21***N-[2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-il]-2-(trifluorometil)benzamida* (compuesto I-2-35 en la tabla 5)****Esquema de síntesis del producto intermediario 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (IX) (según la ruta A-3)****Etapa 1: 2-[2-(2,6-difluorofenil)hidraziniliden]propanaloxima (Ej. 21-II)**

0,1 moles de 2,6-difluorofenilohidrazina (Ej. 21-I) y 0,12 moles de isonitrosoacetona se calentaron en etanol durante 3 h a reflujo. Después de enfriar hasta temperatura ambiente, se filtró el sólido precipitado, se lavó con etanol y se

secó. Se obtuvo 75 % del teórico de hidazonoximas (Ej. 21-II).

Etapa 2: 2-(2,6-difluorofenil)-4-metil-2H-1,2,3-triazol (Ej. 21-III)

Una solución de 0,1 moles de hidazonoxima (Ej. 21-II) en anhídrido de ácido acético se calentó lentamente hasta 120 °C y se agitó durante 2 h a esta temperatura. El anhídrido de ácido acético en exceso se eliminó en el evaporador rotativo. El metiltriazol producido (Ej. 21-III) (65 % del teórico) se siguió usando sin ulterior elaboración.

Etapa 3: ácido 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-carboxílico (Ej. 21-IV)

0,2 moles de dicromato de sodio se vertieron en pequeñas porciones a una solución bien agitada de 0,1 moles de metiltriazol (Ej. 21-III) en ácido sulfúrico al 66 %. Cada porción individual de dicromato se añadió recién después de que desapareciera el color anaranjado amarillento del Cr⁶⁺ en el matraz. La división en porciones se dosificó además de modo tal que la temperatura en el matraz quedara a aproximadamente 80-90 °C. Luego se calentó en el baño de vapor durante 1 h. Despues de enfriar, la mezcla se vertió en aproximadamente la misma cantidad de hielo y se dejó reposar durante la noche. El ácido producido (Ej. 21-IV) se filtró, se lavó con agua y se secó. Se obtuvo 50 % del teórico del ácido (Ej. 21-IV).

Etapa 4: 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-carboxilato de metilo (Ej. 21-V)

Se condujo ácido clorhídrico durante 2 h a través de una solución hirviendo del ácido (Ej. 21-IV) en metanol. Tras enfriar, se filtraron cristales blancos del éster (Ej. 21-V) (85 % del teórico).

Etapa 5: 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-carbohidrazida (Ej. 21-VI)

El éster (Ej. 21-V) se hirvió con un exceso de 1,5 eq. de hidrato de hidracina durante 4 h en etanol. Tras enfriar, se lavaron los cristales de la hidrazida (Ej. 21-VI) con agua y se secaron. Se obtuvo 90 % del teórico.

Etapa 6: 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-carbonilazida (Ej. 21-VII)

A una suspensión de la hidrazida (Ej. 21-VI) en ácido clorhídrico acuoso al 20 %, se añadió una solución acuosa de nitrito de sodio. Despues de seguir agitando a 10 °C, se pudieron filtrar los cristales de la acilazida (Ej. 21-VII), se lavaron con agua y se secaron al vacío a temperatura ambiente. Se obtuvo 75 % del teórico.

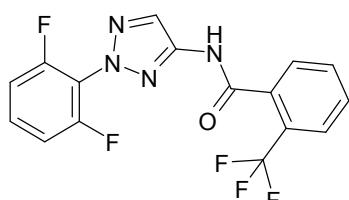
Etapa 7: 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-carbonilisocianato (Ej. 21-VIII)

La acilazida seca (Ej. 21-VII) se hirvió en tolueno hasta que la producción de gas terminara (aproximadamente 2 h). Luego se eliminó el tolueno en el evaporador rotativo y el residuo viscoso del isocianato (Ej. 21-VIII) se hizo seguir reaccionando directamente sin ulterior purificación. Se obtuvo aproximadamente 90 % del teórico.

Etapa 8: 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (Ej. 21-IX)

El isocianato (Ej. 21-VIII) se hidrolizó durante 30 min de cocción en ácido clorhídrico. Las sustancias volátiles restantes se eliminaron en el evaporador rotativo y el residuo se trató con solución de carbonato de sodio. Los cristales producidos se filtraron, se lavaron con agua y se recristalizaron de hexano. Se obtuvo 70 % del teórico de la amina (Ej. 21-IX). HPLC-EM: logP = 1,16; masa (m/z): 197,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 5,46 (a, 2H), 7,33 – 7,38 (m, 3H), 7,56 – 7,64 (m, 1H).

N-[2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-2-35 en la tabla 5)

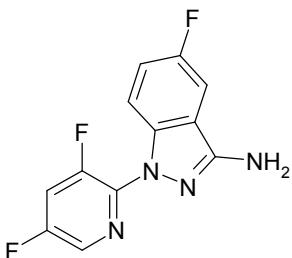


Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2 se hizo reaccionar 2-(2,6-difluorofenil)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (150 mg) con cloruro de 2-(trifluorometil)benzoilo (160 mg) y trietilamina (0,21 ml) en 3,9 ml de diclorometano. Despues de la purificación por cromatografía en columna y HPLC preparativa se obtuvieron 143 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 369,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,45 – 7,49 (m, 2H), 7,70 – 7,77 (m, 4H), 7,78 – 7,88 (m, 1H), 8,45 (s, 1H), 11,83 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 22

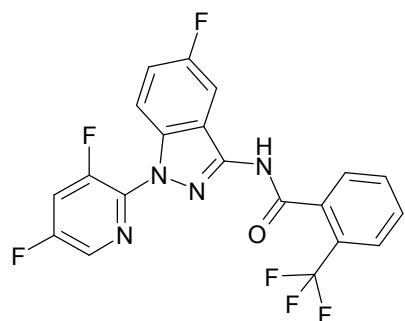
N-[1-(3,5-difluoropiridin-2-il)-5-fluoro-1H-indazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-5-2 en la tabla 4)

Etapa 1: 1-(3,5-difluoropiridin-2-il)-5-fluoro-1H-indazol-3-amina (según la ruta A-2)



5-fluoro-1H-indazol-3-amina (100 mg) se dispuso bajo argón en N,N-dimetilformamida (1 ml), se mezcló con hidruro de sodio (16 mg) y se agitó durante 30 min a temperatura ambiente. Luego se añadió una solución de 2,3,5-trifluoropiridina (88 mg en 0,5 ml de N,N-dimetilformamida) gota a gota y se agitó durante 2 días a temperatura ambiente. La mezcla de reacción se extrajo luego en acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. Se obtuvieron 121 mg del compuesto del título crudo, que se hicieron reaccionar luego sin ulterior purificación. HPLC-EM: logP = 2,09; masa (m/z): 265,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 6,14 (s a, 2H), 7,31 – 7,39 (m, 1H), 7,41 – 7,47 (m, 1H), 7,63 – 7,71 (m, 1H), 8,07 – 8,16 (m, 1H), 8,20 – 8,22 (m, 1H).

10 Etapa 2: *N*-[1-(3,5-difluoropiridin-2-il)-5-fluoro-1H-indazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida

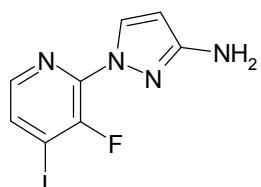


15 1-(3,5-difluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (121 mg) se dispuso en acetonitrilo (3 ml) y se mezcló a temperatura ambiente con carbonato de potasio (284 mg) y cloruro de 2-(trifluorometil)benzoílo (287 mg) y se agitó durante la noche. La mezcla de reacción se diluyó luego con acetato de etilo, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y se secó al vacío hasta sequedad. El residuo se cromatógrafió en una HPLC preparativa con agua / acetonitrilo como eluyente (gradiente = 40 min de 10 % de acetonitrilo en agua a 100 % de acetonitrilo). Se obtuvieron 13 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,37; masa (m/z): 437,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,47 – 7,52 (m, 1H), 7,64 – 7,67 (m, 1H), 7,74 – 7,77 (m, 1H), 7,81 – 7,89 (m, 3H), 7,98 – 8,05 (m, 1H), 8,32 – 8,45 (m, 1H), 8,57 – 8,58 (m, 1H), 11,47 (s, 1H).

20 Ejemplo de síntesis 23

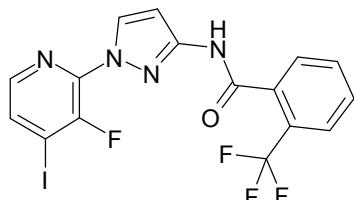
N-{1-[3-fluoro-4-(4-fluorofenil)piridin-2-il]-1H-pirazol-3-il}-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-1-640 en la tabla 1)

Etapa 1: 1-(3-fluoro-4-yodopiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina (según A-1)



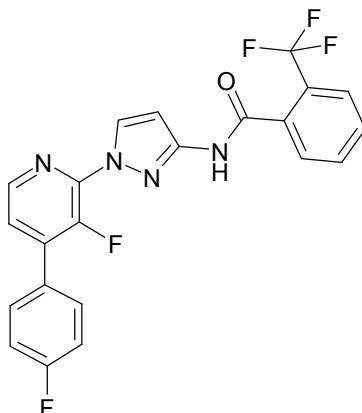
25 Una mezcla de 3-aminopirazol (0,50 g), 2,3-difluoro-4-yodopiridina (1,45 g), carbonato de potasio (3,3 g) y 10 ml de dimetilsulfóxido anhídrico se agitó a 85 °C durante 48 horas. Para la elaboración, se añadieron a temperatura ambiente 100 ml de agua y se extrajo con acetato de etilo. Tras secar la fase orgánica con sulfato de magnesio se evaporó por completo y se cromatógrafió en gel de sílice con un gradiente de acetato de etilo/metanol. Se obtuvieron 705 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,38; masa (m/z): 304,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,91 (m, 1H), 7,62 (m, 1H), 7,85 (m, 1H), 8,08 (m, 1H).

Etapa 2: *N*-[1-(3-fluoro-4-yodopiridin-2-il)-1*H*-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-1-576 en la tabla 1)



- 5 A una solución de 1-(3-fluoro-4-yodopiridin-2-il)-1*H*-pirazol-3-amina (600 mg) y trietilamina (0,83 ml) en diclorometano (12 ml) se añadió bajo enfriamiento con hielo cloruro de 2-(trifluorometil)benzoílo (412 mg), se agitó otra hora a 0 °C y se dejó calentar durante la noche a temperatura ambiente. La preparación se evaporó por completo y el residuo así obtenido se dividió entre acetato de etilo y solución semisaturada de hidrógeno-carbonato de sodio. La fase orgánica se evaporó y se cromatógrafió en gel de sílice con un gradiente de cloruro de metileno / metanol. Se obtuvieron 650 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 476,9 ($M+H$)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,05 (m, 1H), 7,6 (br m, 3H), 7,76 (br m, 2H), 7,92 (m, 1H), 8,29 (m, 1H), 9,54 (s a, 1H).
- 10

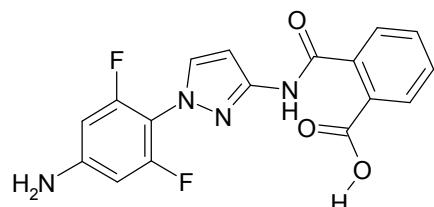
Etapa 3: *N*-{1-[3-fluoro-4-(4-fluorofenil)piridin-2-il]-1*H*-pirazol-3-il}-2-(trifluorometil)benzamida



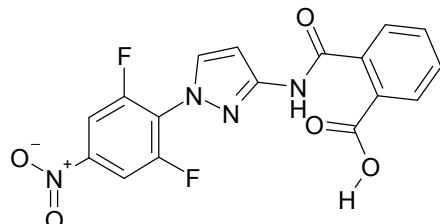
- 15 Una mezcla de N-[1-(3-fluoro-4-yodopiridin-2-il)-1*H*-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (200 mg), ácido 4-fluoroborónico (117 mg), carbonato de sodio (170 mg), cloruro de 1,1'-bis-(difenilofosfino)-ferroceno-paladio (II) (15 mg), 1,2-dimetoxietano (3 ml) y agua (1 ml) se calentó durante 6 horas hasta 85 °C. La mezcla de reacción se evaporó, el residuo se trituró con acetato de etilo, se filtró y el filtrado se lavó con agua, se secó y nuevamente se evaporó. El residuo así obtenido se purificó por cromatografía en columna de gel de sílice con un gradiente de ciclohexano / acetato de etilo. Se obtuvieron 81 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 3,40; masa (m/z): 445,1 ($M+H$)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 6,99 (m, 1H), 7,42 (m, 2H), 7,61 – 7,85 (m, 7H), 8,42 (m, 2H), 11,46 (s, 1 H).

20 Ejemplo de síntesis 24

Ácido 2-{{1-(4-amino-2,6-difluorofenil)-1*H*-pirazol-3-il}carbamoyl}benzoico (compuesto I-1-643 en la tabla 1)

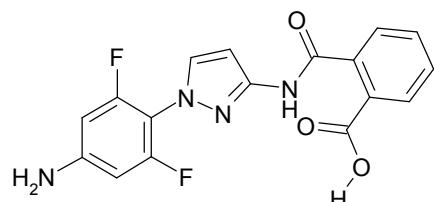


Etapa 1: ácido 2-{{[1-(2,6-difluoro-4-nitrofeuil)-1H-pirazol-3-il]carbamoiil}benzoico



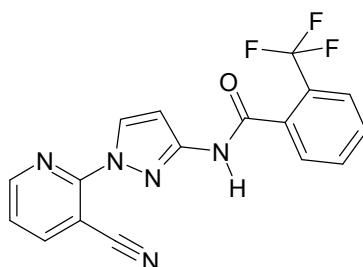
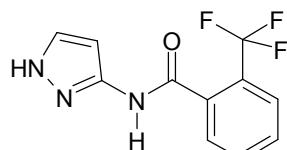
5 A una solución de 2-(1H-pirazol-3-il)-1H-isoindol-1,3(2H)-diona (5,90 g) y 3,4,5-trifluoronitrobenceno (5,05 g) en tetrahidrofuran (120 ml) se añadió bajo argón hidruro de sodio al 60 % (2,27 g) a -20 °C en porciones. La temperatura no aumentó en este caso a más de -5 °C. Después de 6 horas se dejó calentar hasta temperatura ambiente, la mezcla de reacción se agitó en 300 ml agua y se extrajo con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se filtraron después de secar sobre sulfato de magnesio y el filtrado se concentró por completo. Se obtuvieron 8,5 g del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 1,85, masa (m/z): 389,0 (M+H)⁺. El residuo así obtenido se usó en la siguiente etapa sin ulterior purificación.

10 Etapa 2: ácido 2-{{[1-(4-amino-2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]carbamoiil}benzoico



15 Una mezcla del anterior ácido 2-{{[1-(2,6-difluoro-4-nitrofenil)-1H-pirazol-3-il]carbamoiil}benzoico (6,56 g), metanol (50 ml) y 250 mg Pd/C (10 %) se hidrogenó en un autoclave bajo 4 bar de hidrógeno a temperatura ambiente durante 4 días. Después de filtrar el catalizador y evaporar la fase orgánica, se obtuvieron 6,2 g del compuesto del título con un contenido del 70 % del teórico. HPLC-EM: logP = 1,38, masa (m/z): 359,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 4,10 (m, 2H), 6,07(s, 2H), 6,33 (m, 2H), 6,85 (m, 1H), 7,41 (m, 2H), 7,67 (m, 1H), 7,74 (m, 1H), 7,77 (s a, 1H)

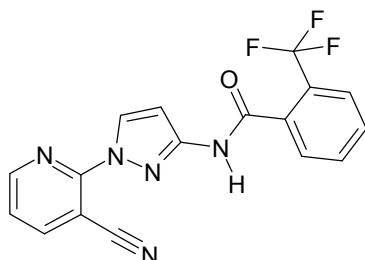
Ejemplo de síntesis 25

N-[1-(3-cianpiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-575) en la tabla 1)20 Etapa 1: *N*-(1*H*-pirazol-3-*i*l)-2-(trifluorometil)benzamida

25 Una solución de 3-aminopirazol (43,9 g) y trietilamina (52,4 g) en acetonitrilo (400 ml) se agitó bajo exclusión de humedad a 0 °C durante una hora. Luego se vertió gota a gota una solución de cloruro de ácido 2-(trifluorometil)benzoico (109,1 g) en acetonitrilo (50 ml) de modo tal que la temperatura interna no aumentara a más de 7 °C. Durante la noche se dejó calentar la reacción hasta temperatura ambiente, se diluyó con 600 ml de agua y se extrajo con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre sulfato de magnesio, se filtraron y se evaporaron. El residuo así obtenido se disolvió en isopropanol (500 ml) a reflujo. Después de enfriar hasta temperatura ambiente, se aislaron los cristales separados (48,6 g). Se trataba en este caso del compuesto del título con un equivalente molar de isopropanol cristalizado. HPLC-EM: logP = 1,33, masa (m/z): 255,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H

(DMSO-D₆) 1,03 (m, 6H), 3,77 (m, 1H), 4,33 (m, 1H), 6,60 (m, 1H), 7,60 – 7,81 (m, 5H), 10,97 (s, 1H), 12,41 (m, 1H).

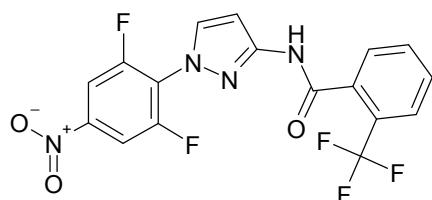
Etapa 2: N-[1-(3-cianpiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida



- 5 Una solución de N-(1H-pirazol-3-il)-2-(trifluorometil)benzamida x iso-propanol (222 mg) en 50 ml de dimetilformamida se evaporó al vacío hasta sequedad. El residuo se extrajo en dimetilformamida anhidra (3 ml), se mezcló con carbonato de potasio y la mezcla así obtenida se agitó intensamente durante 5 minutos. Luego se añadió 2-nitrilo de ácido cloronicotínico (88 mg) y se dejó agitar durante 6 horas a 50 °C, se añadió luego agua a temperatura ambiente (50 ml), se extrajo con acetato de etilo, las fases orgánicas combinadas se secaron sobre sulfato de magnesio y se evaporaron hasta sequedad. Por cromatografía en gel de sílice con un gradiente de ciclohexano / acetato de etilo se obtuvo el compuesto del título (149 mg). HPLC-EM: logP = 2,55, masa (m/z): 358,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,06 (m, 1H), 7,53 (m, 1H), 7,69 – 7,84 (m, 4H), 8,46 (m, 1H), 7,60 – 7,81 (m, 4H), 8,46 (m, 1H), 8,60 (m, 1H), 8,74 (m, 1H), 11,61 (s, 1H).
- 10 Las nuevas 2-(trifluorometil)benzamidas nuevas se obtuvieron análogamente a los js de síntesis indicados:

Ejemplo de síntesis 26:

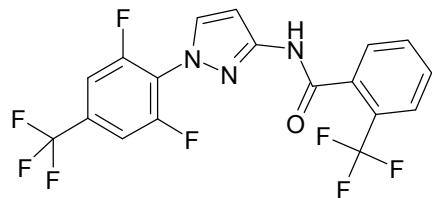
- 15 N-[1-(2,6-difluoro-4-nitrofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-229) en la tabla 1)



Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 3,4,5-trifluoronitrobenceno: HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 413,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 7,02 (m, 1H), 7,60 – 7,95 (m, 4H), 8,13 (m, 1H), 8,36 (m, 1H), 11,45 (s, 1H).

20 **Ejemplo de síntesis 27:**

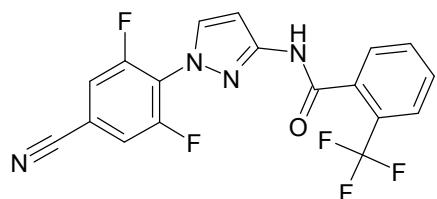
N-[1-[2,6-difluoro-4-(trifluorometil)fenilo]-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-230) en la tabla 1)



- 25 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 1,2,3-trifluoro-5-(trifluorometil)benceno: HPLC-EM: logP = 3,39; masa (m/z): 436,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 6,98 (m, 1H), 7,68 – 7,14 (m, 2H), 7,77 (m, 1H), 7,81 (m, 1H), 7,97 (m, 2H), 8,14 (m, 1H), 11,40 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 28:

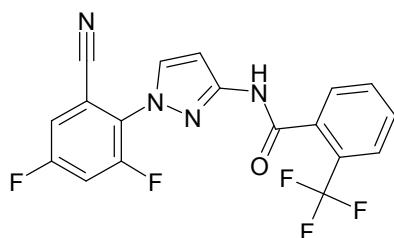
: N-[1-(4-cian-2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-228) en la tabla 1)



Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 3,4,5-trifluorobenzonitrilo: HPLC-EM: logP = 2,66; masa (m/z): 393,0 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 6,99 (m, 1H), 7,68 – 7,71 (m, 2H), 7,75 (m, 1H), 7,82 (m, 1H), 8,09 – 8,14 (m, 3H), 11,41 (s, 1H).

5 **Ejemplo de síntesis 29:**

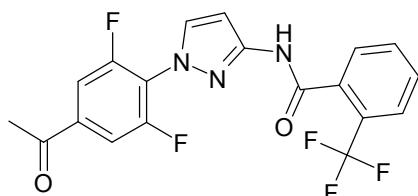
N-[1-(2-cian-4,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-393) en la tabla 1)



10 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2,3,5-trifluorobenzonitrilo: HPLC-EM: logP = 2,65; masa (m/z): 393,0 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,00 (m, 1H), 7,68 – 7,71 (m, 2H), 7,75 (m, 1H), 7,83 (m, 1H), 8,04 – 8,11 (m, 2H), 8,17 (m, 1H), 11,44 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 30:

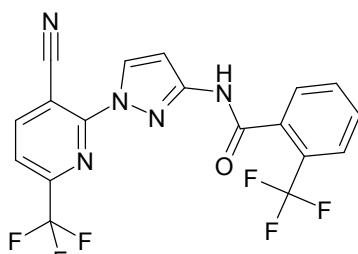
N-[1-(4-acetyl-2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-584) en la tabla 1)



15 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 3,4,5-trifluoroacetofenona: HPLC-EM: logP = 2,70; masa (m/z): 410,0 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 2,65 (s, 3H), 6,99 (m, 1H), 7,68 – 7,71 (m, 2H), 7,75 (m, 1H), 7,83 (m, 1H), 7,90 – 7,93 (m, 2H), 8,11 (m, 1H), 11,44 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 31:

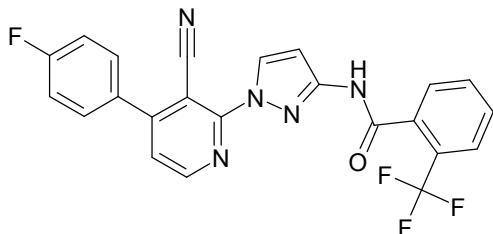
N-[1-[3-cian-6-(trifluorometil)piridin-2-il]-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-569) en la tabla 1)



20 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2-cloro-6-(trifluorometil)nicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 3,41; masa (m/z): 426,1 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,11 (m, 1H), 7,67 – 7,73 (m, 2H), 7,77 (m, 1H), 7,84 (m, 1H), 7,99 (m, 1H), 8,60 (m, 1H), 8,77 (m, 1H), 11,71 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 32:

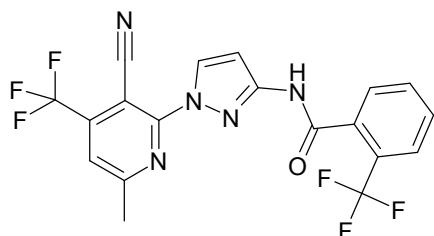
N-[1-[3-cian-4-(4-fluorofenil)piridin-2-il]-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-641) en la tabla 1)



- 5 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2-cloro-4-(4-fluorofenil)nicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 3,41; masa (m/z): 426,1 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,11 (m, 1H), 7,67 – 7,73 (m, 2H), 7,77 (m, 1H), 7,84 (m, 1H), 7,99 (m, 1H), 8,60 (m, 1H), 8,77 (m, 1H), 11,71 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 33:

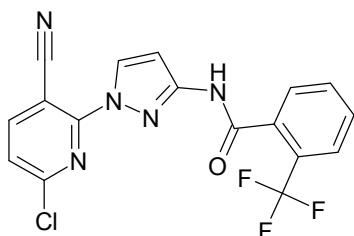
10 **N-[1-[3-cian-6-metil-4-(trifluorometil)piridin-2-il]-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida** (compuesto (I-1-571) en la tabla 1)



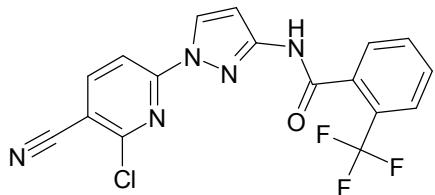
- 15 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2-cloro-6-metil-4-(trifluorometil)nicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 3,49; masa (m/z): 440,0 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 2,70 (s, 3H), 7,09 (m, 1H), 7,69 – 7,73 (m, 2H), 7,76 (m, 1H), 7,83 (m, 1H), 7,89 (m, 1H), 8,62 (m, 1H), 11,66 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 34:

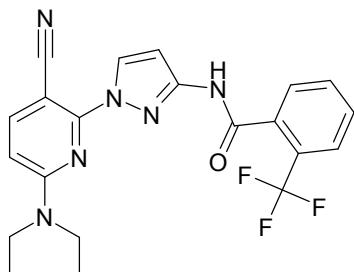
N-[1-(6-cloro-3-cianpiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-607) en la tabla 1)



- 20 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2,6-dicloronicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 3,14; masa (m/z): 392.0/394.1 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,08 (m, 1H), 7,64 (m, 1H), 7,69 – 7,72 (m, 2H), 7,76 (m, 1H), 7,82 (m, 1H), 8,48 (m, 1H), 8,55 (m, 1H), 11,66 (s, 1H).

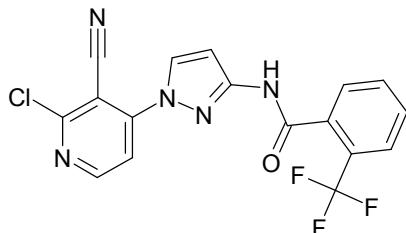
Ejemplo de síntesis 35:**N-[1-(6-cloro-5-cianpiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida** (compuesto (I-1-608) en la tabla 1)

5 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 también a partir de 2,6-dicloronicotinonitrilo en la mezcla con el Ejemplo de síntesis 34: HPLC-EM: logP = 3,17; masa (m/z): 392,0/394,1 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,06 (m, 1H), 7,70 – 7,86 (m, 5H), 8,54 (m, 1H), 8,60 (m, 1H), 11,62 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 36:**N-[1-(3-cian-6-(diethylamino)piridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida** (compuesto (I-1-568) en la tabla 1)

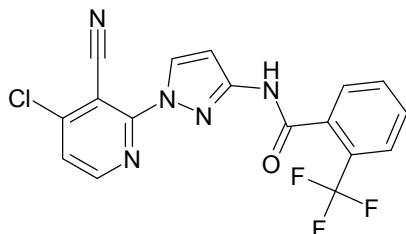
10

Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2-cloro-6-(diethylamino)nicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 3,76; masa (m/z): 429,1 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 1,17 (m, 6H), 3,60 (br, 4H), 6,66 (m, 1H), 7,00 (m, 1H), 7,69 (m, 2H), 7,76 (m, 1H), 7,81 (m, 1H), 7,86 (m, 1H), 8,48 (m, 1H), 11,52 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 37:15 **N-[1-(2-cloro-3-cianpiridin-4-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida** (compuesto (I-1-585) en la tabla 1)

Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2,4-dicloronicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 2,67; masa (m/z): 391,9/394,0 (M+H)+; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,15 (m, 1H), 7,71 (m, 2H), 7,79 (m, 1H), 7,84 (m, 1H), 7,95 (m, 1H), 8,67 – 8,70 (m, 2H), 11,69 (s, 1H).

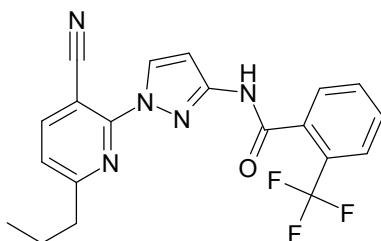
20

Ejemplo de síntesis 38:**N-[1-(4-cloro-3-cianpiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida** (compuesto (I-1-586) en la tabla 1)

Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 también producido a partir de 2,4-dicloronicotinonitrilo en mezcla con el Ejemplo de síntesis 36 y aislado por cromatografía en gel de sílice con un gradiente de ciclohexano / acetato de etilo.: HPLC-EM: logP = 2,67; masa (m/z): 391,9/394,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,08 (m, 1H), 7,71 (m, 2H), 7,78 (m, 1H), 7,85 (m, 1H), 8,58 (m, 1H), 8,68 (m, 2H), 11,66 (s, 1H).

5 Ejemplo de síntesis 39:

N-[1-(3-cian-6-propilpiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-573) en la tabla 1)

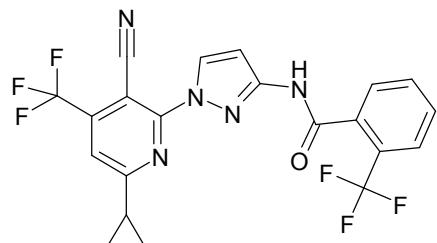


Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2-cloro-6-propilnicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 3,80; masa (m/z): 400,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 0,95 (m, 3H), 1,77 (m, 2H), 2,82 (m, 2H), 7,05 (m, 1H), 7,40 (m, 1H), 7,70 (m, 2H), 7,76 (m, 1H), 7,83 (m, 1H), 7,95 (m, 1H), 8,32 (m, 1H), 8,58 (m, 1H), 11,59 (s, 1H).

10

Ejemplo de síntesis 40:

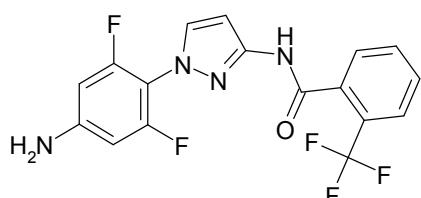
N-[1-(3-cian-6-ciclopropil-4-(trifluorometil)piridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-570) en la tabla 1)



15 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2-cloro-6-ciclopropil-4-(trifluorometil)nicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 3,99; masa (m/z): 466,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 1,24 (m, 4H), 2,47 (m, 1H), 7,07 (m, 1H), 7,77 (m, 2H), 7,83 (m, 1H), 7,96 (s, 1H), 8,59 (m, 1H), 8,58 (m, 1H), 11,64 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 41:

N-[1-(4-amino-2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-227) en la tabla 1)



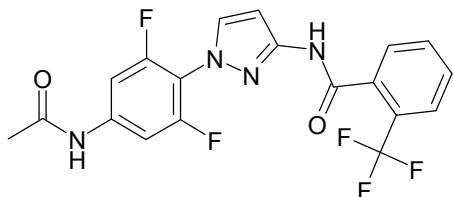
20

Análogamente al Ejemplo de síntesis 24, Etapa 2, a partir de N-[1-(2,6-difluoro-4-nitrofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (Ejemplo de síntesis 26, 1,00 g) se obtuvieron 830 mg del compuesto del título : HPLC-EM: logP = 2,32; masa (m/z): 383,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 6,09 (m, 2H), 6,33 (m, 2H), 6,80 (m, 1H), 7,68 (m, 2H), 7,55 (m, 1H), 7,81 (m, 2H), 11,18 (s, 1H).

25

Ejemplo de síntesis 42:

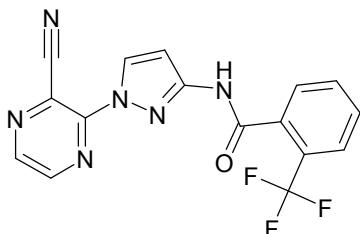
N-[1-(4-acetamido-2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-583) en la tabla 1)



- 5 Una mezcla de N-[1-(4-amino-2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (100 mg) y anhídrido de ácido acético (1 g) se agitó a temperatura ambiente durante una hora, se diluyó con agua (30 ml) y se aisló el compuesto del título (98 mg) por filtración: HPLC-EM: logP = 2,28; masa (m/z): 425,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 2,11 (s, 3H), 6,89 (m, 1H), 7,52 (m, 2H), 7,69 (m, 2H), 7,76 (m, 1H), 7,82 (m, 1H), 7,99 (m, 1H), 10,51 (s, 1H), 11,96 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 43:

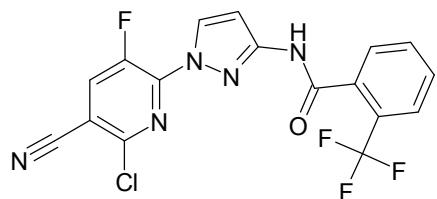
N-[1-(3-cianpirazin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-574) en la tabla 1)



- 15 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 3-cloropirazin-2-carbonitrilo: HPLC-EM: logP = 2,47; masa (m/z): 359,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,12 (m, 1H), 7,72 (m, 2H), 7,78 (m, 1H), 7,83 (m, 1H), 8,63 (m, 1H), 8,75 (m, 1H), 8,85 (m, 1H), 11,71 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 44:

N-[1-(6-cloro-5-cian-3-fluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-1-606) en la tabla 1)

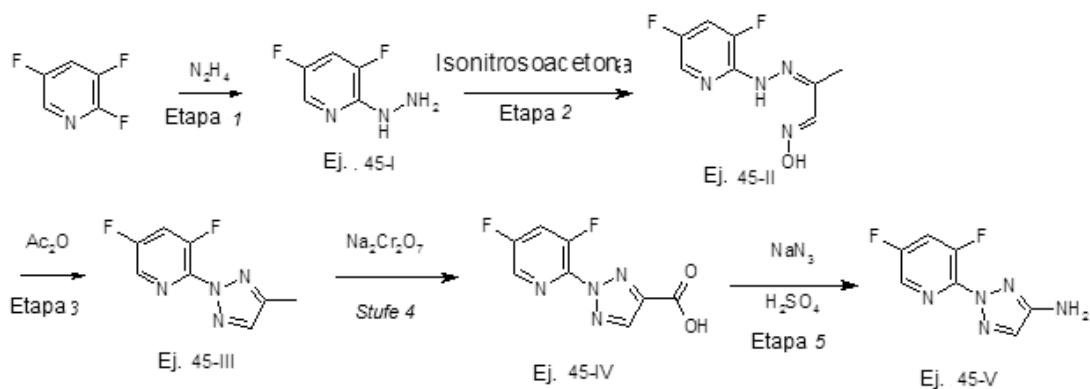


- 20 Análogamente al Ejemplo de síntesis 25, Etapa 2 a partir de 2,6-dicloro-5-fluornicotinonitrilo: HPLC-EM: logP = 2,94; masa (m/z): 410,0/411,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,11 (m, 1H), 7,70 (m, 2H), 7,77 (m, 1H), 7,83 (m, 1H), 8,52 (m, 1H), 8,80 (m, 1H), 8,85 (m, 1H), 11,89 (s, 1H).

Ejemplo de síntesis 45:

N-[2-(3,5-difluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-il]-2-(trifluorometil)benzamida
(compuesto (I-2-63) en la tabla 3)

Esquema de síntesis del producto intermediario 2-(3,5-difluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (Ej. 45-V) (según la ruta A-3)

**Etapa 1: 3,5-difluoro-2-hydrazinopiridina (Ej. 45-I)**

25 g de 2,3,5-trifluoropiridina se calentaron junto con un exceso de hidrato de hidracina durante 1 h a reflujo. Luego la mezcla de reacción se destiló con vapor de agua y se recolectó aproximadamente 1 l de destilado. El destilado se extrajo 5 veces con 250 ml de diclorometano, las fases orgánicas se secaron sobre sulfato de sodio y luego el disolvente se eliminó en el evaporador rotativo. Se obtuvo hidrazino-3,5-difluoropiridina cruda (48 % del teórico), que se hizo reaccionar sin ulterior elaboración en la siguiente etapa.

Etapa 2: 2-[2-(3,5-difluoropiridin-2-il)hidraziniliden]propanaloxima (Ej. 45-II)

La hidrazino-3,5-difluoropiridina de la primera etapa (Ej. 45-I) se calentó con un exceso del 20 % de isonitrosoacetona en etanol durante 3 h a reflujo. Tras enfriar, se obtuvo un precipitado que se filtró y se lavó con etanol. Se obtuvo propanaloxima cruda (65 % del teórico) que se hizo reaccionar sin ulterior elaboración en la siguiente etapa.

Etapa 3: 3,5-difluoro-2-(4-metil-2H-1,2,3-triazol-2-il) (Ej. 45-III)

Una solución de 0,1 moles de hidrazoneoxima (Ej. 45-II) en anhídrido de ácido acético se calentó lentamente hasta 130 °C y se agitó durante 2 h a esta temperatura. El anhídrido de ácido acético en exceso se eliminó en el evaporador rotativo y el metiltriazol producido (Ej. 45-III) (70 % del teórico) se siguió utilizando sin ulterior elaboración.

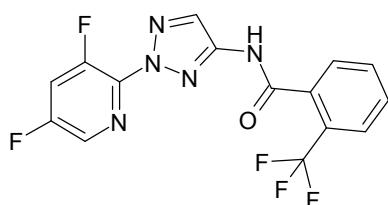
Etapa 4: ácido 2-(3,5-difluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-carboxílico (Ej. 45-IV)

El dicromato de sodio (0,2 moles) se vertió en pequeñas porciones a una solución bien agitada de metiltriazol (Ej. 45-III, 0,1 mol) en ácido sulfúrico al 66 %. Cada porción individual de dicromato se añadió recién después de que desapareció el color naranja amarillento del Cr⁶⁺ en el matraz. La división en porciones de dosificó de modo tal que la temperatura en el matraz quedara a aproximadamente 80-90 °C. Luego se calentó en un baño de vapor durante 1 h. Tras enfriar, la mezcla se vertió en aproximadamente la misma cantidad de hielo y se dejó reposar durante la noche. El ácido producido se filtró, se lavó con agua y se secó. Se obtuvo 50 % del teórico del ácido (Ejemplo 45-IV).

Etapa 5: 2-(3,5-difluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (Ej. 45-V)

A una mezcla agitada del ácido de la etapa previa (Ej. 45-IV) en 50 ml de cloroformo y 50 ml de ácido sulfúrico concentrado se vertió en pequeñas porciones azida sódica en un lapso de 2 h. La reacción se agitó durante otras 2 h a 55 °C. Tras enfriar, la mezcla se vertió en aproximadamente la misma cantidad de hielo y se dejó reposar durante la noche, luego se filtró de sólidos y la lejía madre se alcalinizó con solución de amoníaco. La amina producida se filtró, se lavó con agua y se secó. Se obtuvo 70 % del teórico. HPLC-EM: logP = 0,65; masa (m/z): 198,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,61 (s, 2H), 7,38 (s, 1H), 8,21 –8,25 (m, 1H), 8,45 (s, 1H).

N-[2-(3,5-difluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-2-63) en la tabla 3)

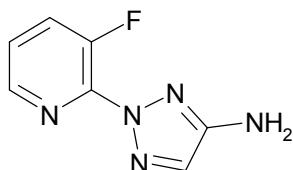


Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2 se hizo reaccionar 2-(3,5-difluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina (Ej. 45-V; 174 mg) con cloruro de 2-(trifluorometil)benzoilo (150 mg) y trietilamina (0,23 ml) en 4 ml de diclorometano.

Después de la purificación por cromatografía en columna y HPLC preparativa se obtuvieron 207 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 370,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 7,72 – 7,83 (m, 3H), 8,35 – 8,40 (m, 1H), 8,45 – 8,47 (m, 1H), 8,57-8-58 (s, 1H), 11,96-11-97 (d, 1H).

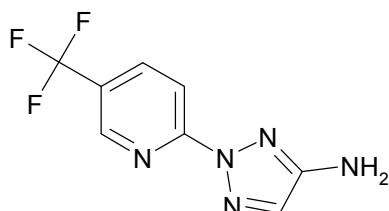
De forma análoga al Ej. 45-V se obtuvieron los siguientes nuevos productos intermedios (según la ruta A-3):

- 5 2-(3-fluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina:



HPLC-EM: logP = 0,40; masa (m/z): 180,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,61 (s, 2H), 7,39 (s, 1H), 7,48-7,52 (m, 1H), 7,95–8,00 (m, 1H), 8,35-8,36 (m, 1H).

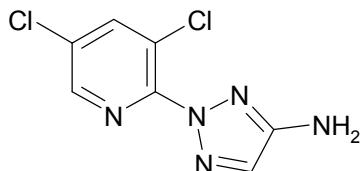
2-[5-(trifluorometil)piridin-2-il]-2H-1,2,3-triazol-4-amina:



10

HPLC-EM: logP = 1.53; masa (m/z): 230,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,86 (s, 2H), 7,48 (s, 1H), 7,91-7,94 (m, 1H), 8,29–8,31 (m, 1H), 8,8 (s, 1H).

2-(3,5-dicloropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina:



- 15 HPLC-EM: logP = 1.38; masa (m/z): 229,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,60 (s, 2H), 7,38 (s, 1H), 8,48-8,49 (d, 1H), 8,58 – 8,59 (d, 1H).

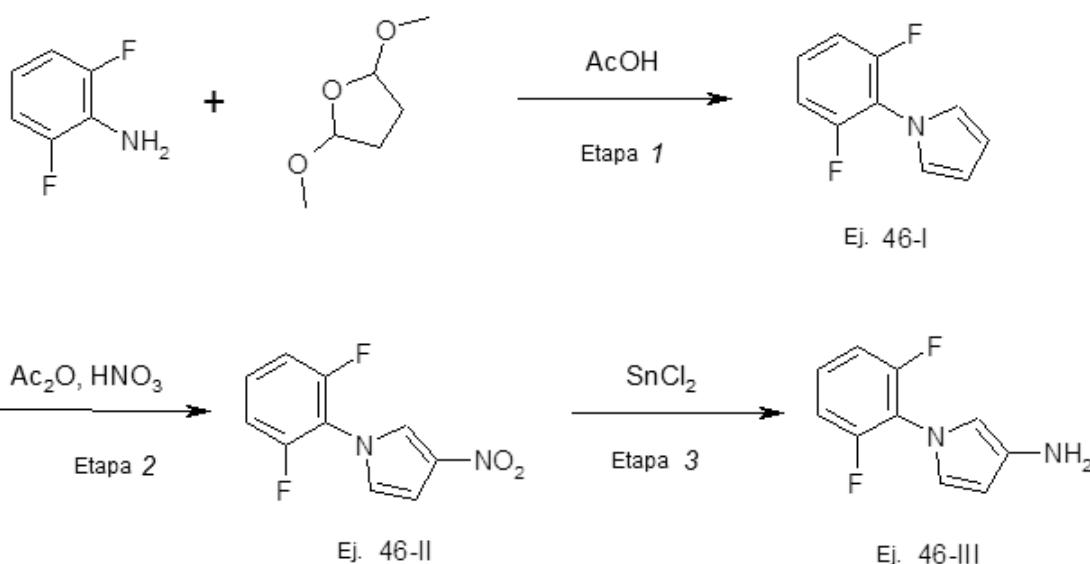
2-[3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-il]-2H-1,2,3-triazol-4-amina:

HPLC-EM: logP = 1.74; masa (m/z): 263,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 5,76 (s, 2H), 7,48 (s, 1H), 8,68-8,69 (d, 1H), 8,89 – 8,90 (d, 1H).

20 Ejemplo de síntesis 46

N-[1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirrol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-3-1) en la tabla 5)

Esquema de síntesis del producto intermedio: 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirrol-3-amina (Ej. 46-III) (según la ruta A-4)



Etapa 1: 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirrol (Ej. 46-I)

A 0,39 moles de 2,6-difluoroanilina en 100 ml de ácido acético glacial, se vertieron lentamente bajo agitación gota a gota 0,39 moles de 2,5-dimetoxetetrahidrofuran y se agitó otra 1 h a 100 °C. Después de enfriar hasta temperatura ambiente, se eliminó el ácido acético glacial en el evaporador rotativo y el residuo se evaporó varias veces más con tolueno. Después de la purificación por cromatografía en columna del residuo con ciclohexano / acetato de etilo (10: 1 a 1: 1) se obtuvieron 5,6 g, 78 % del teórico del pirrol deseado con una pureza del 96 % (LCMS). HPLC-EM: logP = 2,98; RMN de ¹H (CD₃CN) 6,28 – 6,29 (m, 2H), 6,95 – 7,00 (m, 2H), 7,30 – 7,35 (m, 2H), 7,45-7,52 (m, 1H).

Etapa 2: 1-(2,6-difluorofenil)-3-nitro-1H-pirrol (Ej. 46-II)

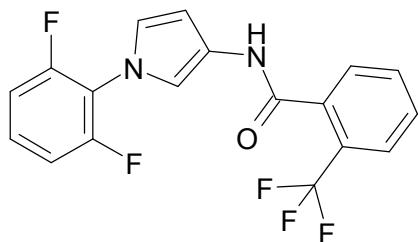
- 5 10 2 ml de ácido nítrico concentrado se vertieron gota a gota a -10 °C a 162 ml de acetanhídrido con cuidado. Esta mezcla se vertió luego gota a gota en una solución de 5,4 g (0,31 moles) de 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirrol en 80 ml de acetanhídrido a -40 °C. Luego se dejó agitar durante otras 2 h a esta temperatura.

15 La mezcla de reacción se vertió en hielo y se extrajo tres veces con cloroformo. Después de secar la fase orgánica sobre sulfato de sodio, se eliminó el disolvente en el evaporador rotativo. Después de la purificación por cromatografía en columna del residuo con ciclohexano / acetato de etilo (10: 1 a 1: 1) se obtuvo ademáis del isómero 2-nitro 3,2 g, (48 % del teórico) del 3-nitropirrol deseado con una pureza del 99 % (LCMS). HPLC-EM: logP = 2,58; masa (m/z): 225,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (CD₃CN) 6,60 – 6,62 (m, 1H), 7,37 – 7,42 (m, 2H), 7,55 – 7,58 (m, 2H), 7,62 – 7,70 (m, 1H).

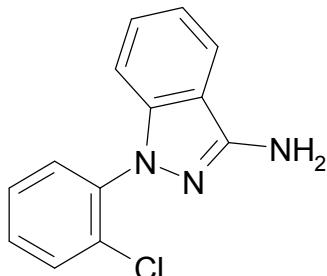
Etapa 3: 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirrol-3-amina (Ej. 46-III)

- 20 20 575 mg (2,57 mMol) del 3-nitropirrol se agitaron con 2,43 g (12,8 mMol) de cloruro de estaño a 80 °C en 17 ml de acetato de etilo durante la noche. Tras enfriar, se filtró y el disolvente se eliminó en el evaporador rotativo. El residuo así obtenido se usó directamente y sin ulterior elaboración en la reacción siguiente.

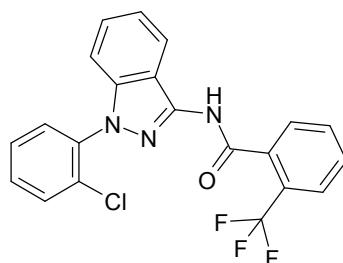
N-[1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirrol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto (I-3-1) en la tabla 5)



- 25 Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2 se hizo reaccionar la 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirrol-3-amina cruda (85 mg) con cloruro de 2-(trifluorometil)benzoilo (92 mg) y trietilamina (0,12 ml) en 1,3 ml de diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna y HPLC preparativa se obtuvieron 26 mg del compuesto del título. HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 367,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (DMSO-D₆) 6,31-6,32 (m, 1H), 6,92-6,94 (m, 1H), 7,31-7,39 (m, 3H), 7,48-7,52 (m, 1H), 7,66-7,84 (m, 4H).

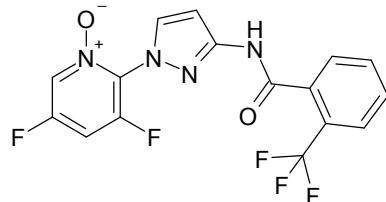
Ejemplo de síntesis 47**N-[1-(2-clorofenil)-1H-indazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-5-8) en la tabla 4)***Etapa 1: 1-(2-clorofenil)-1H-indazol-3-amina (según la ruta B-2)*

- 5 2-yodobenzonitrilo (500 mg), de N'-(2-clorofenil)benzohidrazida (646 mg), carbonato de potasio (1207 mg), bromuro de cobre (I) (31 mg) y trans-4-hidroxi-L-prolina (57 mg) se agitaron en dimetilsulfóxido (7,5 ml) durante 48 h a 90 °C bajo argón. Tras enfriar, la mezcla de reacción se extrajo en acetato de etilo, se lavó con solución saturada de cloruro de amonio y cloruro de sodio saturado, se adsorbió en gel de sílice y se purificó en gel de sílice con ciclohexano / acetato de etilo como eluyente por cromatografía en columna. Se obtuvieron 226 mg del compuesto del título. HPLC-EM: $\log P = 2,32$; masa (m/z): 244,0 ($\text{M}+\text{H}$)⁺; RMN de ^1H (DMSO- D_6) 5,83 (s a, 2H), 7,01 – 7,09 (m, 2H), 7,31 – 7,35 (m, 1H), 7,42 – 7,49 (m, 3H), 7,67 – 7,69 (m, 1H), 7,82 – 7,84 (m, 1H).
- 10 10

Etapa 2: N-[1-(2-clorofenil)-1H-indazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-5-8 en la tabla 4)

- 15 Análogamente al Ejemplo de síntesis 9 Etapa 2 se hizo reaccionar 1-(2-clorofenil)-1H-indazol-3-amina (174 mg) con cloruro de 2-(trifluorometil)benzoílo (47 mg) y trietilamina (0,6 ml) en 4 ml de diclorometano. Después de la purificación por cromatografía en columna y HPLC preparativa se obtuvieron 20 mg del compuesto del título. HPLC-EM: $\log P = 3,54$; masa (m/z): 416,0 ($\text{M}+\text{H}$)⁺; RMN de ^1H (DMSO- D_6) 7,19 – 7,28 (m, 2H), 7,45 – 7,49 (m, 1H), 7,57 – 7,63 (m, 3H), 7,65 – 7,95 (m, 6H), 11,31 (s, 1H).

- 20 De modo análogo al Ej. 47 Etapa 1 se puede obtener a partir de 2-fluoro-6-yodobenzonitrilo y N'-(4-cian-2,5-difluorofenil)benzohidrazida 4-(3-amino-4-fluoro-1H-indazol-1-il)-2,5-difluorbenzonitrilo.

Ejemplo de síntesis 48**N-[1-(3,5-difluoro-1-oxidopiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (compuesto I-1-438 en la tabla 1)**

- 25 N-[1-(3,5-difluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-il]-2-(trifluorometil)benzamida (I-1-75 en la tabla 1; 150 mg) se agitó con urea-peróxido de hidrógeno (153 mg) en 3 ml de diclorometano 30 min. Luego se vertió gota a gota en un baño de hielo a 0-5 °C anhídrido de ácido trifluoroacético (342 mg) y se agitó durante la noche. La mezcla se mezcló con solución de sulfito de sodio, se lavó con agua, se secó sobre sulfato de sodio y luego se concentró en el evaporador rotativo. Despues de la purificación por cromatografía en columna y HPLC preparativa se obtuvieron 35 mg del compuesto del título. HPLC-EM: $\log P = 1,69$; masa (m/z): 385,1 ($\text{M}+\text{H}$)⁺; RMN de ^1H (DMSO- D_6) 6,95 – 6,96 (d, 1H),
- 30

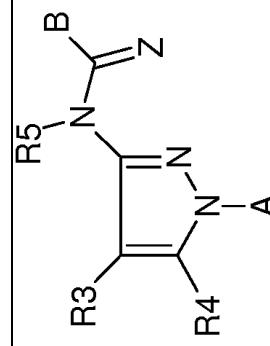
ES 2 651 074 T3

7,68 – 7,78 (m, 4H), 7,82 – 7,96 (m, 1H), 8,05 – 8,06 (m, 1H), 8,83 – 8,85 (m, 1H), 11,33 (s, 1H).

Los compuestos de las fórmulas (I-1), (I-4), (I-2), (I-5) y (I-3) descritos en las tablas 1 a 5 también son compuestos preferidos que se obtuvieron según o análogamente a los ejemplos de síntesis descritos anteriormente.

Tabla 1

(I-1)						
Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-1 Ejemplo de síntesis 1	2-metilfenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-2	2-metoxifenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-3	2-metoxifenilo	2,5-dimetil-3-furanilo	H	H	H	O
I-1-4	2-(trifluorometil)fenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-5	2-(trifluorometil)fenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-6	2-(trifluorometil)fenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-7	2-(trifluorometil)fenilo	1-(difluorometil)-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-8	2-cianfenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-9	2-cianfenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-10	2-fluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-11	2-clorofenilo	2-metilfenilo	H	H	H	O
I-1-12	2-clorofenilo	2-etilfenilo	H	H	H	O
I-1-13	2-clorofenilo	2-difluorometilfenilo	H	H	H	O



(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-14	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-15	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Cl	H	H	O
Ejemplo de síntesis 17						
I-1-16	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Br	H	H	O
Ejemplo de síntesis 18						
I-1-17	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	I	H	H	O
Ejemplo de síntesis 19						
I-1-18	2-clorofenilo	2-trifluormetoxifenilo	H	H	H	O
I-1-19	2-clorofenilo	2-fluorofenilo	H	H	H	O
I-1-20	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 14						
I-1-21	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	metilo	O
Ejemplo de síntesis 15						
I-1-22	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	etilo	O
I-1-23	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	1-propin-2-il	O
I-1-24	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	ciclopripilmetilo	O
I-1-25	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	cianmetilo	O
I-1-26	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	alilo	O
I-1-27	2-clorofenilo	2-clorofenilo	F	H	H	O
Ejemplo de síntesis 16						
I-1-28	2-clorofenilo	2-clorofenilo	Cl	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-29	2-clorofenilo	2-clorofenilo	Br	H	H	O
I-1-30	2-clorofenilo	2-clorofenilo	I	H	H	O
I-1-31	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	metil o	H	O
I-1-32	2-clorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-33	2-clorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-34	2-clorofenilo	2-yodofenilo	Cl	H	H	O
I-1-35	2-clorofenilo	2-yodofenilo	H	metil o	H	O
I-1-36	2-clorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-37	2-clorofenilo	2-cloro-6-fluorofenilo	H	H	H	O
I-1-38	2-clorofenilo	3-metilpiridin-2-iló	H	H	H	O
I-1-39	2-clorofenilo	3-trifluorometilpiridin-2-iló	H	H	H	O
I-1-40	2-clorofenilo	3-cloropiridin-2-iló	H	H	H	O
I-1-41	2-clorofenilo	2-metilpiridin-3-iló	H	H	H	O
I-1-42	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-iló	H	H	H	O
I-1-43	2-clorofenilo	2-cloropiridin-3-iló	H	H	H	O
I-1-44	2-clorofenilo	3-trifluorometil-2-pirazinilo	H	H	H	O
I-1-45	2-clorofenilo	2,5-dimetil-3-furanilo	H	H	H	O
I-1-46	2-clorofenilo	3-metil-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-47	2-clorofenilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O
I-1-48	2-clorofenilo	5-cloro-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-iló	H	H	H	O
I-1-49	2-clorofenilo	3-difluorometil-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-iló	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-50	2-bromofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-51	2-bromofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-52	2-bromofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-53	2-bromofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-54	2-bromofenilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-55	2-bromofenilo	3-chloropiridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-56	2-bromofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-57	2-bromofenilo	2-chloropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-58	2-bromofenilo	3-difluorometil-5-fluoro-1-metil-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-59	2-bromofenilo	5-fluoro-1-metil-3-trifluorometil-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-60	2-bromofenilo	3-metil-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-61	2,6-dimetilfenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-62	2,3-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-63	2,3-difluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 2						
I-1-64	2,4-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-65	2,5-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-66	2,5-difluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-67	2,5-difluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-68	2,5-difluorofenilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-69	2,5-difluorofenilo	2-metilpiridin-3-ilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-70	2,5-difluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-71	2,5-difluorofenilo	3-metil-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-72	2,5-difluorofenilo	5-fluoro-1-metil-3-trifluorometil-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 4						
I-1-73	2,6-difluorofenilo	2-metilfenilo	H	H	H	O
I-1-74	2,6-difluorofenilo	2-difluorometilfenilo	H	H	H	O
I-1-75	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-76	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	F	H	H	O
I-1-77	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	S
I-1-78	2,6-difluorofenilo	2-etylfenilo	H	H	H	O
I-1-79	2,6-difluorofenilo	2-trifluormetoxifenilo	H	H	H	O
I-1-80	2,6-difluorofenilo	2-(metilsulfoni)fenilo	H	H	H	O
I-1-81	2,6-difluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-82	2,6-difluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-83	2,6-difluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-84	2,6-difluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-85	2,6-difluorofenilo	2-cloro-6-fluorofenilo	H	H	H	O
I-1-86	2,6-difluorofenilo	2-nitrofenilo	H	H	H	O
I-1-87	2,6-difluorofenilo	2-hidroxifenilo	H	H	H	O
I-1-88	2,6-difluorofenilo	2-[(trifluorometil)sulfanil]fenilo	H	H	H	O
I-1-89	2,6-difluorofenilo	2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)fenilo	H	H	H	O
I-1-90	2,6-difluorofenilo	3-metilpiridin-2-ilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-91	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 7	2,6-difluorofenilo	3-cloropiridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-92	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-il	H	H	H	O
I-1-93	2,6-difluorofenilo	4-(trifluorometil)piridin-3-il	H	H	H	O
I-1-94	2,6-difluorofenilo	2-chloropiridin-3-il	H	H	H	O
I-1-95	2,6-difluorofenilo	2-bromopiridin-3-il	H	H	H	O
I-1-96	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)piridin-4-il	H	H	H	O
I-1-97	2,6-difluorofenilo	3-ethylpiridazin-4-il	H	H	H	O
I-1-98	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)pirazin-2-il	H	H	H	O
I-1-99	2,6-difluorofenilo	3-ethylpiridazin-4-il	H	H	H	O
I-1-100	2,6-difluorofenilo	3-chloropirazin-2-il	H	H	H	O
I-1-101	2,6-difluorofenilo	2-metil-5,6-dihidro-1,4-oxatina-3-il	H	H	H	O
I-1-102	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)-5,6-dihidro-1,4-oxatina-3-il	H	H	H	O
I-1-103	2,6-difluorofenilo	3-metil-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-104	2,6-difluorofenilo	3-yodo-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-105	2,6-difluorofenilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O
I-1-106	2,6-difluorofenilo	5-(difluorometil)-3-metil-1,2-oxazol-4-il	H	H	H	O
I-1-107	2,6-difluorofenilo	1,3-dimetil-1H-pirazol-4-il	H	H	H	O
I-1-108	2,6-difluorofenilo	3-yodo-1-metil-1H-pirazol-4-il	H	H	H	O
I-1-109	2,6-difluorofenilo	1,3,5-trimetil-1H-pirazol-4-il	H	H	H	O
I-1-110	2,6-difluorofenilo	1,3-dimetil-5-fluoro-1H-pirazol-4-il	H	H	H	O
I-1-111	2,6-difluorofenilo	1-(difluorometil)-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-112	2,6-difluorofenilo	5-fluoro-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-113	2,6-difluorofenilo	2,4-dimetil-1,3-tiazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-114	2,6-difluorofenilo	2-metil-4-trifluorometil-1,3-tiazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-115	2,6-difluorofenilo	3,4-dicloro-1,2-tiazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-116	2,6-difluorofenilo	4-metil-1,2,5-oxadiazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-117	2-etoxi-6-fluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 5						
I-1-118	2,5-diclorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-119	2,5-diclorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-120	2,6-diclorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-121	2,6-diclorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-122	2,6-diclorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-123	2,6-diclorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 8						
I-1-124	2,6-diclorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-125	2-nitrofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-126	2-(metilsulfoni)fenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-127	2-piridilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-128	3-fluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-129	3-fluoropiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-130	3-fluoropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-131	3-fluoropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-132	3-fluoropiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-133	3-fluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-134	3-fluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	2-(trifluorometil)- piridin-3-ilcarbonilo	O
I-1-135	3-cloropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-136	3-cloropiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-137	3-cloropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-138	3-cloropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-139	2-cloropiridin-3-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 11						
I-1-140	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-141	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	I	H	H	O
I-1-142	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	acetilo	O
I-1-143	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-144	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-145	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-146	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
Ejemplo de síntesis 9						
I-1-147	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-nitrofenilo	H	H	H	O
I-1-148	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-hidroxifenilo	H	H	H	O
I-1-149	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-[trifluorometil)sulfanil]fenilo	H	H	H	O
I-1-150	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(1H-1,2,4-triazol-1-il)fenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-151	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-152	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-153	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-(trifluorometil)piridin-4-ilo	H	H	H	O
I-1-154	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-(trifluorometil)pirimidin-5-ilo	H	H	H	O
I-1-155	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)-5,6-dihidro-1,4-oxatiin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-156	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-metil-4-(trifluorometil)-1H-pirrol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-157	3,5-difluoropiridin-2-ilo	5-(difluorometil)-3-metil-1,2-oxazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-158	3,5-difluoropiridin-2-ilo	5-fluoro-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-159	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3,4-dicloro-1,2-tiazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-160	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-metil-1,2,3-triaziol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-161	2,5-difluoropiridin-3-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-162	3,5,6-trifluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-163	3,5,6-trifluoropiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-164 Ejemplo de síntesis 10	3,5,6-trifluoropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-165	3,5,6-trifluoropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-166	3,5,6-trifluoropiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-167	3,5,6-trifluoropiridin-2-ilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-168	2-pririmidinilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-169 Ejemplo de síntesis 12	5,6-Difluoropirimidin-4-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-170	5,6-Difluoropirimidin-4-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-171	5,6-Difluoropirimidin-4-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-172	3-piridazinilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-173	3-fluoropirazin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-174 Ejemplo de síntesis 13	3-fluoropirazin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-175	3-fluoropirazin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-176	3-fluoropirazin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-177	3-fluoropirazin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-178	3-fluoropirazin-2-ilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-179	2-(metilsulfoni)fenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-180	2-(metilsulfoni)fenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-il	H	H	H	O
I-1-181	2-(metilsulfoni)fenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-182	2-(metilsulfoni)fenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-183	3-cloro-5-fluoropiridin-2-il	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-184	2-(metilsulfoni)fenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-185	2-(trifluorometil)fenilo	1,3,5-trimetil-1H-pirazol-4-il	H	H	H	O
I-1-186	2,3-diclorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-187	2,3-diclorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-188	2,3-diclorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-189	2,3-diclorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-190	2,3-diclorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-191	2,4,5-trifluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-192	2,4,5-trifluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-il	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto N°	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-193	2,4,5-trifluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-194	2,4,5-trifluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-195	2,4,5-trifluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-196	2,4,5-trifluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-197	2,4-diclorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-198	2,4-diclorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-199	2,4-diclorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-200	2,4-diclorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-201	2,4-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	etilo	H	O
I-1-202	2,4-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	metil	H	O
I-1-203	2,4-difluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	metil O	H	O
I-1-204	2,4-difluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	etilo	H	O
I-1-205	2,4-difluorofenilo	2,4-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-206	2,4-difluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	metil O	H	O
I-1-207	2,4-difluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	etilo	H	O
I-1-208	2,4-difluorofenilo	2-bromofenilo	H	metil O	H	O
I-1-209	2,4-difluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-210	2,4-difluorofenilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	metil O	H	O
I-1-211	2,4-difluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-212	2,4-difluorofenilo	2-clorofenilo	H	metil o	H	O
I-1-213	2,4-difluorofenilo	2-clorofenilo	H	etilo	H	O
I-1-214	2,4-difluorofenilo	2-yodofenilo	H	metil o	H	O
I-1-215	2,4-difluorofenilo	2-yodofenilo	H	etilo	H	O
I-1-216	2,4-difluorofenilo	3-metil-2-tienilo	H	etilo	H	O
I-1-217	2,5-difluoro-4-metilpiridin-3-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-218	2,5-difluorofenilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-219	2,5-difluorofenilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O
I-1-220	2,5-difluorofenilo	3-cloropiridin-2-il	H	H	H	O
I-1-221	2,5-difluorofenilo	3-yodo-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-222	2,5-difluorofenilo	3-yodofuran-2-il	H	H	H	O
I-1-223	2,5-difluorofenilo	5-fluoro-1-metil-3-(difluorometil)-1H-pirazol-4-il	H	H	H	O
I-1-224	2,5-difluoropiridin-3-il	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-225	2,5-difluoropiridin-3-il	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-226	2,6-diclorofenilo	2-(trifluormetoxi)piridin-3-il	H	H	H	O
I-1-227 Ejemplo de síntesis 41	2,6-difluoro-4-aminofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-228 Ejemplo de síntesis 28	2,6-difluoro-4-cianfenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-229 Ejemplo de síntesis 26	2,6-difluoro-4-nitrofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-230 Ejemplo de síntesis 27	2,6-difluoro-4-trifluorometil)fenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-231	2,6-difluorofenilo	1-(difluorometil)-4-fluoro-3-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-232	2,6-difluorofenilo	1,3-dimetil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-233	2,6-difluorofenilo	1,3-dimetil-4-nitro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-234	2,6-difluorofenilo	1,5-dimetil-4-nitro-1H-pirazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-235	2,6-difluorofenilo	1-etil-4-yodo-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-236	2,6-difluorofenilo	1-metil-1H-1,2,4-triazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-237	2,6-difluorofenilo	1-metil-3-(pentafluoretil)-4-(trifluorometil)-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-238	2,6-difluorofenilo	1-metil-3,5-bis(trifluorometil)-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-239	2,6-difluorofenilo	1-metil-3-nitro-1H-pirrol-2-ilo	H	H	H	O
I-1-240	2,6-difluorofenilo	1-metil-4-(trifluorometil)-1H-pirrol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-241	2,6-difluorofenilo	1-metil-4-nitro-1H-pirazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-242	2,6-difluorofenilo	1-metil-5-nitro-1H-imidazo-4-ilo	H	H	H	O
I-1-243	2,6-difluorofenilo	1-oxido-2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-244	2,6-difluorofenilo	1-sec-butil-4-cloro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-245	2,6-difluorofenilo	1-sec-butil-4-yodo-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-246	2,6-difluorofenilo	2-(2,2-trifluoretil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-247	2,6-difluorofenilo	2-(difluorometoxi)fenilo	H	H	H	O
I-1-248	2,6-difluorofenilo	2-(difluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-249	2,6-difluorofenilo	2-(metilsulfanil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-250	2,6-difluorofenilo	2-(trifluormetoxi)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-251	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Cl	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-252	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Br	H	H	O
I-1-253	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	metilo	O
I-1-254	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	etilo	O
I-1-255	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	alilo	O
I-1-256	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	1-propin-2-ilo	O
I-1-257	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	I	H	H	O
I-1-258	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	ciclopropilmetilo	O
I-1-259	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	cianmetilo	O
I-1-260	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	2-propilo	O
I-1-261	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	1-propilo	O
I-1-262	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	etoximetilo	O
I-1-263	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	but-2-in-1-ilo	O
I-1-264	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	2,2-difluoroetilo	O
I-1-265	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	2,2,2-trifluoretilo	O
I-1-266	2,6-difluorofenilo	2,3-diclorofenilo	H	H	H	O
I-1-267	2,6-difluorofenilo	2,6-diclorofenilo	H	H	H	O
I-1-268	2,6-difluorofenilo	2,6-dimetilfenilo	H	H	H	O
I-1-269	2,6-difluorofenilo	2-acetamidofenilo	H	H	H	O
I-1-270	2,6-difluorofenilo	2-acetilfenilo	H	H	H	O
I-1-271	2,6-difluorofenilo	2-cloro-6-metoxifenilo	H	H	H	O
I-1-272	2,6-difluorofenilo	2-cianfenilo	H	H	H	O
I-1-273	2,6-difluorofenilo	2-ciclopropilfenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-274	2,6-difluorofenilo	2-etil-6-fluorofenilo	H	H	H	O
I-1-275	2,6-difluorofenilo	2-etylpiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-276	2,6-difluorofenilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-277	2,6-difluorofenilo	2-fluoro-6-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-278	2,6-difluorofenilo	2-fluorofenilo	H	H	H	O
I-1-279	2,6-difluorofenilo	2-fluoropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-280	2,6-difluorofenilo	2-metoxifenilo	H	H	H	O
I-1-281	2,6-difluorofenilo	2-metil-3-furanilo	H	H	H	O
I-1-282	2,6-difluorofenilo	3-(difluorometil)-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-283	2,6-difluorofenilo	3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metilpirazol-4-il	H	H	H	O
I-1-284	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-285	2,6-difluorofenilo	3-etylpirazin-2-il	H	H	H	O
I-1-286	3-cloro-5-fluoropiridin-2-il	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-287	2,6-difluorofenilo	3-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-288	2,6-difluorofenilo	3-yodo-2-furanilo	H	H	H	O
I-1-289	2,6-difluorofenilo	3-isobutil-1-metil-4-nitro-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-290	2,6-difluorofenilo	3-isopropil-1-metil-4-nitro-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-291	2,6-difluorofenilo	3-metil-5-(trifluorometil)-1,2-oxazol-4-il	H	H	H	O
I-1-292	2,6-difluorofenilo	3-ter-butil-1-metil-4-nitro-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-293	2,6-difluorofenilo	3-ter-butil-4-cloro-1-metil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-294	2,6-difluorofenilo	4-(difluorometil)-1,3-dimetil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-295	2,6-difluorofenilo	4-(trifluorometil)pirimidin-5-il	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-296	2,6-difluorofenilo	4,5,6-trifluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-297	2,6-difluorofenilo	4,5-dimetil-1,2-oxazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-298	2,6-difluorofenilo	4-bromo-1,3-dimetil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-299	2,6-difluorofenilo	4-bromo-1-etil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-300	2,6-difluorofenilo	4-bromo-1-etil-3-metil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-301	2,6-difluorofenilo	4-bromo-1-metil-1H-pirazol-3-il	H	H	H	O
I-1-302	2,6-difluorofenilo	4-bromo-1-metil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-303	2,6-difluorofenilo	4-bromo-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-304	2,6-difluorofenilo	4-bromo-2,5-dimetil-3-furanilo	H	H	H	O
I-1-305	2,6-difluorofenilo	4-bromotiofen-3-il	H	H	H	O
I-1-306	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-(difluorometil)-3-metil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-307	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1,3-dimetil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-308	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-etil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-309	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-etil-3-metil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-310	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-isopropil-3-nitro-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-311	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-metil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-312	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-metil-3-nitro-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-313	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-metil-3-propil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-314	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-metil-5-propil-1H-pirazol-3-il	H	H	H	O
I-1-315	2,6-difluorofenilo	4-cloro-1-propil-1H-pirazol-3-il	H	H	H	O
I-1-316	2,6-difluorofenilo	4-cloro-3-etil-1-metil-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O
I-1-317	2,6-difluorofenilo	4-cian-1-metil-3-(pentafluoretil)-1H-pirazol-5-il	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-318	2,6-difluorofenilo	4-cian-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-319	2,6-difluorofenilo	4-ciclopropil-1,2,3-tiadiazol-5-il	H	H	H	O
I-1-320	2,6-difluorofenilo	4-fluoro-1,3-dimetil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-321	2,6-difluorofenilo	4-fluoro-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-322	2,6-difluorofenilo	4-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-323	2,6-difluorofenilo	4-yodo-1-isobutil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-324	2,6-difluorofenilo	4-yodo-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-325	2,6-difluorofenilo	4-yodo-1-propil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-326	2,6-difluorofenilo	4-metil-1,2,3-tiadiazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-327	2,6-difluorofenilo	4-metil-1,2-oxazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-328	2,6-difluorofenilo	4-metil-4H-1,2,4-triazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-329	2,6-difluorofenilo	5-cloropirimidin-4-il	H	H	H	O
I-1-330	2,6-difluorofenilo	5-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-331	2,6-difluorofenilo	5-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-332	2,6-difluorofenilo	5-metil-1,2,3-tiadiazol-4-il	H	H	H	O
I-1-333	2,6-difluorofenilo	6-metil-3,4-dihidro-2H-piran-5-il	H	H	H	O
I-1-334	2-bromofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-335	2-bromofenilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-336	2-bromofenilo	3-metilpiridin-2-il	H	H	H	O
I-1-337	2-cloro-3-cianpiridin-4-il	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-338	2-cloro-4-metilfenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-339	2-cloro-4-metilfenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-340	2-cloro-6-etoxifenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-341	2-clorofenilo	2-(metilsulfoni)fenilo	H	H	H	O
I-1-342	2-clorofenilo	2-(metilsulfoni)fenilo	H	metil o	H	O
I-1-343	2-clorofenilo	2-(trifluormetoxi)fenilo	H	metil o	H	O
I-1-344	2-clorofenilo	2-(trifluormetoxi)piridin-3-iló	H	H	H	O
I-1-345	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	metil o	H	H	O
I-1-346	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	cian o	H	H	O
I-1-347	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	metil o	H	O
I-1-348	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-iló	metil o	H	H	O
I-1-349	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-iló	H	metil o	H	O
I-1-350	2-clorofenilo	2,3-diclorofenilo	H	H	H	O
I-1-351	2-clorofenilo	2,6-diclorofenilo	H	H	H	O
I-1-352	2-clorofenilo	2,6-difluorofenilo	metil o	H	H	O
I-1-353	2-clorofenilo	2,6-dimetilfenilo	H	H	H	O
I-1-354	2-clorofenilo	2-bromofenilo	metil o	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-355	2-clorofenilo	2-bromofenilo	H	amin o	H	O
I-1-356	2-clorofenilo	2-bromofenilo	H	métil o	H	O
I-1-357	2-clorofenilo	2-bromopiridin-3-ilo	métil o	H	H	O
I-1-358	2-clorofenilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-359	2-clorofenilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	métil o	H	O
I-1-360	2-clorofenilo	2-clorofenilo	métil o	H	H	O
I-1-361	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	amin o	H	O
I-1-362	2-clorofenilo	2-clorofenilo	cian o	H	H	O
I-1-363	2-clorofenilo	2-cloropirazin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-364	2-clorofenilo	2-fluoropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-365	2-clorofenilo	2-yodofenilo	métil o	H	H	O
I-1-366	2-clorofenilo	2-yodofenilo	Br	H	H	O
I-1-367	2-clorofenilo	2-yodofenilo	I	H	H	O
I-1-368	2-clorofenilo	2-yodofenilo	cian o	H	H	O
I-1-369	2-clorofenilo	2-yodopiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-370	2-clorofenilo	2-metil-3-furanilo	H	H	H	O
I-1-371	2-clorofenilo	2-metil-4-(trifluorometil)-1,3-tiazol-5-ilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-372	2-clorofenilo	2-metil-5,6-dihidro-1,4-oxatian-3-ilo	H	H	H	O
I-1-373	2-clorofenilo	2-tert-butilfenilo	H	H	H	O
I-1-374	2-clorofenilo	3-(difluorometil)-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-375	2-clorofenilo	3-(trifluorometil)-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-376	2-clorofenilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	metil o	H	O
I-1-377	2-clorofenilo	3-cloro-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-378	2-clorofenilo	3-yodo-2-furanilo	H	H	H	O
I-1-379	2-clorofenilo	3-yodo-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-380	2-clorofenilo	4-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	metil o	H	O
I-1-381	2-clorofenilo	4-cloropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-382	2-clorofenilo	5-fluoro-1,3-dimetil-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-383	2-clorofenilo	5-fluoro-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-384	2-clorofenilo	6-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-385	2-cloropirazin-5-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-386	2-cloropirazin-5-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-387	2-cloropirazin-5-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-388	2-cloropirazin-5-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-389	2-cloropirazin-5-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-390	2-cloropirazin-5-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-391	2-cloropiridin-3-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-392	2-cloropiridin-3-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto N°	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-393 Ejemplo de síntesis 29	2-cian-4,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-394	2-cianfenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-395	2-etoxi-3-clorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-396	2-etoxi-3-fluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-397	2-etoxi-3-fluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-398	2-cloro-6-etoxifenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-399	2-etoxi-6-fluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-400	2-fluorofenilo	2,5-dimetilfuran-3-ilo	H	H	H	O
I-1-401	2-fluoropirazin-6-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-402	2-fluoropirazin-6-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-403	2-fluoropirazin-6-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-404	2-fluoropirazin-6-ilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-405	2-fluoropirazin-6-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-406	2-metoxifenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-407	2-metoxifenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-408	2-metoxifenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-409	2-metoxifenilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-410	2-metoxifenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-411	2-metoxifenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-412	2-metoxipirazin-3-ilo	2,5-dimetilfuran-3-ilo	H	H	H	O
I-1-413	2-metoxipirazin-3-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-414	2-metifenilo	2,5-dimetilfurán-3-ilo	H	H	H	O
I-1-415	2-nitrofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-416	2-nitrofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-il	H	H	H	O
I-1-417	2-nitrofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-418	2-nitrofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-419	2-nitrofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-420	2-piridil	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-421	3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-il	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-422	3-(trifluorometil)piridin-2-il	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-423	3-(trifluorometil)piridin-2-il	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-424	3-(trifluorometil)piridin-2-il	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-425	3-(trifluorometil)piridin-2-il	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-426	3-(trifluorometil)piridin-2-il	2-(trifluorometil)piridin-3-il	H	H	H	O
I-1-427	3-(trifluorometil)piridin-2-il	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-428	3,5-dicloropiridin-2-il	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-429	3,5-dicloropiridin-2-il	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-430	3,5-dicloropiridin-2-il	2-bromopiridin-3-il	H	H	H	O
I-1-431	3,5-dicloropiridin-2-il	2-bromopiridin-3-il	H	H	H	O
I-1-432	3,5-dicloropiridin-2-il	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-433	3,5-dicloropiridin-2-il	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-434	3,5-dicloropiridin-2-il	3-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-435	3,5-dicloropiridin-2-il	3-yodo-1-metil-1H-pirazol-4-il	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto N°	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-436	3,5-dicloropiridin-2-ilo	4-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-437	3,5-dicloropiridin-2-ilo	5-cloro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-438	3,5-difluoro-1-oxidopiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-439	3,5-difluoro-6-metilpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-440	3,5-difluoro-6-metilpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)pirimidin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-441	3,5-difluoro-6-metilpiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-442	3,5-difluoro-6-metilpiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-443	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-(difluorometil)-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-444	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-(difluorometil)-4-fluoro-3-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-445	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1,3,5-trimetil-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-446	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1,3-dimetil-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-447	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1,3-dimetil-4-nitro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-448	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1,5-dimetil-4-nitro-1H-pirazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-449	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-metil-1H-1,2,4-triazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-450	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-metil-3-(pentfluoretil)-4-(trifluorometil)-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-451	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-metil-3,5-bis(trifluorometil)-1H-pirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-452	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-metil-3-nitro-1H-pirrol-2-ilo	H	H	H	O
I-1-453	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-metil-4-nitro-1H-pirazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-454	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-metil-5-nitro-1H-imidazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-455	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-sec-butil-4-chloro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-456	3,5-difluoropiridin-2-ilo	1-sec-butil-4-yodo-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-457	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(2,2,2-trifluoretil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-458	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(difluorometoxi)fenilo	H	H	H	O
I-1-459	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(difluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-460	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(difluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-461	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(metilsulfani)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-462	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(metilsulfoni)fenilo	H	H	H	O
I-1-463	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluormetoxi)fenilo	H	H	H	O
I-1-464	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluormetoxi)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-465	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	F	H	H	O
I-1-466	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	S
I-1-467	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	metilo	O
I-1-468	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	etilo	O
I-1-469	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	alilo	O
I-1-470	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	1-propin-2-ilo	O
I-1-471	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	ciclopropilmetilo	O
I-1-472	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	cianmetilo	O
I-1-473	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	Cl	H	H	O
I-1-474	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	Br	H	H	O
I-1-475	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	nitro	H	H	O
I-1-476	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2,3-diclorofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-477	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2,3-diclorofenilo	H	H	2,3-diclorofenilcarbonilo	O
I-1-478	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2,4-dimetil-1,3-tiazol-5-ilo	H	H		O
I-1-479	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2,6-diclorofenilo	H	H		O
I-1-480	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2,6-dimetilfenilo	H	H		O
I-1-481	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-acetilfenilo	H	H		O
I-1-482	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	H		O
I-1-483	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-cloro-5-metoxifenilo	H	H		O
I-1-484	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-cloro-6-fluorofenilo	H	H		O
I-1-485	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-cloropirazin-3-ilo	H	H		O
I-1-486	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-ciclopropilfenilo	H	H		O
I-1-487	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-etil-6-fluorofenilo	H	H		O
I-1-488	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-etilfenilo	H	H		O
I-1-489	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-etilpirazin-3-ilo	H	H		O
I-1-490	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-etylpiridin-3-ilo	H	H		O
I-1-491	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H		O
I-1-492	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-fluoro-6-yodofenilo	H	H		O
I-1-493	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-yodo-3-tienilo	H	H		O
I-1-494	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-yodopiridin-3-ilo	H	H		O
I-1-495	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-metoxifenilo	H	H		O
I-1-496	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-metil-4-(trifluorometil)-1,3-tiazol-5-ilo	H	H		O
I-1-497	3,5-difluoropiridin-2-ilo					O

(continuación)

Compuesto N°	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-498	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-metil-5,6-dihidro-1,4-oxatian-3-ilo	H	H	H	O
I-1-499	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-metilfenilo	H	H	H	O
I-1-500	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-(difluorometil)-5-fluoro-1-metilpirazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-501	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-(trifluorometil)pirazin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-502	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-503	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-cloro-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-504	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-cloropiridin-2-ilo	H	H	H	O
I-1-505	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-ethylpirazin-4-ilo	H	H	H	O
I-1-506	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-507	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-yodo-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-508	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-isobutil-1-metil-4-nitro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-509	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-isopropil-1-metil-4-nitro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-510	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-metil-2-tienilo	H	H	H	O
I-1-511	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-metil-5-(trifluorometil)-1,2-oxazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-512	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-ter-butil-1-metil-4-nitro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-513	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-ter-butil-4-cloro-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-514	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-(difluorometil)-1,3-dimetil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-515	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-516	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4,5,6-trifluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-517	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromo-1,3-dimetil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-518	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromo-1-etyl-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-519	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromo-1-etyl-3-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto N°	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-520	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromo-1-metil-1H-pirazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-521	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromo-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-522	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromo-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-523	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromo-2,5-dimetil-3-furanilo	H	H	H	O
I-1-524	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-bromotiofen-3-ilo	H	H	H	O
I-1-525	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-(difluorometil)-3-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-526	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-etil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-527	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-etil-3-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-528	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-isopropil-3-nitro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-529	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-530	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-metil-3-nitro-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-531	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-metil-3-propil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-532	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-metil-5-propil-1H-pirazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-533	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-1-propil-1H-pirazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-534	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cloro-3-etil-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-535	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cian-1-metil-3-(pentafluoretil)-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-536	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-cian-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-537	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-ciclopropil-1,2,3-tiadiazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-538	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-fluoro-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-539	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-yodo-1-isobutil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-540	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-yodo-1-metil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-541	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-yodo-1-propil-1H-pirazol-5-ilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-542	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-metil-1,2,5-oxadiazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-543	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-metil-1,2-oxazol-5-ilo	H	H	H	O
I-1-544	3,5-difluoropiridin-2-ilo	4-metil-4H-1,2,4-triazol-3-ilo	H	H	H	O
I-1-545	3,5-difluoropiridin-2-ilo	5-cloropirimidin-4-ilo	H	H	H	O
I-1-546	3,5-difluoropiridin-2-ilo	5-metil-1,2,3-triazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-547	3,5-difluoropiridin-2-ilo	5-metil-1,2-oxazol-4-ilo	H	H	H	O
I-1-548	3,5-difluoropiridin-2-ilo	6-metil-3,4-dihidro-2H-piran-5-ilo	H	H	H	O
I-1-549	3-bromopiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-550	3-bromopiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-551	3-bromopiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-552	3-bromopiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-553	3-bromopiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-554	3-bromopiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-555	3-cloro-2-fluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-556	3-cloro-2-fluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-557	3-cloro-2-fluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-558	3-cloro-2-fluorofenilo	2-bromopirimidin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-559	3-cloro-2-fluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-560	3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-561	3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-562	3-cloropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-563	3-cloropiridin-2-ilo	2,5-dimetilfuran-3-ilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-564	3-cloropiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-565	3-cloropiridin-2-ilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-566	3-cloropiridin-2-ilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O
I-1-567	3-cian-4,6-dimetilpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-568 Ejemplo de síntesis 36	3-cian-6-(dietilamino)piridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-569 Ejemplo de síntesis 31	3-cian-6-(trifluorometil)piridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-570 Ejemplo de síntesis 40	3-cian-6-ciclopropil-4- (trifluorometil)piridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-571 Ejemplo de síntesis 33	3-cian-6-metil-4-(trifluorometil)piridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-572	3-cian-6-metilpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-573 Ejemplo de síntesis 39	3-cian-6-propilpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-574 Ejemplo de síntesis 43	3-ciampirazin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-575 Ejemplo de síntesis 25	3-ciampiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-576	3-fluoro-4-yodopiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-577	3-fluoropiridin-2-ilo	2-(trifluormetoxi)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-578	3-fluoropiridin-2-ilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-579	3-fluoropiridin-2-ilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-580	3-fluoropiridin-2-ilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-581	3-fluoropiridin-2-ilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-582	3-fluoropiridin-2-ilo	3-yodo-2-furanilo	H	H	H	O
I-1-583 Ejemplo de síntesis 42	4-acetamido-2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-584 Ejemplo de síntesis 30	4-acetil-2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-585 Ejemplo de síntesis 37	2-cloro-3-cianpiridin-4-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-586 Ejemplo de síntesis 38	4-cloro-3-cianpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-587	5-cloro-3-fluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-588	5-cloro-3-fluoropiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-589	5-cloro-3-fluoropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-590	5-cloro-3-fluoropiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-591	5-cloro-3-fluoropiridin-2-ilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-592	5-cloro-3-fluoropiridin-2-ilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O
I-1-593	5-cloro-3-fluoropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-594	5-cianpirimidin-4-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-595	5-cianpirimidin-4-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-596	5-fluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-597	5-fluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-598	5-fluoropiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-599	5-fluoropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-600	5-fluoropirimidin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-601	5-fluoropirimidin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	O

(continuación)

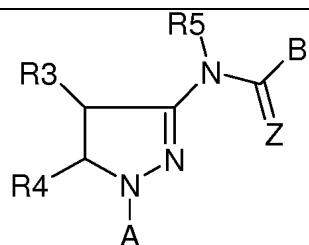
Compuesto N°	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-602	5-fluoropirimidin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-603	5-fluoropirimidin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-604	5-fluoropirimidin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-605	5-fluoropirimidin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-606 Ejemplo de síntesis 44	6-cloro-5-cian-3-fluoropirimidin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-607 Ejemplo de síntesis 34	6-cloro-3-cianpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-608 Ejemplo de síntesis 35	6-cloro-5-cianpiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-609	pirimidin-2-ilo	2,5-dimetilfuran-3-ilo	H	H	H	O
I-1-610	2,6-difluorofenilo	2-(2,2,2-trifluoretil)fenilo	H	H	H	O
I-1-611	2,6-difluorofenilo	2-(difluorometil)-5,6-dihidro-1,4-oxatina-3-ilo	H	H	H	O
I-1-612	2,6-difluorofenilo	2-[trifluoracetil]amino)fenilo	H	H	H	O
I-1-613	2,6-difluorofenilo	2-bromo-6-fluorofenilo	H	H	H	O
I-1-614	2,6-difluorofenilo	2-cloro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-615	2,6-difluorofenilo	3-metil-5,6-dihidro-1,4-dioxin-2-il	H	H	H	O
I-1-616	2,6-difluorofenilo	2-metil-5,6-dihidro-4,4-dioxo-1,4-oxatina-3-ilo	H	H	H	O
I-1-617	2-cian-3-fluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-618	2-cian-3-fluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-il	H	H	H	O
I-1-619	2-cian-3-fluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-620	2-cian-3-fluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-621	2-cian-3-fluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-622	2-cian-3-fluorofenilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-623	2-cian-3-fluorofenilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-624	2-cian-3-fluorofenilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O
I-1-625	2-cian-3-fluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-626	2-cian-4-fluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-627	2-cian-4-fluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-illo	H	H	H	O
I-1-628	2-cian-4-fluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-1-629	2-cian-4-fluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-1-630	2-cian-4-fluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-1-631	2-cian-4-fluorofenilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	H	O
I-1-632	2-cian-4-fluorofenilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-633	2-cian-4-fluorofenilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	O
I-1-634	2-cian-4-fluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-1-635	3,5-difluoropiridin-2-illo	2-(2,2,2-trifluoretil)fenilo	H	H	H	O
I-1-636	3,5-difluoropiridin-2-illo	2-(difluorometil)-5,6-dihidro-1,4-oxatina-3-illo	H	H	H	O
I-1-637	3,5-difluoropiridin-2-illo	2-bromo-6-fluorofenilo	H	H	H	O
I-1-638	3,5-difluoropiridin-2-illo	2-cloro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-639	3,5-difluoropiridin-2-illo	3-metil-5,6-dihidro-1,4-dioxin-2-illo	H	H	H	O
I-1-640 Ejemplo de síntesis 23	3,5-difluoropiridin-2-illo	2-metil-5,6-dihidro-4,4-dioxo-1,4-oxatina-3-illo	H	H	H	O
I-1-641 Ejemplo de síntesis 32	3-cian-4-(4-fluorofenil)piridin-2-illo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-1-642	3-fluoro-4-(4-fluorofenil)piridin-2-illo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O

(continuación)

Compuesto N°	A	B	R3	R4	R5	Z
I-1-643 Ejemplo de síntesis 24	4-amino-2,6-difluorofenilo	2-Carboxifenilo	H	H	H	O
I-1-644	2,6-difluorofenilo	1-metil-1H-imidazol-5-ilO	H	H	H	O
I-1-645	2,6-difluorofenilo	1-metil-1H-pirrol-2-ilO	H	H	H	O
I-1-646	3,5-difluoropiridin-2-ilO	1-metil-1H-imidazol-5-ilO	H	H	H	O
I-1-647	3,5-difluoropiridin-2-ilO	1-metil-1H-pirrol-2-ilO	H	H	H	O

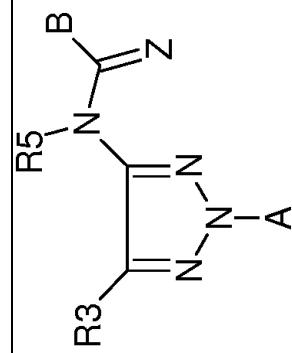
Tabla 2

(I-4)

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	Z
I-4-1	2,6-difluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	H	O
I-4-2 Ejemplo de síntesis 6	2,6-difluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O
I-4-3	2,6-difluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
I-4-4	2,6-difluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	O
I-4-5	2,6-difluorofenilo	2-metilfenilo	H	H	H	O
I-4-6	2,6-difluorofenilo	2-metilfenilo	H	H	2-metilpiridin-3-ilcarbonilo	O
I-4-7	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
I-4-8	2-clorofenilo	2-bromofenilo	H	H	H	O

Tabla 3

(I-2)						
Compuesto Nº	A	B	R3	R5	Z	
I-2-1	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O	
Ejemplo de síntesis 20						
compuesto Nr.	A	B	R3	R5	Z	
I-2-2	2-clorofenilo	2-clorofenilo	H	H	O	
I-2-3	2-clorofenilo	2-yodofenilo	H	H	O	
I-2-4	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O	
I-2-5	2-clorofenilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	O	
I-2-6	2-bromofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O	
I-2-7	2-bromofenilo	2-clorofenilo	H	H	O	
I-2-8	2-bromofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O	
I-2-9	2-bromofenilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	O	
I-2-10	3-cloropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O	
I-2-11	3-cloropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	C]	H	O	



(continuación)

Comuesto Nº	A	B	R3	R5	Z
I-2-12	3-cloropiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	O
I-2-13	3-cloropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	O
I-2-14	3-cloropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-15	3-cloropiridin-2-ilo	2,6-difluorofenilo	H	H	O
I-2-16	3-cloropiridin-2-ilo	5-fluoro-1-metil-3-(trifluorometil)-1H-pirazol-4-ilo	H	H	O
I-2-17	3-bromopiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-18	3-bromopiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-19	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Cl	H	O
I-2-20	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Cl	2-(trifluorometil)fenilocarbonilo	O
I-2-21	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	metilo	H	O
I-2-22	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	metilo	2-(trifluorometil)fenilocarbonilo	O
I-2-23	2-bromofenilo	2-cloropiridin-3-ilo	Cl	2-cloropiridin-3-ilcarbonilo	O
I-2-24	2-clorofenilo	2-yodofenilo	metilo	H	O
I-2-25	2-clorofenilo	2-yodofenilo	metilo	2-yodofenilocarbonilo	O
I-2-26	2-bromofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Cl	2-(trifluorometil)fenilocarbonilo	O
I-2-27	2-bromofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	Cl	2-(trifluorometil)fenilocarbonilo	O
I-2-28	2-bromofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	Cl	H	O
I-2-29	2-bromofenilo	2-clorofenilo	Cl	H	O
I-2-30	2-bromofenilo	2-clorofenilo	Cl	2-clorofenilocarbonilo	O
I-2-31	2-bromofenilo	2-cloropiridin-3-ilo	Cl	H	O
I-2-32	2-bromofenilo	2-yodofenilo	Cl	H	O

(continuación)

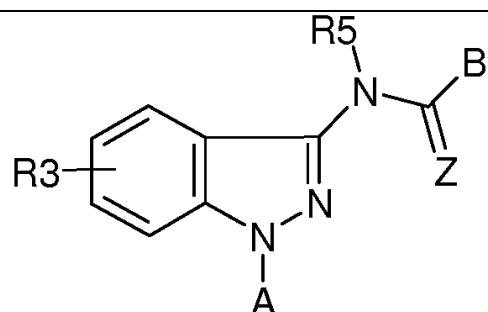
Comuesto Nº	A	B	R3	R5	Z
I-2-33	2-bromofenilo	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-34	2-bromofenilo	2-yodofenilo	Ci	2-yodofenilocarbonilo	O
I-2-35 Ejemplo de síntesis 21	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-36	2,6-difluorofenilo	2-bromofenilo	H	H	O
I-2-37	2,6-difluorofenilo	2-bromopiridin-3-iló	H	H	O
I-2-38	2,6-difluorofenilo	2-clorofenilo	H	H	O
I-2-39	2,6-difluorofenilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-40	2,6-difluorofenilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	O
I-2-41	2,6-difluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-42	5-(trifluorometil)piridin-2-iló	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-43	5-(trifluorometil)piridin-2-iló	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-44	3-fluoropiridin-2-iló	2-(trifluorometil)piridin-3-iló	H	H	O
I-2-45	3-fluoropiridin-2-iló	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-46	3-fluoropiridin-2-iló	2-bromofenilo	H	H	O
I-2-47	3-fluoropiridin-2-iló	2-bromopiridin-3-iló	H	H	O
I-2-48	3-fluoropiridin-2-iló	2-clorofenilo	H	H	O
I-2-49	3-fluoropiridin-2-iló	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-50	3-fluoropiridin-2-iló	2-yodo-3-tienilo	H	H	O
I-2-51	3-fluoropiridin-2-iló	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-52	3-cloropiridin-2-iló	2-(trifluorometil)fenilo	H	2-(trifluorometil)fenilocarbonilo	O
I-2-53	3-cloropiridin-2-iló	2-(trifluorometil)fenilo	metilo	H	O
I-2-54	3-cloropiridin-2-iló	2-(trifluorometil)fenilo	metilo	2-(trifluorometil)fenilocarbonilo	O

(continuación)

Comuesto Nº	A	B	R3	R5	Z
I-2-55	3-cloropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O
I-2-56	3-cloropiridin-2-ilo	2-cloropiridin-3-ilo	H	H	O
I-2-57	3-cloropiridin-2-ilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-58	3-cloropiridin-2-ilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	O
I-2-59	3-cloropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	metilo	H	O
I-2-60	3-cloropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	Cl	H	O
I-2-61	3-cloropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	metilo	2-yodofenilcarbonilo	O
I-2-62	2,5-difluoropiridin-3-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-63 Ejemplo de síntesis 45	3,5-dicloropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-64	3,5-dicloropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O
I-2-65	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-66	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-67	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O
I-2-68	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	O
I-2-69	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-bromopiridin-3-ilo	H	H	O
I-2-70	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-clorofenilo	H	H	O
I-2-71	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-72	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	O
I-2-73	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-74	3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-2-75	3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-ilo	2-yodofenilo	H	H	O
I-2-76	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O

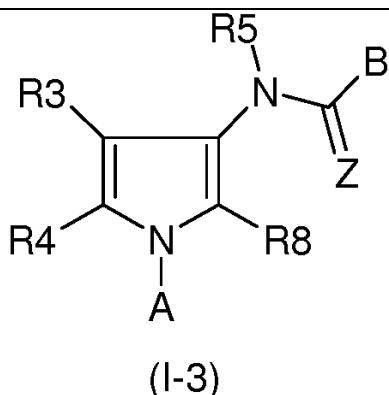
(continuación)

Compuesto Nº	A	B	R3	R5	Z
I-2-77	2,6-difluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	O
I-2-78	2,6-difluorofenilo	3-(difluorometil)-1-metil-1H-pirazol-4-ilo	H	H	O
I-2-79	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)pirazin-2-ilo	H	H	O
I-2-80	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	O
I-2-81	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)piridin-4-ilo	H	H	O
I-2-82	2,6-difluorofenilo	3-(trifluorometil)tolueno-2-ilo	H	H	O
I-2-83	2,6-difluorofenilo	4-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O
I-2-84	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-(trifluorometil)piridin-2-ilo	H	H	O
I-2-85	3,5-difluoropiridin-2-ilo	3-(trifluorometil)tolueno-2-ilo	H	H	O

Tabla 4

(I-5)

Compuesto N°	A	B	R3	R5	Z
I-5-1	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
I-5-2	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	5-F	H	O
Ejemplo de síntesis 22					
I-5-3	3,5-difluoropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	O
I-5-4	3-fluoropiridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	O
I-5-5	3-cloro-5-(trifluorometil)piridin-2-ilo	2-bromofenilo	H	H	O
I-5-6	2,5-difluoropiridin-3-ilo	2-bromofenilo	H	H	O
I-5-7	2,5-difluoropiridin-3-ilo	2-(trifluorometil)fenilo	5-F	H	O
I-5-8	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	O
Ejemplo de síntesis 47					
I-5-9	2-clorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	O
I-5-10	2,5-difluoro-4-cianfenilo	2-(trifluorometil)fenilo	4-F	H	O
I-5-11	2,5-difluoro-4-cianfenilo	2,6-difluorofenilo	4-F	H	O

Tabla 5

Compuesto Nº	A	B	R3	R4	R5	R8	Z
I-3-1 Ejemplo de síntesis 46	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	H	O
I-3-2	2,6-difluorofenilo	2,6-difluorofenilo	H	H	H	H	O
I-3-3	2,6-difluorofenilo	2-yodofenilo	H	H	H	H	O
I-3-4	2,6-difluorofenilo	2-cloro-4-metoxifenilo	H	H	H	H	O
I-3-5	2,6-difluorofenilo	2-(trifluorometil)piridin-3-ilo	H	H	H	H	O
I-3-6	2,6-difluorofenilo	3-yodo-2-furanilo	H	H	H	H	O
I-3-7	2,6-difluorofenilo	2-yodo-3-tienilo	H	H	H	H	O
<u>Datos de HPLC- EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾</u>							

Compuesto Nº Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-1 ver el Ejemplo de síntesis 1
I-1-2 HPLC-EM: logP = 2,69; masa (m/z): 372,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,33 (s, 3H), 6,86 (d, 1H), 7,05 – 7,09 (m, 1H), 7,24 – 7,26 (m, 1H), 7,32 – 7,42 (m, 2H), 7,46 – 7,49 (m, 1H), 7,51 – 7,54 (m, 1H), 7,58 – 7,60 (m, 1H), 7,68 – 7,70 (m, 1H), 8,12 (d, 1H), 11,17 (s, 1H).
I-1-3 HPLC-EM: logP = 2,87; masa (m/z): 312,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,24 (s, 3H), 2,52 (s, 3H), 3,88 (s, 3H), 6,79 – 6,80 (m, 1H), 6,83 – 6,84 (m, 1H), 7,05 – 7,10 (m, 1H), 7,23 – 7,25 (m, 1H), 7,31 – 7,35 (m, 1H), 7,62 – 7,65 (m, 1H), 8,10 (d, 1H), 10,48 (s, 1H).
I-1-4 HPLC-EM: logP = 2,92; masa (m/z): 366,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,40 – 7,60 (m, 5H), 7,64 – 7,68 (m, 1H), 7,74 – 7,78 (m, 2H), 7,86 – 7,88 (m, 1H), 9,18 (s a, 1H).
I-1-5 HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 458,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,96 – 6,97 (m, 1H), 7,17 – 7,24 (m, 1H), 7,45 – 7,50 (m, 2H), 7,54 – 7,56 (m, 1H), 7,64 – 7,68 (m, 1H), 7,74 – 7,78 (m, 2H), 7,86 – 7,88 (m, 1H), 7,93 – 7,95 (m, 1H), 9,17 (s a, 1H).
I-1-6 HPLC-EM: logP = 2,75; masa (m/z): 372,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,90 (d, 1H), 7,41 (s, 1H), 7,64 – 7,67 (m, 1H), 7,73 – 7,77 (m, 1H), 7,85 – 7,89 (m, 1H), 7,92 – 7,96 (m, 2H), 8,00 (d, 1H), 8,32 (t, 1H), 11,53 (s, 1H).
I-1-7 HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 400,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,94 – 6,95 (m, 1H), 7,54 – 7,55 (m, 1H), 7,64 – 7,82 (m, 7H), 7,86 – 7,88 (m, 1H), 9,23 (s a, 1H).

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-8
HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 323,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,07 (d, 1H), 7,40 – 7,52 (m, 4H), 7,59 – 7,62 (m, 1H), 7,69 – 7,71 (m, 1H), 7,75 – 7,79 (m, 1H), 7,85 – 7,87 (m, 1H), 8,12 (d, 1H), 9,39 (s a, 1H).
I-1-9
HPLC-EM: logP = 2,55; masa (m/z): 357,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,05 (d, 1H), 7,48 – 7,52 (m, 1H), 7,65 – 7,86 (m, 7H), 8,11 (d, 1H), 9,39 (s a, 1H).
I-1-10
HPLC-EM: logP = 2,78; masa (m/z): 360,01 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,95 (d, 1H), 7,34 – 7,50 (m, 5H), 7,53 – 7,55 (m, 1H), 7,69 – 7,71 (m, 1H), 7,73 – 7,77 (m, 1H), 8,16 – 8,17 (m, 1H), 11,27 (s, 1H).
I-1-11
HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 312,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,45 (s, 3H), 6,98 – 6,99 (m, 1H), 7,25 – 7,31 (m, 3H), 7,36 – 7,45 (m, 3H), 7,47 – 7,54 (m, 2H), 7,58 – 7,60 (m, 1H), 7,88 (d, 1H), 9,07 (s a, 1H).
I-1-12
HPLC-EM: logP = 3,30; masa (m/z): 326,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 1,25 (t, 3H), 2,84 (c,2H), 7,01 (d, 1H), 7,28 – 7,32 (m, 1H), 7,37 – 7,38 (m, 1H), 7,43 – 7,52 (m, 4H), 7,55 – 7,58 (m, 1H), 7,61 – 7,64 (m, 1H), 7,91 (d, 1H), 9,13 (s a, 1H).
I-1-13
HPLC-EM: logP = 3,03; masa (m/z): 348,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,30 (t, 1H), 7,41 – 7,48 (m, 2H), 7,52 – 7,56 (m, 1H), 7,59 – 7,69 (m, 3H), 7,76 – 7,81 (m, 2H), 7,81 – 7,89 (m, 1H), 9,32 (s a, 1H).
I-1-14
HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 366,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,95 (d, 1H), 7,41 – 7,47 (m, 2H), 7,51 – 7,54 (m, 1H), 7,57 – 7,60 (m, 1H), 7,65 – 7,74 (m, 3H), 7,80 – 7,82 (m, 1H), 7,88 (d, 1H), 9,26 (s a, 1H).
I-1-15
ver el Ejemplo de síntesis 17
I-1-16
ver el Ejemplo de síntesis 18
I-1-17
ver el Ejemplo de síntesis 19
I-1-18
HPLC-EM: logP = 3,28; masa (m/z): 382,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,96 (d, 1H), 7,40 – 7,56 (m, 4H), 7,59 – 7,65 (m, 3H), 7,77 – 7,80 (m, 1H), 7,89 (d, 1H), 9,23 (s a, 1H).
I-1-19
HPLC-EM: logP = 2,89; masa (m/z): 316,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,24 – 7,29 (m, 1H), 7,32 – 7,36 (m, 1H), 7,41 – 7,48 (m, 2H), 7,53 – 7,62 (m, 3H), 7,89 – 7,93 (m, 2H), 9,17 (s a, 1H).
I-1-20
ver el Ejemplo de síntesis 14
I-1-21
ver el Ejemplo de síntesis 15
I-1-22
HPLC-EM: logP = 3,41; masa (m/z): 360,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 1,28 (t, 3H), 3,95 (c,2H), 6,10 (d, 1H), 7,21 – 7,33 (m, 4H), 7,37 – 7,54 (m, 4H), 7,61 – 7,64 (m, 1H).
I-1-23
HPLC-EM: logP = 3,25; masa (m/z): 370,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,54 (s, 1H), 4,72 (s, 2H), 6,15 (s, 1H), 7,22 – 7,34 (m, 4H), 7,39 – 7,41 (m, 3H), 7,53 – 7,54 (m, 1H), 7,66 (s, 1H).
I-1-24
HPLC-EM: logP = 3,85; masa (m/z): 386,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 0,29 – 0,30 (m, 2H), 0,48 – 0,50 (m, 2H), 1,13 – 1,21 (m, 1H), 3,81 (d, 2H), 6,13 (d, 1H), 7,15 – 7,34 (m, 5H), 7,39 – 7,41 (m, 2H), 7,52 – 7,55 (m, 1H), 7,62 (d, 1H).
I-1-25
HPLC-EM: logP = 3,04; masa (m/z): 371,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 4,87 (s, 2H), 5,99 (s, 1H), 7,24 – 7,45 (m, 7H), 7,55 – 7,56 (m, 1H), 7,66 (s, 1H).

(continuación)

Compuesto N°	Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-26	HPLC-EM: logP = 3,56; masa (m/z): 372,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 4,51 (d, 2H), 5,18 (d, 1H), 5,33 (d, 1H), 5,89 – 5,99 (m, 1H), 6,12 (d, 1H), 7,19 – 7,50 (m, 7H), 7,59 – 7,61 (m, 1H), 7,89 (d, 1H).
I-1-27	ver el Ejemplo de síntesis 16
I-1-28	HPLC-EM: logP = 2,88; masa (m/z): 366,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,42 – 7,63 (m, 8H), 8,05 (s, 1H), 8,62 (s a, 1H).
I-1-29	HPLC-EM: logP = 2,99; masa (m/z): 409,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,44 – 7,63 (m, 8H), 8,06 (s, 1H), 8,58 (s a, 1H).
I-1-30	HPLC-EM: logP = 3,01; masa (m/z): 457,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,42 – 7,66 (m, 8H), 8,05 (s, 1H), 8,55 (s a, 1H).
I-1-31	HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 346,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,28 (s, 3H), 6,48 (s, 1H), 7,32 – 7,36 (m, 1H), 7,39 – 7,50 (m, 5H), 7,56 – 7,59 (m, 1H), 8,50 (s a, 1H).
I-1-32	HPLC-EM: logP = 2,83; masa (m/z): 376,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,37 – 7,47 (m, 4H), 7,53 – 7,56 (m, 2H), 7,59 – 7,60 (m, 1H), 7,68 – 7,69 (m, 1H), 7,89 (d, 1H), 9,20 (s a, 1H).
I-1-33	HPLC-EM: logP = 2,95; masa (m/z): 423,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,18 – 7,24 (m, 1H), 7,39 – 7,55 (m, 5H), 7,58 – 7,61 (m, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,93 – 7,95 (m, 1H), 9,17 (s a, 1H).
I-1-34	HPLC-EM: logP = 3,10; masa (m/z): 457,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,21 – 7,25 (m, 1H), 7,48 – 7,62 (m, 6H), 7,97 – 7,98 (m, 1H), 8,05 (s, 1H), 8,56 (s a, 1H).
I-1-35	HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 438,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,28 (s, 3H), 6,49 (s, 1H), 7,12 – 7,17 (m, 1H), 7,24 – 7,29 (m, 1H), 7,38 – 7,49 (m, 4H), 7,56 – 7,58 (m, 1H), 7,84 – 7,86 (m, 1H), 8,46 (s a, 1H).
I-1-36	HPLC-EM: logP = 2,65; masa (m/z): 334,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,95 (d, 1H), 7,03 – 7,13 (m, 2H), 7,41 – 7,49 (m, 2H), 7,50 – 7,56 (m, 2H), 7,59 – 7,62 (m, 1H), 7,88 (d, 1H), 9,46 (s a, 1H).
I-1-37	HPLC-EM: logP = 2,84; masa (m/z): 350,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,20 – 7,23 (m, 1H), 7,35 – 7,37 (m, 1H), 7,42 – 7,50 (m, 3H), 7,52 – 7,55 (m, 1H), 7,59 – 7,61 (m, 1H), 7,89 (d, 1H), 9,37 (s a, 1H).
I-1-38	HPLC-EM: logP = 3,24; masa (m/z): 313,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,78 (s, 3H), 7,06 (d, 1H), 7,43 – 7,52 (m, 3H), 7,61 – 7,65 (m, 2H), 7,78 – 7,80 (m, 1H), 7,94 (d, 1H), 8,52 – 8,54 (m, 1H), 10,51 (s a, 1H).
I-1-39	HPLC-EM: logP = 2,99; masa (m/z): 367,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,02 (d, 1H), 7,44 – 7,52 (m, 2H), 7,57 – 7,65 (m, 2H), 7,75 -7,78 (m, 1H), 7,93 – 7,94 (m, 1H), 8,31 – 8,34 (m, 1H), 8,88 – 8,89 (m, 1H), 10,04 (s a, 1H).
I-1-40	HPLC-EM: logP = 2,79; masa (m/z): 333,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,03 (d, 1H), 7,42 – 7,48 (m, 2H), 7,54 – 7,61 (m, 3H), 7,92 (d, 1H), 7,97 -7,99 (m, 1H), 8,58 – 8,59 (m, 1H), 10,09 (s a, 1H).
I-1-41	HPLC-EM: logP = 1,44; masa (m/z): 313,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,62 (s, 3H), 6,98 (d, 1H), 7,24 – 7,27 (m, 1H), 7,40 – 7,47 (m, 2H), 7,52 -7,54 (m, 1H), 7,58 – 7,60 (m, 1H), 7,83 – 7,89 (m, 2H), 8,53 – 8,55 (m, 1H), 9,25 (s a, 1H).
I-1-42	HPLC-EM: logP = 2,48; masa (m/z): 367,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,95 (d, 1H), 7,42 – 7,47 (m, 2H), 7,53 – 7,54 (m, 1H), 7,59 -7,61 (m, 1H), 7,71 – 7,73 (m, 1H), 7,89 (d, 1H), 8,08 – 8,10 (m, 1H), 8,81 – 8,82 (m, 1H), 9,35 (s a, 1H).

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-43
HPLC-EM: logP = 2,19; masa (m/z): 333,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,38 – 7,48 (m, 3H), 7,51 – 7,55 (m, 1H), 7,59 – 7,62 (m, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,97 – 7,99 (m, 1H), 8,48 – 8,50 (m, 1H), 9,35 (s a, 1H).
I-1-44
HPLC-EM: logP = 2,74; masa (m/z): 368,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,41 – 7,49 (m, 2H), 7,55 – 7,62 (m, 2H), 7,92 (d, 1H), 8,90 (s, 2H), 9,84 (s a, 1H).
I-1-45
HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 316,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,23 (s, 3H), 2,52 (s, 3H), 6,78 (s, 1H), 6,88 (d, 1H), 7,45 – 7,53 (m, 2H), 7,60 – 7,62 (m, 1H), 7,67 – 7,69 (m, 1H), 8,05 (d, 1H), 10,51 (s a, 1H).
I-1-46
HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 318,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,53 (s, 3H), 6,92 (d, 1H), 6,99 (d, 1H), 7,40 – 7,49 (m, 3H), 7,54 – 7,60 (m, 2H), 7,87 – 7,88 (m, 1H), 8,76 (s a, 1H).
I-1-47
HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 430,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,96 (d, 1H), 7,25 (d, 1H), 7,40 – 7,48 (m, 2H), 7,53 – 7,56 (m, 1H), 7,58 – 7,61 (m, 1H), 7,63 – 7,64 (m, 1H), 7,88 (d, 1H), 9,08 (s a, 1H).
I-1-48
HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 350,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,38 (s, 3H), 3,77 (s, 3H), 6,93 (d, 1H), 7,39 – 7,47 (m, 2H), 7,53 – 7,55 (m, 1H), 7,58 – 7,60 (m, 1H), 7,86 (d, 1H), 8,75 (s a, 1H).
I-1-49
HPLC-EM: logP = 2,59; masa (m/z): 370,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 3,79 (s, 3H), 6,89 (d, 1H), 7,10 (t, 1H), 7,40 – 7,48 (m, 2H), 7,53 – 7,56 (m, 1H), 7,58 – 7,61 (m, 1H), 7,87 (d, 1H), 8,62 (s a, 1H).
I-1-50
HPLC-EM: logP = 3,07; masa (m/z): 410,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,94 (d, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 1H), 7,48 – 7,52 (m, 2H), 7,65 – 7,83 (m, 6H), 9,22 (s a, 1H).
I-1-51
HPLC-EM: logP = 2,83; masa (m/z): 376,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,36 – 7,39 (m, 1H), 7,41 – 7,43 (m, 1H), 7,46 – 7,52 (m, 4H), 7,59 – 7,61 (m, 1H), 7,76 – 7,78 (m, 1H), 7,83 (d, 1H), 9,19 (s a, 1H).
I-1-52
HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 419,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,96 (d, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 2H), 7,45 – 7,47 (m, 1H), 7,49 – 7,51 (m, 2H), 7,55 – 7,56 (m, 1H), 7,68 – 7,69 (m, 1H), 7,76 – 7,78 (m, 1H), 7,83 (d, 1H), 9,17 (s a, 1H).
I-1-53
HPLC-EM: logP = 3,07; masa (m/z): 467,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,96 (d, 1H), 7,19 – 7,23 (m, 1H), 7,35 – 7,40 (m, 1H), 7,46 – 7,51 (m, 4H), 7,76 – 7,78 (m, 1H), 7,84 (d, 1H), 7,93 – 7,95 (m, 1H), 9,19 (s a, 1H).
I-1-54
HPLC-EM: logP = 2,99; masa (m/z): 411,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,35 – 7,40 (m, 1H), 7,48 – 7,54 (m, 3H), 7,72 – 7,79 (m, 2H), 7,86 (d, 1H), 8,28 – 8,31 (m, 1H), 8,85 – 8,86 (m, 1H), 10,01 (s a, 1H).
I-1-55
HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 377,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,35 – 7,40 (m, 1H), 7,48 – 7,56 (m, 3H), 7,77 – 7,79 (m, 1H), 7,86 (d, 1H), 7,96 – 7,99 (m, 1H), 8,58 – 8,59 (m, 1H), 10,08 (s a, 1H).
I-1-56
HPLC-EM: logP = 2,54; masa (m/z): 411,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,94 (d, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 1H), 7,48 – 7,53 (m, 2H), 7,70 – 7,73 (m, 1H), 7,76 – 7,79 (m, 1H), 7,84 (d, 1H), 8,08 – 8,10 (m, 1H), 8,80 – 8,82 (m, 1H), 9,30 (s a, 1H).
I-1-57
HPLC-EM: logP = 2,37; masa (m/z): 377,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,96 (d, 1H), 7,35 – 7,41 (m, 1H), 7,44 – 7,47 (m, 1H), 7,49 – 7,51 (m, 2H), 7,76 – 7,78 (m, 1H), 7,84 (d, 1H), 7,97 – 8,00 (m, 1H), 8,48 – 8,50 (m, 1H), 9,34 (s a, 1H).
I-1-58
HPLC-EM: logP = 2,63; masa (m/z): 414,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 3,79 (s, 3H), 6,88 (d, 1H), 7,11 (t, 1H), 7,35 – 7,41 (m, 1H), 7,49 – 7,51 (m, 2H), 7,76 – 7,79 (m, 1H), 7,82 (d, 1H), 8,69 (s a, 1H).

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-59 HPLC-EM: logP = 3,00; masa (m/z): 431.9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 3,81 (s, 3H), 6,88 (d, 1H), 7,36 – 7,41 (m, 1H), 7,49 – 7,51 (m, 2H), 7,76 – 7,78 (m, 1H), 7,82 (d, 1H), 9,00 (s a, 1H).
I-1-60 HPLC-EM: logP = 3,16; masa (m/z): 362,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,53 (s, 3H), 6,91 (d, 1H), 6,98 – 6,99 (m, 1H), 7,34 – 7,38 (m, 1H), 7,48 – 7,50 (m, 3H), 7,75 – 7,77 (m, 1H), 7,82 (d, 1H), 8,77 (s a, 1H).
I-1-61 ver el Ejemplo de síntesis 2
I-1-62 HPLC-EM: logP = 3,07; masa (m/z): 368,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,02 (d, 1H), 7,20 – 7,30 (m, 2H), 7,54 – 7,58 (m, 1H), 7,66 – 7,76 (m, 3H), 7,80 – 7,82 (m, 1H), 8,03 – 8,04 (m, 1H), 9,34 (s a, 1H).
I-1-63 ver el Ejemplo de síntesis 3
I-1-64 HPLC-EM: logP = 3,02; masa (m/z): 368,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,92 (d, 1H), 7,24 – 7,29 (m, 1H), 7,54 – 7,60 (m, 1H), 7,67 – 7,71 (m, 2H), 7,74 – 7,84 (m, 3H), 8,13 – 8,14 (m, 1H), 11,35 (s a, 1H).
I-1-65 HPLC-EM: logP = 3,13; masa (m/z): 368,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,03 – 7,09 (m, 1H), 7,30 – 7,36 (m, 1H), 7,52 – 7,57 (m, 1H), 7,66 – 7,74 (m, 3H), 7,80 – 7,82 (m, 1H), 8,07 – 8,08 (m, 1H), 9,39 (s a, 1H).
I-1-66 HPLC-EM: logP = 3,02; masa (m/z): 334,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,03 – 7,09 (m, 2H), 7,31 – 7,36 (m, 1H), 7,39 – 7,60 (m, 5H), 8,07 – 8,08 (m, 1H), 9,37 (s a, 1H).
I-1-67 HPLC-EM: logP = 3,10; masa (m/z): 426,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,03 – 7,09 (m, 2H), 7,18 – 7,24 (m, 1H), 7,30 – 7,36 (m, 1H), 7,45 – 7,50 (m, 2H), 7,53 – 7,58 (m, 1H), 7,93 – 7,95 (m, 1H), 8,07 – 8,09 (m, 1H), 9,30 (s a, 1H).
I-1-68 HPLC-EM: logP = 3,29; masa (m/z): 369,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,05 – 7,10 (m, 2H), 7,31 – 7,37 (m, 1H), 7,60 – 7,65 (m, 1H), 7,78 – 7,79 (m, 1H), 8,11 (s, 1H), 8,30 – 8,32 (m, 1H), 8,92 (s a, 1H), 10,14 (s, 1H).
I-1-69 HPLC-EM: logP = 1,53; masa (m/z): 315,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,04 – 7,09 (m, 2H), 7,24 – 7,28 (m, 1H), 7,30 – 7,37 (m, 1H), 7,54 – 7,58 (m, 1H), 7,83 – 7,85 (m, 1H), 8,07 – 8,08 (m, 1H), 8,54 – 8,56 (m, 1H), 9,33 (s a, 1H).
I-1-70 HPLC-EM: logP = 2,60; masa (m/z): 369,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,05 – 7,11 (m, 1H), 7,31 – 7,37 (m, 1H), 7,53 – 7,58 (m, 1H), 7,70 – 7,74 (m, 1H), 8,08 – 8,09 (m, 2H), 8,81 – 8,82 (m, 1H), 9,47 (s a, 1H).
I-1-71 HPLC-EM: logP = 3,24; masa (m/z): 320,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,54 (s, 3H), 6,97 – 7,00 (m, 2H), 7,03 – 7,09 (m, 1H), 7,30 – 7,36 (m, 1H), 7,49 – 7,51 (m, 1H), 7,57 – 7,62 (m, 1H), 8,05 – 8,07 (m, 1H), 8,83 (s a, 1H).
I-1-72 ver el Ejemplo de síntesis 4
I-1-73 HPLC-EM: logP = 2,60; masa (m/z): 314,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,40 (s, 3H), 6,95 – 6,96 (m, 1H), 7,24 – 7,38 (m, 5H), 7,43 – 7,47 (m, 1H), 7,54 – 7,61 (m, 1H), 7,98 – 7,99 (m, 1H), 10,94 (s a, 1H).
I-1-74 HPLC-EM: logP = 2,73; masa (m/z): 350,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,15 – 7,48 (m, 3H), 7,49 – 7,55 (m, 1H), 7,61 – 7,69 (m, 2H), 7,77 – 7,81 (m, 3H), 9,37 (s a, 1H).
I-1-75 HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 368,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,16 – 7,22 (m, 2H), 7,47 – 7,54 (m, 1H), 7,65 – 7,76 (m, 4H), 7,80 – 7,82 (m, 1H), 9,30 (s a, 1H).

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-76 HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 386,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,13 – 7,23 (m, 2H), 7,50 – 7,57 (m, 1H), 7,67 – 7,77 (m, 3H), 7,82 – 7,84 (m, 2H), 8,76 (s a, 1H).
I-1-77 HPLC-EM: logP = 3,33; masa (m/z): 384,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,18 – 7,24 (m, 2H), 7,50 – 7,60 (m, 4H), 7,65 – 7,69 (m, 1H), 7,73 – 7,75 (m, 1H), 7,83 – 7,84 (m, 1H), 10,67 (s a, 1H).
I-1-78 HPLC-EM: logP = 2,92; masa (m/z): 328,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 1,22 (t, 3H), 2,81 (c,2H), 7,01 (d, 1H), 7,16 – 7,21 (m, 2H), 7,25 – 7,29 (m, 1H), 7,33 – 7,35 (m, 1H), 7,40 – 7,44 (m, 1H), 7,47 – 7,54 (m, 2H), 7,74 – 7,75 (m, 1H), 9,07 (s a, 1H).
I-1-79 HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 384,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,00 (d, 1H), 7,15 – 7,21 (m, 2H), 7,43 – 7,55 (m, 3H), 7,60 – 7,65 (m, 1H), 7,76 – 7,80 (m, 2H), 9,21 (s a, 1H).
I-1-80 HPLC-EM: logP = 1,95; masa (m/z): 378,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 3,31 (s, 3H), 6,98 (d, 1H), 7,17 – 7,22 (m, 2H), 7,49 – 7,53 (m, 1H), 7,70 – 7,81 (m, 4H), 8,06 – 8,08 (m, 1H), 9,35 (s a, 1H).
I-1-81 HPLC-EM: logP = 2,55; masa (m/z): 334,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,17 – 7,21 (m, 2H), 7,41 – 7,43 (m, 1H), 7,46 – 7,44 (m, 3H), 7,60 – 7,61 (m, 1H), 7,76 (d, 1H), 9,20 (s a, 1H).
I-1-82 HPLC-EM: logP = 2,59; masa (m/z): 378,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,17 – 7,21 (m, 2H), 7,38 – 7,40 (m, 1H), 7,45 – 7,48 (m, 1H), 7,49 – 7,54 (m, 1H), 7,55 – 7,57 (m, 1H), 7,68 – 7,69 (m, 1H), 7,76 (d, 1H), 9,18 (s a, 1H).
I-1-83 HPLC-EM: logP = 2,67; masa (m/z): 426,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,16 – 7,23 (m, 3H), 7,46 – 7,54 (m, 3H), 7,76 (d, 1H), 7,93 – 7,95 (m, 1H), 9,15 (s a, 1H).
I-1-84 HPLC-EM: logP = 2,42; masa (m/z): 336,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,08 – 7,13 (m, 2H), 7,17 – 7,22 (m, 2H), 7,48 – 7,57 (m, 2H), 7,77 (d, 1H), 9,40 (s a, 1H).
I-1-85 HPLC-EM: logP = 2,60; masa (m/z): 352,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,02 (d, 1H), 7,20 – 7,24 (m, 3H), 7,37 – 7,39 (m, 1H), 7,49 – 7,54 (m, 2H), 7,80 (d, 1H), 9,62 (s a, 1H).
I-1-86 HPLC-EM: logP = 2,20; masa (m/z): 345,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,92 (d, 1H), 7,32 – 7,41 (m, 2H), 7,56 – 7,64 (m, 1H), 7,71 – 7,77 (m, 2H), 7,82 – 7,87 (m, 1H), 8,07 (d, 1H), 8,11 – 8,13 (m, 1H), 11,46 (s, 1H).
I-1-87 HPLC-EM: logP = 2,66; masa (m/z): 316,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,95 – 7,02 (m, 3H), 7,36 – 7,47 (m, 3H), 7,58 – 7,65 (m, 1H), 8,05 – 8,08 (m, 2H), 11,02 (s, 1H), 11,89 (s, 1H).
I-1-88 HPLC-EM: logP = 3,15; masa (m/z): 400,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,95 (d, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 2H), 7,57 – 7,68 (m, 3H), 7,74 – 7,81 (m, 2H), 8,07 – 8,08 (m, 1H), 11,34 (s, 1H).
I-1-89 HPLC-EM: logP = 1,66; masa (m/z): 367,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,78 (d, 1H), 7,32 – 7,37 (m, 2H), 7,55 – 7,60 (m, 2H), 7,64 – 7,71 (m, 3H), 7,98 (d, 1H), 8,13 (s, 1H), 8,88 (s, 1H), 11,13 (s, 1H).
I-1-90 HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 315,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,74 (s, 3H), 7,06 (d, 1H), 7,17 – 7,23 (m, 2H), 7,45 – 7,54 (m, 2H), 7,75 – 7,77 (m, 2H), 8,48 – 8,50 (m, 1H), 10,47 (s a, 1H).
I-1-91 ver el Ejemplo de síntesis 7
I-1-92 HPLC-EM: logP = 2,40; masa (m/z): 335,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,20 – 7,26 (m, 2H), 7,50 – 7,59 (m, 2H), 7,81 (d, 1H), 7,99 – 8,02 (m, 1H), 8,60 – 8,62 (m, 1H), 10,15 (s a, 1H).

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°	Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-93	HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 369,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,03 (d, 1H), 7,17 – 7,23 (m, 2H), 7,48 – 7,55 (m, 1H), 7,72 – 7,75 (m, 1H), 7,78 (d, 1H), 8,28 – 8,30 (m, 1H), 8,85 – 8,86 (m, 1H), 10,04 (s a, 1H).
I-1-94	HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 369,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,00 (d, 1H), 7,17 – 7,22 (m, 2H), 7,48 – 7,55 (m, 1H), 7,74 – 7,78 (m, 2H), 8,91 – 8,94 (m, 2H), 9,44 (s a, 1H).
I-1-95	HPLC-EM: logP = 1,96; masa (m/z): 335,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,17 – 7,21 (m, 2H), 7,44 – 7,55 (m, 2H), 7,77 (d, 1H), 7,97 – 8,00 (m, 1H), 8,48 – 8,50 (m, 1H), 9,36 (s a, 1H).
I-1-96	HPLC-EM: logP = 1,97; masa (m/z): 378,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,00 (d, 1H), 7,16 – 7,22 (m, 2H), 7,46 – 7,54 (m, 2H), 7,77 (d, 1H), 7,89 – 7,91 (m, 1H), 8,45 – 8,46 (m, 1H), 9,32 (s a, 1H).
I-1-97	HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 368,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,92 (d, 1H), 7,36 – 7,41 (m, 2H), 7,57 – 7,64 (m, 1H), 7,77 – 7,79 (m, 1H), 8,10 (d, 1H), 8,98 – 9,00 (m, 1H), 9,07 (s, 1H), 11,56 (s, 1H).
I-1-98	HPLC-EM: logP = 1,73; masa (m/z): 330,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 1,30 (t, 3H), 3,05 (c, 2H), 6,96 (d, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 2H), 7,57 – 7,65 (m, 1H), 7,75 (d, 1H), 8,10 (d, 1H), 9,24 – 9,26 (m, 1H), 11,54 (s, 1H).
I-1-99	HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 370,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,02 (d, 1H), 7,16 – 7,23 (m, 2H), 7,48 – 7,56 (m, 1H), 7,80 (d, 1H), 8,89 – 8,90 (m, 2H), 9,86 (s a, 1H).
I-1-100	HPLC-EM: logP = 2,15; masa (m/z): 336,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,05 (d, 1H), 7,17 – 7,24 (m, 2H), 7,50 – 7,56 (m, 1H), 7,79 (d, 1H), 8,61 – 8,63 (m, 2H), 9,92 (s a, 1H).
I-1-101	HPLC-EM: logP = 2,41; masa (m/z): 338,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,01 (s, 3H) 3,02 – 3,04 (m, 2H), 4,26 – 4,28 (m, 2H), 6,79 (d, 1H), 7,34 – 7,39 (m, 2H), 7,55 – 7,61 (m, 1H), 7,99 (d, 1H), 10,40 (s, 1H).
I-1-102	HPLC-EM: logP = 2,56; masa (m/z): 391,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,23 – 3,25 (m, 2H), 4,36 – 4,39 (m, 2H), 6,78 (d, 1H), 7,34 – 7,40 (m, 2H), 7,56 – 7,63 (m, 1H), 8,03 (d, 1H), 11,38 (s, 1H).
I-1-103	HPLC-EM: logP = 2,64; masa (m/z): 320,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,53 (s, 3H), 6,95 (d, 1H), 6,98 – 7,00 (m, 1H), 7,17 – 7,22 (m, 2H), 7,47 – 7,54 (m, 2H), 7,73 (d, 1H), 8,72 (s a, 1H).
I-1-104	HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 431,8 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,96 (d, 1H), 7,18 – 7,23 (m, 2H), 7,26 – 7,27 (m, 1H), 7,48 – 7,55 (m, 1H), 7,61 – 7,63 (m, 1H), 7,76 (d, 1H), 9,23 (s a, 1H).
I-1-105	HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 431,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,16 – 7,22 (m, 2H), 7,25 – 7,27 (m, 1H), 7,47 – 7,55 (m, 1H), 7,63 – 7,64 (m, 1H), 7,75 (d, 1H), 9,12 (s a, 1H).
I-1-106	HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 355,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,43 (s, 3H), 6,92 (d, 1H), 7,29 – 7,55 (m, 3H), 7,58 – 7,65 (m, 1H), 8,10 (d, 1H), 11,39 (s, 1H).
I-1-107	HPLC-EM: logP = 1,71; masa (m/z): 318,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,41 (s, 3H), 3,80 (s, 3H), 6,96 (d, 1H), 7,16 – 7,22 (m, 2H), 7,48 – 7,53 (m, 1H), 7,70 (d, 1H), 7,96 (s, 1H), 8,69 (s a, 1H).
I-1-108	HPLC-EM: logP = 2,03; masa (m/z): 430,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,89 (s, 3H), 6,91 (d, 1H), 7,35 – 7,39 (m, 2H), 7,56 – 7,63 (m, 1H), 8,03 (d, 1H), 8,38 (s, 1H), 10,72 (s a, 1H).
I-1-109	HPLC-EM: logP = 1,77; masa (m/z): 332,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,25 (s, 3H), 2,36 (s, 3H), 3,67 (s, 3H), 6,88 (d, 1H), 7,35 – 7,39 (m, 2H), 7,55 – 7,63 (m, 1H), 8,00 (d, 1H), 10,22 (s a, 1H).

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-110 HPLC-EM: logP = 1,98; masa (m/z): 336,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,36 (s, 3H), 3,65 (s, 3H), 6,93 (d, 1H), 7,15 – 7,21 (m, 2H), 7,46 – 7,53 (m, 1H), 7,71 – 7,72 (m, 1H), 8,41 (s a, 1H).
I-1-111 HPLC-EM: logP = 2,40; masa (m/z): 340,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,93 (d, 1H), 7,37 – 7,41 (m, 3H), 7,58 – 7,65 (m, 1H), 7,93 (d, 1H), 8,11 (d, 1H), 8,32 (t, 1H), 11,57 (s, 1H).
I-1-112 HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 390,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,85 (s, 3H), 6,87 (d, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 2H), 7,57 – 7,64 (m, 1H), 8,06 (d, 1H), 11,09 (s, 1H).
I-1-113 HPLC-EM: logP = 2,09; masa (m/z): 335,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,60 (s, 3H), 2,64 (s, 3H), 6,93 (d, 1H), 7,15 – 7,21 (m, 2H), 7,46 – 7,54 (m, 1H), 7,73 – 7,74 (m, 1H), 8,91 (s a, 1H).
I-1-114 HPLC-EM: logP = 2,58; masa (m/z): 389,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 2,73 (s, 3H), 6,92 – 6,93 (m, 1H), 7,17 – 7,22 (m, 2H), 7,48 – 7,55 (m, 1H), 7,75 – 7,76 (m, 1H), 9,42 (s a, 1H).
I-1-115 HPLC-EM: logP = 3,33; masa (m/z): 374,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,92 (d, 1H), 7,37 – 7,42 (m, 2H), 7,58 – 7,65 (m, 1H), 8,12 (d, 1H), 11,65 (s, 1H).
I-1-116 HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 306,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,55 (s, 3H) 6,92 (d, 1H), 7,36 – 7,42 (m, 2H), 7,58 – 7,66 (m, 1H), 8,12 (d, 1H), 11,79 (s, 1H).
I-1-117 ver el Ejemplo de síntesis 5
I-1-118 HPLC-EM: logP = 3,36; masa (m/z): 366,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,00 (d, 1H), 7,41 – 7,44 (m, 2H), 7,46 – 7,52 (m, 2H), 7,56 – 7,60 (m, 3H), 7,95 (d, 1H), 9,27 (s a, 1H).
I-1-119 HPLC-EM: logP = 3,40; masa (m/z): 409,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,00 (d, 1H), 7,38 – 7,48 (m, 3H), 7,55 – 7,58 (m, 2H), 7,60 – 7,61 (m, 1H), 7,68 – 7,70 (m, 1H), 7,95 (d, 1H), 9,22 (s a, 1H).
I-1-120 HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 399,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,46 – 7,50 (m, 1H), 7,56 – 7,58 (m, 1H), 7,65 – 7,74 (m, 1H), 7,80 – 7,82 (m, 1H), 9,30 (s a, 1H).
I-1-121 HPLC-EM: logP = 2,84; masa (m/z): 366,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,00 (d, 1H), 7,40 – 7,52 (m, 4H), 7,56 – 7,61 (m, 3H), 7,66 (d, 1H), 9,25 (s a, 1H).
I-1-122 HPLC-EM: logP = 2,88; masa (m/z): 410,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,38 – 7,41 (m, 1H), 7,44 – 7,50 (m, 2H), 7,55 – 7,58 (m, 3H), 7,66 – 7,69 (m, 2H), 9,18 (s a, 1H).
I-1-123 ver el Ejemplo de síntesis 8
I-1-124 HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 401,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,97 (d, 1H), 7,47 – 7,51 (m, 1H), 7,57 – 7,59 (m, 2H), 7,67 (d, 1H), 7,70 – 7,73 (m, 1H), 8,08 – 8,10 (m, 1H), 8,80 – 8,82 (m, 1H), 9,36 (s a, 1H).
I-1-125 HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 343,0 (M+H) ⁺ ; ¹ H- RMN [DMSO-D ₆] 6,96 (d, 1H), 7,39 – 7,55 (m, 4H), 7,61 – 7,65 (m, 1H), 7,79 – 7,86 (m, 2H), 8,00 – 8,03 (m, 1H), 8,24 – 8,26 (m, 1H), 11,26 (s, 1H).
I-1-126 HPLC-EM: logP = 1,96; masa (m/z): 376,1 (M+H) ⁺ ; ¹ H- RMN [DMSO-D ₆] 2,54 (s, 3H), 6,88 (d, 1H), 7,43 – 7,65 (m, 5H), 7,72 – 7,77 (m, 1H), 7,86 – 7,90 (m, 1H), 8,05 (d, 1H), 8,10 – 8,12 (m, 1H), 11,20 (s, 1H).

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°	Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-127	HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 343,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,00 (d, 1H), 7,24 – 7,26 (m, 1H), 7,38 – 7,41 (m, 1H), 7,46 – 7,48 (m, 1H), 7,56 – 7,57 (m, 1H), 7,69 – 7,70 (m, 1H), 7,77 – 7,79 (m, 1H), 7,88 – 7,90 (m, 1H), 8,41 – 8,42 (m, 1H), 8,52 (d, 1H), 9,24 (s a, 1H).
I-1-128	HPLC-EM: logP = 2,24; masa (m/z): 351,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,03 (d, 1H), 7,33 – 7,37 (m, 1H), 7,60 – 7,77 (m, 5H), 8,27 – 8,30 (m, 2H), 9,53 (s a, 1H).
I-1-129	HPLC-EM: logP = 2,05; masa (m/z): 317,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,06 (d, 1H), 7,34 – 7,38 (m, 2H), 7,40 – 7,47 (m, 2H), 7,55 – 7,57 (m, 1H), 7,69 – 7,74 (m, 1H), 8,28 – 8,31 (m, 2H), 9,54 (s a, 1H).
I-1-130	HPLC-EM: logP = 2,12; masa (m/z): 361,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,05 (d, 1H), 7,32 – 7,42 (m, 3H), 7,50 – 7,53 (m, 1H), 7,62 – 7,64 (m, 1H), 7,69 – 7,74 (m, 1H), 8,28 – 8,31 (m, 2H), 9,45 (s a, 1H).
I-1-131	HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 409,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,05 (d, 1H), 7,15 – 7,20 (m, 1H), 7,34 – 7,38 (m, 1H), 7,42 – 7,49 (m, 2H), 7,70 – 7,75 (m, 1H), 7,90 – 7,92 (m, 1H), 8,29 – 8,31 (m, 2H), 9,40 (s a, 1H).
I-1-132	HPLC-EM: logP = 1,99; masa (m/z): 319,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,03 – 7,07 (m, 3H), 7,35 – 7,39 (m, 1H), 7,45 – 7,52 (m, 1H), 7,70 – 7,75 (m, 1H), 8,28 – 8,31 (m, 2H), 9,62 (s a, 1H).
I-1-133	HPLC-EM: logP = 1,83; masa (m/z): 352,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,36 – 7,40 (m, 1H), 7,69 – 7,75 (m, 2H), 8,07 – 8,09 (m, 1H), 8,30 – 8,31 (m, 2H), 8,79 – 8,80 (m, 1H), 9,52 (s a, 1H).
I-1-134	HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 525,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,61 (d, 1H), 7,40 – 7,45 (m, 1H), 7,62 – 7,65 (m, 2H), 7,70 – 7,75 (m, 1H), 8,07 – 8,09 (m, 2H), 8,21 (d, 1H), 8,26 – 8,28 (m, 1H), 8,73 – 8,81 (m, 2H).
I-1-135	HPLC-EM: logP = 2,41; masa (m/z): 367,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 (d, 1H), 7,37 – 7,43 (m, 1H), 7,63 – 7,72 (m, 3H), 7,78 – 7,80 (m, 1H), 7,98 – 8,01 (m, 1H), 8,10 (d, 1H), 8,43 – 8,45 (m, 1H), 9,44 (s a, 1H).
I-1-136	HPLC-EM: logP = 2,21; masa (m/z): 333,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,38 – 7,51 (m, 4H), 7,58 – 7,60 (m, 1H), 7,99 – 8,02 (m, 1H), 8,10 (d, 1H), 8,44 – 8,45 (m, 1H), 9,31 (s a, 1H).
I-1-137	HPLC-EM: logP = 2,23; masa (m/z): 376,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,95 (d, 1H), 7,38 – 7,42 (m, 1H), 7,45 – 7,49 (m, 1H), 7,52 – 7,55 (m, 2H), 7,68 – 7,70 (m, 1H), 8,19 – 8,22 (m, 1H), 8,26 (d, 1H), 8,52 – 8,53 (m, 1H), 11,28 (s a, 1H).
I-1-138	HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 424,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,01 (d, 1H), 7,18 – 7,22 (m, 1H), 7,38 – 7,41 (m, 1H), 7,45 – 7,51 (m, 2H), 7,92 – 7,94 (m, 1H), 8,00 – 8,02 (m, 1H), 8,11 (d, 1H), 8,44 – 8,46 (m, 1H), 9,29 (s a, 1H).
I-1-139	ver el Ejemplo de síntesis 11
I-1-140	
I-1-141	HPLC-EM: logP = 2,48; masa (m/z): 369,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,03 (d, 1H), 7,62 – 7,70 (m, 4H), 7,77 – 7,79 (m, 1H), 8,20 (d, 1H), 8,25 (d, 1H), 9,47 (s a, 1H).
I-1-142	HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 495,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,70 – 7,91 (m, 5H), 8,30 (s, 1H), 8,37 (s, 1H), 8,65 (s a, 1H).
I-1-143	HPLC-EM: logP = 2,97; masa (m/z): 411,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,31 (s, 3H), 6,67 (d, 1H), 7,59 – 7,70 (m, 3H), 7,76 – 7,78 (m, 1H), 8,25 – 8,30 (m, 1H), 8,38 (d, 1H), 8,49 (d, 1H).
I-1-144	HPLC-EM: logP = 2,32; masa (m/z): 335,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,06 (d, 1H), 7,34 – 7,38 (m, 1H), 7,40 – 7,47 (m, 2H), 7,54 – 7,56 (m, 1H), 7,62 – 7,67 (m, 1H), 8,21 (d, 1H), 8,25 (d, 1H), 9,55 (s a, 1H).

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-144
HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 378,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,05 (d, 1H), 7,34 – 7,38 (m, 1H), 7,41 – 7,45 (m, 1H), 7,52 – 7,54 (m, 1H), 7,64 – 7,69 (m, 2H), 8,21 (d, 1H), 8,26 (d, 1H), 9,42 (s a, 1H).
I-1-145
HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 426,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,05 (d, 1H), 7,15 – 7,19 (m, 1H), 7,42 – 7,48 (m, 2H), 7,64 – 7,69 (m, 1H), 7,89 – 7,91 (m, 1H), 8,22 (d, 1H), 8,26 (d, 1H), 9,42 (s a, 1H).
I-1-146
ver el Ejemplo de síntesis 9
I-1-147
HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 346,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,98 (d, 1H), 7,72 – 7,77 (m, 2H), 7,83 – 7,87 (m, 1H), 8,12 – 8,14 (m, 1H), 8,23 – 8,28 (m, 1H), 8,36 – 8,37 (m, 1H), 8,48 (d, 1H), 11,58 (s, 1H).
I-1-148
HPLC-EM: logP = 2,48; masa (m/z): 317,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,96 – 7,03 (m, 3H), 7,44 – 7,48 (m, 1H), 8,06 – 8,09 (m, 1H), 8,25 – 8,30 (m, 1H), 8,35 – 8,36 (m, 1H), 8,49 (d, 1H), 11,08 (s, 1H), 11,89 (s, 1H).
I-1-149
HPLC-EM: logP = 2,98; masa (m/z): 401,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,95 (d, 1H), 7,62 – 7,68 (m, 2H), 7,75 – 7,81 (m, 2H), 8,23 – 8,29 (m, 1H), 8,36 (d, 1H), 8,48 – 8,49 (m, 1H), 11,46 (s, 1H).
I-1-150
HPLC-EM: logP = 1,47; masa (m/z): 368,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,84 (d, 1H), 7,58 – 7,60 (m, 1H), 7,65 – 7,70 (m, 3H), 8,11 (s, 1H), 8,19 – 8,27 (m, 2H), 8,44 (d, 1H), 8,88 (s, 1H), 11,22 (s, 1H).
I-1-151
HPLC-EM: logP = 2,02; masa (m/z): 370,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 6,99 – 7,02 (m, 1H), 7,65 – 7,73 (m, 2H), 8,08 – 8,10 (m, 1H), 8,22 – 8,28 (m, 2H), 8,80 – 8,82 (m, 1H), 9,44 (s a, 1H).
I-1-152
HPLC-EM: logP = 1,72; masa (m/z): 336,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,04 (d, 1H), 7,43 – 7,46 (m, 1H), 7,65 – 7,70 (m, 1H), 7,97 – 7,99 (m, 1H), 8,22 (d, 1H), 8,27 (d, 1H), 8,48 – 8,49 (m, 1H), 9,40 (s a, 1H).
I-1-153
HPLC-EM: logP = 1,96; masa (m/z): 369,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,97 (d, 1H), 7,77 (d, 1H), 8,24 – 8,29 (m, 1H), 8,37 – 8,38 (m, 1H), 8,49 (d, 1H), 8,99 (d, 1H), 9,07 (s, 1H), 11,70 (s, 1H).
I-1-154
HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 370,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,99 (d, 1H), 8,24 – 8,30 (m, 1H), 8,40 – 8,41 (m, 1H), 8,49 (d, 1H), 9,39 (s, 1H), 9,56 (s, 1H), 11,80 (s, 1H).
I-1-155
HPLC-EM: logP = 2,35; masa (m/z): 392,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,23 – 3,26 (m, 2H), 4,37 – 4,39 (m, 2H), 6,83 (d, 1H), 8,23 – 8,29 (m, 1H), 8,32 (d, 1H), 8,47 (d, 1H), 11,51 (s, 1H).
I-1-156
HPLC-EM: logP = 2,31; masa (m/z): 371,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,70 (s, 3H), 6,95 (d, 1H), 7,40 (d, 1H), 7,85 (d, 1H), 8,22 – 8,29 (m, 2H), 8,47 (d, 1H), 10,71 (s, 1H).
I-1-157
HPLC-EM: logP = 2,33; masa (m/z): 356,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,42 (s, 3H), 6,96 (d, 1H), 7,42 (t, 1H), 8,24 – 8,30 (m, 1H), 8,37 (d, 1H), 8,48 – 8,49 (m, 1H), 11,51 (s, 1H).
I-1-158
HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 391,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,86 (s, 3H), 6,92 (d, 1H), 8,24 – 8,29 (m, 1H), 8,35 (d, 1H), 8,47 – 8,48 (m, 1H), 11,21 (s, 1H).
I-1-159
HPLC-EM: logP = 3,06; masa (m/z): 375,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 6,96 (d, 1H), 8,25 – 8,30 (m, 1H), 8,39 (d, 1H), 8,49 (d, 1H), 11,78 (s, 1H).
I-1-160
HPLC-EM: logP = 1,91; masa (m/z): 323,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 2,83 (s, 3H), 6,99 (d, 1H), 8,25 – 8,30 (m, 1H), 8,37 – 8,38 (m, 1H), 8,49 (d, 1H), 11,82 (s, 1H).

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°	Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-161	HPLC-EM: logP = 2,75; masa (m/z): 426,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,08 (d, 1H), 7,20 – 7,25 (m, 1H), 7,41 – 7,50 (m, 2H), 7,93 – 7,98 (m, 2H), 8,06 – 8,11 (m, 1H), 8,16 – 8,17 (m, 1H), 9,31 (s, 1H).
I-1-162	HPLC-EM: logP = 2,78; masa (m/z): 387,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,00 (d, 1H), 7,68 – 7,72 (m, 2H), 7,75 – 7,77 (m, 1H), 7,82 – 7,84 (m, 1H), 8,33 (d, 1H), 8,55 – 8,61 (m, 1H), 11,51 (s, 1H).
I-1-163	HPLC-EM: logP = 2,64; masa (m/z): 353,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,02 (d, 1H), 7,41 – 7,58 (m, 4H), 8,33 (d, 1H), 8,55 – 8,61 (m, 1H), 11,43 (s, 1H).
I-1-164	ver el Ejemplo de síntesis 10
I-1-165	HPLC-EM: logP = 3,04; masa (m/z): 445,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,02 (d, 1H), 7,18 – 7,24 (m, 1H), 7,46 – 7,50 (m, 2H), 7,90 – 7,92 (m, 1H), 8,32 (d, 1H), 8,55 – 8,61 (m, 1H), 11,35 (s, 1H).
I-1-166	HPLC-EM: logP = 2,51; masa (m/z): 355,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,01 (d, 1H), 7,18 – 7,25 (m, 2H), 7,54 – 7,62 (m, 1H), 8,35 (d, 1H), 8,56 – 8,62 (m, 1H), 11,74 (s, 1H).
I-1-167	HPLC-EM: logP = 3,88; masa (m/z): 388,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,00 (d, 1H), 7,80 – 7,84 (m, 1H), 8,00 – 8,01 (m, 1H), 8,19 – 8,22 (m, 1H), 8,34 – 8,35 (m, 1H), 8,39 – 8,45 (m, 1H), 8,56 – 8,62 (m, 1H), 8,84 (d, 1H), 11,68 (s, 1H).
I-1-168	HPLC-EM: logP = 1,72; masa (m/z): 344,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,02 (d, 1H), 7,42 – 7,58 (m, 4H), 7,70 – 7,75 (m, 1H), 8,64 (d, 1H), 8,84 (d, 2H), 11,44 (s a, 1H).
I-1-169	ver el Ejemplo de síntesis 12
I-1-170	HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 379,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,14 (d, 1H), 7,33 – 7,50 (m, 2H), 7,54 – 7,57 (m, 1H), 7,69 – 7,71 (m, 1H), 8,64 – 8,67 (m, 2H), 11,59 (s, 1H).
I-1-171	HPLC-EM: logP = 2,29; masa (m/z): 338,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,12 (d, 1H), 7,20 – 7,26 (m, 2H), 7,55 – 7,63 (m, 1H), 8,66 – 8,69 (m, 2H), 11,91 (s, 1H).
I-1-173	HPLC-EM: logP = 2,24; masa (m/z): 352,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,06 (d, 1H), 7,69 – 7,72 (m, 2H), 7,75 – 7,77 (m, 1H), 7,82 – 7,84 (m, 1H), 8,30 – 8,33 (m, 1H), 8,51 (d, 1H), 8,53 – 8,56 (m, 1H), 11,57 (s, 1H).
I-1-174	ver Ejemplo de síntesis 10d
I-1-175	HPLC-EM: logP = 2,09; masa (m/z): 362,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,08 (d, 1H), 7,39 – 7,43 (m, 1H), 7,46 – 7,49 (m, 1H), 7,54 – 7,56 (m, 1H), 7,69 – 7,71 (m, 1H), 8,30 – 8,31 (m, 1H), 8,51 (d, 1H), 8,54 – 8,55 (m, 1H), 11,47 (s, 1H).
I-1-176	HPLC-EM: logP = 2,18; masa (m/z): 409,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,08 (d, 1H), 7,20 – 7,25 (m, 1H), 7,47 – 7,51 (m, 2H), 7,91 – 7,93 (m, 1H), 8,30 – 8,31 (m, 1H), 8,51 (d, 1H), 8,54 – 8,55 (m, 1H), 11,41 (s, 1H).
I-1-177	HPLC-EM: logP = 1,94; masa (m/z): 320,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,06 (d, 1H), 7,20 – 7,25 (m, 2H), 7,54 – 7,62 (m, 1H), 8,31 – 8,32 (m, 1H), 8,53 – 8,56 (m, 2H), 11,80 (s, 1H).
I-1-178	HPLC-EM: logP = 1,77; masa (m/z): 353,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,06 (d, 1H), 7,81 – 7,84 (m, 1H), 8,20 – 8,22 (m, 1H), 8,31 – 8,32 (m, 1H), 8,53 – 8,56 (m, 1H), 8,84 – 8,85 (m, 1H), 11,74 (s, 1H).

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-179:
<p>HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 410,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,261(2,7);8,123(1,6);8,119(1,7);8,103(1,9);8,099(1,9);8,057(3,3);8,051(3,2);7,901(0,7);7,897(0,8);7,881(1,7);7,878(1,6);7,862(2,3);7,859(2,4);7,841(1,7);7,808(0,5);7,790(1,5);7,771(1,3);7,766(1,5);7,763(1,3);7,746(1,8);7,743(1,8);7,732(1,2);7,727(1,2);7,724(1,0);7,713(1,5);7,705(1,9);7,694(0,6);7,686(1,2);7,656(2,0);7,653(1,9);7,636(1,6);7,633(1,6);6,861(3,5);6,855(3,5);3,456(16,0);3,324(82,6);2,675(0,4);2,670(0,5);2,666(0,4);2,540(55,9);2,523(1,6);2,510(30,5);2,506(59,9);2,501(77,4);2,496(54,9);2,492(25,8);2,332(0,4);2,328(0,5);2,323(0,4);2,074(0,5);0,008(0,6);0,000(15,6);-0,009(0,5)</p>
I-1-180:
<p>HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 411,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,337(2,8);8,938(1,5);8,928(1,5);8,390(1,5);8,372(1,6);8,129(1,6);8,125(1,7);8,109(1,9);8,105(1,9);8,074(3,3);8,067(3,2);7,908(0,7);7,904(0,8);7,889(1,7);7,885(1,7);7,870(1,2);7,866(1,1);7,821(1,0);7,808(1,1);7,801(1,0);7,778(1,0);7,776(1,2);7,773(1,3);7,757(1,7);7,754(1,8);7,738(0,9);7,735(0,8);7,669(2,0);7,667(2,0);7,650(1,8);7,647(1,7);6,871(3,5);6,865(3,5);3,461(16,0);3,332(224,0);2,995(0,4);2,711(0,6);2,675(0,5);2,671(0,6);2,666(0,5);2,541(14,2);2,524(1,9);2,519(2,9);2,511(34,6);2,506(68,5);2,502(89,3);2,497(64,4);2,493(31,2);2,367(0,6);2,333(0,4);2,329(0,6);2,324(0,4);2,074(1,0);0,008(0,4);0,000(9,8)</p>
I-1-181:
<p>HPLC-EM: logP = 1,86; masa (m/z): 378,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,465(2,7);8,125(1,6);8,122(1,7);8,106(1,9);8,102(1,9);8,075(3,2);8,069(3,2);7,907(0,7);7,903(0,8);7,887(1,7);7,884(1,7);7,868(1,2);7,864(1,2);7,776(1,2);7,773(1,3);7,756(1,7);7,754(1,8);7,737(0,9);7,734(0,8);7,656(2,0);7,639(1,8);7,636(1,7);7,631(0,5);7,614(0,7);7,609(0,7);7,593(1,3);7,576(0,7);7,572(0,8);7,555(0,4);7,274(0,5);7,268(2,3);7,248(3,3);7,227(2,0);7,220(0,4);6,870(3,5);6,864(3,5);3,456(16,0);3,367(0,7);3,334(243,8);3,303(0,7);3,289(0,3);2,995(0,5);2,711(0,6);2,675(0,4);2,671(0,5);2,666(0,4);2,541(168,5);2,524(2,6);2,511(32,7);2,506(63,5);2,502(82,5);2,497(60,3);2,493(30,1);2,368(0,6);2,333(0,4);2,328(0,5);2,324(0,4);2,074(0,7);0,000(1,9)</p>
I-1-182:
<p>HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 422,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,188(2,9);8,121(1,7);8,118(1,8);8,101(1,9);8,098(1,9);8,056(3,3);8,050(3,3);7,900(0,8);7,896(0,8);7,881(1,7);7,877(1,7);7,862(1,2);7,858(1,1);7,764(1,2);7,761(1,3);7,744(1,8);7,741(1,9);7,725(2,6);7,707(2,1);7,705(2,0);7,651(2,0);7,648(2,0);7,631(1,8);7,629(1,6);7,566(1,1);7,561(1,3);7,547(2,1);7,543(2,1);7,512(1,0);7,509(1,1);7,493(2,0);7,490(1,9);7,475(1,0);7,472(0,9);7,442(1,3);7,437(1,3);7,423(1,5);7,418(1,5);7,404(0,7);7,399(0,7);6,882(3,5);6,876(3,5);3,475(16,0);3,327(122,0);2,675(0,3);2,670(0,5);2,666(0,3);2,541(54,6);2,524(1,5);2,519(2,3);2,510(28,0);2,506(55,8);2,501(72,8);2,497(52,0);2,492(24,5);2,332(0,3);2,328(0,5);2,323(0,3);2,074(0,5);0,000(6,9)</p>
I-1-183:
<p>HPLC-EM: logP = 2,64; masa (m/z): 384,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 6,93 (d, 1H), 7,67 – 7,84 (m, 4H), 8,20 (d, 1H), 8,40 – 8,42 (m, 1H), 8,61 – 8,62 (m, 1H), 11,37 (s, 1H).</p>
I-1-184:
<p>HPLC-EM: logP = 2,10; masa (m/z): 468,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,129(3,2);8,122(1,8);8,118(1,8);8,102(2,0);8,099(2,0);8,055(3,3);8,048(3,3);7,945(2,2);7,925(2,5);7,900(0,8);7,896(0,8);7,881(1,8);7,877(1,7);7,861(1,3);7,858(1,1);7,763(1,3);7,760(1,3);7,743(2,0);7,741(2,0);7,724(0,9);7,721(0,9);7,656(2,2);7,637(1,9);7,522(0,5);7,503(1,8);7,485(4,3);7,471(0,7);7,251(1,0);7,244(1,0);7,234(1,1);7,231(1,2);7,224(1,0);7,215(0,9);7,208(0,8);6,880(3,4);6,874(3,4);3,482(16,0);3,335(303,3);2,675(0,5);2,671(0,6);2,666(0,5);2,541(52,4);2,524(2,5);2,511(38,8);2,506(74,3);2,502(95,3);2,497(68,5);2,493(33,2);2,333(0,5);2,329(0,6);2,324(0,4);2,074(0,8);0,000(2,6)</p>
I-1-185:
<p>HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 364,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,164(2,5);8,315(0,6);7,941(1,2);7,938(1,2);7,921(1,4);7,918(1,4);7,901(2,0);7,895(1,9);7,860(0,5);7,841(1,3);7,822(0,9);7,730(0,9);7,711(1,3);7,691(0,5);7,644(1,6);7,624(1,3);6,857(3,0);6,850(3,0);5,756(0,5);3,667(14,4);3,321(243,6);2,689(0,7);2,680(0,7);2,675(1,5);2,670(2,1);2,666(1,4);2,661(0,7);2,524(6,3);2,519(10,2);2,510(112,4);2,506(224,0);2,501(294,8);2,497(210,2);2,492(98,1);2,360(15,9);2,337(0,8);2,333(1,5);2,328(2,0);2,324(1,4);2,319(0,7);2,258(16,0);1,259(0,5);1,235(0,4);0,146(0,7);0,008(6,5);0,000(180,4);-0,009(5,4);-0,150(0,7)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-186:
<p>HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 411,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,178(12,3);7,967(10,7);7,961(10,7);7,945(6,5);7,927(7,4);7,925(7,5);7,868(2,8);7,866(2,8);7,848(6,7);7,829(4,5);7,740(4,7);7,721(7,0);7,699(9,7);7,696(8,7);7,679(9,4);7,676(9,2);7,655(8,3);7,635(6,8);7,547(5,6);7,542(6,3);7,528(9,4);7,524(9,6);7,482(4,4);7,479(4,7);7,463(9,2);7,460(8,8);7,445(5,1);7,442(4,7);7,430(0,3);7,427(0,3);7,416(6,1);7,411(6,1);7,396(7,1);7,392(7,0);7,377(3,4);7,373(3,1);6,917(16,0);6,910(15,8);5,756(9,8);4,038(0,7);4,020(0,7);3,325(10,8);2,675(0,6);2,670(0,8);2,666(0,6);2,524(2,6);2,510(44,5);2,506(89,2);2,501(117,8);2,497(85,2);2,492(40,8);2,333(0,6);2,328(0,8);2,323(0,6);1,989(3,2);1,397(2,1);1,336(1,4);1,299(0,4);1,259(0,6);1,250(1,8);1,235(0,6);1,192(0,9);1,175(1,8);1,159(0,7);1,157(1,0);0,991(0,6);0,008(2,1);0,000(59,3);-0,009(1,9)</p>
I-1-187:
<p>HPLC-EM: logP = 3,41; masa (m/z): 411,9(M+H)⁺; RMN de ¹H (601,6 MHz, CD₃CN): δ= 9,253(3,0);9,237(0,9);7,894(11,2);7,889(11,3);7,685(6,3);7,684(6,5);7,672(7,6);7,669(13,4);7,665(12,6);7,624(0,4);7,623(0,4);7,612(0,5);7,610(0,5);7,553(5,4);7,550(5,7);7,541(7,1);7,538(7,4);7,532(0,4);7,520(9,4);7,506(16,0);7,470(10,6);7,468(5,7);7,466(13,4);7,456(13,7);7,454(9,0);7,452(6,7);7,443(4,4);7,441(4,2);7,415(0,5);7,413(0,5);7,400(5,0);7,397(4,9);7,387(5,8);7,384(5,7);7,374(3,3);7,371(3,2);7,302(0,4);7,277(0,4);6,987(12,3);6,983(12,1);2,185(0,7);2,183(0,9);2,174(405,2);2,056(0,4);2,052(0,6);2,048(0,4);1,973(1,1);1,966(3,4);1,958(2,7);1,954(3,3);1,950(35,9);1,946(67,5);1,942(102,0);1,938(69,7);1,934(34,2);1,929(1,0);1,925(0,4);1,831(0,4);1,827(0,6);1,823(0,4);1,436(14,3);1,268(0,4);1,216(1,3);1,204(2,5);1,192(1,2);1,029(1,1);1,017(2,2);1,005(1,1);0,005(0,8);0,000(27,7);-0,006(0,7)</p>
I-1-188:
<p>HPLC-EM: logP = 3,38; masa (m/z): 366,0(M+H)⁺; RMN de ¹H (601,6 MHz, CD₃CN): δ= 9,307(3,0);9,242(0,4);7,891(11,4);7,886(11,5);7,663(11,7);7,660(12,1);7,590(5,4);7,588(5,6);7,578(6,5);7,575(6,6);7,514(9,2);7,509(3,8);7,507(4,4);7,500(16,0);7,496(8,8);7,494(8,8);7,482(4,6);7,479(4,6);7,470(6,7);7,465(12,1);7,462(9,7);7,456(3,8);7,454(3,8);7,451(5,9);7,447(5,7);7,443(0,5);7,441(0,4);7,421(5,2);7,419(5,1);7,409(7,1);7,407(6,9);7,402(0,6);7,396(3,1);7,394(3,0);7,390(0,4);7,386(0,4);6,990(12,1);6,986(12,0);5,449(8,5);2,189(0,5);2,177(2,17);2,052(0,4);1,973(1,0);1,966(2,3);1,958(1,8);1,954(2,3);1,950(24,2);1,946(44,6);1,942(67,1);1,938(46,0);1,934(22,7);1,929(0,6);1,827(0,4);1,435(1,7);1,266(0,4);1,215(0,4);1,210(0,7);1,203(0,6);1,198(1,4);1,191(0,3);1,186(0,7);1,024(0,7);1,012(1,4);1,000(0,7);0,005(0,5);0,000(17,8);-0,006(0,5)</p>
I-1-189:
<p>HPLC-EM: logP = 3,01; masa (m/z): 334,0(M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,336(3,6);8,042(7,0);8,036(12,5);8,030(7,0);7,598(6,8);7,596(6,9);7,580(10,1);7,576(11,3);7,567(3,0);7,559(6,2);7,543(2,7);7,539(4,2);7,534(2,6);7,516(2,9);7,512(4,1);7,496(12,1);7,492(16,0);7,487(8,4);7,473(10,4);7,469(9,4);7,453(4,5);7,449(4,1);7,429(8,0);7,424(7,2);7,410(8,8);7,406(8,5);7,392(4,1);7,388(3,8);7,294(1,5);7,280(2,0);7,273(4,9);7,270(5,0);7,262(5,7);7,259(6,1);7,254(13,3);7,246(4,5);7,238(8,6);7,232(4,9);7,225(2,3);7,221(4,3);7,216(4,5);7,200(1,6);7,195(1,3);7,042(12,4);7,035(12,2);5,447(1,9);2,155(42,5);1,964(1,9);1,958(2,5);1,952(17,5);1,946(32,4);1,940(45,1);1,934(31,1);1,927(16,0);1,376(0,5);1,372(1,2);1,339(0,5);1,284(0,7);1,276(1,4);1,263(0,6);0,008(1,6);0,000(42,7);-0,009(1,3)</p>
I-1-190:
<p>HPLC-EM: logP = 3,09; masa (m/z): 425,9(M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,255(8,9);8,316(1,2);8,233(4,7);8,226(8,6);8,220(4,6);8,202(0,4);8,196(0,3);7,927(6,7);7,907(7,5);7,612(2,3);7,595(3,8);7,591(4,0);7,574(2,6);7,503(1,2);7,483(6,9);7,476(9,7);7,469(16,0);7,458(4,5);7,441(2,3);7,437(2,8);7,433(2,8);7,415(1,7);7,411(1,6);7,392(1,8);7,388(1,9);7,372(3,3);7,367(2,8);7,357(2,5);7,353(2,9);7,336(0,9);7,332(1,0);7,250(0,5);7,237(3,0);7,230(3,1);7,222(3,1);7,217(3,7);7,215(3,6);7,210(2,9);7,203(2,7);7,195(2,3);6,989(9,2);6,983(8,9);4,027(0,3);4,008(0,3);3,322(248,2);2,943(0,5);2,675(2,7);2,671(3,6);2,666(2,7);2,607(0,4);2,541(3,1);2,506(397,8);2,502(510,3);2,497(379,1);2,333(2,6);2,328(3,5);2,324(2,6);1,989(0,7);1,398(12,3);1,257(0,4);1,239(0,8);1,222(0,4);1,175(0,4);0,000(37,9);-0,008(1,8)</p>
I-1-191:
<p>HPLC-EM: logP = 4,04; masa (m/z): 386,1(M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,402(13,3);8,316(0,4);8,187(7,5);8,181(14,2);8,174(7,3);7,937(2,9);7,918(3,2);7,909(5,4);7,891(6,2);7,882(3,9);7,875(5,0);7,866(4,6);7,856(3,8);7,844(8,7);7,823(9,8);7,790(2,7);7,771(7,5);7,753(6,4);7,719(5,7);7,700(7,2);7,684(11,0);7,666(6,2);6,951(16,0);6,944(15,9);3,384(0,5);3,333(420,8);3,299(0,5);2,677(0,9);2,672(1,2);2,668(0,8);2,542(49,0);2,525(5,4);2,512(74,4);2,507(143,2);2,503(184,3);2,498(132,1);2,494(64,5);2,334(0,9);2,329(1,1);2,325(0,8);1,234(0,5);0,000(0,4)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-192:
<p>HPLC-EM: logP = 3,42; masa (m/z): 387,1(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,569(10,2);8,852(5,8);8,842(5,8);8,315(0,4);8,200(16,0);8,194(6,4);8,182(6,2);7,941(2,1);7,923(2,4);7,913(4,0);7,896(4,4);7,882(3,9);7,872(3,0);7,868(2,9);7,861(2,7);7,853(3,7);7,845(5,3);7,833(6,9);7,825(4,7);7,813(4,4);6,956(12,5);6,950(12,4);3,386(0,3);3,332(293,6);2,676(0,7);2,672(1,0);2,667(0,7);2,542(30,9);2,525(3,6);2,512(68,7);2,507(129,8);2,503(163,2);2,498(115,5);2,494(55,1);2,338(0,4);2,334(0,8);2,330(1,0);2,325(0,7);1,235(0,5);0,000(0,5)</p>
I-1-193:
<p>HPLC-EM: logP = 3,73; masa (m/z): 354,0(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,618(12,2);8,316(0,4);8,204(7,1);8,197(13,3);8,191(6,9);7,940(2,6);7,922(3,0);7,912(5,9);7,894(6,2);7,885(4,5);7,867(4,3);7,862(4,5);7,842(2,6);7,615(1,6);7,598(3,4);7,594(3,2);7,577(6,3);7,560(3,4);7,556(3,8);7,539(1,7);7,250(2,2);7,244(11,1);7,223(16,0);7,203(9,3);7,196(2,0);6,956(15,3);6,949(15,1);3,367(0,5);3,330(314,3);3,297(0,3);2,712(0,7);2,676(0,8);2,672(1,0);2,668(0,7);2,542(179,6);2,525(3,3);2,511(63,1);2,507(122,4);2,503(157,5);2,498(113,9);2,494(55,3);2,465(0,3);2,368(0,7);2,334(0,8);2,329(1,0);2,325(0,8);1,234(0,6);0,000(0,6)</p>
I-1-194:
<p>HPLC-EM: logP = 3,99; masa (m/z): 396,0(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,299(13,9);8,315(0,4);8,185(7,8);8,179(14,6);8,172(7,5);7,935(3,0);7,917(3,4);7,908(5,6);7,890(7,9);7,880(3,8);7,871(5,1);7,862(6,1);7,852(3,5);7,843(4,6);7,824(2,8);7,708(8,9);7,706(9,0);7,689(10,4);7,686(10,2);7,541(5,2);7,537(6,2);7,523(10,5);7,518(10,7);7,493(5,3);7,491(5,6);7,475(10,1);7,472(9,7);7,456(5,1);7,454(4,7);7,429(6,4);7,424(6,4);7,410(7,6);7,405(7,5);7,391(3,5);7,386(3,1);6,967(16,0);6,961(15,7);3,385(0,3);3,368(0,8);3,332(495,1);3,300(0,9);3,284(0,4);2,996(0,4);2,711(1,4);2,676(0,9);2,671(1,2);2,667(0,9);2,561(1,9);2,542(342,9);2,524(5,0);2,511(77,3);2,507(151,1);2,502(196,3);2,498(140,9);2,493(68,1);2,368(1,5);2,333(0,9);2,329(1,2);2,324(0,9);1,234(0,7);0,000(0,5)</p>
I-1-195:
<p>HPLC-EM: logP = 3,94; masa (m/z): 352,1(M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,314(13,5);8,315(0,4);8,187(7,7);8,180(14,2);8,174(7,3);7,936(2,9);7,918(3,3);7,908(5,5);7,891(7,1);7,881(3,8);7,873(5,0);7,864(5,6);7,853(3,5);7,845(4,6);7,825(2,7);7,573(6,8);7,569(7,4);7,555(15,1);7,551(10,7);7,537(12,1);7,535(12,5);7,517(5,4);7,513(5,6);7,499(9,3);7,494(7,7);7,479(5,0);7,474(4,1);7,453(7,5);7,450(7,2);7,435(9,2);7,432(8,9);7,417(3,4);7,413(3,1);6,970(16,0);6,964(15,7);3,384(0,5);3,331(472,9);3,313(1,8);3,301(0,6);2,996(0,4);2,712(1,6);2,676(1,0);2,671(1,4);2,667(1,0);2,662(0,5);2,594(0,4);2,584(0,5);2,562(2,3);2,542(380,9);2,511(86,0);2,507(165,9);2,502(213,6);2,498(151,8);2,493(71,8);2,368(1,6);2,334(1,0);2,329(1,4);2,325(1,0);1,234(0,7);0,000(0,5)</p>
I-1-196:
<p>HPLC-EM: logP = 4,10; masa (m/z): 444,0(M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,240(10,7);8,315(0,5);8,185(5,8);8,179(11,0);8,173(5,7);7,936(2,7);7,926(8,3);7,918(3,1);7,908(11,7);7,891(5,7);7,881(2,9);7,873(3,7);7,864(4,5);7,853(2,7);7,845(3,4);7,825(2,1);7,504(1,9);7,502(2,0);7,485(6,8);7,483(6,6);7,468(16,0);7,462(11,0);7,449(2,9);7,443(1,4);7,238(4,1);7,232(3,9);7,221(4,4);7,218(4,8);7,215(4,6);7,212(4,1);7,202(3,6);7,196(3,3);6,967(12,7);6,961(12,6);3,380(0,6);3,363(1,2);3,331(509,7);3,306(1,1);3,294(0,5);2,676(1,0);2,671(1,4);2,667(1,0);2,542(34,6);2,525(5,0);2,520(8,0);2,511(84,1);2,507(166,0);2,502(216,0);2,498(153,6);2,493(7,2,5);2,334(1,0);2,329(1,3);2,324(0,9);1,235(0,6);0,000(0,5)</p>
I-1-197:
<p>HPLC-EM: logP = 3,51; masa (m/z): 400,0(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,331(9,0);8,315(0,4);8,117(10,9);8,111(10,8);7,890(9,6);7,884(9,7);7,836(4,6);7,817(5,7);7,782(1,6);7,764(4,7);7,745(4,2);7,711(3,7);7,686(7,0);7,667(4,2);7,645(5,1);7,623(16,0);7,608(10,7);7,602(9,7);7,586(3,2);7,581(3,4);6,913(12,1);6,907(12,0);3,323(83,8);2,675(0,6);2,671(0,8);2,666(0,5);2,541(0,4);2,524(1,8);2,519(2,9);2,511(43,0);2,506(88,2);2,502(116,1);2,497(81,2);2,493(37,2);2,333(0,5);2,328(0,7);2,324(0,5);1,398(0,8);0,008(0,7);0,000(2,7);-0,009(0,6)</p>
I-1-198:
<p>HPLC-EM: logP = 3,25; masa (m/z): 368,0(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,549(8,6);8,315(0,8);8,130(10,9);8,124(10,7);7,895(9,5);7,889(9,7);7,649(4,9);7,627(16,0);7,612(10,9);7,606(10,8);7,590(5,3);7,585(5,5);7,573(1,8);7,568(4,5);7,564(1,6);7,552(2,3);7,547(2,7);7,531(1,2);7,244(1,4);7,238(8,0);7,218(10,9);7,197(6,6);7,190(1,3);6,917(12,1);6,911(11,9);3,322(326,0);3,300(0,5);2,680(0,7);2,675(1,4);2,671(2,0);2,666(1,4);2,662(0,6);2,541(1,0);2,524(4,8);2,519(8,1);2,511(114,4);2,506(232,5);2,502(305,0);2,497(213,2);2,493(97,5);2,338(0,7);2,333(1,4);2,328(1,9);2,324(1,4);2,319(0,6);1,989(0,4);1,398(12,4);1,120(0,4);1,104(0,4);0,08(2,0);0,000(60,1);-0,009(1,8)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-199:
<p>HPLC-EM: logP = 3,44; masa (m/z): 411,9(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,307(2,9);7,892(9,9);7,885(10,0);7,682(5,7);7,680(5,7);7,661(16,0);7,656(11,9);7,613(0,4);7,594(0,4);7,590(0,4);7,550(4,2);7,546(4,7);7,531(6,4);7,527(6,8);7,518(6,3);7,496(13,7);7,467(12,5);7,462(10,0);7,448(8,0);7,446(10,9);7,440(4,9);7,430(4,1);7,427(3,9);7,400(4,7);7,396(4,7);7,381(5,7);7,376(5,5);7,362(2,6);7,357(2,4);6,985(10,2);6,979(10,1);5,447(2,3);2,205(116,2);2,133(0,4);2,108(0,4);1,977(0,5);1,972(1,8);1,965(44,2);1,959(2,3);1,953(17,7);1,947(33,4);1,941(47,5);1,935(33,4);1,928(17,4);1,435(0,8);1,268(0,8);1,221(0,3);1,203(0,6);1,135(0,4)</p>
I-1-200:
<p>HPLC-EM: logP = 3,40; masa (m/z): 366,0(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,281(3,7);7,892(11,4);7,886(11,9);7,666(11,8);7,661(13,0);7,616(0,4);7,600(5,5);7,597(6,0);7,582(6,7);7,578(7,3);7,527(7,3);7,519(3,4);7,515(4,4);7,505(16,0);7,499(11,0);7,495(11,6);7,491(7,4);7,487(6,2);7,472(15,9);7,466(13,3);7,450(7,4);7,445(5,9);7,432(5,7);7,427(5,6);7,413(7,0);7,409(7,0);7,395(2,9);7,391(2,9);7,377(0,4);6,988(11,5);6,982(11,8);5,447(3,2);3,282(1,3);3,268(1,4);2,193(194,5);2,133(1,1);2,123(0,3);2,120(0,4);2,114(0,6);2,108(0,7);2,102(0,5);2,095(0,3);1,976(1,7);1,965(126,9);1,953(32,6);1,947(59,7);1,940(84,0);1,934(60,0);1,928(32,1);1,894(0,4);1,792(0,8);1,775(0,4);1,769(0,6);1,763(0,4);1,436(5,1);1,292(0,5);1,269(1,3);1,200(0,4);1,101(0,5);1,014(0,3);0,911(0,4);0,000(1,1)</p>
I-1-201:
<p>HPLC-EM: logP = 4,15; masa (m/z): 396,1(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,145(5,8);7,835(3,0);7,816(3,7);7,780(1,1);7,762(3,1);7,744(2,5);7,708(2,4);7,691(3,7);7,676(1,9);7,669(3,9);7,659(4,1);7,655(3,9);7,647(2,2);7,641(2,9);7,632(1,6);7,610(1,5);7,603(1,5);7,588(1,8);7,584(2,0);7,581(2,0);7,577(1,8);7,561(1,4);7,555(1,4);7,307(1,2);7,304(1,1);7,286(2,0);7,268(1,0);7,265(1,1);7,261(1,0);6,726(8,9);3,399(0,4);3,389(0,4);3,361(2,2);3,339(401,4);3,298(0,3);2,717(0,7);2,678(1,0);2,673(0,8);2,571(0,7);2,548(146,2);2,513(121,0);2,508(156,2);2,504(114,3);2,482(6,2);2,463(6,0);2,444(2,0);2,374(0,7);2,340(0,8);2,335(1,0);2,331(0,8);2,090(0,6);1,955(0,7);1,243(0,5);1,165(7,7);1,146(16,0);1,127(7,4);1,115(0,4)</p>
I-1-202:
<p>HPLC-EM: logP = 3,78; masa (m/z): 382,1(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,124(4,3);7,827(2,4);7,807(3,1);7,772(1,0);7,753(2,5);7,735(2,1);7,700(1,9);7,680(3,1);7,663(2,0);7,657(2,9);7,650(3,4);7,642(2,4);7,633(2,8);7,620(1,1);7,603(1,0);7,596(1,1);7,576(1,6);7,554(1,1);7,547(1,0);7,301(0,9);7,297(0,9);7,280(1,6);7,261(0,8);7,258(0,8);7,254(0,8);6,710(6,2);3,332(91,6);2,541(26,7);2,506(38,9);2,502(48,6);2,498(35,5);2,329(0,3);2,165(16,0)</p>
I-1-203:
<p>HPLC-EM: logP = 3,19; masa (m/z): 383,1(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,293(4,8);8,835(2,4);8,825(2,5);8,166(2,3);8,149(2,5);7,828(2,1);7,816(2,1);7,809(2,0);7,797(1,9);7,686(1,0);7,671(1,1);7,664(2,1);7,649(2,1);7,642(1,2);7,627(1,1);7,607(1,1);7,600(1,1);7,584(1,3);7,580(1,6);7,574(1,3);7,558(1,1);7,551(1,1);7,307(0,8);7,304(0,9);7,300(0,8);7,283(1,6);7,278(1,5);7,265(0,8);7,262(0,8);7,258(0,7);6,716(6,5);3,333(82,7);2,712(0,5);2,672(0,3);2,542(109,4);2,525(1,5);2,507(37,6);2,503(47,7);2,498(34,5);2,369(0,5);2,330(0,4);2,173(16,0)</p>
I-1-204:
<p>HPLC-EM: logP = 3,58; masa (m/z): 397,1(M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,306(5,6);8,836(3,0);8,825(2,9);8,169(2,8);8,150(3,0);7,831(2,6);7,819(2,6);7,812(2,4);7,800(2,3);7,693(1,2);7,677(1,4);7,670(2,5);7,655(2,5);7,648(1,5);7,633(1,3);7,608(1,3);7,601(1,4);7,585(1,6);7,581(1,9);7,579(1,9);7,575(1,7);7,559(1,3);7,552(1,3);7,307(1,0);7,304(1,1);7,300(1,0);7,283(1,9);7,278(1,8);7,264(0,9);7,261(1,0);7,257(0,9);6,725(8,7);3,328(102,1);2,712(0,7);2,676(0,4);2,672(0,6);2,667(0,4);2,582(0,3);2,542(153,4);2,511(34,2);2,507(65,4);2,502(85,3);2,498(62,1);2,483(7,4);2,464(6,0);2,445(2,0);2,368(0,7);2,333(0,4);2,329(0,5);2,325(0,4);1,159(7,8);1,140(16,0);1,122(7,4)</p>
I-1-205:
<p>HPLC-EM: masa (m/z): 336,1(M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,203(2,4);8,144(8,6);8,140(15,6);8,136(8,6);7,803(3,2);7,793(3,9);7,788(6,8);7,779(8,6);7,773(4,9);7,766(8,2);7,755(7,1);7,741(3,4);7,605(4,3);7,601(4,4);7,590(4,8);7,586(8,5);7,581(4,8);7,571(4,4);7,566(4,3);7,420(3,5);7,416(3,7);7,402(6,3);7,387(3,7);7,383(3,5);7,290(3,6);7,288(3,5);7,277(6,5);7,275(6,4);7,273(6,4);7,262(3,5);7,259(3,3);7,224(4,4);7,221(4,3);7,210(7,9);7,207(7,7);7,196(4,0);7,193(3,8);6,933(16,0);6,929(16,0);6,687(0,3);5,359(0,3);5,325(0,7);3,366(3290,1);2,998(0,5);2,619(3,5);2,616(4,8);2,613(3,5);2,544(8,8);2,525(8,2);2,522(10,6);2,519(11,4);2,510(255,3);2,507(544,6);2,504(751,0);2,501(558,6);2,499(264,8);2,392(3,4);2,389(4,7);2,386(3,4);2,294(0,5);2,020(0,8);2,008(1,4);1,995(1,1);1,985(0,7);1,976(0,7);1,940(0,4);1,506(1,1);1,453(0,5);1,280(0,9);1,235(5,5);0,865(1,0);0,853(2,5);0,842(1,2);0,005(2,7);0,000(80,1);-0,006(2,7)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-206:
<p>HPLC-EM: logP = 3,42; masa (m/z): 350,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,338(4,4);7,685(1,0);7,670(1,1);7,663(2,2);7,648(2,2);7,641(1,2);7,626(1,1);7,608(1,1);7,601(1,2);7,594(0,7);7,585(1,4);7,578(2,6);7,574(2,2);7,557(2,7);7,552(2,0);7,540(1,1);7,535(1,3);7,519(0,6);7,308(0,8);7,305(0,9);7,301(0,8);7,298(0,8);7,285(1,5);7,279(1,4);7,266(0,8);7,262(0,8);7,259(0,7);7,256(0,7);7,233(0,7);7,226(3,9);7,206(5,4);7,186(3,2);7,179(0,7);6,715(6,3);3,329(65,2);2,712(0,5);2,542(115,3);2,530(0,7);2,525(1,2);2,520(1,6);2,511(17,7);2,507(34,9);2,502(45,2);2,498(32,2);2,493(15,3);2,368(0,5);2,329(0,4);2,168(16,0)</p>
I-1-207:
<p>HPLC-EM: logP = 3,84; masa (m/z): 364,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,351(5,0);7,689(1,1);7,674(1,3);7,667(2,4);7,652(2,4);7,645(1,4);7,630(1,3);7,608(1,3);7,601(1,4);7,596(0,9);7,585(1,7);7,579(3,0);7,575(2,7);7,558(3,5);7,553(2,0);7,541(1,3);7,537(1,5);7,520(0,7);7,307(1,0);7,304(1,0);7,301(0,1);7,284(1,7);7,278(1,7);7,265(0,9);7,262(0,9);7,258(0,9);7,235(0,8);7,228(4,3);7,208(6,1);7,188(3,6);7,180(0,7);6,725(8,4);3,327(84,3);3,308(0,4);2,711(0,6);2,676(0,4);2,671(0,5);2,667(0,3);2,565(0,6);2,542(146,2);2,511(28,7);2,507(55,8);2,502(72,0);2,498(51,9);2,493(25,2);2,477(5,6);2,458(5,5);2,439(1,9);2,368(0,6);2,333(0,4);2,329(0,5);2,324(0,4);1,154(7,7);1,135(16,0);1,116(7,4)</p>
I-1-208:
<p>HPLC-EM: logP = 3,63; masa (m/z): 392,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,020(4,4);7,691(2,9);7,672(4,2);7,657(1,4);7,650(2,2);7,635(2,3);7,628(1,3);7,613(1,2);7,603(1,1);7,597(1,1);7,581(1,3);7,574(1,6);7,570(1,3);7,554(1,1);7,547(1,1);7,510(1,3);7,505(1,6);7,491(3,7);7,486(3,8);7,477(2,0);7,475(2,0);7,459(3,1);7,456(2,9);7,440(1,4);7,438(1,3);7,410(2,1);7,405(2,0);7,391(2,3);7,386(2,1);7,373(1,2);7,367(1,0);7,305(0,8);7,302(0,9);7,295(0,9);7,281(1,6);7,275(1,5);7,262(0,8);7,259(0,8);7,255(0,8);6,723(6,2);3,328(209,9);3,298(0,3);3,292(0,4);2,711(0,6);2,676(0,6);2,671(0,8);2,666(0,6);2,559(0,8);2,541(146,5);2,524(2,9);2,511(51,7);2,506(99,1);2,502(126,3);2,497(90,0);2,493(43,1);2,367(0,6);2,333(0,6);2,329(0,8);2,324(0,6);2,164(16,0);2,059(0,4);1,236(0,4);0,000(0,4)</p>
I-1-209:
<p>HPLC-EM: logP = 2,95; masa (m/z): 378,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,270(0,3);9,223(3,6);7,952(7,8);7,946(14,9);7,940(7,9);7,765(3,7);7,750(4,1);7,743(7,9);7,728(7,9);7,720(4,3);7,705(4,2);7,694(9,4);7,692(9,1);7,675(10,8);7,672(10,5);7,596(0,3);7,589(0,3);7,564(6,7);7,560(7,2);7,545(10,0);7,541(10,5);7,482(5,6);7,479(5,9);7,463(11,8);7,460(11,4);7,444(6,6);7,441(5,9);7,411(8,0);7,407(8,0);7,391(9,0);7,387(8,7);7,373(4,4);7,368(4,0);7,206(4,2);7,199(4,8);7,183(4,5);7,176(8,8);7,169(5,1);7,154(4,1);7,147(4,8);7,123(3,3);7,119(3,4);7,116(2,8);7,113(2,7);7,103(3,9);7,100(5,5);7,096(5,5);7,093(4,7);7,080(3,1);7,077(3,1);7,074(2,7);7,070(2,6);6,992(16,0);6,985(15,7);2,207(0,5);2,199(0,7);2,191(1,4);2,174(186,7);2,170(344,6);2,168(275,4);2,167(301,3);2,133(0,5);2,120(0,5);2,114(0,8);2,108(1,3);2,101(0,8);2,095(0,5);1,964(34,9);1,958(4,1);1,952(68,7);1,946(134,9);1,940(198,0);1,934(134,1);1,928(67,4);1,921(1,6);1,915(0,6);1,781(0,5);1,775(0,8);1,769(1,1);1,762(0,7);1,756(0,3);1,270(0,8);0,000(1,7)</p>
I-1-210:
<p>HPLC-EM: logP = 2,89; masa (m/z): 395,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,199(4,5);8,471(3,0);8,466(3,2);8,459(3,2);8,454(3,1);7,959(2,9);7,954(3,0);7,940(3,4);7,935(3,1);7,680(1,0);7,664(1,1);7,657(2,2);7,642(2,1);7,635(1,2);7,620(1,1);7,607(1,1);7,600(1,1);7,584(1,3);7,580(1,5);7,578(1,5);7,574(1,3);7,556(3,9);7,551(1,4);7,544(3,2);7,538(3,0);7,526(2,9);7,308(0,8);7,305(0,9);7,301(0,8);7,298(0,8);7,284(1,5);7,279(1,4);7,265(0,8);7,262(0,8);7,258(0,7);6,728(6,3);3,328(191,1);2,995(0,4);2,711(0,7);2,676(0,6);2,671(0,8);2,667(0,6);2,572(0,4);2,565(0,5);2,541(178,2);2,524(2,8);2,511(47,3);2,507(94,0);2,502(122,0);2,497(86,5);2,493(40,9);2,367(0,7);2,333(0,6);2,329(0,8);2,324(0,5);2,171(16,0);1,235(0,4);0,000(0,5)</p>
I-1-211:
<p>HPLC-EM: logP = 2,91; masa (m/z): 334,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,251(3,9);7,952(8,2);7,945(15,2);7,939(8,1);7,766(3,8);7,751(4,1);7,743(7,8);7,728(7,9);7,720(4,3);7,706(4,1);7,607(7,5);7,603(7,2);7,588(9,5);7,584(9,5);7,524(3,7);7,520(5,2);7,504(13,1);7,501(14,7);7,496(9,3);7,492(8,5);7,479(12,6);7,474(10,8);7,459(5,8);7,454(4,8);7,438(9,5);7,433(8,5);7,419(10,2);7,415(10,0);7,401(4,6);7,397(4,0);7,388(0,4);7,205(4,6);7,198(5,3);7,183(4,8);7,176(9,6);7,169(5,6);7,154(4,4);7,147(5,4);7,122(3,6);7,119(3,7);7,116(3,0);7,112(2,9);7,102(4,3);7,099(5,9);7,096(6,1);7,092(5,1);7,089(3,4);7,080(3,4);7,076(3,5);7,073(3,0);7,069(2,8);6,995(16,0);6,988(15,6);5,447(1,9);4,068(0,5);4,050(0,5);2,213(0,5);2,203(0,7);2,175(222,4);2,170(346,5);2,169(324,8);2,147(0,6);2,133(0,4);2,120(0,5);2,114(0,8);2,108(1,1);2,101(0,8);2,095(0,3);1,976(0,5);1,972(2,7);1,965(30,8);1,958(4,1);1,953(65,1);1,946(125,9);1,940(181,9);1,934(122,2);1,928(61,6);1,921(1,1);1,915(0,5);1,781(0,3);1,775(0,7);1,769(1,0);1,763(0,6);1,756(0,4);1,436(1,4);1,268(0,9);1,221(0,7);1,204(1,3);1,186(0,6);0,000(1,8)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-212:
<p>HPLC-EM: logP = 3,58; masa (m/z): 348,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,037(4,4);7,671(1,0);7,656(1,2);7,649(2,2);7,634(2,2);7,627(1,3);7,612(1,2);7,603(1,2);7,596(1,2);7,580(1,4);7,576(1,6);7,574(1,6);7,570(1,4);7,554(1,3);7,547(1,5);7,541(3,8);7,537(3,7);7,522(6,2);7,518(7,4);7,498(1,6);7,493(1,8);7,479(3,1);7,474(1,9);7,460(1,2);7,455(1,4);7,437(2,4);7,434(2,4);7,419(2,9);7,416(2,5);7,400(0,8);7,397(1,0);7,305(0,8);7,302(0,9);7,298(0,9);7,295(0,8);7,281(1,5);7,276(1,5);7,262(0,8);7,259(0,8);7,255(0,7);7,252(0,7);6,725(6,3);3,331(129,3);2,711(0,5);2,671(0,4);2,569(0,4);2,541(127,3);2,524(1,4);2,511(22,4);2,506(45,1);2,502(59,2);2,497(42,4);2,493(20,2);2,367(0,5);2,329(0,4);2,324(0,3);2,164(16,0)</p>
I-1-213:
<p>HPLC-EM: logP = 3,99; masa (m/z): 362,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,051(5,5);7,676(1,3);7,661(1,4);7,654(2,6);7,639(2,5);7,632(1,5);7,617(1,3);7,603(1,4);7,596(1,4);7,580(1,7);7,577(1,9);7,574(1,9);7,570(1,6);7,554(1,6);7,547(1,9);7,542(4,5);7,523(7,6);7,520(7,9);7,499(2,0);7,495(2,1);7,481(3,7);7,476(2,6);7,462(1,7);7,457(1,6);7,450(0,4);7,440(2,8);7,436(2,7);7,421(3,4);7,418(2,9);7,402(1,1);7,400(1,1);7,305(1,0);7,301(1,1);7,297(1,1);7,281(1,9);7,275(1,8);7,262(1,0);7,259(1,0);7,255(0,9);6,739(8,6);3,331(170,4);3,310(0,6);2,712(0,6);2,675(0,4);2,671(0,5);2,667(0,4);2,541(144,9);2,511(31,7);2,507(61,0);2,502(78,4);2,498(56,3);2,493(28,6);2,474(5,9);2,455(5,8);2,437(1,9);2,368(0,6);2,334(0,4);2,329(0,5);2,324(0,4);1,156(7,8);1,138(16,0);1,119(7,3);0,998(0,5)</p>
I-1-214:
<p>HPLC-EM: logP = 3,73; masa (m/z): 440,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,966(4,7);7,912(3,2);7,894(3,4);7,675(1,0);7,660(1,1);7,653(2,1);7,638(2,1);7,631(1,4);7,616(1,1);7,601(1,1);7,595(1,1);7,578(1,4);7,574(1,6);7,552(1,1);7,545(1,1);7,488(1,0);7,486(1,0);7,469(2,9);7,451(2,8);7,449(2,7);7,438(3,5);7,433(4,0);7,419(1,7);7,414(1,5);7,304(0,9);7,301(0,9);7,297(0,9);7,280(1,7);7,261(0,8);7,258(0,9);7,254(0,9);7,219(1,6);7,215(1,6);7,200(2,2);7,196(2,2);7,182(1,5);7,177(1,4);6,727(6,4);3,332(58,6);2,711(0,4);2,541(83,7);2,524(0,8);2,511(13,1);2,506(25,4);2,502(32,7);2,497(23,4);2,493(11,2);2,368(0,4);2,167(16,0);2,120(0,4);2,067(0,7)</p>
I-1-215:
<p>HPLC-EM: logP = 4,15; masa (m/z): 454,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,985(6,3);7,921(4,2);7,901(4,5);7,688(1,2);7,673(1,5);7,666(2,6);7,651(2,6);7,644(1,7);7,629(1,5);7,610(1,5);7,603(1,6);7,583(2,4);7,581(2,4);7,561(1,4);7,554(1,5);7,496(1,4);7,477(4,0);7,459(3,7);7,444(4,4);7,440(5,0);7,425(2,2);7,421(1,8);7,307(1,3);7,304(1,4);7,287(2,4);7,265(1,3);7,261(1,2);7,227(2,0);7,223(2,1);7,208(3,1);7,205(3,1);7,190(1,7);7,185(1,6);6,743(9,2);3,338(262,3);2,717(0,7);2,677(0,8);2,547(136,3);2,512(96,7);2,508(122,2);2,504(95,1);2,482(7,1);2,463(6,5);2,445(2,3);2,374(0,7);2,335(0,8);2,091(0,6);2,026(0,7);1,241(0,4);1,168(7,9);1,149(16,0);1,131(7,6);1,114(0,5)</p>
I-1-217:
<p>HPLC-EM: logP = 3,06; masa (m/z): 383,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,451(6,6);8,316(0,4);8,254(3,6);8,248(6,4);8,242(3,4);8,156(2,6);8,134(3,5);8,115(2,6);7,984(0,5);7,965(0,6);7,961(0,6);7,942(0,6);7,932(0,7);7,925(1,3);7,918(0,7);7,843(3,6);7,824(4,6);7,790(1,3);7,772(3,6);7,754(3,2);7,721(2,8);7,701(3,5);7,685(5,4);7,667(3,0);6,979(7,7);6,973(7,6);5,842(1,5);5,836(1,4);5,757(9,3);5,337(1,8);3,322(16,1,8);2,679(0,6);2,675(1,3);2,671(1,7);2,666(1,2);2,524(5,3);2,510(99,1);2,506(193,9);2,502(251,8);2,497(182,5);2,493(88,3);2,456(0,6);2,432(15,9);2,425(16,0);2,367(3,4);2,360(3,4);2,337(0,7);2,333(1,3);2,328(1,7);2,324(1,2);1,989(1,0);1,336(1,0);1,298(0,6);1,259(0,9);1,249(1,2);1,235(0,6);1,175(0,5);0,008(2,0);0,000(54,6);-0,008(1,9)</p>
I-1-218:
<p>HPLC-EM: logP = 2,28; masa (m/z): 335,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,462(3,5);8,505(8,8);8,500(9,4);8,493(9,4);8,488(9,3);8,093(8,5);8,087(15,6);8,081(8,6);7,995(9,6);7,990(9,7);7,976(10,4);7,971(10,2);7,593(3,7);7,585(4,0);7,577(4,2);7,569(7,4);7,561(4,2);7,553(3,9);7,545(3,8);7,475(11,1);7,463(11,2);7,456(10,7);7,444(10,1);7,371(3,8);7,359(4,0);7,348(4,8);7,342(4,4);7,336(5,0);7,330(4,2);7,319(4,6);7,307(4,5);7,105(2,6);7,097(4,8);7,088(3,4);7,086(3,6);7,082(3,2);7,077(5,5);7,074(4,9);7,069(3,4);7,065(3,1);7,063(3,0);7,055(4,0);7,046(2,3);7,028(16,0);7,022(15,8);5,449(0,4);4,068(0,4);4,050(0,4);2,464(0,3);2,175(115,2);2,115(0,4);2,109(0,5);2,103(0,3);1,972(2,1);1,966(2,4);1,960(3,5);1,954(31,8);1,948(59,8);1,942(84,2);1,935(57,9);1,929(29,6);1,776(0,3);1,770(0,5);1,764(0,3);1,436(0,7);1,372(5,4);1,340(0,7);1,284(1,0);1,276(6,2);1,221(0,5);1,204(0,9);1,186(0,5);0,146(0,6);0,008(5,5);0,000(139,7);-0,009(5,6);-0,150(0,6)</p>
I-1-219:
<p>HPLC-EM: logP = 3,25; masa (m/z): 431,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,040(6,0);8,227(3,4);8,221(6,5);8,214(3,5);7,814(7,3);7,800(7,8);7,655(1,5);7,647(1,6);7,639(1,7);7,631(2,8);7,623(1,7);7,616(1,6);7,608(1,5);7,581(1,5);7,569(1,6);7,558(1,9);7,553(1,8);7,546(1,9);7,541(1,7);7,530(1,7);7,517(1,7);7,411(5,9);7,397(5,6);7,281(1,0);7,273(1,8);7,262(1,5);7,258(1,3);7,253(2,2);7,250(1,9);7,245(1,4);7,241(1,2);7,231(1,5);7,222(0,8);6,990(3,6);6,984(3,6);5,757(16,0);3,338(10,3);2,512(11,5);2,507(14,9);2,503(11,0);1,992(0,4);1,396(1,3)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-220: HPLC-EM: logP = 3,00; masa (m/z): 335,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 10,173(3,4);8,614(7,7);8,611(8,1);8,603(8,1);8,600(8,1);8,113(6,9);8,106(12,9);8,100(7,0);8,000(7,2);7,997(7,5);7,979(8,1);7,976(8,1);7,664(3,2);7,656(3,4);7,648(3,5);7,640(6,4);7,632(3,6);7,624(3,4);7,616(3,3);7,578(8,1);7,567(8,1);7,558(7,6);7,546(7,3);7,425(0,5);7,419(0,5);7,376(3,0);7,364(3,2);7,353(3,9);7,347(3,5);7,341(4,0);7,335(3,4);7,324(3,7);7,312(3,6);7,240(0,4);7,235(0,4);7,172(0,4);7,165(0,4);7,102(2,2);7,093(4,2);7,082(16,0);7,076(15,6);7,066(3,1);7,061(2,7);7,051(3,2);7,043(1,7);5,448(1,0);2,468(0,4);2,463(0,5);2,459(0,4);2,149(379,2);2,121(2,2);2,114(2,0);2,108(2,2);2,102(1,5);2,096(0,9);1,965(12,1);1,958(17,5);1,953(121,2);1,947(224,8);1,941(311,8);1,934(217,2);1,928(114,5);1,781(0,7);1,775(1,3);1,769(1,8);1,763(1,3);1,757(0,7);1,372(11,0);1,340(1,2);1,285(1,9);1,276(11,2);1,269(3,1);1,216(1,7);0,881(0,5);0,858(0,4);0,146(2,0);0,008(19,1);0,000(421,4);-0,008(20,7);-0,150(2,0)
I-1-221: HPLC-EM: logP = 3,57; masa (m/z): 403,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,061(8,8);8,237(5,0);8,230(9,8);8,224(5,1);7,809(13,3);7,796(13,7);7,656(2,3);7,648(2,5);7,640(2,6);7,632(4,5);7,624(2,5);7,617(2,5);7,609(2,3);7,587(2,1);7,575(2,3);7,564(2,7);7,559(2,5);7,552(2,7);7,546(2,5);7,536(2,5);7,523(2,4);7,293(2,0);7,286(16,0);7,273(15,3);7,265(3,6);7,262(3,0);7,257(2,0);7,253(1,8);7,251(1,7);7,242(2,2);7,234(1,1);6,937(9,7);6,930(9,7);5,757(1,4);3,326(12,4);2,673(0,4);2,512(24,2);2,508(46,1);2,503(59,5);2,499(43,3);2,495(21,5);2,330(0,4);1,232(0,8);1,181(0,4);0,000(3,7)
I-1-222: HPLC-EM: logP = 3,14; masa (m/z): 415,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,963(7,2);8,316(0,6);8,224(4,4);8,218(9,1);8,211(4,6);7,945(11,9);7,940(12,1);7,666(1,9);7,657(2,1);7,650(2,2);7,642(4,0);7,634(2,2);7,626(2,2);7,618(2,0);7,584(1,8);7,572(2,0);7,561(2,2);7,555(2,1);7,549(2,3);7,543(2,1);7,532(2,2);7,520(2,1);7,284(1,3);7,276(2,4);7,267(1,6);7,265(1,8);7,261(1,5);7,256(2,8);7,253(2,4);7,248(1,6);7,245(1,4);7,242(1,4);7,234(1,9);7,225(0,9);6,931(10,2);6,922(16,0);6,918(13,2);3,324(151,7);2,676(1,0);2,671(1,4);2,667(1,0);2,662(0,5);2,525(3,6);2,520(5,6);2,511(79,5);2,507(163,0);2,502(215,9);2,498(156,7);2,493(76,2);2,338(0,5);2,333(1,0);2,329(1,4);2,324(1,0);1,398(0,4);1,135(0,5);1,117(1,3);1,099(0,7);0,008(1,1);0,000(35,4);-0,009(1,3)
I-1-223: HPLC-EM: logP = 2,71; masa (m/z): 372,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,672(1,2);8,068(2,8);8,062(5,3);8,055(2,8);7,625(1,4);7,617(1,4);7,610(1,4);7,602(2,7);7,594(1,4);7,586(1,4);7,578(1,4);7,426(0,4);7,420(0,4);7,368(1,3);7,355(1,4);7,345(1,6);7,339(1,4);7,332(1,6);7,327(1,4);7,316(1,5);7,304(1,5);7,235(3,4);7,101(6,6);7,090(1,7);7,082(1,1);7,079(1,1);7,076(1,0);7,071(1,8);7,067(1,5);7,062(1,1);7,059(0,9);7,056(0,9);7,048(1,3);7,040(0,7);6,967(3,3);6,942(5,4);6,936(5,3);5,448(2,3);3,804(15,2);3,802(16,0);3,788(0,3);3,408(0,3);2,172(5,9);2,121(0,4);2,115(0,4);2,109(0,4);2,102(0,3);1,965(1,3);1,959(1,7);1,953(13,0);1,947(24,0);1,941(33,2);1,935(22,7);1,929(11,6);1,372(5,7);1,340(0,8);1,285(1,3);1,276(6,5);1,268(1,2);0,008(1,7);0,000(42,7);-0,009(1,6)
I-1-224: HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 369,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,424(5,5);8,163(13,6);8,103(3,3);8,097(3,6);8,084(6,0);8,078(6,2);8,064(3,5);8,058(3,5);7,980(12,1);7,829(7,3);7,809(11,2);7,757(2,7);7,740(7,6);7,721(9,4);7,700(9,1);7,687(16,0);7,671(7,7);7,060(13,7);7,054(12,7);5,449(13,4);2,164(73,5);2,114(0,5);2,109(0,5);1,972(2,2);1,953(26,4);1,947(44,4);1,941(55,6);1,935(39,2);1,930(21,0);1,769(0,4);1,372(4,5);1,311(0,7);1,294(0,8);1,276(4,6);1,221(0,4);1,204(0,7);1,186(0,4);0,000(13,7)
I-1-225: HPLC-EM: logP = 2,59; masa (m/z): 335,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,382(3,2);8,168(5,8);8,162(10,4);8,155(6,2);8,105(2,4);8,098(2,8);8,085(4,1);8,079(4,5);8,066(2,5);8,059(2,7);7,982(6,3);7,975(10,4);7,969(6,1);7,602(6,0);7,583(7,8);7,526(2,2);7,522(3,4);7,506(10,3);7,502(16,0);7,498(8,6);7,484(8,4);7,480(8,1);7,465(3,5);7,460(3,3);7,442(6,4);7,437(6,0);7,423(7,2);7,419(7,2);7,406(3,1);7,401(3,1);7,082(9,8);7,076(10,0);5,447(1,5);2,165(37,0);2,110(0,4);2,088(0,6);1,966(1,8);1,960(2,2);1,955(16,0);1,948(30,2);1,942(42,2);1,936(29,7);1,930(15,7);0,008(0,5);0,000(13,2);-0,008(0,7)
I-1-226: HPLC-EM: logP = 3,21; masa (m/z): 417,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,373(2,7);8,428(4,0);8,424(4,3);8,416(4,4);8,412(4,2);8,286(4,2);8,282(4,1);8,267(4,5);8,263(4,2);7,675(7,4);7,669(7,5);7,589(7,8);7,587(7,6);7,568(16,0);7,512(6,2);7,494(4,9);7,489(4,2);7,479(4,5);7,470(4,1);7,467(4,7);7,460(4,3);7,448(3,8);7,426(0,4);7,000(7,5);6,994(7,4);5,449(0,9);4,067(0,6);4,049(0,6);2,163(40,7);1,972(2,9);1,965(1,7);1,954(13,5);1,947(24,6);1,941(33,7);1,935(24,2);1,929(13,2);1,436(5,6);1,372(3,8);1,308(0,3);1,291(0,4);1,276(4,0);1,221(0,8);1,203(1,5);1,186(0,8);0,000(8,2)
I-1-227 ver el Ejemplo de síntesis 41
I-1-228 ver el Ejemplo de síntesis 28
I-1-229 ver el Ejemplo de síntesis 26

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-230 ver el Ejemplo de síntesis 27
I-1-231:
<p>HPLC-EM: logP = 2,89; masa (m/z): 372,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,473(2,7);8,113(3,0);8,109(2,8);7,977(1,0);7,880(2,6);7,784(1,2);7,648(0,4);7,638(0,9);7,634(0,8);7,624(1,6);7,613(0,9);7,609(1,0);7,599(0,4);7,408(2,7);7,394(4,9);7,380(2,4);6,909(2,4);6,906(2,4);3,401(999,7);3,400(1251,1);3,395(262,8);3,394(254,6);3,002(1,3);2,625(0,6);2,552(43,7);2,534(0,9);2,531(1,1);2,528(1,1);2,516(66,1);2,513(92,4);2,510(68,4);2,507(33,5);2,397(0,6);2,284(16,0);1,265(0,3);1,242(1,8);0,861(0,4)</p>
I-1-232:
<p>HPLC-EM: logP = 2,10; masa (m/z): 318,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,141(0,7);7,743(1,7);7,740(1,6);7,737(1,8);7,546(0,3);7,531(0,6);7,525(0,6);7,515(0,4);7,509(1,3);7,503(0,5);7,494(0,6);7,488(0,8);7,472(0,4);7,218(0,5);7,213(2,1);7,200(0,4);7,192(3,5);7,183(0,6);7,171(1,8);7,162(0,4);6,968(2,5);6,962(2,5);6,663(4,3);4,051(16,0);2,214(14,4);2,181(19,9);1,973(0,6);1,966(0,4);1,959(0,5);1,954(4,7);1,947(9,0);1,941(12,7);1,935(9,0);1,929(4,9);1,436(1,0);1,372(1,1);1,276(1,2);0,008(0,7);0,000(16,5);-0,008(1,0)</p>
I-1-233:
<p>HPLC-EM: logP = 2,23; masa (m/z): 363,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,869(2,2);8,142(1,6);8,138(1,5);7,634(0,5);7,630(0,5);7,624(0,4);7,620(0,9);7,616(0,4);7,610(0,5);7,606(0,6);7,411(1,6);7,397(2,8);7,384(1,3);6,982(2,9);6,977(2,9);3,858(16,0);3,350(162,4);2,552(14,7);2,531(0,4);2,519(10,8);2,516(24,2);2,513(34,6);2,510(25,1);2,507(11,7);2,458(14,3)</p>
I-1-234:
<p>HPLC-EM: logP = 2,03; masa (m/z): 363,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,356(2,8);8,316(0,6);8,071(2,1);8,065(2,1);7,619(0,7);7,614(0,6);7,598(1,3);7,582(0,6);7,576(0,9);7,561(0,4);7,398(2,2);7,376(3,8);7,356(1,8);6,915(3,3);6,909(3,3);5,756(1,8);3,867(16,0);3,324(234,7);2,675(1,3);2,671(1,8);2,666(1,3);2,607(14,8);2,541(0,9);2,524(4,6);2,510(106,6);2,506(210,0);2,502(272,4);2,497(195,8);2,440(0,4);2,333(1,3);2,328(1,8);2,324(1,3);0,146(1,0);0,008(8,2);0,000(205,9);-0,008(7,5);-0,150(1,0)</p>
I-1-235:
<p>HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 444,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,302(4,6);8,106(3,7);7,648(0,6);7,638(1,3);7,634(1,3);7,623(10,9);7,613(1,5);7,610(1,5);7,599(0,6);7,409(3,8);7,395(6,8);7,381(3,3);6,947(4,2);6,943(4,2);4,287(1,8);4,275(5,5);4,263(5,5);4,251(1,9);3,371(0,7);3,347(1213,1);2,625(1,0);2,552(5,7);2,534(1,4);2,531(1,8);2,528(1,9);2,519(53,5);2,516(114,3);2,513(158,9);2,510(116,8);2,507(56,9);2,397(1,0);1,356(7,5);1,344(16,0);1,332(7,6);1,246(0,7);0,011(0,7)</p>
I-1-236:
<p>HPLC-EM: logP = 1,93; masa (m/z): 305,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,049(1,4);8,316(0,5);8,139(5,0);8,100(1,8);8,094(1,8);7,639(0,6);7,633(0,5);7,624(0,4);7,618(1,2);7,612(0,4);7,602(0,5);7,597(0,8);7,581(0,3);7,407(2,0);7,386(3,3);7,366(1,5);6,895(2,7);6,888(2,7);4,174(16,0);3,324(380,4);2,675(1,7);2,670(2,4);2,666(1,7);2,661(0,8);2,541(1,8);2,524(7,0);2,510(134,1);2,506(270,6);2,501(357,5);2,497(259,9);2,492(125,8);2,337(0,8);2,333(1,7);2,328(2,3);2,324(1,7);2,074(4,9);1,258(0,4);0,146(0,4);0,008(2,9);0,000(86,4);-0,008(2,7);-0,150(0,4)</p>
I-1-237:
<p>HPLC-EM: logP = 3,84; masa (m/z): 490,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,018(3,8);8,157(2,7);8,154(2,6);7,652(0,4);7,641(0,8);7,638(0,8);7,627(1,4);7,616(0,8);7,613(0,8);7,602(0,4);7,416(2,4);7,401(4,3);7,388(2,0);6,953(4,1);6,949(3,9);4,017(16,0);3,884(0,5);3,349(1067,7);2,625(0,8);2,553(18,2);2,534(1,4);2,531(1,8);2,516(99,1);2,513(128,0);2,510(91,0);2,397(0,8);1,246(0,5);0,011(0,8)</p>
I-1-238:
<p>HPLC-EM: logP = 2,99; masa (m/z): 440,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,589(5,2);8,083(3,7);8,080(3,3);8,077(3,7);7,638(0,6);7,622(1,3);7,616(1,0);7,606(0,9);7,601(2,6);7,595(1,0);7,584(1,1);7,579(1,7);7,564(0,8);7,408(0,7);7,399(4,4);7,378(7,3);7,357(3,4);6,876(7,0);6,870(6,9);5,757(0,4);4,126(16,0);4,092(0,9);4,021(0,4);3,325(34,8);2,982(2,1);2,829(2,1);2,672(0,3);2,525(1,2);2,520(1,8);2,512(19,3);2,507(38,5);2,503(50,6);2,498(36,4);2,493(17,3);1,989(0,7);1,259(0,4);1,236(2,4);1,175(0,4);0,000(0,3)</p>
I-1-239:
<p>HPLC-EM: logP = 2,50; masa (m/z): 348,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,094(3,0);8,230(2,8);8,225(2,9);8,055(2,2);8,050(2,2);7,826(3,4);7,821(3,3);7,626(0,7);7,621(0,6);7,610(0,5);7,604(1,4);7,589(0,7);7,583(0,9);7,567(0,4);7,404(2,2);7,382(3,9);7,362(1,7);6,896(3,4);6,890(3,4);5,757(6,0);3,975(16,0);3,328(95,8);2,675(0,5);2,671(0,7);2,541(0,4);2,506(80,6);2,502(104,7);2,498(77,1);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);0,008(0,9);0,000(22,6);-0,008(1,0)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-240:
<p>HPLC-EM: logP = 2,52; masa (m/z): 371,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,607(3,5);7,997(2,5);7,994(2,3);7,991(2,4);7,798(2,7);7,793(2,7);7,624(0,4);7,608(0,9);7,602(0,7);7,592(0,6);7,587(1,7);7,581(0,6);7,570(0,8);7,565(1,1);7,550(0,5);7,393(3,3);7,389(5,1);7,368(4,7);7,347(2,2);7,341(0,6);6,895(4,3);6,889(4,3);4,101(0,6);4,088(0,6);3,688(16,0);3,327(7,0);3,178(3,0);3,165(2,9);2,525(0,4);2,512(6,2);2,507(2,1);2,503(15,9);2,498(11,6);2,494(5,6);1,250(0,4)</p>
I-1-241:
<p>HPLC-EM: logP = 1,90; masa (m/z): 349,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,412(2,9);8,894(5,3);8,083(2,2);8,078(2,1);7,636(0,3);7,620(0,7);7,615(0,6);7,599(1,4);7,593(0,5);7,583(0,7);7,578(0,9);7,562(0,4);7,400(2,3);7,379(3,9);7,358(1,8);6,927(3,5);6,921(3,3);5,757(1,1);3,945(16,0);3,326(107,5);2,675(0,5);2,671(0,7);2,667(0,5);2,541(0,4);2,506(83,8);2,502(103,4);2,498(72,2);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);0,146(0,3);0,000(74,5);-0,008(2,8);-0,149(0,4)</p>
I-1-242:
<p>HPLC-EM: logP = 1,81; masa (m/z): 349,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,214(3,1);8,316(0,6);8,082(5,3);8,073(2,4);8,067(2,4);7,634(0,4);7,618(0,8);7,612(0,7);7,602(0,5);7,596(1,5);7,591(0,6);7,580(0,7);7,575(1,0);7,559(0,4);7,397(2,6);7,376(4,3);7,355(2,0);6,925(3,9);6,919(3,9);5,756(0,4);3,926(16,0);3,323(161,8);2,675(1,0);2,671(1,4);2,666(1,0);2,541(0,7);2,524(3,2);2,519(5,2);2,511(79,2);2,506(163,8);2,502(217,8);2,497(156,8);2,493(75,7);2,333(1,0);2,328(1,4);2,324(1,0);0,146(0,7);0,008(5,3);0,000(156,3);-0,009(5,9);-0,150(0,7)</p>
I-1-243:
<p>HPLC-EM: logP = 1,80; masa (m/z): 385,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,619(12,2);11,093(0,4);11,082(1,0);8,623(8,5);8,607(8,6);8,490(1,2);8,316(0,9);8,097(9,2);8,092(9,2);7,890(0,3);7,825(6,9);7,805(10,1);7,744(0,6);7,730(5,4);7,713(6,6);7,694(3,7);7,665(0,4);7,638(1,3);7,622(2,8);7,617(2,6);7,601(5,6);7,595(2,5);7,585(2,8);7,579(3,7);7,564(1,6);7,443(0,7);7,422(1,3);7,402(9,8);7,381(16,0);7,360(7,2);7,261(0,4);7,240(0,5);6,905(13,8);6,899(13,6);6,075(0,4);6,069(0,4);3,322(135,5);2,675(2,2);2,671(2,9);2,666(2,2);2,506(347,5);2,502(443,3);2,497(328,0);2,333(2,2);2,328(2,8);2,324(2,1);0,146(0,5);0,008(5,1);0,000(108,9);-0,008(5,0);-0,150(0,5)</p>
I-1-244:
<p>HPLC-EM: logP = 3,58; masa (m/z): 380,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,415(5,6);8,107(4,4);8,104(4,5);7,700(9,1);7,649(0,6);7,638(1,4);7,634(1,3);7,624(2,5);7,614(1,4);7,610(1,6);7,600(0,7);7,410(4,1);7,396(7,3);7,382(3,5);6,948(5,3);6,944(5,4);4,550(0,9);4,539(1,5);4,525(1,5);4,515(1,0);3,345(469,7);2,625(0,6);2,552(11,6);2,534(0,9);2,531(1,2);2,528(1,2);2,519(32,6);2,516(72,2);2,513(101,6);2,510(75,7);2,507(37,7);2,397(0,6);1,879(0,9);1,866(1,3);1,856(1,5);1,841(1,7);1,829(1,3);1,817(0,4);1,765(0,3);1,753(1,2);1,744(1,5);1,741(1,5);1,731(1,9);1,718(1,3);1,709(0,9);1,429(13,0);1,418(13,1);1,246(0,5);0,737(7,5);0,724(16,0);0,712(7,4);0,010(0,7)</p>
I-1-245:
<p>HPLC-EM: logP = 3,47; masa (m/z): 472,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,343(6,8);8,102(4,9);8,099(4,9);7,641(11,4);7,624(2,7);7,613(1,5);7,610(1,7);7,599(0,7);7,410(4,4);7,395(7,9);7,382(3,8);6,947(6,4);6,943(6,5);4,471(1,0);4,461(1,7);4,447(1,7);4,437(1,1);3,346(1159,5);2,625(1,1);2,552(81,9);2,534(1,7);2,531(2,2);2,528(2,1);2,519(58,6);2,516(125,8);2,513(173,8);2,510(126,2);2,507(59,8);2,397(1,1);1,871(0,9);1,858(1,3);1,848(1,6);1,834(1,7);1,821(1,3);1,809(0,4);1,753(0,3);1,741(1,2);1,731(1,6);1,719(2,0);1,706(1,3);1,697(0,9);1,414(14,6);1,403(14,7);1,269(0,4);1,246(0,8);0,731(7,6);0,719(16,0);0,706(7,4);0,011(1,3)</p>
I-1-246:
<p>HPLC-EM: logP = 2,35; masa (m/z): 382,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,441(10,5);8,704(7,3);8,700(7,9);8,692(7,8);8,688(7,6);8,092(6,9);8,087(9,0);8,083(9,0);8,077(8,9);8,073(9,2);8,068(7,2);7,643(1,4);7,627(3,1);7,621(2,4);7,611(2,1);7,606(6,0);7,600(2,3);7,589(2,6);7,584(3,9);7,569(1,8);7,540(6,7);7,528(6,7);7,520(6,5);7,508(6,3);7,413(1,6);7,404(9,8);7,383(16,0);7,362(7,4);6,962(13,3);6,955(13,2);4,43(3,2);4,115(10,1);4,087(10,5);4,058(3,6);3,328(195,5);2,676(0,6);2,671(0,9);2,667(0,6);2,541(34,1);2,525(2,9);2,520(4,6);2,511(49,4);2,507(99,5);2,502(131,9);2,498(95,5);2,493(45,7);2,333(0,6);2,329(0,9);2,324(0,6);0,008(0,9);0,000(27,4);-0,009(0,8)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-247:
<p>HPLC-EM: logP = 2,74; masa (m/z): 366,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,038(10,5);8,056(8,2);8,050(8,2);7,636(6,9);7,632(6,8);7,617(8,1);7,613(9,5);7,604(2,3);7,598(5,9);7,592(2,4);7,581(5,5);7,577(6,7);7,561(7,4);7,541(4,6);7,537(4,0);7,395(9,8);7,388(6,9);7,383(2,5);7,374(16,0);7,364(6,2);7,362(6,1);7,354(7,9);7,345(9,6);7,343(9,3);7,326(3,8);7,324(3,8);7,278(7,4);7,258(6,5);7,204(12,5);7,019(6,2);6,941(13,1);6,935(13,0);5,756(3,7);4,038(0,4);4,020(0,4);3,324(103,6);2,679(0,4);2,675(0,8);2,670(1,1);2,666(0,8);2,524(3,3);2,519(5,3);2,510(62,0);2,506(123,2);2,501(161,2);2,497(115,7);2,492(54,7);2,337(0,4);2,333(0,8);2,328(1,1);2,324(0,8);1,989(1,5);1,299(0,8);1,259(1,2);1,235(1,8);1,192(0,5);1,175(0,9);1,157(0,5);0,008(1,5);0,000(40,7);-0,009(1,2)</p>
I-1-248:
<p>HPLC-EM: logP = 1,99; masa (m/z): 351,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 20,009(0,4);11,503(11,6);8,805(6,8);8,796(6,9);8,793(6,7);8,315(2,2);8,190(6,2);8,171(6,6);8,089(9,0);8,083(9,0);7,700(4,7);7,688(4,9);7,680(4,7);7,668(4,4);7,643(1,3);7,627(2,7);7,622(2,6);7,606(5,5);7,590(2,8);7,585(3,6);7,569(1,6);7,404(9,3);7,382(16,0);7,362(7,3);7,340(4,9);7,205(10,7);7,070(5,3);6,961(12,9);6,955(12,8);3,321(780,9);2,675(5,7);2,670(7,7);2,666(5,7);2,540(4,4);2,506(888,4);2,501(1153,4);2,497(832,1);2,332(5,5);2,328(7,3);2,324(5,4);0,146(0,4);0,008(3,6);0,000(92,4);-0,009(3,1);-0,150(0,4)</p>
I-1-249:
<p>HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 347,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,252(2,1);8,579(1,6);8,575(1,8);8,567(1,7);8,563(1,7);8,071(2,0);8,066(2,1);7,966(1,4);7,962(1,4);7,947(1,5);7,943(1,5);7,624(0,6);7,619(0,6);7,608(0,5);7,603(1,3);7,598(0,5);7,587(0,6);7,581(0,8);7,566(0,4);7,401(2,2);7,380(3,7);7,359(1,7);7,233(1,6);7,220(1,6);7,214(1,6);7,201(1,5);6,947(1,7);6,941(1,7);5,758(1,8);3,332(13,9);2,507(9,7);2,503(12,6);2,498(9,4);2,466(16,0);0,000(0,4)</p>
I-1-250:
<p>HPLC-EM: logP = 2,77; masa (m/z): 385,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,340(3,1);8,430(6,0);8,426(6,1);8,418(6,3);8,414(5,9);8,288(6,3);8,283(5,9);8,269(6,6);8,264(6,0);7,769(8,7);7,553(1,4);7,538(3,0);7,532(3,0);7,522(2,2);7,516(6,2);7,510(2,2);7,501(3,2);7,495(3,7);7,480(7,9);7,467(6,4);7,461(6,2);7,448(5,8);7,426(0,3);7,241(0,3);7,235(0,4);7,216(8,9);7,195(16,0);7,174(7,9);7,010(10,8);7,003(10,2);5,447(1,3);2,140(48,9);2,119(0,3);2,113(0,5);2,107(0,6);2,101(0,4);1,963(1,2);1,952(27,6);1,946(51,2);1,939(71,3);1,933(48,7);1,927(24,7);1,768(0,4);1,372(4,7);1,341(0,8);1,285(1,2);1,277(5,0);0,146(0,6);0,008(5,6);0,000(118,5);-0,008(4,4);-0,149(0,6)</p>
I-1-251:
<p>HPLC-EM: logP = 2,73; masa (m/z): 402,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,661(4,1);7,944(10,5);7,841(5,5);7,822(7,1);7,740(16,0);7,704(4,8);7,691(4,9);7,591(1,4);7,571(3,4);7,555(5,6);7,538(3,7);7,534(3,8);7,518(1,8);7,426(0,6);7,420(0,6);7,239(7,3);7,217(12,7);7,196(6,5);7,171(0,8);7,165(0,7);7,150(0,5);7,144(0,4);5,446(0,6);4,085(0,5);4,067(1,5);4,049(1,6);4,032(0,5);2,145(72,1);2,119(0,7);2,113(0,7);2,106(0,8);2,100(0,6);2,094(0,3);1,971(7,4);1,963(4,1);1,951(40,1);1,945(73,6);1,939(100,3);1,933(68,8);1,927(35,3);1,774(0,4);1,767(0,6);1,761(0,4);1,436(3,7);1,372(8,6);1,340(1,7);1,307(0,4);1,285(2,6);1,276(9,8);1,271(3,8);1,221(1,9);1,203(3,6);1,185(1,8);0,881(0,5);0,146(0,8);0,008(9,1);0,000(174,0);-0,009(6,7);-0,150(0,8)</p>
I-1-252:
<p>HPLC-EM: logP = 2,77; masa (m/z): 447,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,586(5,1);7,956(11,2);7,841(5,9);7,822(7,7);7,748(16,0);7,711(4,4);7,701(5,4);7,693(4,9);7,683(4,2);7,593(1,6);7,577(3,5);7,572(3,7);7,556(6,3);7,540(4,0);7,535(4,1);7,519(1,9);7,447(0,4);7,426(0,8);7,420(0,7);7,240(8,2);7,219(13,8);7,197(7,0);7,171(1,0);7,165(0,8);7,150(0,6);7,144(0,5);3,908(0,7);3,850(0,8);2,133(57,0);2,119(0,7);2,113(0,9);2,106(1,1);2,100(0,8);2,094(0,4);1,963(7,2);1,957(9,7);1,951(68,3);1,945(125,7);1,939(172,2);1,933(116,7);1,927(59,3);1,914(1,0);1,780(0,4);1,773(0,7);1,767(1,0);1,761(0,7);1,755(0,4);1,372(13,0);1,340(2,6);1,285(3,6);1,276(14,9);1,270(3,8);1,216(0,5);1,162(0,5);1,146(0,4);0,881(0,6);0,866(0,6);0,848(0,4);0,146(1,2);0,008(10,1);0,000(270,2);-0,009(8,6);-0,150(1,2)</p>
I-1-253:
<p>HPLC-EM: logP = 3,08; masa (m/z): 382,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,130(3,2);7,907(2,1);7,887(2,7);7,868(4,4);7,845(1,0);7,826(2,2);7,807(1,7);7,745(1,6);7,719(3,6);7,702(4,0);7,684(2,7);7,655(0,5);7,634(1,0);7,618(1,7);7,597(1,4);7,576(2,2);7,558(5,8);7,550(6,7);7,540(5,3);7,519(1,1);7,407(2,5);7,385(4,7);7,365(4,6);7,313(3,7);7,291(6,2);7,271(2,9);7,097(3,5);7,092(3,4);5,984(4,9);5,978(4,8);5,758(1,0);4,038(0,5);4,020(0,6);3,409(24,8);3,323(260,0);3,145(16,0);2,680(0,9);2,675(1,9);2,671(2,6);2,666(1,9);2,662(0,9);2,524(7,2);2,519(11,4);2,511(145,7);2,506(294,0);2,502(387,7);2,497(279,3);2,493(133,4);2,338(0,9);2,333(1,9);2,328(2,6);2,324(1,9);2,320(0,9);1,989(2,3);1,398(1,1);1,351(0,4);1,298(0,3);1,259(0,5);1,235(0,9);1,192(0,7);1,175(1,3);1,157(0,7);0,146(0,7);0,008(5,3);0,000(156,8);-0,009(4,8);-0,150(0,7)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-254:
<p>HPLC-EM: logP = 3,31; masa (m/z): 396,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,317(0,6);8,121(1,2);7,907(0,8);7,880(5,4);7,875(5,1);7,846(0,4);7,830(0,8);7,811(0,6);7,751(0,7);7,731(1,7);7,711(1,1);7,689(2,6);7,676(2,8);7,666(2,9);7,634(0,4);7,615(0,7);7,597(1,1);7,581(1,7);7,576(1,7);7,560(3,1);7,544(2,3);7,531(5,4);7,521(7,1);7,511(5,1);7,495(0,6);7,409(0,9);7,388(1,5);7,366(0,8);7,334(3,2);7,324(4,2);7,316(6,6);7,295(8,0);7,274(3,8);7,007(1,2);7,002(1,2);6,061(6,5);6,055(6,3);3,895(2,4);3,883(2,4);3,793(0,4);3,778(0,4);3,757(0,4);3,740(0,3);3,472(0,4);3,454(0,3);3,322(129,0);2,680(0,8);2,675(1,7);2,671(2,3);2,666(1,7);2,662(0,8);2,524(10,5);2,511(139,7);2,506(267,9);2,502(343,4);2,497(243,9);2,493(114,9);2,337(0,9);2,333(1,8);2,328(2,3);2,324(1,7);2,319(0,8);2,074(0,7);1,754(0,5);1,212(7,7);1,194(16,0);1,177(7,4);1,096(1,5);1,080(2,6);1,063(1,3);0,146(0,9);0,008(9,2);0,000(222,2);-0,009(7,7);-0,150(0,9)</p>
I-1-255:
<p>HPLC-EM: logP = 3,44; masa (m/z): 408,2 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,316(0,5);8,121(2,1);7,864(11,6);7,799(1,6);7,782(1,3);7,703(6,1);7,691(6,7);7,647(2,1);7,629(2,3);7,606(1,8);7,586(2,8);7,542(15,4);7,532(16,0);7,400(1,9);7,378(3,2);7,352(7,7);7,344(7,3);7,304(8,3);7,283(13,3);7,261(6,5);7,008(2,1);6,080(12,1);5,954(1,3);5,941(2,2);5,928(2,4);5,915(3,2);5,900(3,2);5,885(2,5);5,872(2,5);5,859(1,3);5,848(0,4);5,785(0,7);5,772(0,7);5,756(0,6);5,305(6,5);5,262(5,7);5,188(6,7);5,162(6,3);5,064(1,4);5,039(1,2);4,892(1,2);4,849(1,1);4,507(10,9);4,434(0,7);4,419(0,8);4,382(0,9);4,069(0,8);4,033(0,6);3,323(65,6);2,671(1,9);2,629(0,5);2,506(264,1);2,502(261,6);2,359(0,5);2,331(1,9);1,236(1,0);0,002(3,1);0,000(4,3)</p>
I-1-256:
<p>HPLC-EM: logP = 3,14; masa (m/z): 406,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,315(3,3);8,151(1,3);8,121(0,3);7,903(12,0);7,847(1,0);7,760(1,1);7,714(5,9);7,701(6,9);7,692(6,4);7,599(2,2);7,577(4,5);7,559(16,0);7,545(15,4);7,536(12,8);7,392(1,7);7,371(1,4);7,340(6,7);7,327(7,9);7,316(12,7);7,294(15,6);7,273(7,2);7,018(1,2);6,132(12,3);6,126(12,2);4,749(0,3);4,680(15,5);4,532(0,5);4,491(0,6);4,314(0,4);4,296(0,6);4,289(0,6);4,267(0,4);4,258(0,4);4,243(0,4);3,322(466,1);3,248(11,4);3,180(1,2);2,680(1,9);2,675(4,3);2,671(6,2);2,666(4,4);2,662(2,1);2,524(16,1);2,519(24,9);2,511(350,8);2,506(722,0);2,502(959,4);2,497(692,0);2,493(333,3);2,409(0,6);2,398(0,5);2,360(0,4);2,338(2,3);2,333(4,6);2,329(6,3);2,324(4,7);2,320(2,3);2,074(0,5);0,146(0,6);0,008(4,5);0,000(152,1);-0,008(5,7);-0,150(0,7)</p>
I-1-257:
<p>HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 493,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,644(1,8);7,945(4,2);7,843(2,3);7,824(3,1);7,779(4,8);7,761(3,0);7,744(1,4);7,712(1,9);7,694(2,4);7,677(1,2);7,589(0,6);7,568(1,4);7,553(2,3);7,532(1,5);7,515(0,7);7,426(0,8);7,420(0,8);7,262(0,5);7,256(0,6);7,237(3,2);7,216(5,2);7,195(2,7);7,171(0,8);7,165(0,7);7,150(0,4);7,144(0,4);6,985(0,3);4,292(0,9);4,275(1,7);4,257(0,9);4,085(0,5);4,067(1,6);4,049(1,6);4,032(0,6);3,372(0,8);2,566(2,1);2,512(1,5);2,422(0,5);2,403(1,2);2,383(0,8);2,212(0,7);2,192(1,0);2,160(74,4);2,113(0,4);2,107(0,4);1,971(7,3);1,964(2,9);1,958(3,9);1,952(23,6);1,946(43,1);1,940(58,7);1,933(40,1);1,927(20,5);1,768(0,4);1,436(3,3);1,383(0,6);1,372(14,8);1,340(2,8);1,309(0,4);1,285(3,9);1,276(16,0);1,221(2,0);1,217(0,8);1,203(3,8);1,185(1,9);0,882(0,4);0,146(0,4);0,008(3,3);0,000(80,1);-0,009(2,8);-0,150(0,4)</p>
I-1-258:
<p>HPLC-EM: logP = 3,68; masa (m/z): 422,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,316(0,9);8,126(1,1);7,895(0,9);7,870(9,8);7,864(9,5);7,822(0,7);7,804(0,6);7,731(1,6);7,702(4,7);7,691(5,1);7,688(5,0);7,680(5,2);7,617(0,8);7,600(1,7);7,584(3,0);7,579(3,0);7,563(5,4);7,547(4,4);7,536(10,8);7,525(11,4);7,514(9,8);7,410(0,8);7,390(1,3);7,367(0,9);7,319(12,5);7,299(16,0);7,277(6,7);6,958(1,1);6,047(11,5);6,041(11,4);3,769(4,8);3,561(0,5);3,545(0,5);3,466(0,5);3,451(0,5);3,323(194,1);2,676(1,7);2,671(2,3);2,666(1,7);2,662(0,8);2,541(1,4);2,524(6,6);2,511(135,1);2,507(274,6);2,502(362,1);2,497(258,9);2,493(123,1);2,333(1,6);2,329(2,2);2,324(1,6);1,118(1,2);1,107(2,3);1,100(2,3);1,089(3,5);1,077(2,5);1,070(2,5);1,058(1,4);1,039(0,5);0,999(0,4);0,985(0,5);0,456(9,7);0,436(9,1);0,390(0,3);0,311(1,2);0,295(1,1);0,257(3,4);0,245(11,0);0,233(10,3);0,222(2,7);0,000(1,5);-0,029(1,4)</p>
I-1-259:
<p>HPLC-EM: logP = 2,90; masa (m/z): 407,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,316(0,7);8,223(0,4);7,951(8,4);7,898(0,5);7,882(0,5);7,875(0,5);7,846(0,5);7,749(5,2);7,741(4,7);7,710(0,6);7,617(9,7);7,605(12,0);7,586(6,5);7,568(3,3);7,549(1,3);7,450(4,9);7,338(6,6);7,316(10,7);7,295(5,1);7,074(0,4);6,067(8,2);5,002(16,0);4,938(0,3);4,738(0,4);4,702(0,6);3,323(155,0);2,675(1,5);2,671(2,0);2,510(135,9);2,506(260,7);2,502(335,1);2,497(240,7);2,463(1,0);2,333(1,6);2,329(2,2);2,074(4,3);1,755(0,7);0,146(0,8);0,025(0,6);0,008(8,1);0,000(183,5);-0,007(6,5);-0,008(7,1);-0,149(0,9)</p>

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-260:
<p>HPLC-EM: logP = 3,50; masa (m/z): 410,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 19,970(0,9);8,314(1,7);7,884(4,8);7,880(4,9);7,623(2,8);7,611(3,2);7,588(1,4);7,577(2,4);7,562(1,5);7,486(1,0);7,474(3,0);7,464(5,3);7,453(2,8);7,318(6,6);7,305(9,3);7,291(3,3);6,204(5,6);6,200(5,8);4,922(0,8);4,911(2,1);4,900(2,9);4,889(2,1);3,324(377,8);3,320(448,0);3,319(443,5);2,616(3,5);2,613(5,1);2,610(3,9);2,541(1,4);2,522(6,9);2,519(9,1);2,516(8,6);2,507(239,3);2,504(543,6);2,501(773,8);2,498(589,8);2,496(299,2);2,389(3,6);2,386(5,1);2,383(3,9);1,163(15,8);1,152(16,0);0,005(3,2);0,000(118,1)</p>
I-1-261:
<p>HPLC-EM: logP = 3,64; masa (m/z): 410,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,115(0,6);7,901(0,4);7,887(0,5);7,874(4,5);7,870(4,5);7,827(0,4);7,733(0,4);7,708(0,5);7,684(2,3);7,676(2,5);7,669(2,6);7,581(0,6);7,571(1,3);7,567(1,3);7,556(2,4);7,546(1,4);7,542(1,5);7,531(1,0);7,521(4,5);7,513(5,6);7,506(4,8);7,496(0,6);7,400(0,4);7,385(0,7);7,372(0,4);7,312(2,7);7,305(5,7);7,298(3,1);7,291(7,1);7,277(3,5);6,969(0,6);6,086(6,2);6,082(6,2);3,836(1,6);3,322(54,5);2,614(0,4);2,611(0,3);2,523(0,7);2,520(0,8);2,517(0,7);2,508(21,2);2,505(47,3);2,502(67,5);2,499(48,6);2,496(22,9);2,386(0,4);2,383(0,3);1,645(0,5);1,633(2,6);1,621(5,4);1,608(5,6);1,596(3,0);1,584(0,8);0,936(7,7);0,923(16,0);0,911(7,3);0,643(0,7);0,631(1,3);0,619(0,7);0,005(0,5);0,000(19,7);-0,006(0,7)</p>
I-1-262:
<p>HPLC-EM: logP = 3,40; masa (m/z): 426,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,316(0,4);8,143(1,0);7,900(7,4);7,807(0,9);7,687(5,1);7,587(1,7);7,568(3,0);7,550(4,5);7,527(9,5);7,518(9,3);7,391(1,5);7,326(5,3);7,306(6,4);7,284(8,9);7,263(4,3);6,896(0,9);6,270(7,3);5,278(13,6);5,114(0,4);4,887(0,4);3,699(3,1);3,682(8,0);3,665(8,1);3,648(3,3);3,322(104,8);2,675(1,3);2,671(1,6);2,666(1,2);2,540(0,9);2,506(201,4);2,502(251,0);2,497(182,3);2,333(1,2);2,328(1,6);2,324(1,2);1,158(8,6);1,141(16,0);1,124(8,9);0,954(2,2);0,146(0,5);0,007(8,4);-0,001(103,4);-0,150(0,5)</p>
I-1-263:
<p>HPLC-EM: logP = 3,40; masa (m/z): 420,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,133(1,0);7,887(6,4);7,834(0,8);7,687(3,8);7,681(3,8);7,539(8,9);7,391(1,3);7,314(7,2);7,292(6,8);7,272(3,1);7,015(0,9);6,135(6,0);4,628(8,9);4,482(0,3);4,474(0,3);4,443(0,5);4,271(0,5);3,322(31,8);3,314(26,7);2,667(1,1);2,502(153,1);2,498(159,5);2,329(1,1);2,325(1,1);1,782(16,0);1,688(2,9);0,000(6,1);-0,003(3,6);-0,008(4,3)</p>
I-1-264:
<p>HPLC-EM: logP = 3,38; masa (m/z): 432,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,316(0,5);8,189(0,4);7,898(10,3);7,893(10,1);7,849(0,4);7,837(0,4);7,765(0,5);7,728(4,7);7,718(5,5);7,714(5,7);7,706(5,9);7,601(1,8);7,580(5,3);7,571(14,2);7,564(16,0);7,558(13,3);7,549(14,3);7,528(1,8);7,370(5,8);7,362(5,9);7,358(5,7);7,349(4,9);7,319(8,8);7,298(15,1);7,277(7,0);7,021(0,4);6,449(1,4);6,439(2,7);6,429(1,4);6,310(2,8);6,300(5,6);6,290(2,9);6,171(1,3);6,161(2,8);6,151(1,5);6,092(11,9);6,086(11,7);4,355(3,3);4,346(3,6);4,319(6,7);4,310(6,7);4,282(3,7);4,273(3,4);3,322(79,8);2,676(0,9);2,671(1,3);2,666(0,9);2,662(0,4);2,541(0,7);2,524(3,3);2,511(72,5);2,506(146,7);2,502(194,1);2,497(140,3);2,493(67,6);2,338(0,4);2,333(0,9);2,329(1,3);2,324(0,9);0,008(0,5););0,000(15,4);-0,009(0,6)</p>
I-1-265:
<p>HPLC-EM: logP = 3,59; masa (m/z): 450,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,316(0,5);7,920(10,3);7,916(10,2);7,732(4,8);7,723(5,4);7,710(6,1);7,605(1,7);7,589(3,9);7,583(4,6);7,565(14,1);7,553(13,5);7,546(13,0);7,530(3,1);7,347(6,1);7,334(5,9);7,324(6,6);7,315(9,9);7,294(16,0);7,273(7,5);6,213(11,6);6,207(11,4);4,774(4,2);4,756(4,2);3,322(90,8);2,675(1,0);2,671(1,4);2,666(1,1);2,541(0,7);2,524(3,7);2,510(83,4);2,506(165,6);2,502(217,9);2,497(158,5);2,493(77,0);2,333(1,1);2,328(1,5);2,324(1,1);0,008(0,6);0,000(16,1);-0,009(0,6)</p>
I-1-266:
<p>HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 368,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,332(11,3);8,212(0,5);8,206(0,6);8,077(8,5);8,071(8,6);7,757(7,2);7,753(7,8);7,737(8,5);7,733(8,7);7,640(1,5);7,624(3,1);7,618(2,5);7,608(2,1);7,603(5,8);7,597(2,3);7,586(2,7);7,581(3,7);7,563(6,8);7,559(6,9);7,544(10,2);7,540(9,2);7,478(9,6);7,459(13,1);7,439(6,0);7,417(0,8);7,399(9,9);7,378(16,0);7,357(7,4);6,946(14,3);6,940(14,4);6,928(1,2);6,729(0,9);5,757(6,7);3,323(58,3);2,675(0,7);2,671(0,9);2,666(0,7);2,541(31,2);2,524(2,8);2,511(53,6);2,506(107,0);2,502(140,6);2,497(102,8);2,493(50,5);2,348(3,6);2,337(0,5);2,333(0,8);2,328(1,0);2,324(0,7);0,008(1,4);0,000(39,7);-0,009(1,4)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
<p>I-1-267:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 368,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,468(5,9);8,080(4,4);8,077(3,8);8,074(4,4);7,640(0,8);7,624(1,7);7,618(1,2);7,608(1,1);7,602(3,3);7,597(1,2);7,586(1,3);7,581(2,2);7,564(7,7);7,560(8,8);7,543(15,4);7,541(16,0);7,497(8,3);7,480(5,2);7,474(4,2);7,457(3,1);7,410(0,8);7,406(1,4);7,401(5,5);7,388(1,0);7,380(8,8);7,359(4,1);7,354(1,1);6,949(8,8);6,943(8,7);3,406(0,3);3,390(0,6);3,343(380,7);3,321(1,7);3,301(0,5);3,291(0,4);2,676(0,4);2,672(0,6);2,667(0,4);2,542(50,0);2,532(0,5);2,525(1,8);2,520(3,0);2,512(34,4);2,507(69,0);2,503(90,9);2,498(65,3);2,493(30,6);2,334(0,4);2,329(0,6);2,325(0,4);0,000(0,9)</p>
<p>I-1-268:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 328,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,056(0,4);7,752(1,1);7,749(1,0);7,746(1,1);7,523(0,4);7,518(0,4);7,502(0,9);7,486(0,4);7,480(0,5);7,238(0,6);7,219(1,1);7,210(0,4);7,205(1,5);7,200(1,2);7,192(0,3);7,184(2,3);7,163(1,2);7,101(2,3);7,082(1,7);7,042(1,8);7,035(1,8);2,316(16,0);2,150(7,5);1,963(0,5);1,957(0,7);1,951(3,7);1,945(6,6);1,939(9,0);1,933(6,2);1,927(3,2);1,372(0,8);1,276(0,8);0,008(0,5);0,000(11,0);-0,009(0,5)</p>
<p>I-1-269:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,20; masa (m/z): 357,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,210(1,8);10,533(1,1);8,177(1,1);8,156(1,2);8,072(2,3);8,066(2,3);7,823(1,5);7,805(1,6);7,646(0,4);7,631(0,7);7,625(0,7);7,615(0,6);7,609(1,4);7,593(0,7);7,588(0,9);7,573(0,5);7,524(0,9);7,521(0,9);7,503(1,7);7,485(1,0);7,482(0,9);7,405(2,5);7,384(4,1);7,363(1,9);7,188(1,1);7,170(1,9);7,152(0,9);6,940(2,2);6,934(2,2);3,325(42,1);2,675(0,4);2,671(0,5);2,541(0,5);2,506(53,8);2,502(68,6);2,497(49,8);2,328(0,4);2,260(0,5);2,087(16,0);2,027(0,3);1,909(2,2);1,235(1,0);0,008(2,9);0,000(61,0);-0,008(2,6)</p>
<p>I-1-270:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 342,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,316(0,7);7,804(2,8);7,785(3,3);7,770(1,1);7,768(1,1);7,752(2,5);7,750(2,4);7,733(1,9);7,731(1,7);7,646(3,5);7,628(3,5);7,610(5,1);7,603(2,8);7,594(1,3);7,515(4,3);7,482(0,5);7,466(1,0);7,460(0,8);7,450(0,7);7,445(2,0);7,439(0,8);7,428(0,9);7,423(1,3);7,408(0,6);7,263(0,9);7,257(3,4);7,236(5,7);7,215(2,5);7,209(0,6);5,757(1,5);5,130(4,5);5,124(4,4);3,322(330,5);2,680(1,2);2,675(2,4);2,671(3,2);2,666(2,3);2,661(1,2);2,612(0,4);2,524(10,6);2,519(16,2);2,510(174,5);2,506(347,1);2,501(454,2);2,497(323,8);2,492(151,3);2,337(0,9);2,333(2,1);2,328(2,9);2,324(2,1);2,319(0,9);1,903(16,0);1,298(1,4);1,259(2,1);1,235(1,1);0,146(0,9);0,008(8,0);0,000(229,0);-0,009(7,1);-0,150(0,9)</p>
<p>I-1-271:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,47; masa (m/z): 363,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,146(2,3);8,038(1,7);8,032(1,8);7,617(0,6);7,611(0,5);7,602(0,4);7,596(1,2);7,580(0,5);7,575(0,8);7,559(0,4);7,423(1,4);7,402(2,8);7,394(2,1);7,382(2,3);7,373(3,4);7,352(1,6);7,102(2,4);7,096(2,8);7,080(2,0);7,076(2,5);6,936(3,2);6,930(3,3);3,811(16,0);3,328(486,3);2,995(0,4);2,680(0,7);2,675(1,2);2,671(1,6);2,666(1,2);2,541(53,6);2,524(5,1);2,519(8,0);2,511(91,0);2,506(182,0);2,502(239,8);2,497(172,9);2,493(82,2);2,338(0,5);2,333(1,1);2,328(1,5);2,324(1,1);0,008(0,6);0,000(16,7);-0,009(0,4)</p>
<p>I-1-272:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,48; masa (m/z): 325,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 10,113(5,2);9,387(0,4);8,021(7,9);8,003(9,3);7,945(10,2);7,932(4,2);7,914(7,5);7,896(9,4);7,883(2,7);7,875(1,5);7,869(1,5);7,861(1,4);7,830(3,3);7,812(7,7);7,794(5,3);7,779(8,6);7,776(8,5);7,761(10,4);7,758(9,4);7,742(3,6);7,740(3,2);7,591(1,8);7,576(4,0);7,570(3,7);7,560(2,8);7,554(8,1);7,548(2,9);7,539(4,0);7,533(4,7);7,517(2,3);7,266(8,9);7,245(16,0);7,231(3,6);7,224(7,8);7,210(1,6);7,045(8,0);7,039(7,8);6,675(1,8);6,669(1,8);2,727(0,4);2,463(0,4);2,184(0,7);2,153(83,5);2,120(0,5);2,114(0,7);2,108(0,8);2,101(0,6);1,964(5,2);1,958(6,4);1,953(47,9);1,946(89,3);1,940(124,6);1,934(86,0);1,928(44,1);1,775(0,5);1,769(0,7);1,763(0,5);1,267(0,4);0,008(1,5);0,000(42,2);-0,009(1,4)</p>
<p>I-1-273:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,89; masa (m/z): 340,2 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,037(8,6);8,039(7,7);7,635(1,1);7,619(2,5);7,614(2,2);7,597(4,8);7,581(2,5);7,576(3,1);7,560(1,4);7,401(7,3);7,393(8,7);7,382(8,5);7,372(16,0);7,351(11,4);7,335(4,2);7,234(4,5);7,216(7,0);7,197(3,0);6,981(7,4);6,969(10,7);6,963(14,8);5,756(3,7);3,323(59,0);2,675(0,8);2,670(1,0);2,666(0,8);2,540(0,8);2,506(126,6);2,501(157,1);2,497(13,6);2,332(0,8);2,328(1,0);2,324(0,8);2,257(0,9);2,244(2,0);2,236(2,3);2,223(3,8);2,210(2,3);2,202(2,0);2,189(1,0);1,989(0,7);1,175(0,4);0,954(2,5);0,943(7,7);0,938(7,9);0,928(4,7);0,922(7,6);0,917(7,6);0,907(2,9);0,705(3,1);0,691(9,4);0,682(8,8);0,678(8,6);0,666(2,5);0,146(0,4);0,008(4,3);0,000(84,1);-0,008(3,2);-0,150(0,4)</p>

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-274:
<p>HPLC-EM: logP = 2,85; masa (m/z): 346,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,297(4,4);8,315(0,3);8,062(3,4);8,056(3,5);7,637(0,6);7,621(1,2);7,616(1,0);7,605(0,8);7,600(2,3);7,594(0,9);7,583(1,0);7,578(1,5);7,563(0,7);7,437(1,1);7,421(1,4);7,417(2,2);7,402(3,3);7,397(5,5);7,381(2,5);7,376(6,6);7,355(3,1);7,171(3,6);7,153(3,1);7,144(2,0);7,121(3,0);7,100(1,6);6,953(5,9);6,947(5,9);3,327(306,3);2,678(2,1);2,671(1,8);2,666(1,7);2,660(5,5);2,641(5,4);2,622(1,8);2,541(42,5);2,524(4,3);2,519(7,1);2,511(82,9);2,506(164,3);2,502(213,7);2,497(155,5);2,493(76,3);2,337(0,5);2,333(1,0);2,328(1,4);2,324(1,0);2,074(7,1);1,259(0,4);1,235(0,6);1,203(7,2);1,184(16,0);1,165(7,0);1,149(0,7);0,008(1,1);0,000(32,5);-0,009(1,3)</p>
I-1-275:
<p>HPLC-EM: logP = 1,47; masa (m/z): 329,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,235(3,8);8,593(2,5);8,588(2,7);8,580(2,7);8,576(2,7);8,315(0,7);8,068(3,1);8,062(3,1);7,872(1,8);7,868(1,9);7,853(2,0);7,849(2,0);7,639(0,5);7,623(1,2);7,617(0,9);7,607(0,8);7,602(2,4);7,596(0,9);7,585(1,1);7,580(1,6);7,564(0,7);7,398(3,8);7,377(6,3);7,357(3,0);7,335(2,0);7,323(2,1);7,316(2,1);7,304(1,9);6,965(4,9);6,958(4,9);3,334(50,5,9);2,915(1,7);2,897(5,3);2,878(5,4);2,859(1,8);2,680(1,2);2,675(2,5);2,671(3,5);2,666(2,5);2,662(1,2);2,541(60,7);2,524(10,3);2,519(15,9);2,511(199,0);2,506(400,9);2,502(526,4);2,497(373,9);2,492(174,8);2,419(0,4);2,338(1,2);2,333(2,5);2,328(3,5);2,324(2,4);2,319(1,1);2,074(13,8);1,298(0,6);1,259(1,0);1,248(7,5);1,229(16,0);1,210(7,1);1,147(0,3);0,008(2,8);0,000(83,4);-0,009(2,2)</p>
I-1-276:
<p>HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 386,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,563(9,8);8,090(8,0);8,084(8,0);7,774(0,8);7,754(2,5);7,746(1,4);7,735(5,8);7,721(9,3);7,701(16,0);7,685(4,5);7,680(3,4);7,639(1,3);7,623(2,6);7,617(2,3);7,607(1,8);7,601(5,3);7,596(2,2);7,585(2,4);7,580(3,4);7,564(1,5);7,401(8,6);7,379(14,4);7,359(6,5);6,927(13,6);6,921(13,5);3,517(0,6);3,351(103,3);2,714(0,5);2,544(105,9);2,527(0,8);2,522(0,8);2,513(10,6);2,509(21,8);2,504(29,2);2,500(21,8);2,496(10,8);2,370(0,5);0,000(2,0)</p>
I-1-277:
<p>HPLC-EM: logP = 2,74; masa (m/z): 431,8 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,408(2,5);8,080(1,8);8,074(1,8);7,740(1,9);7,722(1,9);7,720(2,0);7,623(0,6);7,617(0,5);7,608(0,4);7,602(1,2);7,596(0,5);7,586(0,5);7,581(0,8);7,565(0,4);7,410(0,3);7,401(2,1);7,379(4,1);7,359(3,3);7,337(1,1);7,335(1,1);7,284(1,0);7,268(1,1);7,264(1,2);7,249(1,2);7,243(0,6);7,228(0,6);6,943(3,3);6,937(3,2);4,116(1,0);4,103(3,1);4,089(3,1);4,076(1,1);3,328(12,9);3,176(16,0);3,163(15,4);2,524(0,3);2,510(5,9);2,506(11,7);2,501(15,3);2,497(10,9);2,492(5,1);0,008(0,3);0,000(9,3)</p>
I-1-278:
<p>HPLC-EM: logP = 2,60; masa (m/z): 318,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,109(8,0);8,066(7,6);8,060(7,5);7,695(2,5);7,691(2,9);7,676(4,8);7,672(5,4);7,657(3,0);7,653(3,0);7,640(1,5);7,625(3,1);7,618(2,4);7,609(2,0);7,603(6,2);7,597(3,6);7,592(2,3);7,586(3,0);7,582(5,1);7,579(4,3);7,576(3,2);7,572(2,7);7,565(3,9);7,560(3,0);7,558(3,8);7,553(2,2);7,544(2,1);7,539(1,8);7,409(1,5);7,405(2,6);7,400(9,8);7,387(2,0);7,379(16,0);7,358(7,6);7,352(2,5);7,346(4,6);7,326(9,0);7,321(5,3);7,319(4,5);7,310(9,0);7,308(8,3);7,300(3,7);7,298(3,6);7,291(4,5);7,289(3,7);6,945(10,0);6,939(9,8);3,424(0,4);3,412(0,5);3,399(0,6);3,344(657,4);2,712(0,4);2,681(0,3);2,676(0,7);2,672(1,0);2,667(0,8);2,663(0,4);2,542(109,0);2,525(2,9);2,520(4,5);2,512(57,6);2,507(116,9);2,503(155,0);2,498(111,8);2,494(53,0);2,368(0,4);2,339(0,4);2,334(0,8);2,330(1,0);2,325(0,8);2,320(0,4);0,000(4,6)</p>
I-1-279:
<p>HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 319,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,330(9,6);8,391(5,3);8,381(5,1);8,379(5,2);8,317(0,4);8,269(3,1);8,265(3,0);8,251(3,8);8,246(5,8);8,241(3,3);8,227(3,3);8,222(2,9);8,088(8,6);8,083(8,4);7,643(1,5);7,627(3,1);7,621(2,7);7,612(2,3);7,606(6,1);7,600(2,6);7,590(2,9);7,585(3,9);7,569(1,9);7,519(0,4);7,507(3,7);7,502(3,8);7,494(3,9);7,489(5,6);7,484(3,8);7,476(3,5);7,471(3,3);7,404(9,6);7,383(16,0);7,362(7,4);6,946(12,0);6,940(11,6);3,324(126,4);3,063(2,4);2,998(0,5);2,897(0,5);2,680(0,7);2,675(1,3);2,671(1,7);2,666(1,3);2,662(0,6);2,541(32,6);2,524(6,8);2,511(100,3);2,506(194,4);2,502(252,1);2,497(182,2);2,493(87,8);2,338(0,6);2,333(1,2);2,329(1,7);2,324(1,2);2,320(0,6);0,008(2,8);0,000(68,7);-0,008(2,4)</p>
I-1-280:
<p>HPLC-EM: logP = 2,75; masa (m/z): 330,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,544(2,3);8,047(1,9);8,042(1,9);7,782(1,5);7,777(1,6);7,762(1,6);7,758(1,6);7,642(0,4);7,627(0,7);7,620(0,6);7,611(0,5);7,605(1,5);7,599(0,5);7,589(0,6);7,584(0,9);7,568(0,4);7,553(0,8);7,548(0,8);7,534(1,1);7,532(1,3);7,528(1,1);7,514(1,0);7,509(1,0);7,405(0,4);7,400(0,6);7,395(2,4);7,383(0,5);7,374(3,9);7,354(1,8);7,348(0,5);7,210(2,1);7,189(1,8);7,106(1,2);7,104(1,2);7,087(2,0);7,086(2,0);7,069(1,0);7,067(1,0);6,960(3,1);6,953(3,1);5,756(0,6);3,931(16,0);3,324(20,7);2,524(0,7);2,519(1,1);2,511(12,2);2,506(24,6);2,502(32,6);2,497(23,4);2,493(11,1);0,008(0,6);0,000(18,2);-0,009(0,6)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-281:
<p>HPLC-EM: logP = 2,43; masa (m/z): 304,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,776(0,7);7,719(1,8);7,716(1,8);7,713(1,7);7,523(0,6);7,517(0,6);7,507(0,4);7,502(1,3);7,496(0,5);7,486(0,7);7,480(0,8);7,465(0,4);7,390(2,6);7,385(2,5);7,218(0,4);7,208(2,1);7,196(0,5);7,187(3,6);7,178(0,4);7,166(1,8);6,977(2,6);6,971(2,5);6,820(2,7);6,815(2,5);5,446(1,0);2,666(0,5);2,587(16,0);2,522(1,4);2,138(3,5);1,963(0,7);1,952(5,6);1,945(10,3);1,939(13,9);1,933(9,4);1,927(4,8);1,372(0,7);1,276(0,9);1,269(0,5);0,000(5,1)</p>
I-1-282:
<p>HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 356,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,324(9,3);11,220(0,4);8,212(0,5);8,205(0,5);8,094(0,4);8,082(7,5);8,076(7,4);7,917(10,0);7,905(10,6);7,649(1,3);7,633(2,7);7,628(2,2);7,617(1,9);7,612(5,3);7,606(2,1);7,595(2,3);7,590(3,4);7,575(1,6);7,565(4,2);7,426(9,5);7,416(2,4);7,409(16,0);7,396(12,8);7,386(14,6);7,365(6,8);7,288(4,4);6,934(0,9);6,927(0,9);6,895(12,3);6,889(12,5);6,729(0,8);5,757(2,8);3,324(116,7);3,051(0,4);2,680(0,5);2,675(1,0);2,671(1,3);2,666(1,0);2,662(0,5);2,541(7,1);2,524(4,0);2,519(6,4);2,511(76,7);2,506(152,6);2,502(199,6);2,497(143,6);2,493(68,4);2,347(2,9);2,338(0,6);2,333(1,0);2,328(1,4);2,324(1,0);2,320(0,5);0,008(1,8);0,000(53,6);-0,009(1,7)</p>
I-1-283:
<p>HPLC-EM: logP = 2,27; masa (m/z): 372,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,784(4,2);8,317(0,5);8,057(3,6);8,051(3,6);7,639(0,6);7,623(1,2);7,618(1,1);7,607(1,0);7,602(2,4);7,586(1,3);7,580(1,6);7,565(0,8);7,399(4,1);7,378(6,8);7,357(3,3);7,266(2,1);7,131(4,8);6,997(2,3);6,861(4,2);6,855(4,1);4,170(0,4);3,810(16,0);3,537(0,6);3,321(520,2);3,035(0,4);2,861(0,3);2,795(0,4);2,718(0,4);2,675(6,3);2,670(8,4);2,666(6,1);2,541(12,5);2,523(32,0);2,510(491,8);2,506(943,2);2,501(1214,7);2,497(877,5);2,492(424,1);2,412(0,5);2,332(5,9);2,328(8,0);2,323(5,8);1,235(0,3);1,147(0,8);0,933(0,5);0,146(1,3);0,008(12,2);0,000(297,3);-0,009(10,4);-0,150(1,3)</p>
I-1-284:
<p>HPLC-EM: logP = 2,82; masa (m/z): 374,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,493(7,8);8,316(1,2);8,082(8,3);8,076(8,1);7,923(7,9);7,910(8,3);7,646(1,4);7,631(2,9);7,625(2,3);7,615(1,9);7,609(5,7);7,603(2,1);7,593(2,5);7,588(3,7);7,572(1,6);7,448(15,3);7,435(14,5);7,404(9,7);7,383(16,0);7,362(7,3);6,888(6,9);6,882(6,8);3,321(329,2);2,679(2,0);2,675(4,3);2,670(5,8);2,666(4,3);2,661(2,0);2,596(0,3);2,524(18,6);2,510(332,4);2,506(666,1);2,501(876,1);2,497(627,6);2,492(297,5);2,417(0,5);2,337(2,0);2,333(4,1);2,328(5,8);2,324(4,1);2,319(1,9);1,398(0,9);1,336(0,6);1,298(0,4);1,258(0,5);1,250(0,7);0,146(2,3);0,008(19,4);0,000(544,0);-0,009(17,4);-0,021(0,7);-0,150(2,3)</p>
I-1-285:
<p>HPLC-EM: logP = 2,65; masa (m/z): 330,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,119(3,4);8,758(5,0);8,752(5,2);8,583(4,6);8,577(4,2);8,316(0,4);8,098(2,8);8,092(2,8);7,645(0,5);7,629(1,0);7,623(0,8);7,613(0,7);7,608(2,0);7,602(0,7);7,591(0,8);7,586(1,3);7,571(0,6);7,414(0,5);7,404(3,4);7,383(5,5);7,362(2,6);7,357(0,7);6,975(5,2);6,969(5,1);3,324(200,9);3,310(1,5);3,106(1,7);3,087(5,3);3,068(5,4);3,050(1,8);2,680(0,4);2,675(0,9);2,671(1,3);2,666(0,9);2,662(0,4);2,541(8,9);2,524(3,3);2,519(5,5);2,511(71,7);2,506(145,0);2,502(190,3);2,497(134,9);2,493(63,2);2,338(0,4);2,333(0,9);2,328(1,2);2,324(0,9);2,319(0,4);2,074(6,1);1,287(7,3);1,268(16,0);1,259(0,7);1,249(7,3);1,235(0,6);0,008(1,5);0,000(45,7);-0,009(1,3)</p>
I-1-286:
<p>HPLC-EM: logP = 2,33; masa (m/z): 352,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H [CD₃CN] 6,98 (d, 1H), 7,05 – 7,11 (m, 2H), 7,50 – 7,55 (m, 1H), 7,91 – 7,92 (m, 1H), 8,03 (d, 1H), 8,39 (d, 1H), 9,43 (s a, 1H).</p>
I-1-287:
<p>HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 386,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,415(10,6);8,074(8,2);8,068(8,1);7,851(1,9);7,838(2,2);7,831(3,9);7,818(3,9);7,811(2,7);7,798(2,4);7,634(3,8);7,623(3,2);7,616(4,3);7,607(5,5);7,601(7,1);7,596(2,4);7,585(5,3);7,580(4,6);7,564(1,7);7,497(7,0);7,478(6,3);7,408(1,5);7,399(9,6);7,378(16,0);7,357(7,5);6,905(15,3);6,899(15,2);4,583(0,4);3,512(3,8);3,492(0,6);3,478(0,7);3,466(0,5);3,463(0,4);3,456(0,4);3,424(1,1);3,411(1,2);3,397(1,3);3,339(1044,4);3,277(0,5);2,995(0,4);2,712(0,5);2,681(0,6);2,676(1,3);2,672(1,8);2,667(1,3);2,663(0,6);2,542(136,0);2,525(5,1);2,520(7,9);2,512(98,7);2,507(197,8);2,502(262,0);2,498(190,3);2,493(90,8);2,368(0,5);2,338(0,6);2,334(1,2);2,329(1,7);2,325(1,2);2,320(0,6);2,074(0,6);1,235(0,8);0,008(0,8);0,000(25,2);-0,009(0,7)</p>
I-1-288:
<p>HPLC-EM: logP = 2,64; masa (m/z): 415,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,883(10,6);8,053(7,9);8,047(7,8);7,922(15,8);7,917(16,0);7,641(1,2);7,625(2,6);7,619(2,2);7,610(1,8);7,604(5,1);7,598(2,1);7,588(2,4);7,583(3,3);7,567(1,5);7,408(1,5);7,399(8,8);7,378(14,3);7,357(6,6);6,909(16,0);6,904(15,9);6,887(12,9);6,881(12,6);5,757(15,4);3,329(22,4);2,512(19,9);2,508(38,2);2,503(49,3);2,499(35,5);2,495(17,0);2,087(2,7);1,990(1,1);1,397(0,7);1,175(0,5);0,008(1,6);0,000(31,5);-0,008(1,1)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-289:
<p>HPLC-EM: logP = 3,19; masa (m/z): 405,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,886(2,7);8,140(1,6);8,136(1,7);7,631(0,5);7,627(0,5);7,617(1,0);7,606(0,5);7,603(0,6);7,410(1,7);7,396(2,9);7,382(1,4);6,980(2,9);6,976(3,0);3,870(16,0);3,358(196,3);2,760(3,9);2,748(4,1);2,553(49,9);2,534(0,4);2,531(0,5);2,528(0,4);2,519(11,2);2,516(25,8);2,513(37,1);2,510(27,8);2,507(13,9);2,046(0,4);2,035(0,7);2,024(0,9);2,013(0,8);2,001(0,4);0,951(13,6);0,940(13,5)</p>
I-1-290:
<p>HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 391,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,859(2,7);8,138(1,8);8,134(1,8);7,633(0,5);7,629(0,5);7,619(1,0);7,608(0,5);7,605(0,7);7,410(1,8);7,396(3,1);7,382(1,5);6,978(3,0);6,974(3,0);3,869(16,0);3,519(0,4);3,508(1,0);3,496(1,4);3,485(1,0);3,473(0,4);3,349(170,5);2,552(53,4);2,534(0,5);2,531(0,5);2,519(8,2);2,516(17,4);2,513(24,1);2,510(18,0);2,507(8,9);1,285(14,7);1,273(14,7)</p>
I-1-291:
<p>HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 373,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,653(2,1);8,316(0,3);8,112(1,9);8,106(1,9);7,631(0,6);7,625(0,6);7,615(0,5);7,609(1,3);7,604(0,5);7,593(0,6);7,588(0,8);7,572(0,4);7,406(2,1);7,385(3,5);7,364(1,6);6,912(3,1);6,905(3,1);3,326(270,7);2,680(0,6);2,675(1,2);2,671(1,7);2,666(1,2);2,662(0,6);2,541(2,4);2,524(5,2);2,519(8,2);2,511(94,7);2,506(189,4);2,502(249,0);2,497(180,2);2,493(87,3);2,422(16,0);2,337(0,5);2,333(1,2);2,328(1,6);2,324(1,2);2,319(0,5);2,074(3,4);1,235(0,4);0,008(1,4);0,000(40,9);-0,009(1,4)</p>
I-1-292:
<p>HPLC-EM: logP = 3,33; masa (m/z): 405,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,866(1,1);8,130(0,8);8,126(0,8);7,616(0,4);7,408(0,7);7,393(1,3);7,380(0,6);6,962(1,3);6,958(1,3);3,841(6,8);3,3754(253,8);3,3745(256,5);2,552(20,7);2,534(0,4);2,531(0,5);2,528(0,5);2,519(8,5);2,516(17,7);2,513(24,3);2,510(18,0);2,507(8,8);1,401(16,0)</p>
I-1-293:
<p>HPLC-EM: logP = 4,15; masa (m/z): 394,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,298(0,9);8,087(0,8);8,084(0,8);7,611(0,5);7,396(0,8);7,382(1,4);7,368(0,7);6,923(0,8);6,920(0,8);3,843(5,2);3,340(158,7);2,542(10,3);2,523(0,3);2,520(0,4);2,517(0,4);2,508(13,3);2,505(29,0);2,502(40,4);2,499(29,7);2,497(14,6);1,352(16,0)</p>
I-1-294:
<p>HPLC-EM: logP = 2,34; masa (m/z): 368,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,537(3,0);8,107(3,1);8,104(3,1);7,646(0,5);7,636(1,2);7,632(1,1);7,621(2,1);7,611(1,1);7,607(1,4);7,597(0,6);7,408(3,5);7,393(6,2);7,380(3,0);7,109(1,1);7,018(2,4);6,941(2,6);6,938(2,6);6,927(1,3);3,858(15,0);3,349(973,1);2,628(0,7);2,625(1,0);2,622(0,8);2,552(19,9);2,534(1,5);2,531(1,9);2,528(1,8);2,519(53,0);2,516(118,1);2,513(166,3);2,510(120,3);2,507(57,5);2,400(0,8);2,397(1,1);2,394(0,8);2,303(0,5);2,270(16,0);1,246(0,6);0,010(0,4)</p>
I-1-295:
<p>HPLC-EM: logP = 2,25; masa (m/z): 370,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,479(1,6);9,444(13,2);9,182(16,0);7,788(7,7);7,785(7,4);7,783(7,4);7,559(1,3);7,550(0,4);7,543(2,8);7,537(2,5);7,528(1,9);7,522(5,6);7,516(2,0);7,506(2,7);7,500(3,2);7,485(1,6);7,427(0,5);7,420(0,5);7,241(0,4);7,236(0,6);7,227(2,2);7,218(8,3);7,205(2,9);7,197(13,9);7,188(1,8);7,176(7,1);7,167(1,4);6,993(10,7);6,986(10,7);6,972(1,2);6,966(1,1);5,447(12,0);4,085(0,4);4,067(1,3);4,050(1,3);4,032(0,4);2,147(20,3);2,143(17,2);2,107(0,4);1,971(5,9);1,964(2,2);1,958(2,7);1,952(20,5);1,946(38,1);1,940(53,1);1,933(36,7);1,927(19,0);1,436(1,9);1,383(0,3);1,372(8,7);1,340(1,5);1,300(0,4);1,285(2,2);1,277(9,3);1,221(1,6);1,217(0,4);1,203(3,0);1,185(1,5);0,008(0,7);0,000(17,7);-0,009(0,6)</p>
I-1-296:
<p>HPLC-EM: logP = 3,14; masa (m/z): 422,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,952(0,3);11,701(11,4);8,316(0,6);8,112(8,3);8,106(8,4);8,090(2,3);8,086(2,5);8,069(2,8);8,065(2,8);8,060(2,6);8,047(2,3);7,642(1,3);7,626(2,8);7,620(2,3);7,610(1,9);7,604(5,6);7,599(2,1);7,588(2,5);7,583(3,6);7,567(1,6);7,404(9,5);7,383(16,0);7,362(7,3);7,280(0,3);6,910(14,6);6,904(14,6);5,756(0,5);3,323(119,2);3,021(0,5);2,829(0,5);2,676(1,0);2,671(1,4);2,667(1,0);2,541(0,8);2,524(3,7);2,511(80,1);2,507(161,9);2,502(212,2);2,498(150,7);2,493(71,2);2,333(1,0);2,329(1,4);2,324(1,0);2,179(0,5);1,259(0,5);1,236(7,0);0,854(0,7);0,146(0,3);0,008(2,6);0,000(74,7);-0,008(2,4)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-297:
<p>HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 319,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,180(3,1);8,075(2,9);8,069(2,8);7,648(0,4);7,632(0,9);7,626(0,8);7,616(0,7);7,611(1,9);7,605(0,7);7,595(0,9);7,589(1,2);7,574(0,5);7,402(3,1);7,381(5,2);7,360(2,4);6,894(3,7);6,887(3,6);3,325(92,7);2,675(0,5);2,671(0,7);2,66(0,5);2,541(0,5);2,524(1,8);2,510(42,2);2,506(82,7);2,502(106,4);2,497(75,8);2,493(35,9);2,399(15,2);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);2,071(16,0);1,989(0,3);0,000(42,0);-0,008(1,4)</p>
I-1-298:
<p>HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 398,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,235(2,3);8,102(2,1);8,099(2,1);7,647(0,3);7,637(0,7);7,633(0,7);7,623(1,4);7,612(0,7);7,608(0,9);7,598(0,4);7,407(2,3);7,393(4,1);7,379(2,0);6,940(1,9);6,936(2,0);3,881(14,2);3,354(657,5);2,628(0,3);2,625(0,5);2,622(0,3);2,552(9,2);2,534(0,7);2,531(0,8);2,528(0,8);2,519(23,5);2,516(52,2);2,513(73,6);2,510(53,9);2,507(25,7);2,397(0,5);2,394(0,4);2,168(16,0);0,010(0,5)</p>
I-1-299:
<p>HPLC-EM: logP = 2,84; masa (m/z): 398,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,354(4,1);8,108(3,4);8,105(3,4);7,672(7,7);7,648(0,5);7,638(1,2);7,634(1,1);7,623(2,1);7,613(1,2);7,609(1,4);7,599(0,6);7,408(3,5);7,394(6,2);7,381(3,0);6,947(3,8);6,943(3,8);4,294(1,6);4,282(5,1);4,270(5,2);4,258(1,8);3,355(364,0);3,353(606,6);3,005(0,9);2,625(0,5);2,552(54,1);2,534(0,8);2,531(1,0);2,528(1,0);2,519(27,5);2,516(59,1);2,513(81,5);2,510(59,6);2,507(29,0);2,397(0,5);1,367(7,4);1,355(16,0);1,343(7,5);1,246(0,4);0,010(0,5)</p>
I-1-300:
<p>HPLC-EM: logP = 3,15; masa (m/z): 412,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,267(2,3);8,100(2,0);8,097(2,0);7,648(0,3);7,638(0,7);7,634(0,7);7,623(1,4);7,613(0,7);7,609(0,9);7,599(0,4);7,407(2,2);7,393(3,9);7,379(1,9);6,939(2,1);6,935(2,1);4,226(1,0);4,214(2,9);4,202(3,0);4,190(1,0);3,351(498,7);2,625(0,4);2,552(3,9);2,534(0,6);2,531(0,8);2,528(0,8);2,519(21,5);2,516(47,9);2,513(67,3);2,510(48,7);2,507(23,6);2,397(0,4);2,181(16,0);1,346(4,7);1,334(10,3);1,322(4,7);0,010(0,5)</p>
I-1-301:
<p>HPLC-EM: logP = 2,37; masa (m/z): 384,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,334(2,2);8,316(0,7);8,109(5,4);8,042(1,7);8,036(1,7);7,620(0,6);7,615(0,5);7,605(0,4);7,599(1,2);7,593(0,5);7,582(0,5);7,577(0,8);7,562(0,3);7,396(2,0);7,375(3,3);7,354(1,6);6,880(2,3);6,873(2,3);3,925(16,0);3,324(216,8);2,675(1,1);2,671(1,5);2,666(1,1);2,541(1,0);2,524(3,9);2,511(88,5);2,506(180,0);2,502(236,5);2,497(168,4);2,493(79,2);2,333(1,1);2,328(1,5);2,324(1,1);0,146(0,8);0,008(6,3);0,000(174,5);-0,009(5,7);-0,150(0,7)</p>
I-1-302:
<p>HPLC-EM: logP = 2,50; masa (m/z): 382,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,319(2,5);8,110(2,2);8,106(2,3);7,657(5,0);7,648(0,5);7,638(0,8);7,634(0,7);7,623(1,5);7,613(0,8);7,609(1,0);7,599(0,4);7,409(2,5);7,395(4,3);7,381(2,1);6,949(2,2);6,945(2,3);3,949(16,0);3,351(381,4);3,005(0,7);2,625(0,3);2,552(35,7);2,534(0,6);2,531(0,7);2,528(0,6);2,519(16,5);2,516(36,9);2,513(52,2);2,510(38,7);2,507(18,8);2,397(0,3)</p>
I-1-303:
<p>HPLC-EM: logP = 3,37; masa (m/z): 452,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,645(3,6);8,129(2,6);8,125(2,6);7,643(0,4);7,632(0,8);7,629(0,8);7,618(1,5);7,608(0,8);7,604(0,9);7,594(0,4);7,403(2,5);7,389(4,3);7,375(2,1);6,950(4,0);6,946(4,0);4,024(16,0);3,340(237,0);2,995(1,4);2,614(0,4);2,542(95,9);2,524(0,6);2,520(0,8);2,517(0,7);2,509(21,2);2,506(47,7);2,503(67,6);2,499(48,5);2,496(23,1);2,387(0,4);2,384(0,3);0,000(0,7)</p>
I-1-304:
<p>HPLC-EM: logP = 3,38; masa (m/z): 398,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,720(3,2);8,043(2,7);8,037(2,7);7,635(0,4);7,619(0,8);7,614(0,8);7,603(0,6);7,598(1,7);7,592(0,7);7,582(0,8);7,577(1,1);7,561(0,5);7,393(3,0);7,372(4,9);7,351(2,2);6,893(2,2);6,887(2,2);5,757(0,8);3,327(95,9);2,676(0,3);2,671(0,4);2,667(0,3);2,506(52,2);2,502(68,5);2,497(50,3);2,395(15,8);2,333(0,4);2,329(0,5);2,324(0,4);2,248(16,0);2,232(0,8);0,008(0,8);0,000(17,4);-0,008(0,7)</p>
I-1-305:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 385,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,108(9,1);8,316(0,6);8,212(11,4);8,203(11,7);8,053(8,5);8,047(8,5);7,773(14,7);7,765(14,0);7,638(1,3);7,623(2,9);7,617(2,4);7,607(2,0);7,601(5,7);7,596(2,2);7,585(2,6);7,580(3,7);7,564(1,6);7,399(9,7);7,377(16,0);7,357(7,2);6,922(7,2);6,917(7,2);5,757(1,0);4,056(0,4);4,038(1,2);4,020(1,2);4,002(0,4);3,327(323,2);2,689(1,0);2,675(1,1);2,671(1,5);2,666(1,1);2,541(1,1);2,524(5,0);2,511(86,5);2,506(173,0);2,502(227,5);2,497(164,2);2,493(79,4);2,333(1,0);2,329(1,4);2,324(1,1);1,989(5,2);1,398(1,0);1,351(0,4);1,259(0,4);1,233(0,6);1,193(1,4);1,175(2,7);1,157(1,4);0,008(2,7);0,000(66,0);-0,008(2,5)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-306:
<p>HPLC-EM: logP = 3,11; masa (m/z): 388,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,612(3,2);8,121(2,6);8,117(2,8);7,943(1,0);7,847(2,4);7,752(1,2);7,651(0,4);7,641(0,8);7,637(0,8);7,626(1,5);7,616(0,8);7,612(1,0);7,602(0,4);7,409(2,5);7,395(4,5);7,381(2,1);6,931(3,4);6,927(3,5);3,409(2,1);3,406(2,9);3,385(2693,6);3,359(2,2);2,625(0,8);2,552(8,8);2,534(1,2);2,531(1,5);2,528(1,5);2,519(43,2);2,516(94,9);2,513(133,7);2,510(99,7);2,507(49,2);2,397(0,8);2,275(16,0);1,243(1,0);0,008(0,5)</p>
I-1-307:
<p>HPLC-EM: logP = 2,78; masa (m/z): 352,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,141(0,8);7,772(1,9);7,769(1,8);7,766(1,9);7,552(0,3);7,536(0,7);7,530(0,7);7,521(0,4);7,515(1,5);7,509(0,5);7,499(0,7);7,493(0,9);7,478(0,4);7,222(0,4);7,218(0,6);7,213(2,3);7,200(0,5);7,192(3,8);7,183(0,5);7,171(1,9);7,162(0,4);6,987(1,8);6,981(1,8);4,014(16,0);2,210(17,3);2,177(0,7);2,156(4,7);1,959(0,4);1,953(3,6);1,947(6,7);1,941(9,5);1,935(6,6);1,929(3,5);1,371(1,0);1,276(1,1);0,008(0,5);0,000(12,8);-0,009(0,6)</p>
I-1-308:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 352,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,355(3,9);8,180(10,0);8,055(2,7);8,051(2,7);7,633(0,4);7,623(0,9);7,619(0,8);7,612(0,6);7,608(1,7);7,605(0,6);7,598(0,8);7,594(1,1);7,584(0,4);7,400(2,9);7,386(4,9);7,372(2,5);6,899(2,9);6,895(2,9);4,217(2,0);4,205(6,1);4,193(6,2);4,181(2,0);3,386(0,3);3,384(0,3);3,379(0,4);3,373(0,9);3,359(357,8);3,343(0,4);3,339(0,7);3,337(0,7);2,552(28,7);2,534(0,4);2,531(0,5);2,528(0,5);2,519(12,4);2,516(27,6);2,513(38,8);2,510(27,9);2,507(12,9);1,446(7,3);1,434(16,0);1,422(7,4)</p>
I-1-309:
<p>HPLC-EM: logP = 3,15; masa (m/z): 366,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,237(2,3);8,102(2,2);8,098(2,2);7,649(0,3);7,638(0,7);7,634(0,7);7,624(1,4);7,613(0,7);7,610(0,8);7,599(0,4);7,408(2,3);7,394(4,0);7,380(1,9);6,938(1,9);6,934(1,9);4,239(1,0);4,227(3,1);4,215(3,1);4,203(1,0);3,346(381,3);3,006(1,7);2,625(0,4);2,552(81,0);2,534(0,7);2,531(0,8);2,528(0,8);2,519(22,8);2,516(50,5);2,513(71,5);2,510(52,9);2,507(25,4);2,397(0,4);2,184(16,0);1,347(4,8);1,335(10,4);1,323(4,8);1,246(0,3);0,011(0,5)</p>
I-1-310:
<p>HPLC-EM: logP = 3,28; masa (m/z): 411,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,875(3,1);8,147(2,1);8,143(2,1);7,637(0,7);7,633(0,6);7,622(1,2);7,612(0,7);7,608(0,8);7,598(0,3);7,408(2,1);7,394(3,6);7,380(1,8);6,961(3,6);6,957(3,6);4,900(0,4);4,889(1,2);4,878(1,6);4,867(1,2);4,856(0,4);3,364(0,4);3,337(831,4);2,995(1,4);2,617(0,6);2,614(0,8);2,611(0,6);2,542(64,8);2,523(1,4);2,520(1,7);2,517(1,7);2,508(42,8);2,505(93,3);2,502(129,3);2,499(92,8);2,496(43,5);2,390(0,6);2,386(0,8);2,383(0,6);1,477(15,9);1,467(16,0);1,235(0,5);0,000(1,3)</p>
I-1-311:
<p>HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 338,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,297(2,2);8,110(2,2);8,106(2,2);7,665(4,3);7,648(0,4);7,638(0,8);7,634(0,7);7,623(1,4);7,613(0,8);7,609(0,9);7,599(0,4);7,409(2,4);7,395(4,1);7,381(2,0);6,946(1,9);6,942(1,9);3,949(16,0);3,353(587,8);3,005(0,6);2,625(0,5);2,622(0,3);2,552(32,7);2,534(0,7);2,531(0,8);2,528(0,8);2,519(26,8);2,516(56,6);2,513(77,3);2,510(56,3);2,507(27,1);2,400(0,4);2,397(0,5);2,394(0,4)</p>
I-1-312:
<p>HPLC-EM: logP = 2,70; masa (m/z): 383,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,784(0,3);11,027(2,6);8,315(0,4);8,080(1,9);8,074(1,9);7,631(0,7);7,625(0,6);7,615(0,5);7,609(1,3);7,604(0,6);7,593(0,6);7,588(0,8);7,572(0,4);7,414(0,7);7,405(2,2);7,384(3,6);7,363(1,7);6,955(0,4);6,949(0,4);6,900(2,1);6,894(2,0);5,756(0,8);4,230(16,0);4,078(1,9);3,321(134,4);2,675(0,9);2,671(1,1);2,666(0,8);2,541(0,7);2,523(3,8);2,510(67,6);2,506(130,2);2,502(168,1);2,497(120,8);2,493(58,3);2,333(0,8);2,328(1,1);2,324(0,8);1,234(0,4);0,008(3,2);0,000(70,6);-0,009(2,4);-0,150(0,3)</p>
I-1-313:
<p>HPLC-EM: logP = 3,68; masa (m/z): 380,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,222(2,5);8,101(2,4);8,098(2,3);7,647(0,4);7,636(0,9);7,632(0,8);7,622(1,5);7,612(0,8);7,608(1,0);7,598(0,4);7,407(2,5);7,393(4,5);7,379(2,2);6,936(2,0);6,933(2,0);3,893(16,0);3,351(861,8);2,628(0,5);2,625(0,7);2,553(21,2);2,544(2,8);2,532(5,9);2,519(43,2);2,516(84,1);2,513(113,6);2,510(82,3);2,507(39,8);2,397(0,7);1,667(0,3);1,654(1,6);1,642(3,0);1,630(3,1);1,617(1,7);1,605(0,4);1,246(0,6);0,951(4,5);0,939(9,0);0,927(4,3);0,011(0,8)</p>
I-1-314:
<p>HPLC-EM: logP = 3,32; masa (m/z): 380,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,247(2,4);8,040(1,9);8,034(1,8);7,619(0,6);7,614(0,5);7,604(0,4);7,598(1,2);7,592(0,5);7,582(0,6);7,577(0,8);7,561(0,3);7,396(2,0);7,375(3,4);7,354(1,5);6,880(2,4);6,874(2,4);5,758(0,9);3,883(16,0);3,327(27,1);2,710(1,7);2,692(2,9);2,673(2,0);2,511(13,2);2,507(26,1);2,502(33,9);2,498(24,2);2,493(11,5);1,614(1,1);1,595(2,0);1,576(2,0);1,558(1,1);0,945(3,6);0,927(7,5);0,908(3,2);0,008(0,3);0,000(8,5)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-315:
<p>HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 366,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,341(4,9);8,170(11,5);8,049(3,7);8,043(3,8);7,636(0,6);7,621(1,2);7,615(1,1);7,605(0,8);7,599(2,4);7,594(1,0);7,583(1,1);7,578(1,6);7,562(0,7);7,398(4,1);7,377(6,9);7,356(3,1);6,890(4,4);6,884(4,4);4,132(4,0);4,115(7,9);4,097(4,1);3,327(30,2);2,511(18,8);2,507(37,7);2,503(49,7);2,498(36,5);1,895(0,5);1,876(2,5);1,858(4,9);1,840(5,0);1,822(2,6);1,804(0,6);0,865(7,8);0,847(16,0);0,828(7,2);0,008(0,5);0,000(12,0);-0,008(0,5)</p>
I-1-316:
<p>HPLC-EM: logP = 3,24; masa (m/z): 366,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,213(2,2);8,100(2,1);8,096(2,1);7,647(0,4);7,636(0,8);7,632(0,7);7,626(0,6);7,622(1,5);7,612(0,7);7,608(0,9);7,597(0,4);7,406(2,4);7,392(4,1);7,378(2,1);6,936(1,7);6,932(1,7);3,892(16,0);3,361(437,6);3,358(597,8);2,628(0,4);2,625(0,5);2,622(0,4);2,594(1,3);2,581(4,2);2,569(4,3);2,556(1,5);2,552(4,2);2,534(0,8);2,531(1,0);2,528(1,0);2,519(25,8);2,516(56,6);2,513(78,4);2,510(56,2);2,507(26,2);2,400(0,4);2,397(0,5);2,394(0,4);1,245(0,4);1,210(5,4);1,198(11,6);1,185(5,4);0,010(0,6)</p>
I-1-317:
<p>HPLC-EM: logP = 3,37; masa (m/z): 447,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,168(3,0);8,170(2,7);8,166(2,7);7,655(0,4);7,644(0,8);7,630(1,5);7,616(0,9);7,606(0,4);7,419(2,4);7,405(4,2);7,391(2,0);6,972(3,5);6,968(3,5);4,145(16,0);3,428(1,0);3,418(0,6);3,386(3294,8);3,385(2796,6);3,358(5,6);3,339(2,1);3,296(0,7);2,628(0,9);2,625(1,2);2,622(0,9);2,552(101,5);2,534(2,1);2,531(2,6);2,528(2,5);2,519(62,7);2,516(136,0);2,513(190,4);2,510(138,3);2,507(65,1);2,436(0,4);2,397(1,2);2,394(0,9);2,310(0,4);1,266(0,4);1,243(1,2);0,008(1,1)</p>
I-1-318:
<p>HPLC-EM: logP = 2,98; masa (m/z): 397,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,125(3,0);8,303(1,3);8,150(2,7);8,147(2,7);7,649(0,4);7,638(0,8);7,634(0,8);7,624(1,5);7,613(0,9);7,610(1,0);7,599(0,4);7,406(2,4);7,392(4,3);7,378(2,1);6,971(3,4);6,967(3,4);4,130(16,0);3,395(2352,3);2,625(0,6);2,622(0,4);2,552(7,5);2,534(0,9);2,531(1,2);2,528(1,1);2,519(32,1);2,516(70,3);2,513(97,0);2,510(69,9);2,507(32,5);2,400(0,5);2,397(0,6);1,241(1,5);0,861(0,4);0,005(0,5)</p>
I-1-319:
<p>HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 348,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,731(5,2);8,316(0,4);8,111(8,7);8,108(7,0);8,105(8,6);7,650(1,4);7,634(3,1);7,628(2,3);7,618(2,0);7,613(6,0);7,607(2,1);7,596(2,5);7,591(3,8);7,575(1,7);7,417(1,5);7,413(2,7);7,408(9,9);7,395(1,9);7,387(16,0);7,366(7,5);7,361(2,1);6,945(5,6);6,940(5,5);5,757(7,3);3,322(215,2);2,675(2,3);2,671(2,3);2,666(2,1);2,662(2,6);2,655(2,4);2,651(1,8);2,642(3,9);2,629(2,3);2,622(2,2);2,609(1,1);2,541(0,6);2,524(5,3);2,519(8,5);2,511(103,2);2,506(208,2);2,502(277,1);2,497(200,7);2,493(95,4);2,337(0,7);2,333(1,4);2,328(1,9);2,324(1,4);2,319(0,6);1,351(0,3);1,336(0,9);1,298(0,9);1,259(1,3);1,249(1,4);1,243(1,9);1,230(5,8);1,224(10,1);1,217(6,2);1,209(5,2);1,202(10,2);1,195(8,0);1,188(9,3);1,182(10,5);1,176(10,4);1,170(6,3);1,156(1,4);1,147(0,6);0,008(2,7);0,000(81,8);-0,009(2,5)</p>
I-1-320:
<p>HPLC-EM: logP = 2,20; masa (m/z): 336,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,155(2,5);8,042(1,8);8,038(1,8);7,621(0,6);7,617(0,5);7,607(1,1);7,596(0,6);7,593(0,7);7,397(1,8);7,383(3,1);7,369(1,5);6,875(2,6);6,871(2,6);3,806(16,0);3,362(756,0);3,333(0,5);3,005(0,5);2,625(0,4);2,552(27,0);2,534(0,6);2,531(0,7);2,528(0,6);2,519(18,6);2,516(40,9);2,513(57,6);2,510(42,5);2,507(20,3);2,397(0,4);2,263(8,5);2,262(8,3);1,245(1,2)</p>
I-1-321:
<p>HPLC-EM: logP = 2,27; masa (m/z): 322,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,051(2,4);8,099(2,3);8,095(2,3);7,645(0,4);7,635(0,7);7,631(0,7);7,623(3,0);7,616(2,9);7,610(0,8);7,606(0,8);7,596(0,4);7,408(2,2);7,394(4,0);7,380(1,9);6,922(1,8);6,918(1,8);3,977(16,0);3,391(0,3);3,353(724,3);2,625(0,6);2,552(4,9);2,534(0,8);2,531(1,0);2,528(1,0);2,519(30,3);2,516(64,8);2,513(90,0);2,510(66,1);2,507(31,9);2,397(0,6);1,245(0,9);0,010(0,5)</p>
I-1-322:
<p>HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 386,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,350(11,5);8,068(8,6);8,062(8,5);8,037(0,5);8,027(0,5);8,015(0,5);7,809(3,6);7,796(3,8);7,788(5,1);7,781(5,9);7,775(9,8);7,758(5,1);7,752(5,3);7,668(2,8);7,661(2,6);7,647(5,3);7,640(5,1);7,622(4,6);7,606(2,4);7,600(6,2);7,595(2,5);7,585(2,8);7,579(4,0);7,563(1,9);7,399(9,8);7,378(16,0);7,357(7,5);7,340(0,8);7,319(1,0);7,298(0,6);6,917(15,2);6,911(15,5);6,700(0,9);6,694(1,0);4,578(0,4);3,511(4,0);3,491(0,4);3,477(0,5);3,465(0,5);3,423(0,7);3,411(0,8);3,399(0,6);3,330(1984,0);3,294(3,0);3,265(1,1);3,207(0,5);2,995(0,3);2,680(1,7);2,675(3,5);2,671(4,9);2,666(3,5);2,662(1,7);2,541(30,6);2,524(14,8);2,519(23,9);2,511(268,4);2,506(536,6);2,502(711,5);2,497(517,2);2,493(247,3);2,338(1,6);2,333(3,4);2,329(4,7);2,324(3,3);2,319(1,5);2,289(0,4);2,074(2,2);1,336(0,5);1,298(0,5);1,258(0,7);1,249(0,8);1,235(2,0);1,147(0,5);0,008(0,9);0,000(21,7);-0,009(0,6)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-323: HPLC-EM: logP = 3,47; masa (m/z): 472,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,302(2,6);8,100(2,0);8,097(2,0);7,636(0,8);7,632(0,8);7,626(5,8);7,622(1,5);7,612(0,7);7,608(0,8);7,597(0,3);7,409(2,0);7,395(3,6);7,381(1,7);6,931(2,4);6,927(2,4);4,094(3,4);4,082(3,5);3,369(0,4);3,347(442,3);2,625(0,4);2,552(48,7);2,534(0,7);2,531(0,9);2,528(0,8);2,519(23,5);2,516(51,1);2,513(70,8);2,510(50,9);2,507(24,3);2,400(0,3);2,397(0,5);2,394(0,3);2,100(0,4);2,088(0,8);2,077(1,1);2,066(0,9);2,054(0,5);1,246(0,3);0,830(16,0);0,819(16,0);0,011(0,5)
I-1-324: HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 430,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,277(2,7);8,106(2,3);7,647(0,4);7,637(0,9);7,633(0,8);7,622(1,6);7,608(6,9);7,598(0,5);7,408(2,6);7,394(4,5);7,380(2,2);6,949(2,3);6,945(2,3);3,950(16,0);3,355(676,1);3,354(837,4);2,628(0,6);2,625(0,8);2,622(0,6);2,552(12,6);2,534(1,2);2,531(1,5);2,528(1,5);2,519(44,2);2,516(96,6);2,513(134,8);2,510(97,2);2,507(46,3);2,400(0,6);2,397(0,8);2,394(0,6);1,245(0,3);0,010(0,9)
I-1-325: HPLC-EM: logP = 3,11; masa (m/z): 458,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,301(4,3);8,102(3,3);8,099(3,3);7,647(0,5);7,637(1,2);7,633(1,2);7,622(10,2);7,612(1,3);7,608(1,4);7,598(0,6);7,409(3,4);7,394(6,0);7,381(2,9);6,939(3,8);6,935(3,9);4,224(2,9);4,212(5,6);4,201(3,0);3,349(680,2);2,625(0,6);2,552(18,8);2,534(0,8);2,531(1,1);2,528(1,1);2,519(28,9);2,516(63,6);2,513(89,7);2,510(66,1);2,507(31,9);2,397(0,6);1,787(0,5);1,775(2,3);1,763(4,6);1,751(4,6);1,739(2,5);1,727(0,6);1,246(0,4);0,832(7,5);0,819(16,0);0,807(7,3)
I-1-326: HPLC-EM: logP = 2,15; masa (m/z): 322,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,688(1,6);8,109(2,4);8,106(2,1);8,102(2,4);7,649(0,4);7,633(0,8);7,627(0,6);7,618(0,6);7,612(1,6);7,606(0,6);7,595(0,7);7,590(1,0);7,575(0,5);7,416(0,4);7,407(2,7);7,385(4,4);7,365(2,0);6,938(1,8);6,932(1,8);5,756(1,3);3,337(0,3);3,323(34,9);2,827(16,0);2,524(1,0);2,520(1,4);2,511(16,7);2,507(33,4);2,502(44,1);2,497(32,6);2,493(16,1);0,008(0,5);0,000(16,6);-0,009(0,7)
I-1-327: HPLC-EM: logP = 2,24; masa (m/z): 305,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,382(2,5);8,677(5,4);8,086(2,3);8,080(2,4);7,637(0,7);7,631(0,7);7,616(1,4);7,599(0,7);7,594(0,9);7,578(0,4);7,408(2,4);7,386(4,0);7,365(1,8);6,896(2,7);6,890(2,7);3,326(33,4);2,506(38,2);2,502(48,8);2,498(36,7);2,328(0,3);2,279(16,0);0,000(9,5)
I-1-328: HPLC-EM: logP = 1,51; masa (m/z): 305,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,159(2,4);8,715(4,9);8,083(2,2);8,078(2,2);7,654(0,3);7,638(1,0);7,633(0,9);7,617(1,4);7,611(0,6);7,600(0,7);7,595(0,9);7,579(0,4);7,406(2,3);7,385(3,8);7,365(1,8);7,356(0,7);7,295(0,3);7,274(0,6);6,876(2,8);6,870(2,8);5,756(0,3);5,741(0,4);5,735(0,4);4,966(0,5);3,922(16,0);3,322(49,8);2,675(0,6);2,671(0,7);2,666(0,6);2,541(0,4);2,510(49,8);2,506(93,6);2,502(118,3);2,497(88,7);2,333(0,6);2,328(0,8);2,324(0,6);2,027(1,2);0,000(55,9)
I-1-329: HPLC-EM: logP = 3,11; masa (m/z): 402,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,412(11,4);8,076(8,6);8,073(7,5);8,070(8,6);7,872(15,1);7,866(10,4);7,852(12,7);7,788(5,6);7,786(6,4);7,783(5,9);7,781(5,3);7,767(3,5);7,765(3,9);7,762(3,8);7,760(3,4);7,639(1,5);7,624(3,1);7,617(2,4);7,608(2,1);7,602(6,0);7,596(2,2);7,586(2,6);7,581(3,9);7,565(1,7);7,408(1,5);7,404(2,7);7,399(10,0);7,378(16,0);7,357(7,5);7,352(2,4);6,925(12,2);6,918(12,2);3,516(0,7);3,346(113,2);2,713(0,4);2,558(0,6);2,543(103,6);2,530(0,6);2,527(0,7);2,522(0,9);2,513(12,3);2,509(25,3);2,504(33,9);2,499(25,1);2,495(12,3);2,369(0,4);0,000(3,6)
I-1-330: HPLC-EM: logP = 2,14; masa (m/z): 336,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,565(7,4);9,260(15,9);9,147(16,0);8,316(0,5);8,124(6,3);8,119(6,6);7,648(0,9);7,632(1,8);7,627(1,8);7,611(3,8);7,595(2,0);7,590(2,5);7,574(1,1);7,408(6,4);7,387(10,9);7,366(4,9);6,946(9,0);6,940(9,1);3,328(297,0);2,671(1,6);2,506(183,2);2,502(239,5);2,498(184,0);2,329(1,5);0,000(5,0)
I-1-331: HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 386,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,405(11,1);8,078(9,0);8,072(8,9);7,932(4,4);7,920(4,7);7,910(5,0);7,898(4,9);7,691(4,5);7,685(4,8);7,669(4,6);7,663(4,6);7,639(1,4);7,623(3,1);7,617(2,5);7,608(2,1);7,602(6,0);7,596(2,3);7,586(2,7);7,581(4,0);7,565(3,7);7,546(4,6);7,540(4,0);7,524(2,3);7,519(2,0);7,408(1,6);7,399(9,9);7,378(16,0);7,357(7,5);6,928(14,5);6,922(14,4);3,516(0,7);3,340(70,2);2,543(60,1);2,529(0,5);2,526(0,7);2,521(0,9);2,512(12,0);2,508(24,4);2,503(32,5);2,499(23,9);2,494(11,6);2,075(0,4);0,000(2,6)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-332:
<p>HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 322,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,196(2,1);8,097(1,9);8,091(1,9);7,636(0,7);7,631(0,5);7,620(0,5);7,615(1,4);7,609(0,5);7,598(0,6);7,593(0,9);7,577(0,4);7,418(0,4);7,409(2,2);7,388(3,6);7,367(1,7);7,361(0,5);6,953(2,3);6,947(2,3);3,324(5,8);2,903(16,0);2,5 12(5,5);2,507(10,8);2,503(14,3);2,498(10,4);2,494(5,0);0,008(0,9);0,000(22,7);-0,009(0,8)</p>
I-1-333:
<p>HPLC-EM: logP = 2,30; masa (m/z): 320,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 1,75 – 1,81 (m, 2H), 1,98 (s, 3H), 2,30 – 2,33 (m, 2H), 3,94 – 3,96 (m, 2H), 6,82 (d, 1H), 7,34 – 7,38 (m, 2H), 7,54 – 7,62 (m, 1H), 7,96 (d, 1H), 10,04 (s, 1H).</p>
I-1-334:
<p>HPLC-EM: logP = 2,70; masa (m/z): 378,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,510(3,9);11,214(0,3);8,063(5,4);8,057(5,3);7,845(2,9);7,826(3,1);7,823(3,0);7,603(0,7);7,586(1,4);7,582(1,5);7,575(1,3);7,570(1,2);7,565(3,3);7,561(7,6);7,559(4,3);7,555(5,0);7,545(4,2);7,542(3,6);7,526(1,2);7,522(1,0);7,446(2,1);7,440(2,0);7,430(1,6);7,426(2,1);7,424(1,8);7,420(1,9);7,410(1,5);7,404(1,4);7,246(0,6);7,243(0,8);7,236(4,1);7,217(5,3);7,196(3,4);7,189(0,6);6,895(5,9);6,889(5,9);5,756(6,9);3,326(12,6);2,524(0,5);2,519(0,8);2,511(8,7);2,506(17,4);2,502(22,9);2,497(16,5);2,493(7,8);1,989(0,4);1,397(16,0);1,234(0,3);1,071(0,4);0,008(0,5);0,000(14,3);-0,009(0,4)</p>
I-1-335:
<p>HPLC-EM: logP = 3,02 (neutral); masa (m/z): 430,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,523(10,4);8,065(13,6);8,059(13,6);7,845(7,0);7,842(7,2);7,825(7,9);7,822(7,9);7,768(0,9);7,749(2,6);7,739(1,4);7,729(5,7);7,715(9,7);7,695(16,0);7,679(4,5);7,675(3,5);7,588(2,6);7,583(4,0);7,568(10,6);7,563(11,1);7,560(7,2);7,557(6,4);7,542(7,2);7,539(7,3);7,522(2,8);7,519(2,8);7,441(4,9);7,436(5,0);7,424(4,4);7,421(5,3);7,419(4,7);7,416(5,1);7,404(3,4);7,399(3,3);6,880(14,7);6,874(14,6);4,115(1,0);4,102(3,2);4,089(3,2);4,075(1,1);3,327(20,0);3,177(15,6);3,163(15,2);2,671(0,4);2,524(1,2);2,511(22,0);2,506(44,2);2,502(58,1);2,497(42,0);2,493(20,2);2,329(0,4);0,008(1,8);0,000(48,4);-0,009(1,6)</p>
I-1-336:
<p>HPLC-EM: logP = 1,44; masa (m/z): 357,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,331(0,8);8,555(1,7);8,551(1,8);8,543(1,8);8,539(1,8);7,861(1,6);7,858(1,6);7,839(4,2);7,834(3,2);7,782(2,3);7,763(2,8);7,501(3,1);7,490(5,5);7,393(1,5);7,384(1,1);7,379(1,1);7,372(1,6);7,370(1,4);7,363(1,0);7,360(1,1);7,350(1,0);7,275(1,5);7,263(1,5);7,256(1,5);7,244(1,4);6,978(2,4);6,972(2,4);5,451(2,0);2,627(16,0);2,469(0,3);2,465(0,3);2,229(85,5);1,966(0,7);1,955(10,9);1,948(20,5);1,942(28,8);1,936(19,9);1,930(10,3);0,000(4,9)</p>
I-1-337: ver el Ejemplo de síntesis 37
I-1-338:
<p>HPLC-EM: logP = 3,23; masa (m/z): 390,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (601,6 MHz, CD₃CN): δ= 9,194(0,9);7,826(3,6);7,822(3,5);7,684(2,1);7,682(2,1);7,670(2,3);7,668(2,3);7,553(1,8);7,550(1,9);7,540(2,3);7,537(2,4);7,466(1,3);7,464(1,4);7,453(2,7);7,451(2,7);7,441(1,5);7,439(1,4);7,420(2,5);7,419(2,6);7,396(2,0);7,394(4,3);7,383(2,2);7,381(5,6);7,371(1,2);7,368(1,1);7,260(1,5);7,259(1,6);7,257(1,6);7,256(1,4);7,246(1,2);7,245(1,4);7,244(1,3);7,242(1,2);6,949(3,9);6,944(3,9);5,448(2,0);2,472(0,4);2,386(16,0);2,159(51,2);1,972(0,5);1,965(1,0);1,957(0,9);1,953(1,1);1,949(11,0);1,945(21,2);1,941(31,5);1,937(21,1);1,933(10,2);1,436(1,8);0,000(2,7)</p>
I-1-339:
<p>HPLC-EM: logP = 3,20; masa (m/z): 346,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (601,6 MHz, CD₃CN): δ= 9,228(1,0);7,824(3,3);7,820(3,3);7,594(1,6);7,591(1,7);7,581(1,9);7,579(2,0);7,509(1,3);7,496(2,7);7,481(1,1);7,478(1,2);7,468(1,7);7,466(1,8);7,455(0,9);7,453(0,8);7,419(3,8);7,409(2,2);7,392(2,9);7,379(3,4);7,256(1,7);7,243(1,4);6,952(3,3);6,947(3,3);5,448(0,6);2,471(0,5);2,385(16,0);2,160(30,7);1,965(0,5);1,957(0,5);1,952(0,7);1,949(5,8);1,945(10,6);1,941(15,5);1,937(10,6);1,933(5,4);1,436(1,5);0,000(1,2)</p>
I-1-340:
<p>HPLC-EM: logP = 3,15; masa (m/z): 410,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,192(5,8);10,394(1,0);10,385(1,0);8,316(0,8);7,828(2,7);7,809(4,1);7,797(1,1);7,778(7,4);7,772(7,6);7,753(3,0);7,735(2,9);7,699(2,7);7,685(6,2);7,667(3,6);7,592(1,1);7,574(0,9);7,495(2,5);7,474(5,2);7,453(3,4);7,228(4,8);7,219(5,0);7,207(4,0);7,199(4,1);7,024(1,3);7,015(1,3);6,979(0,5);6,973(0,6);6,961(0,9);6,956(1,2);6,945(0,6);6,930(1,8);6,924(2,4);6,904(0,9);6,827(6,1);6,821(6,2);4,158(0,7);4,140(2,1);4,123(2,2);4,112(2,5);4,106(1,4);4,094(7,3);4,077(7,4);4,059(2,4);3,321(177,0);2,890(0,5);2,731(0,5);2,675(2,2);2,670(2,9);2,666(2,3);2,540(2,5);2,505(343,0);2,501(452,3);2,497(347,8);2,328(2,8);2,324(2,2);1,753(1,0);1,384(2,2);1,367(4,5);1,349(2,2);1,221(7,8);1,204(16,0);1,187(7,6);0,146(0,6);0,008(5,9);0,000(127,4);-0,150(0,6)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
<p>I-1-341:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,17; masa (m/z): 376,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,308(0,6);8,079(1,5);8,060(1,6);7,884(2,4);7,878(2,4);7,807(0,5);7,804(0,5);7,789(1,6);7,783(0,7);7,770(1,4);7,767(1,2);7,740(0,8);7,736(1,3);7,718(3,7);7,701(1,6);7,698(1,6);7,610(1,1);7,605(0,8);7,603(0,7);7,592(1,3);7,586(1,4);7,557(1,0);7,551(1,1);7,540(1,0);7,537(1,0);7,533(1,6);7,478(0,4);7,473(0,6);7,459(1,5);7,454(1,4);7,447(1,5);7,441(2,3);7,435(1,1);7,429(1,3);7,423(1,1);7,410(0,4);6,948(2,5);6,942(2,4);5,446(1,3);4,085(0,4);4,067(1,1);4,049(1,2);4,031(0,4);3,310(16,0);2,137(1,9);2,135(1,7);1,971(5,1);1,951(4,6);1,945(8,8);1,939(12,5);1,933(8,6);1,926(4,4);1,436(2,8);1,372(0,9);1,284(0,3);1,276(1,1);1,221(1,4);1,203(2,7);1,185(1,3);0,008(0,6);0,000(16,0);-0,009(0,5)</p>
<p>I-1-342:</p> <p>HPLC-EM: logP = 1,82; masa (m/z): 390,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,643(0,6);7,999(1,0);7,996(0,8);7,981(1,2);7,977(1,0);7,711(0,3);7,708(0,4);7,692(1,0);7,689(1,1);7,675(1,3);7,672(1,7);7,667(1,4);7,653(1,3);7,649(1,2);7,634(0,5);7,630(0,4);7,599(0,9);7,594(0,6);7,586(0,4);7,583(0,5);7,579(0,9);7,574(0,8);7,491(0,4);7,484(0,7);7,477(0,8);7,476(0,8);7,468(1,7);7,463(2,2);7,459(1,6);7,452(2,4);7,446(1,6);7,442(0,6);7,432(1,4);7,428(1,5);7,415(1,0);7,413(1,0);7,410(1,0);6,489(2,8);5,446(2,1);3,212(16,0);2,285(11,2);2,132(10,2);1,963(0,8);1,957(1,1);1,951(9,3);1,945(17,2);1,939(24,0);1,933(16,5);1,927(8,5);1,372(3,2);1,340(1,2);1,285(1,6);1,277(3,6);1,271(0,7)</p>
<p>I-1-343:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,87; masa (m/z): 396,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,534(2,7);7,607(4,4);7,593(8,8);7,580(4,6);7,575(8,8);7,560(5,5);7,557(5,4);7,541(4,1);7,537(3,8);7,507(2,2);7,498(2,6);7,493(3,1);7,484(5,8);7,465(7,2);7,457(16,0);7,442(4,9);7,439(3,9);7,427(5,0);7,408(6,8);7,389(2,9);7,350(4,9);7,330(4,0);6,489(10,0);5,447(0,7);2,276(45,3);2,146(34,7);2,113(0,5);2,107(0,4);1,963(1,9);1,957(2,6);1,951(18,2);1,945(34,7);1,939(49,0);1,933(35,8);1,927(19,6);1,372(5,9);1,340(0,4);1,285(0,8);1,276(6,2);0,080(1,8);0,008(2,6);0,000(60,0)</p>
<p>I-1-344:</p> <p>HPLC-EM: logP = 3,10; masa (m/z): 383,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,373(3,8);8,426(6,9);8,414(7,0);8,282(6,8);8,263(7,0);7,893(10,8);7,888(11,0);7,610(5,5);7,607(5,0);7,590(6,8);7,574(0,7);7,556(5,1);7,539(7,8);7,480(8,5);7,466(12,4);7,462(13,1);7,448(16,0);7,435(6,3);7,433(6,4);7,417(2,1);7,253(0,3);7,236(0,4);6,974(10,8);6,969(10,9);3,843(0,7);2,462(0,4);2,147(20,7);2,143(34,3);2,111(0,4);2,107(0,5);2,101(0,3);1,952(25,4);1,949(27,8);1,946(49,1);1,943(50,1);1,940(69,9);1,937(66,5);1,934(50,4);1,931(45,8);1,928(27,0);1,925(23,2);1,768(0,4);1,436(0,7);1,372(5,8);1,349(0,5);1,340(0,9);1,282(1,5);1,276(6,0);0,146(0,5);0,000(89,3);-0,002(79,0);-0,150(0,5)</p>
<p>I-1-345:</p> <p>HPLC-EM: logP = 3,01; masa (m/z): 380,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,538(3,9);7,952(4,8);7,951(4,8);7,857(1,7);7,851(0,6);7,839(2,7);7,812(0,8);7,794(2,0);7,776(1,8);7,727(1,9);7,718(3,0);7,709(2,3);7,701(1,9);7,690(1,0);7,684(2,3);7,680(1,9);7,665(2,7);7,661(2,5);7,587(1,6);7,583(1,9);7,568(2,6);7,563(3,0);7,527(1,1);7,523(1,3);7,508(2,6);7,504(2,3);7,489(1,9);7,485(3,4);7,480(2,1);7,466(2,2);7,461(2,1);7,447(0,8);7,442(0,7);5,753(0,6);4,056(0,4);4,038(1,2);4,020(1,2);4,003(0,4);3,399(0,4);3,357(194,9);2,525(0,6);2,512(11,8);2,508(23,3);2,503(30,2);2,499(21,1);2,494(9,6);2,073(1,5);2,044(16,0);1,989(5,7);1,397(1,8);1,193(1,5);1,175(2,9);1,157(1,4);0,000(0,3)</p>
<p>I-1-346:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 391,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,968(2,5);8,115(0,4);8,089(16,0);7,780(3,6);7,764(4,6);7,758(5,1);7,745(1,1);7,727(0,6);7,706(0,4);7,692(1,4);7,677(5,6);7,672(7,4);7,663(13,4);7,659(8,7);7,656(10,5);7,639(9,0);7,637(8,6);7,591(3,3);7,585(3,6);7,573(4,8);7,568(6,4);7,549(6,3);7,548(6,3);7,536(9,0);7,523(8,1);7,520(7,2);7,506(5,5);7,503(5,5);7,486(2,4);7,483(2,1);7,445(1,0);7,433(4,6);7,427(4,9);7,412(4,5);5,448(1,7);3,871(4,7);3,833(1,6);3,784(0,6);3,772(1,0);3,759(0,9);3,657(0,9);3,644(1,0);3,633(0,6);2,148(37,0);2,108(1,1);2,102(0,9);1,965(1,3);1,953(15,7);1,947(29,8);1,940(42,2);1,934(30,8);1,928(17,5);1,372(4,6);1,340(0,6);1,285(0,9);1,276(5,1);0,008(2,2);0,000(51,7)</p>
<p>I-1-347:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,58; masa (m/z): 380,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,552(2,2);7,736(3,4);7,719(4,6);7,715(4,5);7,652(1,2);7,634(3,8);7,620(7,4);7,615(7,2);7,599(3,7);7,598(3,7);7,588(2,7);7,585(4,5);7,570(3,1);7,567(5,5);7,564(4,0);7,554(0,4);7,495(1,7);7,486(2,3);7,480(2,6);7,472(5,1);7,459(3,7);7,450(16,0);7,440(7,7);7,436(7,6);7,418(3,7);6,483(12,4);5,447(3,2);2,279(50,1);2,152(135,0);2,118(0,5);2,114(0,4);2,107(0,5);2,101(0,3);1,964(3,3);1,958(3,7);1,952(27,2);1,946(50,7);1,940(70,3);1,934(48,5);1,928(25,0);1,768(0,4);0,008(0,6);0,000(15,6);-0,009(0,6)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-348:
HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 381,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,720(1,1);8,862(0,6);8,852(0,6);8,850(0,6);8,214(0,5);8,196(0,6);8,194(0,6);7,962(1,3);7,961(1,3);7,864(0,5);7,852(0,5);7,844(0,5);7,832(0,5);7,686(0,6);7,682(0,5);7,668(0,8);7,663(0,7);7,588(0,5);7,583(0,6);7,568(0,7);7,564(0,9);7,524(0,4);7,510(0,8);7,505(0,7);7,490(1,1);7,485(0,9);7,471(0,6);7,466(0,6);5,755(16,0);3,323(3,9);2,519(0,4);2,511(4,8);2,506(9,7);2,502(12,7);2,497(9,0);2,493(4,2);2,057(4,5);1,989(0,3);0,000(6,8)
I-1-349:
HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 381,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,739(4,5);8,728(4,6);8,664(2,1);7,847(4,0);7,829(4,7);7,828(4,8);7,639(4,1);7,627(4,2);7,619(3,7);7,607(3,4);7,585(4,8);7,570(3,7);7,567(6,1);7,501(1,9);7,491(2,8);7,488(2,9);7,482(1,3);7,478(5,1);7,473(1,6);7,468(2,3);7,459(6,8);7,452(15,9);7,450(16,0);7,443(5,2);7,441(4,8);7,439(5,0);7,435(2,9);7,419(0,5);7,416(0,5);6,520(13,7);5,447(7,5);2,281(53,3);2,149(45,2);2,120(0,6);2,113(0,4);2,107(0,4);1,964(1,9);1,957(2,4);1,952(19,1);1,946(35,7);1,939(50,0);1,933(34,9);1,927(18,3);0,008(2,2);0,000(58,1);-0,009(2,7)
I-1-350:
HPLC-EM: logP = 3,20; masa (m/z): 366,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,244(3,5);9,200(0,6);7,890(13,3);7,885(13,4);7,665(7,2);7,662(7,7);7,651(8,1);7,649(8,5);7,604(6,3);7,601(5,4);7,592(7,8);7,589(7,7);7,578(0,4);7,558(0,4);7,556(0,4);7,539(6,0);7,536(6,8);7,526(13,9);7,524(16,0);7,513(9,4);7,511(9,2);7,470(2,6);7,467(3,2);7,458(7,6);7,455(7,5);7,445(12,1);7,442(10,8);7,432(7,0);7,429(6,6);7,420(2,8);7,416(10,8);7,403(13,8);7,390(6,7);7,355(0,5);7,341(0,5);6,971(13,8);6,967(13,6);5,449(0,7);2,152(176,2);2,056(0,5);2,052(0,8);2,048(0,5);1,972(0,4);1,965(5,0);1,957(4,0);1,953(5,3);1,949(49,8);1,945(92,0);1,941(132,5);1,937(91,5);1,933(46,6);1,831(0,5);1,826(0,8);1,822(0,5);1,436(5,6);1,284(0,7);1,269(1,4);1,213(0,6);1,201(1,0);1,189(0,5);1,026(0,5);1,015(1,0);1,003(0,5);0,005(0,7);0,000(22,6);-0,006(0,7)
I-1-351:
HPLC-EM: logP = 3,00; masa (m/z): 366,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,329(1,5);7,892(7,3);7,888(7,4);7,608(3,6);7,605(2,6);7,604(2,6);7,596(4,8);7,592(4,4);7,547(3,3);7,543(4,2);7,535(2,9);7,534(3,2);7,531(4,9);7,486(6,8);7,484(8,0);7,479(0,3);7,4721(15,4);7,4715(16,0);7,460(4,7);7,457(4,6);7,449(5,4);7,448(5,4);7,445(5,8);7,440(8,4);7,436(4,4);7,433(4,0);7,428(5,4);7,425(4,6);7,421(1,3);7,413(3,0);7,377(0,5);7,367(0,3);6,978(8,0);6,974(8,0);5,448(2,4);2,151(90,6);2,052(0,4);1,965(2,9);1,957(2,2);1,953(2,6);1,949(8,0);1,945(51,8);1,941(74,6);1,937(51,9);1,933(26,5);1,924(0,5);1,826(0,4);1,436(0,7);0,000(11,3);-0,006(0,4)
I-1-352:
HPLC-EM: logP = 2,70; masa (m/z): 348,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,719(3,4);7,965(4,6);7,963(4,5);7,739(0,4);7,686(2,0);7,682(1,7);7,668(2,7);7,663(2,5);7,618(0,5);7,601(1,1);7,594(1,9);7,588(2,2);7,585(0,9);7,580(2,1);7,575(2,7);7,570(3,1);7,563(1,1);7,559(1,2);7,542(0,6);7,527(0,9);7,523(1,1);7,508(2,6);7,504(2,3);7,490(4,1);7,485(3,7);7,471(2,2);7,466(2,1);7,453(0,8);7,448(0,7);7,383(0,3);7,265(0,6);7,258(3,2);7,238(4,3);7,218(2,7);7,210(0,5);7,040(0,4);5,753(0,5);3,354(307,1);2,526(0,6);2,521(1,1);2,512(17,0);2,508(34,7);2,503(45,6);2,499(32,2);2,494(15,0);2,073(1,3);2,031(16,0);1,994(1,4);1,044(0,3);1,028(0,3);0,000(0,5)
I-1-353:
HPLC-EM: logP = 2,97; masa (m/z): 326,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,063(0,4);7,895(1,7);7,894(1,7);7,891(1,8);7,890(1,7);7,603(0,9);7,600(0,8);7,590(1,3);7,587(1,1);7,534(0,9);7,531(1,1);7,522(1,0);7,521(1,0);7,519(1,2);7,466(0,5);7,463(0,6);7,453(1,3);7,451(1,1);7,441(0,9);7,438(0,8);7,434(1,1);7,431(1,1);7,421(1,0);7,418(1,1);7,409(0,4);7,406(0,4);7,235(0,6);7,222(1,2);7,209(1,0);7,102(2,1);7,089(1,7);7,006(2,0);7,002(1,9);2,318(16,0);2,248(0,4);2,191(73,9);1,973(0,4);1,967(17,6);1,958(0,6);1,954(0,7);1,950(6,2);1,946(11,6);1,942(16,6);1,938(10,8);1,934(5,5);0,000(0,6)
I-1-354:
HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 390,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,442(3,7);8,310(0,4);7,948(4,8);7,727(2,4);7,726(2,4);7,708(2,8);7,706(2,7);7,682(2,0);7,678(1,9);7,663(2,5);7,659(2,4);7,586(1,6);7,582(1,9);7,567(4,0);7,562(4,4);7,548(3,0);7,544(2,9);7,525(1,2);7,521(1,4);7,515(1,7);7,512(1,8);7,507(2,7);7,503(2,5);7,496(2,9);7,494(2,8);7,488(2,1);7,483(3,3);7,477(3,2);7,463(2,2);7,458(2,0);7,444(1,0);7,439(2,0);7,434(1,6);7,419(2,0);7,415(1,9);7,400(1,0);7,396(0,9);5,751(6,2);3,422(0,5);3,365(324,7);3,325(0,7);2,526(0,7);2,521(1,1);2,513(14,9);2,508(30,1);2,504(39,1);2,499(27,3);2,494(12,4);2,083(16,0);2,072(2,4);2,063(0,4);1,989(0,9);1,397(0,7);1,175(0,4);0,000(0,6)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹ y RMN de ¹H²)
I-1-355: HPLC-EM: logP = 1,94; masa (m/z): 391,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,888(1,4);7,673(3,4);7,671(3,4);7,653(4,0);7,651(3,9);7,613(2,5);7,608(3,1);7,595(2,7);7,593(3,0);7,590(3,7);7,528(2,5);7,523(2,8);7,509(4,7);7,505(5,7);7,493(3,3);7,487(3,7);7,475(3,7);7,470(2,9);7,468(3,6);7,456(6,0);7,452(5,2);7,438(7,0);7,434(9,4);7,429(4,0);7,419(2,7);7,416(3,3);7,409(1,3);7,385(2,8);7,380(2,8);7,365(3,3);7,360(3,2);7,346(1,6);7,342(1,4);6,085(11,7);5,446(16,0);4,257(1,1);4,067(0,3);2,155(4,8);2,112(0,8);2,106(0,7);2,100(0,5);2,094(0,4);1,971(1,3);1,963(1,8);1,957(1,8);1,951(14,1);1,945(26,5);1,939(36,8);1,933(25,2);1,926(13,0);1,913(0,3);1,436(0,4);1,372(1,5);1,340(0,6);1,285(0,8);1,276(1,9);1,269(0,8);1,221(0,4);1,203(0,7);1,185(0,4);0,008(0,5);0,00 00(16,3);-0,009(0,6)
I-1-356: HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 390,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,467(3,2);7,588(7,7);7,580(5,9);7,568(10,6);7,561(6,8);7,556(5,5);7,493(2,4);7,486(2,9);7,484(2,6);7,477(5,4);7,471(8,5);7,464(9,5);7,459(9,6);7,454(16,0);7,449(10,3);7,441(2,7);7,438(3,5);7,433(3,2);7,418(1,5);7,414(1,2);7,396(1,5);7,377(5,3);7,362(14,1);7,355(12,3);7,343(3,3);7,335(7,0);7,329(3,8);7,316(5,4);7,313(4,0);7,309(3,8);7,299(2,7);7,293(2,4);6,480(14,3);5,445(4,8);4,066(0,6);4,048(0,6);2,436(0,3);2,279(53,7);2,176(0,9);2,117(0,5);1,969(2,8);1,962(1,2);1,955(1,7);1,950(12,8);1,944(23,9);1,938(33,5);1,932(23,6);1,925(12,6);1,436(1,5);1,371(3,6);1,284(0,5);1,276(3,7);1,220(0,7);1,202(1,4);1,184(0,7);0,007(2,8);0,000(60,2);-0,008(3,7);-0,150(0,3)
I-1-357: HPLC-EM: logP = 2,23; masa (m/z): 392,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,632(3,7);8,501(2,1);8,496(2,3);8,489(2,3);8,484(2,2);8,315(0,3);8,006(2,1);8,001(2,2);7,987(2,4);7,982(2,3);7,956(4,6);7,685(1,9);7,681(1,7);7,666(2,4);7,662(2,3);7,589(2,7);7,581(2,2);7,577(2,6);7,570(2,9);7,562(3,1);7,558(2,6);7,526(0,9);7,522(1,0);7,508(2,3);7,503(2,1);7,488(2,9);7,482(2,4);7,468(2,0);7,463(1,9);7,450(0,7);7,445(0,6);3,321(88,1);2,675(0,5);2,670(0,8);2,666(0,6);2,540(0,4);2,523(1,9);2,510(46,9);2,506(94,1);2,501(123,0);2,497(87,4);2,492(41,3);2,332(0,6);2,328(0,8);2,323(0,6);2,094(16,0);2,074(0,3);2,041(0,6);0,000(0,6)
I-1-358: HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 376,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,383(4,1);11,344(0,9);8,480(2,2);8,475(3,1);8,468(3,1);8,463(3,3);8,446(1,1);8,439(1,2);8,435(1,1);8,154(0,5);8,140(0,5);8,135(0,7);8,129(0,7);8,108(3,7);8,102(5,2);8,085(1,0);8,079(1,1);8,069(1,1);7,995(2,2);7,990(3,1);7,976(2,5);7,971(3,4);7,955(0,9);7,936(0,7);7,697(2,1);7,691(2,6);7,679(2,5);7,674(3,3);7,639(1,0);7,612(2,0);7,606(2,7);7,593(2,6);7,588(3,7);7,565(3,2);7,560(2,7);7,553(3,4);7,547(4,1);7,534(3,7);7,530(3,7);7,517(3,7);7,512(4,6);7,505(4,4);7,498(5,3);7,493(4,8);7,486(3,8);7,481(3,8);7,467(2,1);7,462(2,0);7,351(0,4);7,332(0,7);7,181(0,7);7,176(0,7);6,921(3,6);6,915(5,2);6,882(1,0);5,756(0,3);4,056(0,5);4,051(0,4);4,038(1,1);4,034(0,9);4,020(1,2);4,015(0,9);4,002(0,6);3,998(0,6);3,322(34,4);3,318(26,1);3,281(4,1);3,056(0,4);3,000(0,4);2,981(0,5);2,941(0,4);2,908(0,4);2,899(0,5);2,865(0,4);2,859(0,4);2,671(0,9);2,666(0,9);2,626(0,6);2,501(72,4);2,497(70,9);2,466(15,8);2,462(16,0);2,328(0,5);2,324(0,5);1,989(4,3);1,983(2,8);1,949(0,7);1,397(0,6);1,336(4,4);1,297(1,7);1,258(2,1);1,249(5,3);1,245(4,2);1,210(1,6);1,193(1,9);1,188(1,5);1,175(2,8);1,170(2,0);1,157(1,8);1,153(1,4);1,135(0,7);1,117(0,4);0,993(0,4);0,008(1,7);0,000(15,7);-0,005(9,5);-0,040(2,3)
I-1-359: HPLC-EM: logP = 1,85; masa (m/z): 390,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,679(1,9);8,386(5,8);8,381(5,9);8,374(6,1);8,369(5,8);7,714(4,6);7,709(4,6);7,695(5,3);7,690(5,1);7,657(1,7);7,652(1,7);7,638(1,9);7,633(1,9);7,589(4,2);7,585(2,5);7,578(1,5);7,570(5,0);7,565(3,9);7,506(2,0);7,499(2,2);7,490(3,0);7,483(6,8);7,479(3,3);7,473(7,6);7,467(13,6);7,460(7,9);7,449(3,8);7,445(2,1);7,438(2,2);7,426(3,2);7,419(2,3);7,405(5,5);7,393(5,2);7,386(4,8);7,374(4,6);7,262(0,4);7,256(0,3);7,241(0,6);7,235(0,6);7,171(0,5);7,165(0,4);6,514(12,4);4,085(0,8);4,067(2,4);4,050(2,4);4,032(0,8);3,697(0,4);3,681(0,4);3,664(0,3);3,627(0,9);3,351(0,3);3,334(0,4);3,318(0,4);3,189(0,3);3,171(0,6);3,153(0,6);3,134(0,4);3,117(0,6);3,099(0,6);3,082(0,3);2,589(0,5);2,470(1,9);2,460(0,6);2,455(0,4);2,379(0,4);2,283(49,6);2,261(0,5);2,257(0,7);2,254(0,7);2,242(0,5);2,232(0,6);2,219(1,8);2,167(56,7);2,122(1,1);2,114(0,9);2,107(1,0);2,101(0,8);2,095(0,6);2,082(0,3);1,972(11,0);1,964(3,2);1,958(3,9);1,952(34,8);1,946(65,0);1,940(90,5);1,934(61,8);1,928(31,5);1,915(0,7);1,775(0,4);1,768(0,6);1,762(0,4);1,386(0,7);1,372(14,8);1,340(6,3);1,321(0,5);1,303(0,7);1,285(8,3);1,276(16,0);1,270(4,8);1,229(5,7);1,221(3,3);1,216(1,5);1,211(11,4);1,203(6,2);1,193(5,6);1,186(3,1);1,052(5,5);1,034(11,1);1,017(5,3);0,918(2,5);0,898(0,4);0,881(0,9);0,874(0,4);0,864(0,5);0,856(0,4);0,000(1,1)
I-1-360: HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 346,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,448(3,7);7,951(4,7);7,683(1,9);7,679(1,8);7,664(2,3);7,660(2,3);7,596(1,8);7,592(2,1);7,587(2,0);7,582(2,5);7,573(4,2);7,568(3,1);7,563(3,1);7,555(3,2);7,553(3,1);7,525(2,0);7,521(2,3);7,506(4,3);7,502(4,0);7,487(3,1);7,482(4,1);7,477(2,4);7,473(2,3);7,469(2,2);7,463(2,3);7,458(2,4);7,454(2,6);7,451(2,3);7,445(1,0);7,440(0,9);7,436(1,0);5,754(4,8);4,038(0,4);4,020(0,4);3,340(261,8);2,671(0,4);2,525(0,9);2,520(1,5);2,511(22,2);2,507(45,1);2,502(58,9);2,498(41,7);2,493(19,4);2,329(0,4);2,086(0,4);2,073(1,6);2,061(16,0);1,989(1,9);1,398(0,8);1,193(0,5);1,175(1,0);1,157(0,5);0,000(1,1)

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-361: HPLC-EM: logP = 1,88; masa (m/z): 347,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,905(1,5);7,610(2,2);7,606(2,5);7,590(2,7);7,587(3,2);7,567(2,4);7,563(2,4);7,549(3,0);7,544(3,0);7,508(1,2);7,503(1,9);7,497(1,9);7,490(3,0);7,485(3,7);7,481(4,3);7,477(4,6);7,472(4,3);7,469(3,7);7,465(4,9);7,451(5,6);7,449(5,4);7,435(2,5);7,431(3,8);7,427(5,6);7,422(3,3);7,412(3,0);7,408(3,8);7,403(1,5);7,393(3,1);7,390(2,9);7,375(1,2);7,371(1,1);6,088(8,5);5,446(16,0);4,252(4,4);2,146(21,2);1,963(0,9);1,957(1,1);1,951(8,5);1,945(15,8);1,938(21,9);1,932(14,9);1,926(7,6);1,340(0,7);1,285(0,9);1,268(0,8);1,254(0,4);1,247(0,4);0,008(0,7);0,000(18,9);-0,009(0,7)
I-1-362: HPLC-EM: logP = 2,37; masa (m/z): 357,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,954(0,5);8,109(0,8);8,088(11,5);7,642(2,6);7,633(0,8);7,623(4,1);7,618(3,6);7,599(0,3);7,596(0,4);7,582(1,8);7,577(2,2);7,564(3,8);7,560(4,9);7,549(4,2);7,545(5,3);7,543(5,7);7,531(0,6);7,520(3,8);7,516(3,8);7,503(2,5);7,499(2,9);7,490(0,7);7,482(1,3);7,479(1,3);7,472(0,4);7,466(0,5);7,460(2,6);7,455(3,2);7,446(6,7);7,444(7,3);7,442(9,2);7,428(1,5);7,417(1,4);7,413(1,7);7,399(4,2);7,396(5,5);7,387(4,1);7,382(3,2);7,373(2,5);7,367(2,9);7,361(1,1);7,355(1,0);7,348(0,9);5,448(16,0);3,829(3,3);2,154(15,2);2,114(0,6);2,108(0,5);2,101(0,5);1,964(1,9);1,958(2,3);1,953(15,9);1,946(29,6);1,940(40,9);1,934(28,5);1,928(14,8);0,008(0,4);0,000(10,2);-0,009(0,4)
I-1-363: HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 334,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,902(1,9);8,635(6,3);8,629(9,8);8,611(9,8);8,605(6,3);8,457(0,8);7,920(7,4);7,914(7,4);7,617(3,5);7,612(2,9);7,599(4,3);7,593(4,6);7,581(3,5);7,576(3,8);7,562(3,8);7,557(5,1);7,541(0,5);7,506(0,5);7,493(0,5);7,488(1,5);7,483(2,0);7,469(4,6);7,465(4,4);7,455(5,0);7,452(5,6);7,449(5,9);7,436(4,2);7,431(3,6);7,418(1,9);7,413(1,1);7,261(0,4);7,256(0,4);7,240(0,7);7,235(0,7);7,170(0,5);7,164(0,5);7,149(0,4);7,143(0,3);7,017(7,7);7,011(7,6);5,446(2,4);4,996(0,4);3,685(0,4);3,667(0,4);3,524(0,5);3,507(0,4);3,030(0,8);3,015(0,8);2,136(12,0);2,135(11,9);2,107(0,4);1,964(1,6);1,952(21,1);1,946(39,7);1,940(55,6);1,933(38,6);1,927(20,1);1,768(0,3);1,371(16,0);1,340(3,4);1,306(0,4);1,285(4,5);1,276(16,0);1,241(0,4);1,222(0,6);1,216(0,7);1,204(0,3);1,124(1,4);1,106(2,6);1,088(1,3);1,062(0,5);0,881(0,4);0,000(7,0)
I-1-364: HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 317,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,311(2,2);8,436(2,5);8,431(3,4);8,417(2,9);8,408(15,1);8,402(4,4);8,395(11,0);7,929(13,1);7,923(13,2);7,644(7,3);7,640(5,2);7,638(4,9);7,626(9,5);7,621(9,8);7,601(4,7);7,596(5,2);7,582(5,1);7,577(7,3);7,563(0,4);7,517(2,7);7,512(3,9);7,498(13,7);7,493(13,2);7,484(12,2);7,480(16,0);7,478(14,7);7,475(8,6);7,465(10,4);7,460(8,5);7,447(2,8);7,442(2,1);7,011(9,8);7,004(9,8);5,477(2,5);2,227(252,6);2,224(387,2);2,222(387,9);2,143(0,4);2,137(0,6);2,131(0,4);1,994(4,6);1,988(4,0);1,982(39,4);1,976(74,8);1,970(106,6);1,964(72,0);1,958(36,3);1,804(0,4);1,798(0,6);1,792(0,4);1,297(0,7);1,144(0,4)
I-1-365: HPLC-EM: logP = 2,99; masa (m/z): 438,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,397(4,1);7,948(6,7);7,930(3,0);7,682(1,9);7,679(1,9);7,663(2,4);7,659(2,3);7,589(1,5);7,584(1,7);7,569(2,5);7,565(2,7);7,525(1,4);7,522(1,3);7,507(4,9);7,500(4,2);7,492(6,8);7,482(3,2);7,477(2,2);7,462(2,1);7,458(1,9);7,444(0,8);7,439(0,7);7,247(1,1);7,239(1,2);7,232(1,3);7,226(1,5);7,219(1,2);7,212(1,1);7,204(0,9);5,751(2,9);4,038(0,7);4,020(0,7);3,438(0,5);3,432(0,5);3,413(1,0);3,363(502,0);3,307(0,4);3,298(0,5);2,673(0,4);2,512(22,2);2,508(43,0);2,504(55,2);2,499(39,5);2,495(18,8);2,330(0,4);2,114(16,0);2,072(1,9);1,989(3,2);1,397(0,7);1,193(0,9);1,175(1,7);1,157(0,8);0,000(0,4)
I-1-366: HPLC-EM: logP = 3,12; masa (m/z): 501,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,524(1,6);8,074(1,2);8,061(3,7);8,057(3,5);8,014(2,2);8,013(2,2);8,001(2,4);7,999(2,4);7,981(2,7);7,970(2,9);7,944(0,7);7,937(0,5);7,893(0,7);7,888(0,7);7,876(0,5);7,844(0,6);7,841(0,6);7,831(0,7);7,828(0,6);7,726(1,8);7,723(1,8);7,713(2,0);7,710(2,1);7,619(3,5);7,574(4,5);7,541(1,6);7,538(1,6);7,534(1,7);7,532(1,7);7,522(3,1);7,520(3,3);7,509(4,2);7,507(4,1);7,491(8,6);7,489(8,8);7,478(9,0);7,477(8,5);7,466(3,6);7,464(3,3);7,447(1,0);7,444(0,9);7,439(0,9);7,430(0,7);7,427(0,8);7,411(0,5);7,386(0,4);7,359(0,3);7,306(0,5);7,304(0,5);7,294(0,6);7,291(0,6);7,281(0,5);7,278(0,5);7,240(3,3);7,237(3,5);7,227(4,6);7,225(4,3);7,215(3,1);7,212(2,8);6,972(0,5);6,968(0,5);5,590(0,8);5,579(0,8);5,446(1,6);4,365(2,4);4,353(7,3);4,341(7,6);4,329(2,5);2,625(0,4);2,602(0,4);2,152(53,0);2,148(64,3);2,144(67,0);2,142(64,7);2,138(72,9);2,058(0,6);2,054(1,2);2,050(1,8);2,046(1,2);2,042(0,6);1,964(9,2);1,956(8,1);1,951(9,4);1,948(118,8);1,943(217,3);1,939(304,0);1,935(198,5);1,931(96,9);1,926(3,0);1,922(1,4);1,833(0,6);1,829(1,2);1,825(1,8);1,820(1,2);1,816(0,6);1,736(4,2);1,725(4,0);1,639(0,4);1,627(0,4);1,373(7,8);1,361(16,0);1,350(7,8);1,301(0,6);1,294(0,3);1,291(0,6);1,283(0,5);1,270(1,0);1,264(0,5);1,259(0,3);1,253(0,4);1,008(0,4);0,096(0,6);0,005(4,3);0,000(160,3);-0,006(4,7);-0,100(0,6)

(continuación)

Compuesto N°**Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾**

I-1-367:

HPLC-EM: logP = 3,18; masa (m/z): 549,8 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,568(3,7);8,122(0,4);8,099(0,4);8,046(7,5);8,019(2,8);8,017(2,8);7,997(4,2);7,986(5,4);7,967(5,6);7,918(0,6);7,908(1,0);7,890(0,6);7,879(0,5);7,869(0,6);7,858(0,5);7,838(0,4);7,805(0,3);7,801(0,4);7,780(0,6);7,774(0,6);7,732(1,7);7,728(1,8);7,721(0,4);7,712(2,2);7,708(2,1);7,696(0,5);7,685(0,5);7,622(7,6);7,617(7,9);7,610(8,5);7,584(9,2);7,538(5,7);7,529(5,7);7,515(7,1);7,508(6,9);7,491(14,9);7,480(16,0);7,431(1,3);7,423(1,3);7,411(1,0);7,404(1,0);7,389(0,8);7,385(0,8);7,380(0,7);7,371(0,7);7,366(0,7);7,346(0,6);7,342(0,6);7,325(0,5);7,320(0,5);7,310(0,5);7,249(4,9);7,244(4,8);7,230(7,3);7,226(6,3);7,217(3,7);7,211(4,1);7,206(3,3);7,149(0,8);7,146(0,7);7,135(0,7);7,131(0,8);7,110(0,4);6,552(0,4);6,548(0,4);6,537(0,4);6,533(0,4);5,449(1,6);4,826(0,4);4,373(1,9);4,356(5,9);4,338(6,0);4,320(2,0);2,673(1,0);2,669(1,0);2,630(1,5);2,601(0,4);2,567(0,4);2,473(0,6);2,468(1,2);2,464(1,6);2,459(1,1);2,454(0,6);2,178(350,1);2,172(396,0);2,121(1,6);2,115(2,2);2,108(2,6);2,102(1,9);2,096(1,2);2,016(0,4);1,965(14,1);1,959(15,8);1,953(134,8);1,947(253,2);1,941(354,6);1,935(244,9);1,929(126,5);1,854(0,3);1,848(0,3);1,782(0,9);1,776(1,6);1,770(2,2);1,763(1,6);1,757(0,9);1,739(0,4);1,676(0,7);1,658(0,7);1,640(0,4);1,622(0,4);1,379(6,6);1,361(13,0);1,343(6,6);1,331(0,3);1,325(0,4);1,300(0,6);1,282(1,1);1,268(3,8);1,258(1,0);1,247(1,2);1,244(1,0);1,229(1,6);1,226(1,4);1,219(0,5);1,211(1,0);1,209(0,8);1,200(0,4);1,195(0,4);1,101(0,3);1,085(0,3);1,025(0,7);1,014(1,5);1,007(1,3);0,997(1,5);0,989(0,8);0,898(0,4);0,891(0,4);0,881(0,7);0,858(0,5);0,840(0,5);0,774(0,4);0,770(0,4);0,757(0,4);0,751(0,5);0,740(0,4);0,731(0,3);0,723(0,4);0,146(0,6);0,008(4,4);0,000(149,5);-0,009(4,9);-0,149(0,6)

I-1-368:

HPLC-EM: logP = 2,51; masa (m/z): 448,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,866(2,2);8,112(0,5);8,090(16,0);7,904(4,7);7,902(4,9);7,884(5,0);7,882(5,1);7,640(3,0);7,636(2,8);7,635(2,5);7,620(4,9);7,619(5,3);7,617(4,6);7,616(4,4);7,609(0,6);7,590(0,3);7,583(2,5);7,576(3,9);7,571(3,1);7,563(3,3);7,560(6,7);7,558(6,0);7,556(8,9);7,551(3,2);7,537(4,3);7,532(2,4);7,523(5,1);7,518(5,1);7,513(0,8);7,504(3,1);7,503(2,9);7,500(4,7);7,485(1,7);7,481(1,6);7,455(2,5);7,452(2,6);7,446(0,4);7,436(5,6);7,433(5,8);7,427(0,6);7,417(3,8);7,415(3,7);7,298(4,6);7,294(5,4);7,279(3,8);7,275(4,0);7,209(3,3);7,204(3,1);7,195(0,4);7,189(4,4);7,185(4,3);7,170(2,8);7,166(2,7);5,447(2,2);4,066(0,6);4,048(0,6);3,843(2,0);2,146(19,9);1,971(3,0);1,965(1,0);1,958(1,2);1,953(11,1);1,946(21,1);1,940(29,8);1,934(20,8);1,928(10,8);1,436(1,4);1,372(3,6);1,340(0,3);1,284(0,5);1,276(4,1);1,221(0,8);1,203(1,6);1,185(0,8);0,936(0,3);0,008(1,5);0,000(37,8);-0,009(1,6)

I-1-369:

HPLC-EM: logP = 2,27; masa (m/z): 424,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 9,215(3,3);8,425(6,2);8,420(6,4);8,413(6,5);8,408(6,2);7,901(11,5);7,895(11,4);7,768(6,4);7,763(6,3);7,749(7,3);7,744(6,9);7,615(5,3);7,611(4,5);7,597(6,2);7,592(6,8);7,578(0,5);7,560(4,8);7,555(5,2);7,536(7,8);7,524(0,6);7,481(2,9);7,468(11,5);7,462(7,9);7,456(11,7);7,449(16,0);7,443(5,9);7,437(10,1);7,431(5,2);7,417(1,8);7,412(1,3);6,970(11,7);6,964(11,4);5,447(3,8);2,461(0,4);2,136(90,8);2,132(76,9);2,113(1,7);2,107(2,2);2,101(1,6);2,095(0,9);1,963(9,1);1,952(125,9);1,945(233,6);1,939(326,4);1,933(224,8);1,927(115,7);1,780(0,7);1,774(1,4);1,768(1,9);1,762(1,3);1,756(0,7);1,270(0,7);0,146(0,4);0,008(3,3);0,000(77,8);-0,150(0,4)

I-1-370:

HPLC-EM: logP = 2,71; masa (m/z): 302,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,824(0,7);7,859(2,5);7,853(2,5);7,603(1,3);7,599(1,1);7,597(1,1);7,584(1,8);7,579(1,7);7,560(1,2);7,555(1,5);7,542(1,3);7,541(1,4);7,536(1,8);7,474(0,7);7,470(0,8);7,455(1,9);7,451(1,7);7,437(1,7);7,434(1,9);7,432(1,5);7,429(1,8);7,415(1,5);7,410(1,5);7,396(0,8);7,390(2,8);7,384(2,7);6,941(2,6);6,935(2,5);6,821(2,5);6,816(2,5);5,446(0,5);2,587(16,0);2,169(25,7);1,964(4,0);1,958(0,8);1,952(4,1);1,946(7,5);1,939(10,4);1,933(7,1);1,927(3,7);1,436(0,4)

I-1-371:

HPLC-EM: logP = 2,88; masa (m/z): 386,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 9,478(0,4);7,880(2,3);7,874(2,3);7,609(1,2);7,604(0,8);7,600(0,8);7,591(1,2);7,585(1,6);7,541(0,7);7,535(0,8);7,518(1,3);7,480(0,4);7,475(0,7);7,461(1,7);7,456(1,9);7,453(2,0);7,445(2,8);7,435(1,7);7,429(1,2);7,416(0,5);7,411(0,3);6,894(1,1);2,734(16,0);2,699(0,6);2,145(9,8);1,971(0,5);1,964(0,5);1,952(7,9);1,946(14,9);1,940(21,0);1,933(14,6);1,927(7,7);1,372(5,7);1,340(1,2);1,285(1,6);1,276(5,8);0,000(6,5)

I-1-372:

HPLC-EM: logP = 2,75; masa (m/z): 336,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 10,370(2,2);8,039(2,9);8,033(2,9);7,681(1,4);7,677(1,1);7,675(1,1);7,662(1,8);7,657(1,7);7,593(1,1);7,588(1,4);7,574(1,4);7,569(1,9);7,521(0,6);7,516(0,8);7,502(1,7);7,498(1,6);7,485(2,3);7,479(2,2);7,466(1,5);7,461(1,4);7,448(0,5);7,443(0,4);6,773(2,7);6,766(2,7);5,756(1,6);4,287(2,1);4,276(2,4);4,265(2,2);3,323(16,3);3,044(2,3);3,032(2,4);3,021(2,1);2,524(0,5);2,511(11,3);2,506(22,3);2,502(29,0);2,497(20,6);2,493(9,8);2,017(16,0);1,235(1,2);0,000(2,9)

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-373: HPLC-EM: logP = 3,85; masa (m/z): 354,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, CD ₃ CN): δ = 7,892(0,8);7,888(0,8);7,602(0,4);7,600(0,4);7,589(0,5);7,587(0,5);7,566(0,4);7,565(0,4);7,553(0,5);7,552(0,5);7,535(0,4);7,532(0,4);7,523(0,5);7,520(0,5);7,453(0,5);7,450(0,5);7,440(0,4);7,433(0,4);7,429(0,4);7,420(0,4);7,417(0,4);7,401(0,3);7,399(0,4);7,338(0,4);7,336(0,4);7,326(0,5);7,323(0,5);7,274(0,4);7,272(0,4);7,262(0,5);7,260(0,5);6,972(0,9);6,967(0,8);2,162(10,0);1,966(0,5);1,950(2,2);1,945(3,9);1,941(5,7);1,937(3,9);1,933(2,0);1,436(0,7);1,429(16,0);1,344(0,5);0,000(2,6)
I-1-374: HPLC-EM: logP = 3,15; masa (m/z): 354,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,326(11,6);8,315(0,5);8,108(16,0);8,102(15,0);7,916(11,7);7,903(12,2);7,703(7,0);7,698(5,6);7,685(8,2);7,679(7,9);7,664(0,5);7,628(6,1);7,622(6,4);7,611(6,9);7,608(6,9);7,604(8,8);7,591(0,6);7,571(5,0);7,542(2,6);7,537(3,3);7,523(8,6);7,519(8,1);7,510(9,3);7,505(11,3);7,500(6,5);7,492(7,6);7,487(6,1);7,473(2,5);7,468(1,8);7,432(10,7);7,410(13,2);7,397(12,4);7,294(5,2);6,871(14,9);6,865(13,9);5,756(1,8);3,322(125,3);2,675(1,2);2,671(1,4);2,541(1,2);2,506(188,1);2,502(221,9);2,497(156,1);2,333(1,2);2,328(1,4);2,179(0,5);1,235(8,6);0,871(0,4);0,854(0,8);0,836(0,3);0,000(62,8);-0,008(2,9)
I-1-375: HPLC-EM: logP = 3,15; masa (m/z): 372,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,490(7,5);8,315(0,7);8,104(15,4);8,098(15,0);8,083(0,4);7,921(8,4);7,908(8,8);7,711(0,5);7,700(7,0);7,695(5,0);7,692(4,5);7,682(7,3);7,676(8,5);7,663(0,6);7,619(5,4);7,613(5,3);7,603(4,8);7,600(5,6);7,595(8,1);7,584(0,6);7,537(2,2);7,532(3,3);7,519(9,1);7,514(8,6);7,509(9,1);7,502(14,8);7,495(6,5);7,490(7,8);7,485(6,5);7,471(2,3);7,466(1,7);7,447(16,0);7,434(15,2);6,889(0,5);6,883(0,6);6,861(7,0);6,856(6,7);5,756(4,6);3,322(168,7);2,675(1,3);2,671(1,7);2,666(1,3);2,541(1,2);2,524(5,3);2,510(104,8);2,506(203,1);2,502(261,3);2,497(184,6);2,493(86,1);2,337(0,6);2,333(1,2);2,328(1,7);2,324(1,2);2,178(0,6);2,160(0,4);1,258(0,6);1,235(9,2);0,854(1,0);0,836(0,4);0,146(0,4);0,008(4,8);0,000(94,9);-0,009(3,2);-0,150(0,4)
I-1-376: HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 381,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,520(2,1);8,674(4,5);8,662(4,5);8,243(4,3);8,222(4,6);7,686(3,1);7,674(3,1);7,666(3,0);7,654(2,8);7,640(0,5);7,632(3,9);7,629(3,2);7,614(5,8);7,611(4,7);7,544(2,0);7,536(2,3);7,529(3,0);7,521(5,3);7,511(3,7);7,502(12,0);7,499(16,0);7,495(10,3);7,487(2,3);7,483(3,3);7,479(2,3);7,468(0,4);7,464(0,7);7,460(0,8);7,441(0,4);7,436(0,4);6,558(13,5);6,395(0,8);5,447(1,4);2,449(0,3);2,291(53,9);2,254(3,1);2,147(46,9);2,120(0,3);2,113(0,4);2,107(0,4);1,964(2,2);1,958(3,0);1,952(23,2);1,946(43,3);1,940(60,2);1,934(41,3);1,927(21,2);1,768(0,3);1,269(0,6);0,000(0,9)
I-1-377: HPLC-EM: logP = 3,29; masa (m/z): 338,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,252(2,3);7,896(9,6);7,890(9,6);7,728(10,8);7,714(11,3);7,615(4,6);7,610(3,7);7,609(3,4);7,596(6,1);7,591(6,0);7,575(4,5);7,569(5,1);7,557(4,5);7,555(4,7);7,551(6,7);7,535(0,4);7,488(2,1);7,483(2,7);7,469(6,4);7,465(6,1);7,453(7,2);7,451(6,9);7,447(7,2);7,434(5,5);7,429(4,8);7,416(1,9);7,411(1,4);7,134(11,5);7,121(10,9);6,930(9,8);6,924(9,6);6,298(0,4);5,447(1,2);2,244(0,4);2,233(0,5);2,227(0,6);2,169(446,8);2,120(0,9);2,114(0,9);2,107(0,9);2,101(0,7);2,095(0,6);2,087(0,4);2,084(0,4);2,076(0,3);1,972(1,2);1,964(3,8);1,958(5,0);1,952(26,5);1,946(48,4);1,940(6,4);1,934(46,0);1,928(23,9);1,775(0,4);1,768(0,5);1,762(0,4);1,690(0,4);1,437(16,0);1,269(0,5);0,911(0,3);0,000(1,5)
I-1-378: HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 413,8 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,867(7,2);8,095(9,5);8,089(9,5);7,924(12,4);7,920(12,6);7,696(4,5);7,692(3,7);7,690(3,6);7,677(6,1);7,672(5,6);7,624(3,9);7,619(5,0);7,606(4,2);7,604(4,6);7,600(6,2);7,538(2,0);7,534(2,5);7,519(5,8);7,515(5,3);7,501(9,5);7,495(8,3);7,482(4,9);7,477(5,0);7,463(1,9);7,458(1,5);6,910(13,2);6,906(13,1);6,865(9,9);6,859(10,0);5,757(16,0);4,039(0,4);4,021(0,4);3,330(13,5);2,526(0,6);2,521(1,0);2,513(11,5);2,508(23,5);2,504(31,1);2,499(22,3);2,495(10,5);1,990(1,9);1,396(0,7);1,193(0,5);1,175(1,1);1,158(0,5);0,000(6,7)
I-1-379: HPLC-EM: logP = 3,34; masa (m/z): 429,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (600,1 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,213(2,3);8,519(0,4);8,517(0,4);8,512(0,5);8,509(0,5);8,035(0,5);8,033(0,5);8,021(0,6);8,019(0,6);7,894(11,3);7,890(11,2);7,626(15,0);7,621(0,7);7,617(15,9);7,613(6,2);7,611(5,2);7,610(5,3);7,600(7,6);7,597(7,1);7,572(5,6);7,569(6,5);7,559(6,3);7,556(7,5);7,546(0,6);7,538(0,6);7,532(0,6);7,525(0,5);7,483(2,8);7,480(3,4);7,470(7,6);7,468(6,9);7,458(5,8);7,455(5,0);7,451(6,4);7,448(6,4);7,438(6,5);7,435(6,6);7,428(1,4);7,426(2,9);7,423(2,4);7,272(16,0);7,264(15,4);7,103(1,1);7,095(1,0);6,929(10,4);6,925(10,3);5,446(7,3);2,127(117,8);2,058(0,5);2,054(1,0);2,050(1,4);2,046(1,0);2,042(0,5);1,963(5,5);1,955(5,7);1,951(7,7);1,947(91,7);1,943(175,3);1,939(258,1);1,935(176,2);1,931(88,5);1,922(1,4);1,914(0,4);1,832(0,5);1,828(1,0);1,824(1,5);1,820(1,0);1,816(0,5);1,377(1,1);1,372(8,2);1,340(2,2);1,299(0,4);1,289(0,6);1,285(2,8);1,277(8,7);1,264(0,3);1,217(1,2);0,097(0,8);0,005(5,9);0,000(202,9);-0,006(6,3);-0,100(0,8)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-380:
<p>HPLC-EM: logP = 2,09; masa (m/z): 381,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):</p> <p>δ= 8,846(4,1);8,833(4,2);8,775(1,4);8,678(7,7);7,661(4,8);7,648(4,6);7,598(2,0);7,595(3,2);7,592(1,9);7,581(2,4);7,577(4,6);7,574(3,2);7,565(0,4);7,505(1,6);7,496(1,7);7,490(2,1);7,481(4,2);7,471(2,6);7,463(12,0);7,461(11,8);7,457(6,9);7,450(2,3);7,446(2,6);7,442(1,2);7,427(0,8);7,423(0,6);7,420(0,4);7,253(0,6);7,240(0,4);7,235(0,8);7,197(0,7);7,178(0,4);7,171(0,4);7,165(0,4);7,150(0,4);6,523(9,0);5,447(3,6);4,085(1,3);4,067(4,0);4,049(4,1);4,032(1,4);2,966(0,4);2,887(0,4);2,328(2,7);2,285(35,8);2,274(1,5);2,218(0,6);2,154(30,6);2,131(0,3);2,123(0,4);2,107(0,4);1,971(18,0);1,964(1,6);1,957(1,9);1,952(16,5);1,946(30,9);1,939(43,1);1,933(29,7);1,927(15,3);1,913(0,8);1,553(1,1);1,437(16,0);1,372(6,0);1,341(1,4);1,296(0,4);1,285(1,9);1,276(6,9);1,250(0,6);1,231(0,3);1,221(4,9);1,203(9,6);1,85(4,7);0,881(0,3);0,000(1,9)</p>
I-1-381:
<p>HPLC-EM: logP = 2,19; masa (m/z): 333,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):</p> <p>δ= 18,011(0,6);17,562(0,7);15,449(0,6);9,391(2,7);8,783(16,0);8,631(8,9);8,618(9,1);7,928(10,1);7,922(10,4);7,645(5,0);7,639(3,9);7,627(5,8);7,621(6,3);7,587(4,3);7,581(4,8);7,570(14,0);7,563(7,9);7,556(9,9);7,510(2,4);7,496(6,3);7,491(6,1);7,485(6,8);7,479(10,4);7,472(4,6);7,467(5,8);7,462(4,3);7,448(1,4);7,011(10,3);7,005(9,8);5,477(2,0);4,097(0,6);4,079(0,7);3,306(0,7);2,332(0,7);2,318(0,9);2,290(1,3);2,229(869,1);2,223(1835,6);2,162(7,5);2,150(1,1);2,144(2,0);2,137(2,7);2,131(1,8);2,125(1,0);2,104(0,7);2,087(0,7);2,074(0,6);2,067(0,6);2,042(0,7);2,035(0,8);1,994(1128,9);1,982(176,2);1,976(314,2);1,970(437,3);1,964(294,7);1,957(147,0);1,920(0,7);1,863(0,6);1,822(6,6);1,815(0,7);1,805(1,8);1,798(2,4);1,792(1,9);1,786(1,1);1,710(0,6);1,317(0,6);1,299(2,2);1,251(0,8);1,233(1,5);1,214(0,6);0,941(1,0);0,029(1,8)</p>
I-1-382:
<p>HPLC-EM: logP = 2,15; masa (m/z): 334,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, CD₃CN):</p> <p>δ= 8,090(1,0);8,089(1,8);8,088(1,1);8,076(1,1);8,075(2,0);8,074(1,2);7,652(3,7);7,650(3,9);7,648(2,1);7,646(2,0);7,643(2,0);7,641(1,9);7,629(0,3);7,627(0,3);7,525(1,0);7,521(1,0);7,516(0,9);7,511(1,3);7,507(0,9);7,502(0,8);7,498(0,8);5,451(0,9);3,746(9,2);3,743(9,2);2,410(16,0);2,177(4,9);1,967(10,4);1,959(0,3);1,955(0,4);1,951(4,6);1,947(8,5);1,943(12,4);1,939(8,6);1,935(4,4);0,000(1,1)</p>
I-1-383:
<p>HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 387,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):</p> <p>δ= 8,824(1,4);7,870(6,0);7,864(5,9);7,832(0,7);7,827(0,7);7,623(0,3);7,608(3,1);7,604(2,3);7,602(2,2);7,590(4,1);7,585(3,9);7,578(0,5);7,573(0,5);7,569(0,4);7,558(2,7);7,552(3,4);7,541(2,6);7,538(3,0);7,534(4,4);7,480(1,2);7,476(1,8);7,462(4,4);7,457(4,0);7,448(4,2);7,444(4,4);7,442(4,5);7,438(3,0);7,429(3,7);7,424(3,2);7,416(0,4);7,410(1,1);7,406(0,8);7,402(0,4);6,892(4,4);6,886(4,4);5,446(1,3);3,813(15,9);3,811(16,0);3,408(0,3);3,321(1,5);2,150(235,5);2,132(1,3);2,119(0,5);2,113(0,4);2,107(0,5);2,101(0,4);2,074(0,5);1,976(1,1);1,972(1,5);1,964(158,3);1,958(4,2);1,952(31,5);1,946(60,2);1,940(87,3);1,933(59,2);1,927(29,8);1,792(0,8);1,774(0,4);1,768(0,5);1,762(0,4);1,285(0,4);1,270(1,0);1,135(0,4);1,117(0,8);1,099(0,4);0,000(2,6)</p>
I-1-384:
<p>HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 384,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):</p> <p>δ= 11,543(7,4);8,110(9,5);8,104(9,4);7,770(0,6);7,750(1,9);7,741(1,1);7,730(4,2);7,716(6,9);7,696(16,0);7,689(4,1);7,678(7,5);7,672(7,6);7,660(0,5);7,624(4,0);7,618(4,0);7,607(3,3);7,605(3,8);7,600(5,9);7,588(0,4);7,531(1,3);7,526(2,0);7,512(5,4);7,507(5,2);7,502(5,5);7,495(9,1);7,488(4,0);7,483(4,9);7,478(4,1);7,464(1,5);7,459(1,0);6,892(1,0,3);6,885(10,2);5,756(9,7);3,323(19,7);2,675(0,5);2,671(0,6);2,666(0,4);2,524(1,8);2,511(37,1);2,506(74,9);2,502(98,1);2,497(69,8);2,493(33,0);2,333(0,5);2,329(0,6);2,324(0,4);1,989(1,3);1,193(0,4);1,175(0,7);1,157(0,4);0,008(2,3);0,000(63,6);-0,009(2,2)</p>
I-1-385:
<p>HPLC-EM: logP = 2,94; masa (m/z): 368,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):</p> <p>δ= 11,590(1,4);8,840(1,7);8,837(1,5);8,696(1,8);8,693(1,4);8,579(1,5);8,572(1,3);7,855(0,8);7,836(1,0);7,803(0,3);7,785(0,8);7,766(0,7);7,734(0,7);7,716(1,8);7,697(0,8);7,049(1,5);7,042(1,4);3,336(13,5);2,510(4,7);2,505(5,6);2,501(3,8);0,000(0,6)</p>
I-1-386:
<p>HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 369,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):</p> <p>δ= 11,951(0,4);11,745(12,4);8,863(6,7);8,851(7,0);8,843(15,3);8,839(16,0);8,705(15,3);8,702(14,8);8,681(0,5);8,678(0,6);8,597(13,6);8,590(13,5);8,531(0,5);8,524(0,5);8,316(0,9);8,309(0,4);8,306(0,4);8,229(6,2);8,212(6,6);7,855(5,7);7,843(5,6);7,836(5,3);7,824(5,1);7,049(14,2);7,042(14,1);6,924(0,5);6,916(0,4);5,756(2,5);4,055(0,4);4,038(1,2);4,020(1,2);4,002(0,4);3,320(66,4);2,675(2,1);2,671(2,9);2,666(2,1);2,541(1,5);2,524(7,0);2,510(163,2);2,506(331,2);2,502(437,3);2,497(315,2);2,493(151,7);2,333(2,0);2,328(2,8);2,324(2,1);2,197(0,4);2,179(0,8);2,160(0,4);1,989(5,1);1,398(2,1);1,258(0,6);1,235(11,4);1,193(1,4);1,175(2,7);1,157(1,4);0,870(0,4);0,854(1,1);0,836(0,5);0,14(1,4);0,008(9,9);0,000(306,1);-0,008(11,2);-0,150(1,4)</p>

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-387:
<p>HPLC-EM: logP = 2,67; masa (m/z): 336,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,798(10,1);8,944(0,3);8,849(15,7);8,846(16,0);8,704(15,6);8,700(14,8);8,656(0,4);8,596(12,3);8,589(12,0);8,315(2,1);7,629(1,4);7,612(3,0);7,608(2,6);7,591(5,4);7,574(2,8);7,570(3,2);7,554(1,4);7,255(9,6);7,235(13,5);7,214(7,8);7,207(1,5);7,049(14,1);7,042(13,7);5,755(0,7);3,373(0,6);3,321(583,0);3,285(0,5);3,278(0,4);3,095(1,9);2,675(3,5);2,671(4,7);2,666(3,4);2,635(0,4);2,541(2,9);2,524(11,6);2,519(18,7);2,511(269,9);2,506(550,6);2,502(724,4);2,497(511,8);2,493(238,6);2,413(0,4);2,337(1,7);2,333(3,3);2,328(4,5);2,324(3,2);1,230(0,3);1,190(2,9);1,171(4,9);1,154(2,9);0,008(0,5);0,000(12,3)</p>
I-1-388:
<p>HPLC-EM: logP = 2,84; masa (m/z): 378,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,482(5,8);8,948(1,7);8,944(1,8);8,839(7,2);8,836(7,4);8,695(7,6);8,692(7,5);8,577(7,5);8,570(6,3);8,315(0,4);7,718(3,8);7,715(3,9);7,698(4,6);7,695(4,5);7,565(2,4);7,561(2,8);7,546(4,2);7,542(4,4);7,503(2,3);7,500(2,5);7,484(4,9);7,481(4,8);7,471(1,7);7,466(3,7);7,462(2,7);7,441(3,3);7,436(3,3);7,421(3,7);7,417(3,7);7,402(1,8);7,398(1,7);7,064(6,6);7,057(6,6);6,647(1,2);5,755(16,0);5,449(1,9);5,445(1,9);3,346(0,7);3,322(72,3);2,676(0,6);2,671(0,8);2,667(0,6);2,541(0,4);2,525(2,0);2,511(45,6);2,507(92,8);2,502(122,0);2,498(86,3);2,493(40,3);2,333(0,6);2,329(0,8);2,324(0,6);1,506(1,2);0,000(0,8)</p>
I-1-389:
<p>HPLC-EM: logP = 2,82; masa (m/z): 334,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,498(12,8);8,841(14,8);8,838(15,0);8,695(16,0);8,692(15,3);8,579(13,1);8,572(13,1);8,316(0,3);7,598(6,4);7,594(6,8);7,580(8,4);7,576(8,9);7,568(5,4);7,565(6,0);7,548(11,9);7,545(12,2);7,529(5,7);7,525(5,8);7,511(9,3);7,507(8,0);7,491(4,9);7,487(4,3);7,463(7,4);7,459(7,1);7,444(9,5);7,441(9,1);7,426(3,6);7,423(3,3);7,068(13,4);7,061(13,2);5,756(1,1);3,323(80,8);2,676(0,7);2,672(0,9);2,668(0,7);2,542(0,6);2,525(2,7);2,511(54,6);2,507(107,6);2,503(139,7);2,498(99,7);2,494(47,6);2,334(0,6);2,329(0,9);2,325(0,6);0,000(0,7)</p>
I-1-390:
<p>HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 425,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,424(9,2);9,024(0,4);8,840(10,6);8,837(10,2);8,747(0,5);8,744(0,4);8,694(11,0);8,691(10,3);8,576(8,6);8,570(8,5);7,935(7,3);7,916(8,0);7,882(0,4);7,514(0,9);7,493(8,4);7,490(8,6);7,480(16,0);7,259(0,4);7,249(3,2);7,241(2,9);7,236(3,0);7,229(3,9);7,227(3,6);7,220(2,7);7,216(3,0);7,207(2,6);7,064(8,8);7,058(8,7);4,056(0,4);4,038(1,1);4,020(1,1);4,002(0,4);3,322(45,6);2,671(0,6);2,667(0,4);2,541(0,4);2,506(75,6);2,502(96,2);2,498(68,9);2,333(0,5);2,329(0,6);2,325(0,4);1,989(4,7);1,193(1,3);1,175(2,5);1,157(1,2);0,000(0,4)</p>
I-1-391:
<p>HPLC-EM: logP = 2,31; masa (m/z): 367,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,277(4,2);8,436(6,5);8,432(7,2);8,425(7,1);8,420(7,0);7,997(11,4);7,991(11,8);7,953(7,0);7,948(7,4);7,933(7,8);7,929(7,9);7,824(5,8);7,805(7,5);7,764(0,3);7,750(1,9);7,738(2,3);7,730(6,3);7,715(7,0);7,692(16,0);7,674(8,6);7,656(2,2);7,640(0,4);7,635(0,3);7,615(0,3);7,510(7,3);7,498(7,4);7,490(7,1);7,479(6,7);7,426(0,5);7,420(0,5);7,241(0,3);7,236(0,4);7,003(12,0);6,996(12,3);5,448(7,9);2,150(57,8);2,114(0,4);2,108(0,4);1,972(1,1);1,965(2,3);1,953(24,1);1,947(45,3);1,941(63,2);1,935(45,6);1,928(24,2);1,769(0,4);1,372(8,3);1,340(1,1);1,313(0,6);1,297(0,7);1,284(1,7);1,276(9,3);1,203(0,4);0,146(0,4);0,000(97,0);-0,150(0,4)</p>
I-1-392:
<p>HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 333,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,317(4,2);8,438(7,6);8,434(8,3);8,427(8,2);8,422(8,2);7,999(13,1);7,993(13,3);7,962(7,5);7,958(7,7);7,942(8,3);7,938(8,3);7,860(0,4);7,854(0,4);7,631(0,8);7,613(7,0);7,610(7,3);7,595(8,4);7,591(8,8);7,527(4,6);7,514(10,9);7,511(12,7);7,507(14,1);7,503(13,4);7,496(12,7);7,483(16,0);7,479(9,3);7,471(1,9);7,463(4,5);7,459(3,8);7,444(7,0);7,440(6,5);7,426(9,5);7,422(8,9);7,408(3,8);7,404(3,5);7,389(0,4);7,384(0,4);7,368(0,4);7,364(0,4);7,350(0,4);7,345(0,4);7,261(0,3);7,256(0,4);7,240(0,5);7,235(0,6);7,172(0,5);7,166(0,5);7,025(13,4);7,019(13,4);6,985(0,5);6,633(0,4);6,626(0,4);5,449(3,7);4,085(0,4);4,067(1,2);4,049(1,2);4,031(0,4);3,993(0,4);3,259(0,4);2,473(0,5);2,468(0,9);2,463(1,3);2,459(0,9);2,454(0,5);2,433(0,4);2,176(295,1);2,121(0,7);2,115(0,9);2,109(1,1);2,103(0,8);2,096(0,5);1,972(6,2);1,966(5,9);1,954(61,0);1,947(113,7);1,941(158,7);1,935(112,0);1,929(59,9);1,782(0,4);1,776(0,7);1,770(1,0);1,764(0,7);1,757(0,4);1,436(2,7);1,385(0,7);1,371(14,6);1,340(1,9);1,310(2,8);1,293(3,1);1,285(3,1);1,276(14,4);1,221(1,5);1,216(1,0);1,204(2,8);1,186(1,4);0,881(0,6);0,858(0,5);0,146(1,3);0,008(12,5);0,000(261,9);-0,008(14,8);-0,150(1,3)</p>
I-1-393 ver el Ejemplo de síntesis 29

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-394: HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 415,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,341(2,2);8,126(8,5);8,119(8,8);7,948(7,0);7,928(6,9);7,867(4,9);7,864(5,3);7,847(5,5);7,844(5,9);7,794(2,2);7,790(2,2);7,773(5,5);7,755(4,4);7,751(4,2);7,707(7,5);7,688(4,4);7,518(4,2);7,515(4,3);7,506(2,3);7,494(16,0);7,488(9,8);7,477(9,9);7,458(1,7);7,456(1,7);7,231(3,4);7,224(3,0);7,215(3,1);7,211(4,1);7,208(3,9);7,205(3,3);7,195(2,8);7,188(2,8);7,074(8,6);7,068(8,7);5,448(5,4);2,168(30,1);2,109(0,3);1,965(1,9);1,959(2,5);1,953(17,9);1,947(33,3);1,941(46,3);1,935(32,5);1,929(17,1);1,372(4,0);1,340(0,5);1,311(0,8);1,295(0,8);1,284(0,8);1,276(4,5);0,008(0,5);0,000(13,4);-0,009(0,5)
I-1-395: HPLC-EM: logP = 3,21; masa (m/z): 411,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,571(0,7);11,504(4,3);8,849(3,2);8,838(3,3);8,254(0,6);8,247(1,1);8,217(7,9);8,211(7,7);8,195(3,4);7,841(2,4);7,829(2,6);7,822(2,3);7,810(2,2);7,745(0,4);7,727(0,7);7,709(0,4);7,602(3,2);7,598(3,3);7,582(3,5);7,578(3,4);7,531(3,0);7,527(2,9);7,511(3,7);7,507(3,1);7,405(0,4);7,384(0,7);7,381(0,8);7,360(0,3);7,305(3,2);7,285(5,6);7,265(2,4);6,966(1,3);6,959(1,3);6,929(5,7);6,923(5,7);5,758(2,5);3,826(2,3);3,808(7,2);3,791(7,3);3,773(2,2);3,321(216,7);2,675(3,3);2,670(4,1);2,666(3,0);2,604(0,5);2,588(0,4);2,577(0,5);2,506(507,4);2,501(635,4);2,497(456,0);2,441(0,7);2,381(0,6);2,332(3,3);2,328(4,2);2,324(2,9);1,227(7,8);1,210(16,0);1,192(7,3);0,146(2,8);0,050(0,4);0,008(30,0);0,000(619,9);-0,009(24,1);-0,030(1,0);-0,065(0,3);-0,150(3,0)
I-1-396: HPLC-EM: logP = 2,91; masa (m/z): 404,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,280(1,0);7,695(3,2);7,694(3,1);7,676(3,8);7,674(3,7);7,601(6,7);7,567(6,9);7,506(0,9);7,500(1,7);7,486(4,8);7,481(8,1);7,466(4,6);7,464(4,3);7,454(0,5);7,448(1,8);7,445(1,7);7,437(3,4);7,431(2,6);7,418(2,9);7,412(2,5);7,400(1,4);7,395(1,3);7,238(1,7);7,233(2,4);7,228(1,7);7,218(2,8);7,217(2,9);7,213(3,0);7,210(2,7);7,151(1,0);7,136(1,4);7,130(3,6);7,117(4,3);7,115(4,6);7,112(5,0);7,096(3,2);7,091(3,1);7,086(3,1);7,070(1,0);7,065(0,7);5,446(0,6);4,785(5,2);4,751(5,1);4,227(2,2);4,225(2,1);4,209(6,1);4,207(6,1);4,192(6,1);4,189(6,1);4,174(2,0);4,172(2,1);4,090(0,4);4,087(0,4);4,072(0,4);4,069(0,4);2,655(0,4);2,642(0,4);2,148(21,1);1,964(1,4);1,957(1,7);1,952(12,8);1,945(23,9);1,939(33,3);1,933(23,0);1,927(11,9);1,874(1,3);1,860(1,3);1,486(0,4);1,360(8,1);1,359(8,1);1,3424(16,0);1,3416(15,9);1,325(8,0);1,261(0,6);1,259(0,4);1,244(1,1);1,241(0,8);1,226(0,5);1,223(0,4);1,183(0,9);1,165(1,7);1,147(0,8);0,008(1,0);0,000(26,1);-0,009(0,9)
I-1-397: HPLC-EM: logP = 2,74; masa (m/z): 360,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,487(0,9);7,613(5,6);7,578(5,8);7,546(3,3);7,543(2,4);7,527(4,6);7,517(6,9);7,515(7,1);7,509(5,4);7,503(4,7);7,500(3,1);7,483(0,8);7,479(1,0);7,456(0,5);7,444(2,7);7,436(1,9);7,430(1,8);7,425(2,0);7,422(2,0);7,418(1,7);7,410(1,4);7,403(1,3);7,215(1,6);7,211(2,3);7,206(1,5);7,195(2,7);7,193(3,0);7,191(2,8);7,187(2,6);7,147(1,1);7,132(1,4);7,126(3,3);7,111(5,7);7,104(3,4);7,092(2,5);7,084(3,0);7,079(2,7);7,063(1,0);7,058(0,8);5,448(1,9);4,741(5,3);4,707(5,2);4,224(2,3);4,208(6,2);4,207(6,2);4,191(6,1);4,189(6,1);4,173(2,1);4,172(2,1);2,196(21,5);2,189(36,9);2,186(38,3);1,964(1,2);1,958(1,4);1,952(10,5);1,946(19,4);1,940(27,0);1,934(18,6);1,928(9,6);1,874(0,9);1,860(0,9);1,362(8,1);1,345(16,0);1,327(8,0);1,262(0,4);1,245(0,7);1,240(0,4);1,227(0,4);1,182(0,4);1,164(0,8);1,147(0,6);0,008(0,9);0,000(23,3);-0,009(0,8)
I-1-398: HPLC-EM: logP = 3,03; masa (m/z): 420,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,097(2,3);7,775(2,7);7,769(2,7);7,696(1,5);7,694(1,5);7,677(1,8);7,674(1,8);7,546(1,0);7,542(1,2);7,527(1,8);7,523(1,8);7,495(1,4);7,475(2,9);7,461(2,0);7,458(2,0);7,454(2,0);7,442(1,1);7,439(1,1);7,411(1,1);7,406(1,1);7,391(1,3);7,387(1,3);7,372(0,6);7,368(0,6);7,227(2,2);7,219(2,4);7,216(1,9);7,206(1,8);7,199(2,0);7,196(1,6);6,850(3,0);6,844(2,9);4,111(1,1);4,093(3,5);4,076(3,6);4,058(1,2);4,038(0,7);4,020(0,7);3,321(53,8);3,233(0,5);3,019(0,5);2,675(0,6);2,670(0,9);2,666(0,7);2,523(2,5);2,510(51,4);2,506(102,4);2,501(134,1);2,497(96,8);2,492(46,5);2,332(0,7);2,328(0,9);2,323(0,6);1,989(2,9);1,398(16,0);1,330(0,4);1,221(3,7);1,204(7,9);1,192(1,3);1,187(3,7);1,179(0,8);1,175(1,7);1,161(0,3);1,157(0,8);0,008(2,7);0,000(73,6);-0,009(2,4);-0,150(0,3)
I-1-399: HPLC-EM: logP = 2,87; masa (m/z): 404,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 4,132(0,4);4,115(0,4);2,327(16,0);2,324(15,8);1,982(0,6);1,976(1,2);1,970(1,6);1,964(1,1);1,958(0,6);1,319(0,4);1,302(0,9);1,284(0,4)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-400:
<p>HPLC-EM: masa (m/z): 300,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,564(3,9);8,316(0,3);8,127(2,2);8,120(4,2);8,114(2,2);7,808(1,0);7,803(1,1);7,789(2,1);7,784(1,9);7,770(1,1);7,764(1,2);7,493(0,9);7,489(1,0);7,473(1,4);7,469(1,5);7,464(1,0);7,458(1,0);7,444(1,1);7,439(1,5);7,418(0,6);7,413(0,7);7,407(0,6);7,400(1,5);7,395(1,2);7,388(1,5);7,382(1,6);7,376(2,8);7,371(2,9);7,363(1,1);7,357(2,3);7,352(2,1);7,338(0,8);7,334(0,7);6,930(4,8);6,924(4,8);6,801(4,5);3,903(2,2);3,328(194,0);2,675(0,7);2,671(0,9);2,667(0,7);2,523(23,9);2,511(64,2);2,507(123,5);2,502(157,3);2,498(112,4);2,436(0,5);2,333(0,8);2,329(1,0);2,324(0,7);2,315(0,5);2,241(16,0)</p>
I-1-401:
<p>HPLC-EM: logP = 3,33; masa (m/z): 352,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 20,008(1,0);12,063(1,1);11,621(6,1);8,973(5,0);8,963(5,1);8,615(5,4);8,594(5,1);8,552(6,3);8,545(6,3);8,315(4,9);7,852(3,1);7,835(4,8);7,802(1,4);7,784(3,2);7,765(3,5);7,734(3,2);7,716(7,8);7,697(3,6);7,680(1,0);7,057(7,1);7,050(6,3);3,525(1,0);3,505(1,1);3,490(1,2);3,472(1,2);3,447(1,3);3,430(1,4);3,406(3,2);3,398(2,2);3,393(2,1);3,329(5383,3);3,268(3,1);3,231(1,4);3,216(1,2);3,204(1,5);3,194(1,1);3,191(1,1);2,721(1,1);2,675(11,6);2,671(16,0);2,666(11,9);2,585(2,7);2,541(94,2);2,511(970,1);2,506(1928,6);2,502(2517,8);2,497(1817,5);2,493(878,5);2,444(3,4);2,383(1,3);2,370(1,4);2,333(11,5);2,329(16,0);2,324(11,1);2,290(1,0);1,297(1,5);1,259(2,3);1,235(2,5);0,827(1,0);0,000(6,0);-3,400(1,2)</p>
I-1-402:
<p>HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 353,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 16,885(1,2);11,782(9,5);8,977(8,5);8,967(8,0);8,865(5,3);8,854(5,6);8,626(8,2);8,606(8,3);8,572(9,9);8,566(10,3);8,315(5,9);8,239(5,6);8,220(5,7);7,858(4,4);7,847(4,7);7,839(4,5);7,826(4,2);7,062(11,0);7,055(11,0);3,573(1,1);3,537(1,4);3,481(1,6);3,473(1,1);3,440(1,9);3,423(1,6);3,373(5,2);3,327(3958,0);3,305(11,2);3,290(4,8);3,278(1,7);3,250(1,4);3,135(1,1);2,788(1,1);2,675(11,9);2,671(16,0);2,635(1,6);2,616(1,6);2,598(1,7);2,541(91,1);2,506(2024,8);2,502(2524,4);2,498(1779,8);2,431(1,6);2,422(1,7);2,333(11,7);2,329(15,5);1,301(1,5);1,259(2,3);1,236(4,4);0,854(1,1);0,000(12,1)</p>
I-1-403:
<p>HPLC-EM: logP = 2,32; masa (m/z): 320,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,207(1,6);11,202(1,2);9,078(1,6);8,717(1,7);8,696(1,9);8,315(4,8);7,903(1,6);7,639(1,2);7,598(1,2);7,300(1,3);7,281(2,0);7,260(1,3);6,779(1,7);3,733(1,2);3,584(1,1);3,530(1,1);3,503(1,1);3,481(1,3);3,463(1,5);3,436(1,6);3,421(1,6);3,397(2,2);3,383(4,0);3,326(3356,3);3,301(3,9);3,295(3,2);3,262(2,3);3,164(1,1);3,092(1,1);2,728(1,2);2,675(12,2);2,671(16,0);2,614(1,3);2,591(1,6);2,575(2,5);2,541(74,5);2,506(2031,7);2,502(2577,3);2,497(1866,6);2,436(2,4);2,374(1,1);2,363(1,2);2,333(12,0);2,329(16,0);2,290(1,1);2,259(1,3);1,297(1,8);1,258(2,6);1,234(2,6);0,858(1,1);0,008(1,1);0,000(7,7);-1,654(1,1);-3,506(1,0)</p>
I-1-404:
<p>HPLC-EM: logP = 3,19; masa (m/z): 364,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,519(13,3);8,973(11,1);8,963(11,1);8,947(0,9);8,612(12,1);8,592(12,1);8,551(14,5);8,544(14,2);8,480(1,2);8,315(5,5);7,718(9,4);7,701(11,2);7,698(11,2);7,570(5,7);7,566(6,7);7,551(9,5);7,547(10,1);7,505(5,7);7,502(6,2);7,487(11,9);7,484(11,9);7,468(6,4);7,465(6,5);7,444(8,3);7,439(8,1);7,424(9,0);7,420(8,9);7,405(4,4);7,401(3,8);7,076(15,2);7,069(14,8);5,071(0,9);4,612(0,9);3,550(1,2);3,534(0,9);3,516(1,2);3,495(1,4);3,486(1,3);3,473(1,2);3,468(1,7);3,453(1,3);3,439(1,8);3,433(1,3);3,423(1,5);3,415(1,9);3,408(3,2);3,394(4,3);3,373(7,0);3,357(17,8);3,329(5998,7);3,289(3,4);3,281(2,1);3,268(1,2);3,247(1,6);3,238(1,2);3,234(1,3);3,210(1,0);3,203(1,3);3,150(2,3);2,994(1,0);2,770(1,0);2,767(1,0);2,696(0,9);2,676(11,8);2,671(16,0);2,666(12,2);2,606(1,3);2,541(134,0);2,524(54,1);2,520(84,7);2,511(942,6);2,506(1902,0);2,502(2501,8);2,497(1787,9);2,493(846,4);2,419(1,4);2,337(5,0);2,333(11,2);2,329(15,2);2,324(10,9);2,290(1,2);1,336(0,9);1,298(1,9);1,258(2,5);1,235(5,2);0,854(1,0);0,000(8,6)</p>
I-1-405:
<p>HPLC-EM: logP = 3,28; masa (m/z): 410,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 16,864(1,0);16,266(1,1);16,176(1,0);11,478(1,1);11,460(8,0);8,975(6,7);8,964(6,5);8,611(7,2);8,591(7,4);8,551(8,1);8,544(8,4);8,316(5,1);7,937(7,0);7,917(7,7);7,495(10,8);7,484(15,5);7,252(3,7);7,242(3,2);7,239(3,5);7,232(4,0);7,220(3,8);7,209(3,2);7,076(8,8);7,069(8,4);3,471(1,1);3,445(1,2);3,429(1,1);3,418(1,3);3,403(1,4);3,370(2,4);3,324(2280,3);3,295(2,9);3,281(1,5);3,273(1,3);3,190(1,0);2,756(1,1);2,752(1,2);2,675(11,7);2,671(16,0);2,666(11,6);2,628(1,8);2,606(1,6);2,541(99,5);2,524(54,6);2,511(999,9);2,506(1969,9);2,502(2550,4);2,497(1811,4);2,493(89,8);2,333(11,4);2,328(15,2);2,324(11,1);2,289(1,5);1,298(1,7);1,259(2,7);1,235(5,7);0,854(1,1);0,831(1,2);0,000(11,0)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-406:
<p>HPLC-EM: logP = 2,84; masa (m/z): 362,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,269(2,4);8,126(2,9);8,120(2,9);7,832(1,3);7,812(1,6);7,779(0,5);7,761(1,3);7,742(1,2);7,706(1,0);7,686(1,4);7,678(1,8);7,668(0,6);7,659(1,2);7,603(1,5);7,599(1,6);7,584(1,7);7,580(1,7);7,365(0,6);7,361(0,6);7,344(1,3);7,340(1,1);7,326(1,1);7,322(1,1);7,258(1,8);7,256(2,0);7,238(1,3);7,235(1,2);7,093(1,0);7,090(1,0);7,073(1,6);7,071(1,5);7,055(0,8);7,051(0,8);6,846(3,2);6,840(3,1);5,756(1,7);3,883(16,0);3,323(8,7);2,524(0,4);2,510(8,3);2,506(16,5);2,501(21,6);2,497(15,3);2,492(7,2);0,008(1,0);0,000(24,9);-0,009(0,9)</p>
I-1-407:
<p>HPLC-EM: logP = 2,37; masa (m/z): 363,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,445(2,1);8,843(1,1);8,840(1,2);8,831(1,2);8,829(1,2);8,192(1,1);8,189(1,1);8,172(1,2);8,170(1,2);8,142(2,8);8,136(2,8);7,834(1,1);7,822(1,1);7,814(1,0);7,802(1,0);7,597(1,5);7,593(1,6);7,577(1,7);7,573(1,6);7,371(0,6);7,367(0,7);7,353(0,9);7,351(1,2);7,346(1,1);7,332(1,2);7,328(1,1);7,263(1,7);7,260(1,8);7,242(1,3);7,239(1,2);7,094(1,0);7,091(1,0);7,075(1,4);7,073(1,4);7,056(0,9);7,053(0,8);6,850(3,1);6,844(3,1);3,884(16,0);3,869(0,8);3,322(12,7);2,524(0,5);2,519(0,8);2,511(10,9);2,506(22,2);2,502(29,3);2,497(20,7);2,492(9,6);1,989(1,2);1,235(0,4);1,193(0,3);1,175(0,7);1,157(0,3);0,008(1,3);0,000(39,1);-0,009(1,2)</p>
I-1-408:
<p>HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 330,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,491(2,1);8,138(2,8);8,132(2,8);7,600(1,7);7,595(1,6);7,583(0,9);7,580(2,2);7,576(1,8);7,567(0,5);7,562(1,3);7,558(0,5);7,546(0,6);7,541(0,8);7,525(0,3);7,373(0,7);7,369(0,7);7,355(1,0);7,352(1,2);7,351(1,1);7,348(1,1);7,334(1,2);7,330(1,1);7,261(1,7);7,258(1,9);7,240(1,5);7,237(1,5);7,232(2,3);7,212(2,9);7,192(1,8);7,184(0,4);7,096(1,0);7,093(1,0);7,076(1,5);7,074(1,4);7,058(0,9);7,054(0,8);6,851(3,2);6,845(3,1);5,756(0,8);3,881(16,0);3,322(7,9);2,524(0,4);2,511(8,4);2,506(16,8);2,502(22,0);2,497(15,6);2,492(7,4);1,989(0,3);0,008(1,0);0,000(27,4);-0,009(1,0)</p>
I-1-409:
<p>HPLC-EM: logP = 2,12; masa (m/z): 373,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,351(2,2);8,477(1,6);8,472(1,7);8,465(1,7);8,460(1,6);8,140(2,8);8,134(2,9);7,982(1,6);7,977(1,6);7,963(1,8);7,958(1,7);7,600(1,5);7,596(1,5);7,580(1,6);7,576(1,6);7,562(1,7);7,550(1,7);7,543(1,6);7,531(1,7);7,370(0,7);7,366(0,6);7,349(1,3);7,346(1,1);7,331(1,1);7,327(1,0);7,262(1,9);7,259(2,0);7,241(1,3);7,238(1,2);7,096(1,0);7,093(1,0);7,077(1,6);7,074(1,5);7,058(0,9);7,055(0,8);6,865(3,0);6,859(3,0);5,755(1,6);4,038(0,5);4,020(0,5);3,883(16,0);3,869(0,5);3,856(0,3);3,320(38,0);2,675(0,4);2,671(0,5);2,666(0,4);2,524(1,2);2,510(31,2);2,506(62,5);2,501(81,5);2,497(58,0);2,492(27,4);2,333(0,4);2,328(0,5);2,324(0,4);1,988(2,1);1,193(0,6);1,175(1,1);1,157(0,5);0,146(0,4);0,008(3,4);0,000(89,0);-0,009(3,1);-0,150(0,4)</p>
I-1-410:
<p>HPLC-EM: logP = 2,70; masa (m/z): 328,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,183(2,3);8,128(2,9);8,122(2,9);7,605(1,5);7,601(1,6);7,585(1,7);7,581(1,7);7,567(1,2);7,563(1,3);7,548(2,3);7,544(2,8);7,527(2,1);7,524(2,2);7,504(1,0);7,500(1,0);7,486(1,7);7,481(1,4);7,466(1,0);7,461(0,8);7,444(1,4);7,440(1,4);7,426(1,7);7,422(1,6);7,407(0,7);7,404(0,6);7,364(0,7);7,360(0,7);7,345(1,0);7,343(1,3);7,339(1,2);7,325(1,2);7,321(1,1);7,257(1,8);7,254(2,0);7,236(1,3);7,233(1,2);7,093(1,0);7,090(1,0);7,074(1,5);7,072(1,5);7,055(0,9);7,052(0,8);6,866(3,2);6,860(3,1);5,755(5,7);3,882(16,0);3,323(9,2);2,523(0,3);2,510(7,9);2,506(16,0);2,501(21,0);2,496(14,9);2,492(7,0);1,988(1,0);1,397(1,2);1,175(0,5);0,008(1,0);0,000(26,5);-0,009(0,9)</p>
I-1-411:
<p>HPLC-EM: logP = 2,83; masa (m/z): 420,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,106(2,5);8,127(3,0);8,120(2,9);7,919(1,8);7,899(2,1);7,609(1,5);7,605(1,6);7,589(1,7);7,585(1,6);7,496(0,4);7,493(0,4);7,477(1,5);7,474(1,5);7,461(2,9);7,457(3,4);7,444(0,7);7,362(0,7);7,358(0,6);7,341(1,3);7,338(1,1);7,323(1,2);7,319(1,1);7,257(1,9);7,255(2,1);7,236(1,4);7,234(1,3);7,226(1,0);7,219(0,9);7,209(1,0);7,206(1,1);7,203(1,0);7,199(0,9);7,190(0,8);7,183(0,8);7,094(1,0);7,091(1,0);7,074(1,6);7,072(1,5);7,056(0,8);7,053(0,8);6,862(3,2);6,856(3,1);5,755(5,2);4,037(0,6);4,020(0,6);3,884(16,0);3,321(11,9);2,523(0,4);2,510(9,9);2,505(20,0);2,501(26,3);2,496(18,6);2,492(8,7);1,988(2,7);1,397(1,1);1,192(0,7);1,175(1,5);1,157(0,7);0,008(1,2);0,000(31,6);-0,009(1,0)</p>
I-1-412:
<p>HPLC-EM: masa (m/z): 314,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,718(2,3);8,379(2,7);8,373(2,6);8,229(2,8);8,223(3,3);8,160(3,3);8,153(2,8);6,971(2,8);6,964(2,8);6,835(2,7);4,039(16,0);3,903(2,9);3,329(55,9);2,672(0,3);2,526(12,9);2,511(21,1);2,507(41,7);2,503(53,4);2,498(37,5);2,494(17,4);2,329(0,3);2,237(9,3)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-413: HPLC-EM: masa (m/z): 374,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,377(2,4);8,401(2,7);8,395(2,7);8,257(3,1);8,250(3,6);8,175(3,5);8,168(3,0);7,709(1,6);7,707(1,6);7,689(1,9);7,687(1,8);7,552(1,0);7,547(1,1);7,533(1,8);7,528(1,9);7,495(0,9);7,492(0,9);7,476(1,9);7,474(1,7);7,458(1,0);7,455(0,9);7,429(1,2);7,424(1,1);7,409(1,4);7,405(1,3);7,391(0,6);7,386(0,6);6,987(2,9);6,981(2,8);4,038(16,0);3,909(4,1);3,335(152,9);2,682(0,4);2,677(0,6);2,673(0,4);2,530(1,5);2,517(37,6);2,513(75,6);2,508(98,3);2,504(70,0);2,499(33,4);2,339(0,4);2,335(0,6);2,330(0,4)
I-1-414: HPLC-EM: masa (m/z): 296,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,423(2,8);7,937(3,5);7,931(3,5);7,406(0,8);7,399(1,1);7,388(1,9);7,384(2,3);7,374(1,7);7,366(3,4);7,354(3,2);7,349(3,3);7,340(3,4);7,331(1,5);7,327(0,9);6,839(3,6);6,833(3,5);6,781(3,2);3,909(2,2);3,333(66,9);2,682(0,3);2,677(0,4);2,526(17,6);2,513(52,6);2,508(66,7);2,504(47,6);2,334(0,4);2,273(16,0);2,240(11,9)
I-1-415: HPLC-EM: logP = 2,63; masa (m/z): 377,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,332(10,6);8,257(10,7);8,250(11,0);8,025(6,7);8,005(7,4);7,862(1,7);7,859(1,8);7,842(5,9);7,839(5,7);7,821(16,0);7,815(11,9);7,802(8,5);7,766(2,1);7,748(5,9);7,730(5,3);7,700(4,8);7,681(6,0);7,667(8,5);7,650(8,6);7,629(5,9);7,613(3,1);7,608(3,0);6,946(11,1);6,939(11,2);5,758(12,3);4,056(0,7);4,038(2,2);4,020(2,2);4,002(0,7);3,326(49,0);2,890(0,4);2,671(0,6);2,506(76,5);2,502(98,0);2,498(75,7);2,328(0,6);1,989(9,3);1,236(0,6);1,192(2,5);1,174(4,9);1,157(2,5);0,000(9,8)
I-1-416: HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 378,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,478(11,1);8,833(6,0);8,823(5,9);8,821(5,9);8,287(12,7);8,281(12,7);8,193(5,7);8,175(6,1);8,173(6,1);8,029(6,6);8,027(7,0);8,009(7,4);8,007(7,6);7,866(1,8);7,863(1,7);7,846(6,4);7,843(6,2);7,827(16,0);7,822(15,4);7,808(8,1);7,801(6,0);7,789(4,8);7,655(4,5);7,650(4,1);7,638(4,5);7,635(5,5);7,630(4,1);7,619(3,7);7,613(3,3);6,950(13,6);6,944(13,6);5,758(11,6);3,323(112,0);2,675(1,8);2,671(2,5);2,666(1,8);2,524(8,8);2,510(143,1);2,506(280,1);2,501(63,7);2,497(264,2);2,493(129,3);2,333(1,8);2,328(2,4);2,324(1,8);0,146(0,7);0,008(6,5);0,000(168,4);-0,009(6,8);-0,150(0,7)
I-1-417: HPLC-EM: logP = 2,34; masa (m/z): 345,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,551(10,4);8,288(12,5);8,282(12,2);8,032(6,4);8,029(6,8);8,011(7,2);8,009(7,4);7,866(1,7);7,863(1,7);7,846(6,1);7,843(5,7);7,826(16,0);7,821(11,3);7,805(3,3);7,801(1,7);7,658(4,3);7,653(4,0);7,640(4,4);7,637(5,5);7,633(4,1);7,621(3,5);7,615(3,2);7,599(1,4);7,582(3,0);7,578(2,8);7,561(5,5);7,544(2,9);7,540(3,3);7,523(1,5);7,233(1,8);7,227(9,3);7,207(13,8);7,186(8,1);7,179(1,9);6,954(13,1);6,948(13,0);5,758(13,8);4,038(0,8);4,020(0,9);3,326(54,5);2,676(0,6);2,671(0,7);2,666(0,6);2,524(2,6);2,511(42,7);2,506(82,2);2,502(105,8);2,497(76,7);2,493(37,2);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);1,989(3,7);1,235(0,5);1,192(1,0);1,175(2,0);1,157(1,0);0,008(0,5);0,000(12,7);-0,008(0,4)
I-1-418: HPLC-EM: logP = 2,50; masa (m/z): 389,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,243(12,7);11,214(0,3);8,253(13,1);8,246(12,9);8,025(8,0);8,023(7,8);8,005(9,0);7,860(2,4);7,857(2,2);7,840(7,5);7,823(8,7);7,820(8,8);7,814(11,5);7,810(11,9);7,794(4,2);7,790(2,9);7,687(8,3);7,668(9,8);7,649(5,2);7,645(4,8);7,628(7,2);7,611(3,9);7,607(3,5);7,523(4,9);7,519(5,4);7,504(9,3);7,500(9,2);7,472(4,8);7,470(4,7);7,454(9,2);7,435(4,9);7,433(4,3);7,410(5,8);7,406(5,5);7,391(7,0);7,387(6,5);7,372(3,1);7,368(2,7);6,963(13,2);6,957(13,0);5,757(16,0);4,055(0,4);4,038(1,3);4,020(1,3);4,002(0,4);3,324(99,1);2,675(0,9);2,670(1,2);2,666(0,9);2,506(140,0);2,501(173,0);2,497(127,7);2,328(1,2);2,324(0,9);1,989(5,4);1,236(0,6);1,192(1,5);1,174(2,9);1,157(1,5);0,000(17,8)
I-1-419: HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 435,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,213(0,4);11,184(11,8);8,251(11,9);8,244(12,1);8,219(0,3);8,213(0,3);8,025(7,1);8,023(7,7);8,003(8,5);7,906(8,9);7,886(10,2);7,861(2,1);7,858(2,1);7,840(6,6);7,838(6,1);7,823(8,0);7,817(11,1);7,812(11,4);7,796(3,6);7,792(2,4);7,648(4,5);7,643(4,4);7,627(6,5);7,610(3,6);7,606(3,5);7,481(1,9);7,462(7,3);7,448(14,9);7,444(16,0);7,431(3,0);7,425(1,1);7,415(0,5);7,220(4,0);7,213(3,8);7,203(4,3);7,200(5,1);7,197(4,9);7,194(4,2);7,184(3,6);7,177(3,3);7,163(0,4);6,962(12,3);6,956(12,4);5,757(14,7);4,055(0,7);4,038(2,2);4,020(2,2);4,002(0,7);3,324(82,5);2,675(0,9);2,670(1,3);2,666(1,0);2,506(140,5);2,501(183,1);2,497(136,5);2,332(0,9);2,328(1,2);2,324(0,9);1,989(9,3);1,235(0,6);1,192(2,5);1,174(5,0);1,157(2,5);0,008(0,8);0,000(19,6);-0,008(0,9)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-420:
<p>HPLC-EM: logP = 2,33; masa (m/z): 299,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, CD₃CN): δ= 9,281(4,1);8,525(15,9);8,520(16,0);8,415(7,8);8,407(7,9);7,902(4,2);7,899(4,4);7,888(8,3);7,876(5,6);7,874(5,6);7,784(12,7);7,771(9,9);7,614(7,9);7,612(8,5);7,602(9,2);7,599(9,7);7,523(6,5);7,510(13,6);7,496(5,6);7,493(5,9);7,483(8,6);7,481(8,9);7,470(4,4);7,468(4,2);7,439(6,7);7,437(7,1);7,427(9,9);7,425(10,5);7,414(4,0);7,413(4,2);7,262(7,0);7,254(7,4);7,250(7,2);7,241(6,7);7,005(15,8);7,001(15,8);5,449(0,5);2,187(0,5);2,163(312,3);2,057(0,5);2,052(0,8);2,048(0,5);1,966(4,5);1,958(4,2);1,954(5,5);1,950(50,8);1,946(93,5);1,942(136,3);1,938(93,3);1,934(47,4);1,831(0,5);1,827(0,8);1,823(0,5);1,436(1,6);1,267(0,9);1,211(0,5);1,199(1,0);1,188(0,5);1,025(0,5);1,013(1,0);1,02(0,5);0,000(10,1);-0,006(0,3)</p>
I-1-421:
<p>HPLC-EM: logP = 3,43; masa (m/z): 492,8 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,515(6,0);8,730(14,8);8,728(15,0);8,318(13,9);8,314(14,3);8,303(15,9);8,296(16,0);7,901(12,5);7,882(12,5);7,881(12,9);7,481(4,3);7,476(5,6);7,462(13,7);7,457(13,9);7,449(11,7);7,446(11,8);7,431(13,0);7,428(13,6);7,412(5,1);7,409(5,1);7,241(0,4);7,235(0,4);7,194(7,7);7,189(7,3);7,176(8,0);7,174(9,8);7,171(9,8);7,169(9,0);7,156(6,1);7,151(6,6);7,091(15,1);7,085(15,2);5,448(10,7);2,154(69,1);2,121(0,5);2,115(0,6);2,109(0,8);2,102(0,5);1,972(1,4);1,965(4,8);1,959(5,8);1,954(45,5);1,947(85,2);1,941(119,5);1,935(83,7);1,929(43,7);1,776(0,5);1,770(0,7);1,763(0,5);1,436(1,1);1,372(9,7);1,340(0,9);1,284(1,4);1,276(11,0);1,221(0,4);1,216(0,7);1,204(0,6);1,186(0,4);0,008(1,2);0,000(37,1);-0,009(1,5)</p>
I-1-422:
<p>HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 401,2 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,341(9,6);8,818(5,1);8,815(5,4);8,806(5,3);8,803(5,2);8,457(5,4);8,453(5,4);8,437(5,7);8,433(5,5);8,343(10,7);8,337(10,7);7,835(5,1);7,816(7,0);7,783(1,9);7,766(5,5);7,747(5,0);7,714(8,4);7,696(16,0);7,680(7,7);6,964(11,6);6,958(11,6);3,326(425,1);2,995(0,5);2,711(1,0);2,680(0,7);2,675(1,4);2,671(1,9);2,666(1,4);2,589(0,4);2,541(276,2);2,529(2,9);2,524(5,9);2,511(110,0);2,506(219,0);2,502(286,3);2,497(211,3);2,493(104,9);2,368(1,0);2,338(0,6);2,333(1,3);2,329(1,8);2,324(1,3);2,075(6,0);1,259(0,3);1,235(0,8);0,008(1,7);0,000(48,3);-0,009(1,9)</p>
I-1-423:
<p>HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 369,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,567(11,4);8,822(6,4);8,819(6,6);8,810(6,7);8,807(6,4);8,464(6,9);8,460(6,7);8,444(7,3);8,440(6,8);8,369(14,1);8,362(14,1);7,722(5,0);7,710(5,0);7,703(4,9);7,690(4,6);7,614(1,5);7,597(3,4);7,593(3,1);7,576(6,3);7,559(3,3);7,555(3,7);7,538(1,6);7,250(2,1);7,243(11,0);7,223(16,0);7,203(9,1);7,196(1,8);6,979(15,5);6,972(15,3);3,464(0,4);3,337(1001,1);2,996(0,5);2,712(2,3);2,676(1,5);2,672(2,0);2,667(1,5);2,585(0,7);2,577(0,8);2,542(523,9);2,525(6,3);2,512(116,3);2,507(227,0);2,503(293,2);2,498(212,4);2,494(103,0);2,368(2,2);2,339(0,7);2,334(1,4);2,329(1,8);2,325(1,3);2,075(2,0);1,259(0,3);1,235(0,7);0,000(5,2)</p>
I-1-424:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 411,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,266(13,4);8,816(7,5);8,813(7,7);8,804(7,8);8,801(7,5);8,455(7,9);8,452(7,7);8,435(8,4);8,432(7,9);8,344(14,9);8,337(14,8);7,711(6,6);7,701(13,6);7,691(6,7);7,681(14,3);7,553(5,9);7,549(6,6);7,534(10,1);7,530(10,2);7,489(5,0);7,486(5,1);7,471(10,2);7,468(9,6);7,452(5,5);7,449(5,0);7,425(6,4);7,420(6,4);7,406(7,8);7,401(7,5);7,387(3,5);7,382(3,1);6,986(16,0);6,980(15,7);3,400(0,4);3,367(1,0);3,327(1143,5);2,675(3,1);2,671(4,3);2,666(3,1);2,662(1,4);2,541(14,5);2,524(12,6);2,511(258,5);2,506(511,5);2,502(663,7);2,497(475,1);2,493(225,0);2,422(0,4);2,419(0,4);2,338(1,6);2,333(3,2);2,328(4,3);2,324(3,1);2,288(0,4);2,075(5,8);1,298(0,5);1,258(0,6);1,235(0,6);1,147(0,5);0,008(2,6);0,000(78,5);-0,008(2,3)</p>
I-1-425:
<p>HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 367,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,281(13,6);8,816(8,2);8,814(8,4);8,805(8,5);8,456(8,5);8,452(8,3);8,436(9,0);8,433(8,4);8,344(15,1);8,338(14,9);7,713(6,6);7,700(6,6);7,693(6,5);7,681(6,0);7,583(7,2);7,580(7,6);7,565(9,6);7,561(10,0);7,553(6,1);7,550(6,4);7,533(12,9);7,530(12,8);7,513(5,5);7,509(5,6);7,495(9,4);7,490(8,1);7,475(5,0);7,470(4,1);7,449(7,5);7,445(7,1);7,430(9,5);7,427(8,8);7,412(3,6);7,409(3,1);6,989(16,0);6,983(15,7);3,428(0,4);3,414(0,5);3,399(0,7);3,329(1012,7);2,711(0,5);2,675(2,4);2,671(3,3);2,667(2,4);2,662(1,2);2,541(109,9);2,524(11,1);2,511(199,6);2,506(387,5);2,502(498,8);2,497(358,8);2,493(172,4);2,368(0,4);2,333(2,4);2,329(3,2);2,324(2,3);2,075(3,0);1,298(0,4);1,258(0,5);1,26(0,6);1,148(0,3);0,008(1,3);0,000(36,0);-0,009(1,2)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-426:
<p>HPLC-EM: logP = 2,69; masa (m/z): 402,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,334(8,8);8,925(5,2);8,924(5,2);8,914(5,3);8,824(4,9);8,821(5,1);8,813(5,1);8,809(4,9);8,466(5,3);8,462(5,3);8,446(5,7);8,442(5,4);8,378(11,8);8,372(16,0);8,352(5,5);7,808(3,6);7,807(3,6);7,795(3,6);7,788(3,4);7,776(3,3);7,721(3,9);7,709(3,9);7,702(3,7);7,690(3,6);6,976(12,6);6,969(12,4);3,412(0,3);3,398(0,5);3,383(0,7);3,330(854,2);2,680(0,8);2,676(1,7);2,671(2,4);2,667(1,7);2,662(0,8);2,541(27,7);2,524(7,2);2,520(11,5);2,511(138,4);2,507(274,7);2,502(357,8);2,497(254,2);2,493(118,8);2,338(0,8);2,333(1,7);2,329(2,3);2,324(1,6);2,320(0,7);2,075(2,5);1,299(0,3);1,259(0,5);1,235(0,6);0,008(0,9);0,000(25,8);-0,009(0,8)</p>
I-1-427:
<p>HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 459,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,207(8,8);8,816(4,9);8,813(5,0);8,804(5,0);8,801(4,8);8,455(5,1);8,451(5,1);8,435(5,5);8,432(5,2);8,343(9,4);8,336(9,4);7,921(7,2);7,901(8,1);7,710(4,0);7,698(4,0);7,690(3,9);7,678(3,7);7,501(0,8);7,477(9,4);7,468(16,0);7,244(0,5);7,234(3,1);7,225(3,0);7,221(3,2);7,214(3,6);7,212(3,4);7,205(2,9);7,202(3,3);7,192(2,5);7,182(0,4);6,985(10,0);6,978(9,9);3,493(0,3);3,482(0,4);3,456(0,6);3,447(0,6);3,428(0,8);3,413(1,0);3,331(2037,1);3,283(1,1);3,246(0,3);2,712(0,5);2,680(1,8);2,676(3,6);2,671(5,0);2,666(3,6);2,662(1,7);2,617(0,3);2,604(0,4);2,541(109,5);2,524(16,4);2,519(26,0);2,511(293,4);2,506(579,0);2,502(751,7);2,497(537,4);2,493(254,0);2,432(0,3);2,368(0,4);2,333(3,5);2,329(4,8);2,324(3,4);2,289(0,6);2,074(4,2);1,298(0,6);1,258(0,8);1,235(1,8);1,148(0,5);0,008(2,0);0,000(59,5);-0,009(1,8)</p>
I-1-428:
<p>HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 401,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,408(6,6);8,620(8,0);8,615(8,7);8,511(8,1);8,506(7,3);8,268(7,7);8,261(7,6);7,835(3,6);7,816(4,6);7,783(1,3);7,766(3,8);7,747(3,3);7,713(3,0);7,694(8,9);7,675(4,2);6,956(8,4);6,950(8,3);5,756(16,0);3,324(13,3);2,525(0,8);2,512(14,6);2,507(29,0);2,503(37,9);2,498(26,7);2,493(12,4);1,989(0,6);1,397(10,0);1,175(0,4);0,008(2,3);0,000(55,8);-0,009(1,8)</p>
I-1-429:
<p>HPLC-EM: logP = 2,77; masa (m/z): 369,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,633(4,8);8,623(6,6);8,618(7,2);8,516(7,2);8,510(6,5);8,286(5,7);8,279(5,7);7,611(0,6);7,594(1,4);7,590(1,2);7,577(1,0);7,573(2,5);7,569(1,0);7,556(1,3);7,552(1,5);7,535(0,6);7,246(0,8);7,240(4,3);7,220(6,0);7,199(3,6);7,192(0,7);6,966(6,5);6,959(6,4);5,756(16,0);3,328(21,7);2,526(0,4);2,513(7,8);2,508(15,6);2,504(20,4);2,499(14,4);2,495(6,8);0,008(1,1);0,000(26,5);-0,009(0,9)</p>
I-1-430:
<p>HPLC-EM: logP = 2,95; masa (m/z): 410,8 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,308(4,6);8,618(5,5);8,613(5,9);8,508(6,0);8,503(5,4);8,264(5,1);8,258(5,0);7,703(2,8);7,700(2,8);7,683(3,3);7,680(3,2);7,550(2,0);7,545(2,2);7,531(3,4);7,527(3,4);7,488(1,6);7,485(1,7);7,470(3,3);7,467(3,1);7,451(1,8);7,448(1,6);7,423(2,2);7,418(2,2);7,403(2,5);7,399(2,5);7,385(1,2);7,380(1,1);6,975(5,5);6,968(5,4);5,755(16,0);3,324(9,0);2,525(0,4);2,520(0,6);2,511(7,6);2,507(15,2);2,502(19,8);2,498(13,9);2,493(6,4);0,008(1,0);0,000(28,2);-0,009(0,9)</p>
I-1-431:
<p>HPLC-EM: logP = 2,29; masa (m/z): 413,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,486(11,0);8,623(14,3);8,617(15,6);8,515(16,0);8,510(14,4);8,483(7,4);8,478(8,0);8,471(8,0);8,466(7,8);8,311(1,2);8,283(12,6);8,277(12,6);8,000(7,4);7,995(7,7);7,981(8,6);7,976(8,0);7,566(8,1);7,554(7,9);7,547(7,7);7,535(7,5);7,286(0,7);7,262(0,7);7,239(0,3);6,976(13,8);6,969(13,8);3,594(0,3);3,589(0,3);3,578(0,4);3,533(0,6);3,518(0,4);3,509(0,5);3,496(0,4);3,486(0,5);3,474(0,8);3,456(0,8);3,439(1,1);3,420(1,9);3,409(3,2);3,350(2513,1);3,284(1,5);3,268(1,5);3,253(0,9);3,248(0,9);3,238(1,0);3,219(0,6);3,207(0,7);3,199(0,5);3,186(0,4);3,179(0,4);3,153(0,3);3,143(0,4);2,677(2,0);2,672(2,8);2,668(1,9);2,663(0,9);2,543(3,1);2,536(0,9);2,526(6,3);2,521(10,8);2,512(160,9);2,508(328,4);2,503(431,2);2,499(304,0);2,494(141,3);2,339(1,0);2,335(2,0);2,330(2,7);2,325(1,9);2,321(0,9);2,073(5,0);2,047(0,4);1,654(0,9);0,000(8,0)</p>
I-1-432:
<p>HPLC-EM: logP = 2,91; masa (m/z): 366,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,326(4,6);8,618(5,2);8,613(5,6);8,508(5,7);8,503(5,1);8,266(5,0);8,259(4,9);7,582(2,2);7,578(2,3);7,563(3,0);7,559(3,1);7,551(1,8);7,548(2,0);7,531(3,8);7,528(3,9);7,511(1,8);7,506(1,8);7,492(3,1);7,488(2,7);7,473(1,7);7,468(1,4);7,448(2,4);7,444(2,3);7,429(3,0);7,426(2,8);7,411(1,2);7,408(1,1);6,979(5,3);6,972(5,2);5,756(16,0);3,326(8,0);2,512(6,9);2,507(13,8);2,503(18,0);2,498(12,9);2,494(6,1);1,396(0,4);0,008(1,0);0,000(24,2);-0,009(0,9)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-433:
<p>HPLC-EM: logP = 3,06; masa (m/z): 458,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,247(3,0);8,618(3,3);8,612(3,5);8,508(3,6);8,502(3,2);8,264(3,2);8,257(3,1);7,922(2,2);7,902(2,5);7,479(2,4);7,475(2,8);7,466(4,9);7,456(0,5);7,232(1,0);7,223(1,0);7,218(1,0);7,212(1,1);7,209(1,1);7,203(0,9);7,199(1,0);7,189(0,8);6,973(3,3);6,967(3,2);5,754(16,0);3,324(11,4);2,511(6,1);2,506(11,9);2,502(15,2);2,497(10,7);2,493(4,9);1,397(1,4);0,008(1,0);0,000(20,8);-0,009(0,7)</p>
I-1-434:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 387,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 20,006(0,8);11,548(11,0);8,484(10,9);8,478(11,9);8,361(9,9);8,354(10,2);8,285(3,2);8,279(3,0);8,264(3,5);8,258(6,2);8,252(3,5);8,237(3,5);8,231(3,2);7,851(1,7);7,831(3,9);7,817(4,0);7,797(2,6);7,636(3,6);7,608(4,1);7,586(3,1);7,489(7,2);7,470(6,6);6,958(13,5);6,951(13,6);4,593(0,7);4,578(1,4);4,565(0,9);3,511(16,0);3,491(1,8);3,477(2,2);3,465(1,1);3,423(3,0);3,411(3,4);3,399(2,7);3,331(4647,8);2,711(1,1);2,675(9,2);2,671(12,2);2,667(8,9);2,541(137,4);2,524(38,2);2,511(696,8);2,506(1362,8);2,502(1781,8);2,497(1302,9);2,493(634,2);2,367(0,8);2,333(8,5);2,329(11,6);2,324(8,2);2,289(0,7);2,074(5,0);1,336(2,7);1,298(1,3);1,259(1,9);1,249(3,5);1,235(6,8);1,148(1,2);0,907(0,6);0,888(1,2);0,869(0,7);0,854(0,7);0,000(33,3)</p>
I-1-435:
<p>HPLC-EM: logP = 1,83; masa (m/z): 431,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,817(2,9);8,475(2,7);8,469(2,9);8,429(5,8);8,315(2,3);8,310(2,2);8,308(2,2);8,278(0,9);8,272(0,8);8,257(0,9);8,251(1,6);8,245(0,8);8,230(0,9);8,224(0,8);6,968(3,8);6,961(3,8);3,895(16,0);3,513(0,5);3,336(50,5);2,544(5,8);2,527(0,3);2,522(0,5);2,514(6,8);2,509(13,9);2,504(18,6);2,500(13,6);2,495(6,5);0,000(1,0)</p>
I-1-436:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 387,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,486(13,3);8,482(11,5);8,476(12,0);8,357(11,1);8,351(10,9);8,283(3,2);8,277(3,1);8,262(3,6);8,255(6,0);8,249(3,4);8,234(3,3);8,228(3,0);7,810(4,0);7,797(4,6);7,789(5,8);7,779(6,6);7,775(9,9);7,757(5,3);7,751(5,4);7,671(3,3);7,665(3,0);7,650(5,7);7,644(5,0);7,629(2,6);7,622(2,2);6,978(16,0);6,971(15,7);3,516(1,3);3,339(118,8);3,000(0,8);2,715(0,6);2,575(0,4);2,570(0,5);2,545(152,8);2,528(1,3);2,523(1,9);2,515(17,8);2,510(35,2);2,506(46,8);2,501(34,4);2,496(16,7);2,371(0,6);2,078(0,4);1,233(0,3);0,000(2,9)</p>
I-1-437:
<p>HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 403,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,536(12,7);8,484(12,3);8,478(12,9);8,362(11,1);8,355(11,1);8,285(3,6);8,279(3,3);8,264(3,8);8,258(6,7);8,252(3,5);8,237(3,6);8,231(3,3);7,872(8,8);7,864(10,0);7,860(11,0);7,851(13,5);7,790(6,7);7,787(6,2);7,768(3,9);7,765(3,8);6,971(16,0);6,964(15,9);3,514(1,5);3,365(0,9);3,338(229,4);2,998(0,4);2,714(0,4);2,678(0,4);2,673(0,5);2,669(0,4);2,563(0,4);2,544(105,3);2,532(0,7);2,527(1,6);2,522(2,3);2,513(29,3);2,509(58,9);2,504(78,3);2,500(57,2);2,495(27,6);2,370(0,4);2,336(0,4);2,331(0,5);2,326(0,4);1,233(0,4);0,000(3,8)</p>
I-1-438: ver el Ejemplo de síntesis 48
I-1-439:
<p>HPLC-EM: logP = 2,85; masa (m/z): 383,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,442(7,7);8,316(6,4);8,310(5,9);8,179(3,5);8,157(3,9);8,153(3,9);8,131(3,5);7,832(4,0);7,812(4,9);7,779(1,4);7,762(4,0);7,743(3,7);7,709(3,2);7,689(9,0);7,669(4,4);6,964(9,3);6,958(9,2);3,322(182,2);2,680(0,5);2,675(1,0);2,671(1,5);2,666(1,0);2,662(0,5);2,524(4,0);2,519(6,2);2,511(76,9);2,506(156,5);2,502(210,7);2,497(154,4);2,492(73,5);2,464(16,0);2,458(15,4);2,456(15,4);2,337(0,5);2,333(1,1);2,328(1,4);2,324(1,0);2,319(0,5);1,989(0,6);1,398(1,0);1,235(0,4);1,175(0,3);0,008(0,5);0,000(17,4);-0,009(0,5)</p>
I-1-440:
<p>HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 384,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,623(7,4);8,844(3,9);8,834(3,8);8,832(3,8);8,343(6,0);8,337(5,9);8,209(3,5);8,206(3,7);8,187(7,3);8,165(3,8);8,160(3,8);8,139(3,4);7,835(3,6);7,824(3,5);7,816(3,3);7,804(3,2);6,969(9,5);6,963(9,4);5,758(2,2);3,322(233,2);2,680(1,0);2,675(2,2);2,670(3,0);2,666(2,2);2,661(1,0);2,524(8,5);2,519(13,4);2,510(166,2);2,506(336,3);2,501(444,8);2,497(318,7);2,492(149,9);2,467(14,8);2,465(16,0);2,459(15,4);2,457(15,1);2,337(1,0);2,333(2,2);2,328(3,0);2,324(2,2);2,319(1,0);1,146(0,3);0,146(0,9);0,008(7,8);0,000(238,1);-0,009(7,2);-0,150(0,9)</p>
I-1-441:
<p>HPLC-EM: logP = 2,56; masa (m/z): 351,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,671(7,3);8,340(6,1);8,333(6,0);8,316(0,6);8,185(3,4);8,163(3,9);8,159(3,8);8,137(3,4);7,807(0,9);7,590(2,1);7,586(1,8);7,573(1,5);7,569(3,8);7,552(1,9);7,548(2,3);7,531(1,0);7,242(1,3);7,235(6,7);7,215(9,4);7,194(5,5);7,187(1,1);6,971(8,9);6,964(8,8);5,756(0,9);3,322(178,1);2,675(1,3);2,671(1,8);2,666(1,3);2,524(6,0);2,511(96,3);2,506(188,7);2,502(249,0);2,497(183,7);2,493(89,7);2,465(16,0);2,460(15,4);2,458(15,1);2,337(0,6);2,333(1,2);2,328(1,7);2,324(1,2);2,319(0,6);1,336(0,7);1,298(0,5);1,259(0,7);1,250(0,8);1,235(0,5);0,000(3,9)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-442:
<p>HPLC-EM: logP = 2,71; masa (m/z): 395,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,339(7,6);8,315(6,0);8,308(5,8);8,178(3,2);8,156(3,7);8,152(3,8);8,130(3,2);7,699(4,5);7,697(4,5);7,679(5,3);7,677(5,2);7,545(2,9);7,540(3,3);7,526(5,2);7,521(5,3);7,484(2,5);7,482(2,7);7,466(5,1);7,463(5,0);7,447(2,8);7,444(2,6);7,420(3,2);7,415(3,3);7,400(4,0);7,396(3,9);7,382(1,8);7,377(1,6);6,984(7,9);6,977(7,8);5,756(1,9);3,322(14,5,3);2,675(1,0);2,671(1,4);2,666(1,1);2,524(4,2);2,510(81,1);2,506(158,6);2,502(209,1);2,497(155,2);2,493(77,1);2,464(16,0);2,458(15,8);2,333(1,1);2,328(1,4);2,324(1,1);1,336(0,4);1,298(0,3);1,259(0,5);1,250(0,4);1,235(0,4);0,00(2,9)</p>
I-1-443:
<p>HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 341,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,676(12,3);8,520(0,6);8,514(0,8);8,499(13,2);8,493(13,8);8,483(0,8);8,463(4,6);8,378(10,6);8,376(10,8);8,371(10,8);8,370(10,4);8,316(10,5);8,309(5,4);8,303(4,5);8,288(5,0);8,282(8,8);8,276(4,6);8,261(4,8);8,255(4,4);8,170(5,0);7,939(11,2);7,936(11,0);7,458(10,6);7,456(10,7);7,016(0,8);7,009(0,8);6,990(16,0);6,983(15,8);6,812(0,7);5,757(0,9);4,038(0,7);4,020(0,7);3,324(113,5);2,681(0,4);2,676(0,8);2,672(1,2);2,667(0,8);2,663(0,4);2,525(3,4);2,520(5,4);2,512(64,3);2,507(128,7);2,503(170,4);2,498(123,2);2,494(58,3);2,431(1,9);2,338(0,4);2,334(0,8);2,329(1,2);2,325(0,8);2,320(0,4);1,989(3,2);1,397(0,6);1,336(1,3);1,299(0,5);1,259(0,7);1,250(1,7);1,234(0,5);1,193(0,9);1,175(1,7);1,157(0,9);0,008(1,8);0,000(53,2);-0,009(1,7)</p>
I-1-444:
<p>HPLC-EM: logP = 2,65; masa (m/z): 373,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,594(2,5);8,495(3,7);8,489(3,9);8,382(3,1);8,377(3,1);8,316(1,1);8,307(1,3);8,301(1,2);8,286(1,4);8,280(2,5);8,274(1,3);8,259(1,3);8,253(1,2);8,019(1,3);7,874(3,2);7,730(1,6);6,951(2,4);6,944(2,4);3,322(526,6);2,680(1,1);2,675(2,3);2,670(3,2);2,666(2,3);2,661(1,0);2,541(11,1);2,524(8,2);2,519(12,8);2,511(177,2);2,506(361,6);2,501(478,3);2,497(338,8);2,492(156,9);2,337(1,1);2,333(2,3);2,328(3,1);2,324(2,2);2,319(1,0);2,280(16,0);1,259(0,4);1,235(1,0);0,008(1,6);0,000(51,8);-0,009(1,5)</p>
I-1-445:
<p>HPLC-EM: logP = 1,60; masa (m/z): 333,2 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,526(0,7);8,269(2,1);8,263(2,1);8,170(1,7);8,164(1,7);7,699(0,7);7,693(0,7);7,679(0,8);7,673(1,3);7,667(0,7);7,652(0,7);7,646(0,7);7,636(0,3);6,991(2,4);6,985(2,3);5,448(1,1);3,685(15,2);3,671(0,3);3,233(0,9);3,030(0,9);2,469(0,4);2,464(0,5);2,459(0,4);2,428(15,9);2,357(16,0);2,174(55,4);2,120(0,3);2,114(0,5);2,108(0,6);2,102(0,4);1,965(5,5);1,959(8,4);1,953(33,9);1,947(58,3);1,940(75,4);1,934(51,7);1,928(26,6);1,842(0,3);1,775(0,3);1,769(0,4);0,008(1,5);0,000(34,5);-0,009(1,3)</p>
I-1-446:
<p>HPLC-EM: logP = 1,54; masa (m/z): 319,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,654(2,6);8,470(2,5);8,464(2,6);8,445(4,6);8,292(2,0);8,285(2,0);8,275(0,8);8,269(0,8);8,254(0,9);8,248(1,5);8,241(0,8);8,227(0,8);8,220(0,7);6,969(3,2);6,963(3,2);5,757(0,5);3,792(15,2);3,323(75,2);2,675(0,5);2,671(0,7);2,666(0,5);2,524(1,8);2,519(2,8);2,511(38,3);2,506(77,4);2,502(102,8);2,497(74,5);2,493(35,6);2,363(16,0);2,333(0,5);2,328(0,7);2,324(0,5);2,075(0,4);0,008(1,4);0,000(44,6);-0,009(1,4)</p>
I-1-447:
<p>HPLC-EM: logP = 2,03; masa (m/z): 364,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,987(2,1);8,493(2,3);8,487(2,4);8,410(2,1);8,404(2,1);8,315(0,7);8,298(0,7);8,292(0,6);8,277(0,8);8,271(1,3);8,265(0,7);8,250(0,7);8,244(0,7);7,021(2,9);7,014(2,9);3,845(16,0);3,371(0,4);3,325(432,6);2,995(1,0);2,680(0,6);2,675(1,3);2,671(1,7);2,666(1,3);2,662(0,6);2,541(59,5);2,524(5,1);2,511(97,8);2,506(197,2);2,502(259,9);2,497(187,0);2,493(89,1);2,449(14,3);2,338(0,6);2,333(1,2);2,328(1,7);2,324(1,2);2,319(0,6);1,235(1,1);0,008(0,6);0,000(15,6);-0,009(0,5)</p>
I-1-448:
<p>HPLC-EM: logP = 1,83; masa (m/z): 364,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,480(2,8);8,481(2,8);8,475(3,0);8,360(2,5);8,353(2,5);8,316(0,4);8,284(0,9);8,278(0,8);8,263(1,0);8,257(1,6);8,250(0,9);8,235(0,9);8,229(0,8);6,973(3,3);6,967(3,2);3,870(16,0);3,323(93,8);2,675(0,7);2,671(0,9);2,666(0,7);2,610(15,4);2,541(0,5);2,524(2,6);2,511(55,6);2,506(109,1);2,502(140,4);2,497(100,3);2,493(48,4);2,333(0,7);2,329(0,9);2,324(0,7);0,146(0,4);0,008(3,9);0,000(94,2);-0,008(3,9);-0,150(0,4)</p>
I-1-449:
<p>HPLC-EM: logP = 1,67; masa (m/z): 306,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMF): δ= 10,909(0,4);8,499(1,9);8,495(1,9);8,453(1,9);8,4493(1,8);8,4488(1,8);8,261(0,7);8,257(0,6);8,248(0,7);8,243(1,3);8,239(0,6);8,230(0,7);8,225(0,6);8,131(4,4);8,025(4,3);7,074(2,1);7,069(2,0);5,817(0,4);4,286(16,0);3,471(4,4);2,952(4,4);2,922(2,2);2,919(4,3);2,916(6,3);2,912(4,3);2,909(2,0);2,784(4,2);2,751(2,5);2,748(4,8);2,745(6,8);2,741(4,8);2,738(2,4);2,616(0,7);0,005(0,4);0,000(10,9)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-450:
<p>HPLC-EM: logP = 3,65; masa (m/z): 491,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,141(3,6);8,498(3,6);8,492(3,8);8,420(3,2);8,413(3,2);8,315(1,1);8,307(1,2);8,300(1,2);8,286(1,3);8,279(2,3);8,273(1,1);8,258(1,2);8,252(1,1);6,990(4,6);6,983(4,5);4,002(16,0);3,920(0,4);3,414(0,4);3,392(0,5);3,387(0,5);3,374(0,8);3,359(1,4);3,326(1280,7);3,296(1,1);3,273(0,4);2,711(0,4);2,680(1,2);2,675(2,4);2,671(3,4);2,666(2,4);2,662(1,1);2,541(83,9);2,524(8,4);2,519(13,1);2,511(187,5);2,506(384,4);2,502(509,9);2,497(363,2);2,493(169,8);2,362(0,3);2,338(1,1);2,333(2,4);2,328(3,3);2,324(2,3);2,319(1,1);2,289(0,6);1,258(0,4);1,235(1,1);0,008(0,6);0,000(18,6);-0,009(0,6)</p>
I-1-451:
<p>HPLC-EM: logP = 2,79; masa (m/z): 441,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,728(4,9);8,484(4,7);8,478(5,0);8,364(4,3);8,357(4,3);8,292(1,5);8,286(1,3);8,271(1,6);8,265(2,7);8,258(1,4);8,243(1,5);8,237(1,3);6,930(6,0);6,923(5,9);5,758(3,3);4,127(16,0);3,323(109,4);2,680(0,4);2,675(0,9);2,671(1,2);2,666(0,9);2,662(0,4);2,524(3,5);2,511(66,0);2,506(130,7);2,502(170,6);2,497(122,5);2,493(58,0);2,333(0,8);2,329(1,2);2,324(0,8);2,320(0,4);0,008(0,9);0,000(25,5);-0,009(0,8)</p>
I-1-452:
<p>HPLC-EM: logP = 2,27; masa (m/z): 349,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,199(3,1);8,487(2,8);8,480(3,0);8,335(2,6);8,329(2,5);8,317(0,9);8,297(0,9);8,291(0,8);8,270(1,5);8,249(1,1);8,238(3,1);8,234(3,1);7,890(3,6);7,885(3,5);6,955(3,2);6,948(3,2);3,977(16,0);3,403(0,4);3,325(350,6);2,670(3,1);2,506(393,9);2,502(484,1);2,498(358,1);2,445(0,5);2,421(0,4);2,412(0,4);2,332(2,3);2,328(2,9);1,988(0,4);1,259(0,5);1,235(0,8);0,146(0,5);0,000(90,0);-0,150(0,4)</p>
I-1-453:
<p>HPLC-EM: logP = 1,69; masa (m/z): 350,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,534(2,8);8,891(5,4);8,482(2,8);8,476(2,9);8,371(2,5);8,364(2,5);8,316(0,9);8,286(0,8);8,280(0,7);8,264(0,9);8,258(1,6);8,252(0,8);8,237(0,8);8,231(0,8);6,985(3,2);6,978(3,1);5,756(1,2);3,947(16,0);3,324(384,8);2,675(1,9);2,671(2,5);2,666(1,8);2,541(1,6);2,510(151,1);2,506(293,3);2,502(379,5);2,497(271,7);2,493(130,3);2,333(1,8);2,328(2,4);2,324(1,8);0,146(1,3);0,008(11,8);0,000(287,0);-0,008(10,7);-0,150(1,3)</p>
I-1-454:
<p>HPLC-EM: logP = 1,58; masa (m/z): 350,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,335(3,1);8,480(2,8);8,474(3,1);8,365(2,7);8,359(2,7);8,316(0,4);8,284(0,9);8,277(0,8);8,262(1,0);8,256(1,7);8,250(0,9);8,235(0,9);8,229(0,8);8,085(5,0);6,984(3,3);6,977(3,3);3,930(16,0);3,324(123,4);2,675(0,7);2,671(0,9);2,666(0,7);2,541(0,5);2,524(2,2);2,506(108,4);2,502(142,0);2,498(103,9);2,333(0,7);2,329(0,9);2,324(0,7);0,146(0,4);0,008(3,1);0,000(89,8);-0,008(3,8);-0,150(0,4)</p>
I-1-455:
<p>HPLC-EM: logP = 3,37; masa (m/z): 381,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,542(4,1);8,491(5,3);8,485(5,6);8,368(4,2);8,361(4,2);8,315(1,2);8,300(1,6);8,293(1,5);8,279(1,8);8,272(3,0);8,266(1,6);8,251(1,6);8,245(1,4);7,689(8,6);6,987(3,7);6,981(3,7);4,537(0,8);4,522(1,3);4,500(1,3);4,485(0,9);3,458(0,3);3,440(0,4);3,419(0,7);3,395(0,9);3,328(1742,5);3,284(1,2);3,255(0,4);2,995(0,8);2,675(3,3);2,671(4,4);2,667(3,2);2,541(14,1);2,524(12,6);2,511(266,7);2,506(516,9);2,502(665,9);2,498(479,9);2,493(233,4);2,333(3,2);2,329(4,3);2,324(3,1);2,290(0,5);1,875(0,8);1,856(1,1);1,840(1,5);1,821(1,6);1,800(1,3);1,781(0,4);1,765(0,3);1,746(1,2);1,732(1,5);1,728(1,4);1,714(1,8);1,698(1,0);1,680(0,7);1,421(12,4);1,405(12,3);1,298(0,5);1,259(0,7);1,235(2,1);0,726(7,4);0,708(16,0);0,689(6,9);0,008(0,8);0,000(20,1);-0,008(0,7)</p>
I-1-456:
<p>HPLC-EM: logP = 3,28; masa (m/z): 473,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,474(5,2);8,492(5,7);8,486(6,0);8,364(4,3);8,358(4,3);8,315(1,7);8,297(1,8);8,291(1,6);8,276(1,9);8,269(3,3);8,263(1,8);8,248(1,8);8,242(1,6);7,630(11,0);6,989(4,7);6,983(4,7);4,461(1,0);4,445(1,4);4,424(1,4);4,409(1,0);4,394(0,4);3,479(0,4);3,466(0,3);3,443(0,6);3,431(0,5);3,417(0,7);3,408(0,8);3,388(1,3);3,328(2368,1);3,293(1,9);3,280(1,2);3,253(0,5);2,676(3,9);2,671(5,3);2,666(3,9);2,662(1,9);2,541(29,9);2,524(13,6);2,511(303,8);2,506(613,8);2,502(810,3);2,497(583,1);2,493(277,8);2,419(0,3);2,333(3,8);2,329(5,2);2,324(3,8);2,290(0,7);1,868(0,8);1,849(1,1);1,833(1,5);1,812(1,6);1,793(1,3);1,775(0,4);1,733(1,2);1,719(1,5);1,715(1,5);1,701(1,9);1,682(1,1);1,667(0,8);1,406(12,4);1,390(12,3);1,355(0,4);1,298(0,7);1,259(1,0);1,235(3,1);0,854(0,4);0,721(7,4);0,702(16,0);0,684(7,0);0,008(0,6);0,000(20,3);-0,009(0,6)</p>

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-457:
<p>HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 383,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 20,013(0,3);11,562(12,8);8,707(9,4);8,703(10,5);8,695(10,5);8,691(10,4);8,489(14,9);8,483(16,0);8,364(11,6);8,358(11,9);8,292(5,0);8,286(4,6);8,271(5,3);8,265(9,4);8,258(5,0);8,244(5,1);8,237(4,7);8,096(7,5);8,091(7,9);8,076(8,5);8,072(8,3);7,544(8,5);7,532(8,6);7,525(8,4);7,513(8,1);7,011(14,4);7,004(14,6);4,137(4,1);4,109(12,8);4,080(13,4);4,052(4,6);3,473(0,5);3,442(0,7);3,337(3631,0);3,211(1,0);3,147(0,6);2,995(0,6);2,681(2,5);2,676(5,2);2,671(7,2);2,667(5,2);2,662(2,5);2,542(42,8);2,525(22,7);2,520(34,8);2,511(399,6);2,507(806,5);2,502(1065,4);2,498(765,9);2,493(362,6);2,338(2,4);2,334(5,0);2,329(6,9);2,324(4,9);2,320(2,3);2,291(0,4);1,258(0,3);1,235(0,7);1,147(0,7);0,008(2,2);0,000(64,0);-0,009(1,7)</p>
I-1-458:
<p>HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 367,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,161(13,3);8,480(14,0);8,474(14,8);8,344(11,6);8,337(11,6);8,316(0,8);8,280(4,5);8,274(4,2);8,259(4,8);8,253(8,4);8,247(4,5);8,232(4,5);8,226(4,1);7,636(7,0);7,632(8,1);7,617(8,2);7,613(9,0);7,585(4,2);7,581(3,9);7,565(7,4);7,562(6,9);7,546(5,9);7,541(5,1);7,386(7,7);7,364(6,4);7,362(6,7);7,345(10,8);7,343(11,1);7,326(4,9);7,324(4,9);7,277(9,6);7,257(8,4);7,202(16,0);7,017(8,1);6,997(14,8);6,990(14,6);5,756(1,7);3,323(236,9);2,680(0,9);2,675(1,8);2,671(2,5);2,666(1,8);2,662(0,9);2,524(6,9);2,519(10,7);2,511(137,6);2,506(279,5);2,502(370,1);2,497(267,1);2,493(127,5);2,338(0,8);2,333(1,8);2,328(2,4);2,324(1,7);2,319(0,8);1,989(1,1);1,298(1,3);1,259(1,9);1,235(1,1);1,193(0,3);1,175(0,6);0,146(0,4);0,008(3,2);0,000(99,9);-0,009(3,1);-0,150(0,4)</p>
I-1-459:
<p>HPLC-EM: logP = 2,50; masa (m/z): 351,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,485(11,9);8,495(15,5);8,489(16,0);8,361(11,9);8,355(11,7);8,296(4,6);8,290(4,2);8,275(5,0);8,269(8,5);8,263(4,5);8,248(4,6);8,242(4,1);7,794(5,5);7,776(7,5);7,762(6,3);7,744(9,7);7,709(3,3);7,706(3,7);7,691(8,9);7,687(7,7);7,673(12,4);7,669(10,6);7,654(6,4);7,635(2,0);7,493(5,4);7,354(11,7);7,215(5,8);7,008(11,8);7,002(11,5);3,508(0,5);3,496(0,3);3,474(0,5);3,457(0,5);3,439(0,8);3,410(1,3);3,345(1104,0);3,304(1,9);3,288(1,0);3,270(0,4);3,223(0,3);3,001(1,9);2,718(1,4);2,682(1,8);2,677(2,3);2,673(1,7);2,610(0,3);2,607(0,4);2,548(321,5);2,517(146,6);2,513(274,7);2,508(346,5);2,504(247,4);2,500(118,6);2,467(0,7);2,374(1,3);2,340(1,6);2,335(2,2);2,330(1,5);2,298(0,3);1,250(0,4);1,240(0,9);0,006(0,3)</p>
I-1-460:
<p>HPLC-EM: logP = 1,77; masa (m/z): 352,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,621(14,7);8,811(8,5);8,808(8,9);8,799(9,1);8,796(8,6);8,490(14,6);8,484(15,3);8,373(13,0);8,367(12,9);8,316(1,7);8,293(4,4);8,287(4,1);8,272(4,8);8,266(8,4);8,260(4,4);8,245(4,5);8,239(4,1);8,193(7,7);8,174(8,2);7,703(6,1);7,691(6,3);7,683(6,0);7,671(5,6);7,333(6,4);7,198(14,3);7,063(7,0);7,011(16,0);7,005(15,8);4,056(0,4);4,038(1,0);4,020(1,1);4,002(0,3);3,321(311,5);3,175(0,5);3,161(0,5);2,675(4,2);2,671(5,7);2,666(4,1);2,662(2,0);2,541(3,4);2,524(14,6);2,510(316,6);2,506(634,8);2,502(831,9);2,497(594,2);2,493(281,7);2,337(1,9);2,333(4,0);2,328(5,5);2,324(4,0);1,989(4,4);1,235(0,6);1,193(1,2);1,175(2,3);1,157(1,2);0,146(3,1);0,008(23,1);0,000(669,5);-0,009(22,8);-0,150(3,1)</p>
I-1-461:
<p>HPLC-EM: logP = 2,14; masa (m/z): 348,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,368(2,1);8,583(1,5);8,579(1,7);8,571(1,7);8,567(1,7);8,486(2,5);8,480(2,7);8,354(2,2);8,348(2,2);8,290(0,7);8,284(0,7);8,269(0,8);8,263(1,4);8,256(0,8);8,242(0,7);8,235(0,7);7,980(1,3);7,976(1,4);7,961(1,5);7,957(1,5);7,236(1,5);7,224(1,6);7,217(1,6);7,205(1,5);6,996(1,5);6,991(1,5);3,328(72,2);3,175(0,9);3,162(0,9);2,671(0,4);2,506(4,6,3);2,502(61,4);2,498(46,5);2,464(16,0);2,329(0,4);0,000(1,4)</p>
I-1-462:
<p>HPLC-EM: logP = 1,69; masa (m/z): 379,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,264(0,7);8,258(0,7);8,214(0,6);8,208(0,6);8,061(0,3);8,058(0,5);8,041(0,4);8,038(0,5);7,767(0,5);7,749(0,5);7,745(0,4);7,726(0,3);7,722(0,5);7,703(1,2);7,687(0,6);7,684(0,6);7,681(0,6);7,661(0,5);7,011(0,7);7,004(0,7);3,297(5,6);2,502(16,0);2,156(1,4);1,964(0,7);1,958(1,0);1,952(4,2);1,946(7,4);1,940(9,6);1,934(6,6);1,927(3,4);0,000(4,6)</p>
I-1-463:
<p>HPLC-EM: logP = 2,77; masa (m/z): 385,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,367(13,5);8,483(14,3);8,477(15,1);8,348(12,1);8,342(12,1);8,317(0,8);8,285(4,4);8,279(4,1);8,264(4,8);8,258(8,2);8,252(4,4);8,237(4,5);8,231(4,0);7,982(0,3);7,716(7,2);7,712(8,2);7,697(8,8);7,693(9,5);7,660(3,9);7,656(3,8);7,640(8,0);7,636(7,5);7,620(6,7);7,616(5,9);7,520(7,3);7,501(11,6);7,485(11,6);7,465(6,1);7,447(0,4);6,986(15,1);6,980(14,9);5,757(16,0);4,038(0,5);4,020(0,5);3,323(175,0);2,680(1,0);2,675(2,1);2,671(2,8);2,667(2,1);2,662(1,0);2,524(8,4);2,511(154,2);2,506(305,6);2,502(399,3);2,497(287,5);2,493(137,6);2,338(0,9);2,333(1,9);2,329(2,6);2,324(1,9);2,320(0,9);1,989(2,0);1,352(0,3);1,336(2,5);1,298(0,8);1,259(1,2);1,250(3,1);1,235(1,0);1,193(0,6);1,175(1,1);1,157(0,6);1,148(0,3);1,141(0,3);1,124(0,6);1,001(0,6);0,146(1,0);0,008(8,1);0,000(221,7);-0,009(7,2);-0,150(0,9)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-464:
<p>HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 386,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,554(10,5);8,494(11,0);8,487(16,0);8,482(7,5);8,474(6,9);8,470(6,7);8,380(9,3);8,374(9,1);8,297(3,3);8,291(3,0);8,276(3,5);8,270(6,0);8,263(3,2);8,248(3,4);8,242(3,3);8,234(6,8);8,229(6,7);8,215(7,3);8,210(6,7);7,560(6,9);7,547(6,8);7,541(6,7);7,528(6,4);7,007(12,3);7,001(12,0);3,381(0,5);3,365(1,3);3,338(403,0);3,306(0,6);3,299(0,4);2,687(0,4);2,682(0,8);2,678(1,1);2,673(0,8);2,669(0,4);2,548(28,7);2,531(3,5);2,526(5,7);2,518(63,8);2,513(126,2);2,509(164,6);2,504(117,3);2,499(55,3);2,344(0,4);2,340(0,8);2,335(1,1);2,331(0,7);2,326(0,4);1,240(0,5)</p>
I-1-465:
<p>HPLC-EM: logP = 2,44; masa (m/z): 387,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,840(3,8);8,829(4,9);8,791(0,6);8,282(9,8);8,276(11,9);8,270(10,6);8,258(7,4);8,212(1,0);8,206(1,0);8,181(0,3);8,061(0,8);8,054(0,7);7,846(5,7);7,828(8,0);7,807(1,8);7,786(1,3);7,776(2,1);7,757(6,9);7,740(16,0);7,718(10,1);7,697(12,4);7,677(6,4);7,671(5,2);7,648(2,1);7,622(1,4);7,603(1,3);7,584(0,6);7,570(1,3);7,550(0,9);7,520(0,7);7,502(0,7);7,493(0,4);7,482(0,4);7,476(0,3);7,462(0,3);7,455(0,5);7,019(1,1);7,012(1,0);6,248(0,4);6,235(0,3);6,219(0,5);6,206(0,3);6,161(0,4);6,152(0,4);5,869(0,3);5,459(0,3);5,448(0,3);4,193(0,3);2,619(0,4);2,569(0,5);2,466(0,9);2,352(1,3);2,315(2,0);2,309(1,8);2,270(1,7);2,241(1,7);2,179(1,5);2,132(1,3);2,126(1,2);2,119(1,7);2,113(2,3);2,107(2,7);2,101(2,1);2,095(1,4);2,086(0,9);1,964(52,9);1,958(32,2);1,952(140,9);1,946(247,6);1,940(322,7);1,933(221,8);1,927(114,2);1,915(3,4);1,900(1,8);1,843(0,8);1,792(0,7);1,786(0,6);1,780(1,2);1,774(1,8);1,768(2,3);1,762(1,6);1,756(1,0);1,730(0,4);1,718(0,4);1,705(0,4);1,340(0,5);1,295(0,4);1,270(1,3);1,130(0,6);1,064(0,4);0,888(0,4);0,81(0,4);0,871(0,4);0,866(0,4);0,856(0,4);0,146(0,8);0,008(6,8);0,000(188,6);-0,009(6,5);-0,150(0,9)</p>
I-1-466:
<p>HPLC-EM: logP = 3,18; masa (m/z): 385,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 10,724(1,0);8,330(0,4);8,325(0,4);8,301(4,7);8,295(4,8);8,270(3,7);8,263(3,7);8,209(0,4);8,204(0,4);7,754(2,6);7,734(3,3);7,726(1,8);7,719(1,7);7,705(1,9);7,699(3,6);7,693(2,9);7,678(3,7);7,675(3,5);7,658(2,2);7,610(6,0);7,604(6,9);7,586(2,6);7,567(1,1);7,551(3,3);7,532(2,4);7,484(0,4);7,445(0,3);5,450(0,5);5,444(0,4);3,831(0,5);2,470(0,4);2,465(0,5);2,460(0,4);2,266(0,6);2,248(1,0);2,171(287,5);2,120(2,6);2,114(2,6);2,107(2,7);2,101(2,0);2,095(1,4);2,044(0,5);2,029(0,5);2,008(0,4);1,972(2,2);1,964(12,7);1,958(17,6);1,952(99,2);1,946(180,5);1,940(244,9);1,934(168,5);1,928(86,7);1,781(0,7);1,775(1,1);1,769(1,5);1,762(1,1);1,756(0,6);1,477(6,4);1,437(1,6);1,386(1,3);1,376(0,8);1,371(1,2);1,363(0,5);1,340(3,3);1,326(0,5);1,285(5,1);1,269(16,0);1,222(0,4);1,216(0,7);1,210(0,4);1,204(0,5);0,898(0,5);0,882(1,3);0,864(0,7);0,837(0,3);0,146(1,2);0,008(12,1);0,000(291,0);-0,009(12,1);-0,025(0,5);-0,150(1,2)</p>
I-1-467:
<p>HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 383,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,496(3,5);8,412(4,6);8,407(4,7);8,395(3,7);8,317(0,3);8,295(1,0);8,273(1,9);8,252(1,2);8,219(1,4);8,213(1,4);8,192(2,4);8,171(1,4);8,165(1,3);8,143(4,5);8,137(4,3);7,914(2,2);7,894(2,7);7,853(1,1);7,835(2,4);7,817(1,8);7,755(2,0);7,736(4,7);7,716(6,0);7,698(2,4);7,567(4,5);7,558(5,3);7,549(4,2);7,388(2,5);7,382(2,5);7,368(2,2);7,135(3,6);7,130(3,5);5,968(4,5);5,963(4,4);5,758(1,8);3,444(21,8);3,324(332,6);3,196(16,0);2,680(0,9);2,676(1,9);2,671(2,7);2,666(1,9);2,662(0,9);2,524(8,1);2,520(12,6);2,511(150,8);2,507(302,6);2,502(396,3);2,497(279,2);2,493(129,4);2,338(0,9);2,333(1,9);2,329(2,6);2,324(1,9);2,320(0,9);1,351(0,4);1,258(0,5);1,235(1,0);0,146(0,9);0,008(7,2);0,000(215,4);-0,009(6,4);-0,150(0,9)</p>
I-1-468:
<p>HPLC-EM: logP = 3,23; masa (m/z): 397,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,501(1,2);8,415(4,9);8,410(5,1);8,383(1,3);8,317(0,5);8,291(0,4);8,270(0,7);8,244(0,5);8,219(1,5);8,213(1,5);8,192(2,8);8,171(2,1);8,166(2,1);8,151(5,2);8,145(5,4);8,078(1,5);8,073(1,7);7,895(1,2);7,870(1,9);7,864(2,0);7,832(1,1);7,819(1,2);7,794(0,5);7,767(1,3);7,741(2,9);7,717(4,5);7,702(3,4);7,696(3,2);7,554(2,4);7,535(6,5);7,527(6,4);7,518(5,1);7,343(3,4);7,335(3,5);7,322(2,6);7,047(1,3);6,933(0,6);6,060(5,2);6,054(5,4);5,757(0,7);5,722(1,6);5,717(1,7);4,206(0,6);4,189(0,6);4,128(0,8);4,111(2,0);4,094(2,1);4,077(0,7);3,937(3,2);3,833(0,7);3,480(0,5);3,322(131,8);2,675(2,4);2,671(3,2);2,667(2,5);2,506(379,2);2,502(482,3);2,497(374,3);2,333(2,4);2,328(3,2);2,324(2,5);1,352(0,7);1,336(1,2);1,319(0,7);1,260(2,2);1,243(4,7);1,227(9,5);1,210(16,0);1,192(7,9);1,122(3,3);1,107(2,6);0,146(1,3);0,000(278,2);-0,150(1,4)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-469:
<p>HPLC-EM: logP = 3,38; masa (m/z): 409,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):</p> <p>δ= 8,277(1,0);8,270(0,8);8,244(0,8);8,201(3,6);8,196(3,5);8,041(0,5);8,025(0,5);8,012(0,4);7,965(2,0);7,959(2,2);7,948(3,9);7,942(3,8);7,830(1,1);7,824(1,3);7,821(1,2);7,815(1,3);7,809(1,2);7,761(0,7);7,752(0,4);7,740(1,1);7,733(1,3);7,728(1,5);7,719(2,2);7,704(3,6);7,698(4,3);7,691(4,5);7,685(4,3);7,669(5,0);7,652(1,7);7,646(1,9);7,640(1,6);7,620(2,3);7,600(1,6);7,594(1,3);7,582(1,0);7,563(1,0);7,484(5,2);7,475(5,4);7,465(5,3);7,447(1,4);7,424(0,5);7,385(1,3);7,379(1,2);7,371(0,9);7,359(1,5);7,353(1,8);7,342(3,2);7,328(2,8);7,077(0,8);7,020(0,4);7,013(0,5);6,980(0,4);6,564(0,9);6,078(0,3);6,052(0,5);6,035(0,7);6,015(4,5);6,009(4,9);5,985(2,0);5,969(2,2);5,956(1,9);5,943(1,9);5,928(1,1);5,913(0,7);5,900(0,5);5,885(0,4);5,846(2,2);5,840(2,1);5,815(0,6);5,808(0,5);5,797(0,4);5,791(0,4);5,438(0,4);5,434(0,7);5,431(0,6);5,427(0,3);5,395(0,4);5,391(0,6);5,387(0,6);5,328(1,3);5,312(2,9);5,296(1,9);5,285(3,0);5,282(2,8);5,270(2,5);5,256(2,3);5,189(2,7);5,163(2,7);5,110(0,3);5,080(0,7);5,060(0,7);4,971(0,5);4,928(0,6);4,925(0,6);4,825(0,7);4,821(1,1);4,818(0,7);4,810(0,7);4,807(1,1);4,803(0,7);4,667(0,7);4,639(0,4);4,576(7,4);4,478(0,5);4,470(0,4);4,465(0,5);4,118(0,4);4,086(2,4);4,068(6,5);4,050(6,4);4,032(2,2);3,549(1,3);3,095(0,4);3,077(0,4);3,032(0,3);2,135(12,8);2,119(0,5);2,113(0,5);2,107(0,6);2,101(0,5);1,971(27,7);1,964(6,0);1,958(8,6);1,952(36,2);1,946(63,4);1,939(82,4);1,933(56,7);1,927(29,4);1,864(0,3);1,808(0,3);1,780(0,4);1,774(0,6);1,768(0,7);1,762(0,5);1,756(0,4);1,614(0,3);1,558(0,3);1,542(0,4);1,525(0,4);1,372(1,2);1,360(0,5);1,353(0,6);1,342(0,6);1,269(10,2);1,221(8,4);1,214(1,4);1,203(16,0);1,198(9,7);1,191(3,1);1,186(8,7);1,178(2,3);1,173(4,3);1,155(2,3);1,139(0,6);1,110(0,6);1,092(1,0);1,076(0,9);1,043(0,4);1,038(0,4);1,033(0,4);1,025(2,1);1,015(0,4);1,007(3,9);0,998(0,5);0,989(2,0);0,980(0,4);0,969(0,3);0,950(0,4);0,933(0,4);0,925(0,4);0,897(1,2);0,888(2,1);0,881(2,6);0,876(2,0);0,863(1,9);0,858(2,2);0,840(1,4);0,080(0,4);0,000(4,7)</p>
I-1-470:
<p>HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 407,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):</p> <p>δ= 8,511(1,5);8,419(13,8);8,416(13,8);8,316(1,7);8,302(0,8);8,275(1,1);8,219(4,4);8,193(8,3);8,177(15,0);8,173(16,0);7,909(1,3);7,855(1,3);7,817(0,8);7,731(8,6);7,722(7,8);7,663(0,4);7,562(13,5);7,551(14,5);7,541(12,5);7,351(6,8);7,343(7,4);7,061(1,5);6,144(13,0);6,139(12,7);4,734(15,4);4,647(0,5);4,565(0,8);4,342(0,7);3,323(299,4);3,238(13,2);2,676(3,4);2,671(4,6);2,667(3,3);2,524(13,3);2,511(282,2);2,507(556,0);2,502(720,8);2,497(515,7);2,493(245,9);2,333(3,5);2,329(4,7);2,324(3,4);0,008(1,8);0,000(48,9);-0,009(1,6)</p>
I-1-471:
<p>HPLC-EM: logP = 3,62; masa (m/z): 423,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):</p> <p>δ= 8,502(1,6);8,415(15,1);8,409(15,3);8,316(1,7);8,267(1,1);8,240(1,0);8,219(4,6);8,213(4,4);8,192(8,1);8,171(4,6);8,166(4,3);8,145(15,2);8,138(14,8);7,882(1,2);7,828(1,2);7,812(1,1);7,730(8,5);7,718(9,0);7,708(8,0);7,540(14,5);7,529(16,0);7,518(14,1);7,327(7,5);7,318(7,8);7,307(6,4);7,021(1,6);6,047(15,5);6,041(15,2);5,756(3,7);3,819(6,9);3,710(0,5);3,670(0,7);3,651(0,8);3,635(0,8);3,604(0,4);3,474(0,8);3,322(187,3);2,676(2,5);2,671(3,5);2,667(2,5);2,662(1,2);2,541(1,9);2,525(10,1);2,511(209,5);2,507(422,5);2,502(555,8);2,498(398,2);2,493(190,6);2,437(0,5);2,431(0,5);2,408(0,4);2,338(1,3);2,333(2,6);2,329(3,5);2,324(2,6);2,239(0,6);1,235(1,2);1,149(3,6);1,131(5,3);1,120(4,0);1,113(4,0);1,101(2,3);1,081(0,9);1,041(0,9);0,463(14,4);0,444(13,7);0,396(0,8);0,334(2,2);0,323(2,2);0,284(15,7);0,274(14,9);0,146(0,4);0,025(2,3);0,008(3,3);0,000(65,5);-0,009(2,7)</p>
I-1-472:
<p>HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 408,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):</p> <p>δ= 8,441(8,2);8,316(0,9);8,250(3,0);8,226(5,1);8,204(9,4);7,953(0,4);7,779(5,0);7,616(9,0);7,470(4,5);6,043(7,2);5,757(16,0);5,040(12,9);4,743(0,5);3,324(120,7);2,676(1,1);2,672(1,5);2,667(1,1);2,663(0,5);2,542(1,0);2,525(4,4);2,512(89,2);2,507(180,6);2,503(238,3);2,498(170,2);2,494(80,9);2,338(0,5);2,334(1,1);2,329(1,5);2,325(1,1);2,321(0,6);2,075(0,6);0,000(0,9)</p>
I-1-473:
<p>HPLC-EM: logP = 2,62; masa (m/z): 403,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):</p> <p>δ= 8,690(4,5);8,365(11,3);8,296(11,3);8,292(11,2);7,846(6,2);7,827(8,0);7,748(15,9);7,715(10,1);7,695(7,9);7,427(0,6);7,420(0,7);7,241(0,6);7,236(0,5);7,171(0,5);7,165(0,4);5,446(2,0);2,138(44,8);2,119(0,5);2,113(0,8);2,107(1,0);2,101(0,7);2,094(0,4);1,964(6,0);1,958(7,3);1,952(60,8);1,946(113,6);1,939(157,6);1,933(106,8);1,927(53,7);1,920(1,3);1,914(0,5);1,780(0,3);1,774(0,7);1,768(0,9);1,762(0,6);1,387(0,6);1,383(0,5);1,372(13,7);1,340(3,1);1,285(4,3);1,276(16,0);1,270(3,2);1,216(0,5);0,881(0,5);0,146(1,2);0,008(11,2);0,000(295,9);-0,009(8,7);-0,150(1,2)</p>
I-1-474:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 449,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):</p> <p>δ= 8,633(4,3);8,380(10,0);8,298(9,7);7,846(5,6);7,827(7,2);7,756(12,4);7,717(8,7);7,697(7,1);7,426(0,7);7,420(0,7);7,241(0,6);7,235(0,5);7,171(0,5);7,165(0,4);5,446(3,4);2,566(1,0);2,134(51,7);2,119(0,6);2,113(0,8);2,107(1,1);2,101(0,8);2,094(0,4);1,964(7,7);1,957(10,4);1,952(65,5);1,946(119,4);1,939(162,3);1,933(109,9);1,927(55,5);1,914(0,7);1,780(0,4);1,774(0,7);1,768(0,9);1,762(0,6);1,372(14,1);1,340(2,7);1,285(3,9);1,276(16,0);1,271(3,0);1,216(0,6);0,881(0,5);0,146(1,0);0,023(0,4);0,021(0,5);0,020(0,6);0,018(0,7);0,008(9,2);0,000(234,8);-0,007(4,0);-0,009(7,0);-0,013(0,6);-0,014(0,6);-0,015(0,5);-0,0156(0,4);-0,0163(0,4);-0,017(0,4);-0,150(1,0)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-475:
<p>HPLC-EM: logP = 2,63; masa (m/z): 414,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,306(3,0);8,987(16,0);8,985(15,8);8,381(0,3);8,367(9,2);8,361(9,3);7,863(5,2);7,843(6,9);7,804(3,5);7,798(4,2);7,788(11,1);7,778(13,7);7,758(4,1);7,752(3,7);7,742(3,0);7,741(3,1);7,734(2,0);7,728(3,1);7,721(2,9);7,713(1,4);7,708(2,1);7,701(1,0);5,447(1,8);2,149(135,3);2,120(0,5);2,114(0,6);2,107(0,7);2,101(0,5);1,964(5,1);1,958(6,5);1,952(41,1);1,946(75,1);1,940(101,9);1,934(69,4);1,928(35,3);1,915(0,4);1,775(0,4);1,769(0,6);1,762(0,4);1,285(0,3);1,269(0,4);0,146(0,5);0,018(0,5);0,0162(0,6);0,0155(0,6);0,013(0,8);0,008(5,2);0,000(141,2);-0,007(2,8);-0,009(4,6);-0,013(0,5);-0,150(0,5)</p>
I-1-476:
<p>HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 369,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,504(1,5);11,462(10,9);8,583(0,3);8,521(5,2);8,515(5,0);8,490(6,7);8,484(15,8);8,478(12,6);8,430(0,8);8,362(10,2);8,355(10,1);8,329(2,2);8,322(2,6);8,316(4,2);8,308(3,3);8,301(3,5);8,295(2,2);8,286(4,7);8,280(5,4);8,265(4,8);8,259(7,2);8,253(4,3);8,238(5,3);8,232(3,6);8,202(0,9);8,145(0,5);8,064(0,5);8,014(0,4);8,007(0,5);7,977(0,4);7,961(0,4);7,927(0,4);7,910(0,4);7,807(0,5);7,773(1,1);7,769(1,5);7,760(7,0);7,756(7,5);7,749(1,8);7,740(8,1);7,736(7,9);7,680(0,5);7,630(0,3);7,561(6,7);7,557(6,5);7,542(10,5);7,538(8,9);7,497(0,6);7,489(1,3);7,478(8,8);7,470(2,0);7,458(11,8);7,439(5,4);7,356(0,4);7,097(0,9);7,090(1,0);7,027(1,5);7,015(5,7);7,008(5,7);6,997(12,7);6,990(12,7);6,960(0,4);6,929(0,5);6,904(0,9);6,898(0,7);6,868(0,4);6,810(5,3);6,737(0,8);6,179(0,5);5,757(3,0);5,589(0,7);4,143(0,3);3,774(0,3);3,621(0,4);3,593(0,4);3,539(0,5);3,529(0,7);3,511(0,5);3,411(0,8);3,322(817,4);3,264(2,0);3,237(0,7);3,189(1,3);3,114(0,7);3,105(0,7);3,078(1,1);3,035(1,0);2,994(1,1);2,989(0,9);2,978(0,8);2,966(1,0);2,941(1,0);2,916(2,0);2,900(2,2);2,882(1,1);2,860(1,4);2,843(0,9);2,825(0,9);2,749(0,8);2,726(1,5);2,709(1,2);2,675(10,5);2,671(14,0);2,666(10,5);2,541(94,9);2,524(52,2);2,510(827,8);2,506(1578,9);2,502(2019,5);2,497(1471,5);2,493(729,1);2,430(16,0);2,368(0,4);2,333(9,7);2,328(12,8);2,324(9,3);2,288(1,4);1,234(1,1);1,147(1,3);1,131(0,3);0,909(0,4);0,854(0,3);0,146(2,0);0,008(20,4);0,000(500,3);-0,008(20,3);-0,149(2,0)</p>
I-1-477:
<p>HPLC-EM: logP = 4,47; masa (m/z): 542,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,521(0,5);8,515(0,5);8,490(0,7);8,483(0,8);8,473(7,7);8,467(8,0);8,322(8,2);8,315(8,3);8,301(0,4);8,295(0,4);8,283(2,3);8,277(2,1);8,262(2,5);8,256(3,8);8,251(2,3);8,236(2,2);8,230(2,0);7,759(0,5);7,756(0,5);7,739(1,0);7,729(6,5);7,726(14,6);7,723(14,5);7,720(6,8);7,710(6,9);7,707(15,3);7,703(16,0);7,635(0,4);7,449(0,5);7,431(9,8);7,411(14,1);7,392(7,7);7,015(0,5);7,008(0,4);6,810(0,6);6,800(9,3);6,793(9,2);5,757(5,1);3,322(171,4);2,675(1,9);2,671(2,5);2,666(1,9);2,662(0,9);2,541(10,5);2,524(8,7);2,510(148,0);2,506(286,4);2,502(371,5);2,497(271,6);2,493(13,8);2,430(1,6);2,333(1,8);2,328(2,5);2,324(1,8);0,146(0,4);0,008(3,3);0,000(85,3);-0,008(3,4);-0,150(0,4)</p>
I-1-478:
<p>HPLC-EM: logP = 1,88; masa (m/z): 336,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,038(2,5);8,483(2,7);8,476(2,8);8,327(2,2);8,322(2,2);8,291(0,9);8,285(0,8);8,270(0,9);8,264(1,6);8,258(0,8);8,243(0,9);8,237(0,8);6,927(3,3);6,921(3,2);5,757(2,1);3,323(70,8);2,675(0,7);2,671(1,0);2,666(0,8);2,649(16,0);2,555(18,1);2,524(2,9);2,511(49,5);2,506(97,6);2,502(127,4);2,497(92,7);2,493(45,0);2,333(0,6);2,328(0,8);2,324(0,6);0,008(1,1);0,000(28,5);-0,009(1,0)</p>
I-1-479:
<p>HPLC-EM: logP = 2,51; masa (m/z): 369,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,604(6,0);8,484(6,4);8,478(6,7);8,367(5,7);8,360(5,6);8,285(2,1);8,278(1,9);8,264(2,2);8,257(3,8);8,251(2,0);8,236(2,1);8,230(1,9);7,563(6,5);7,558(8,0);7,540(16,0);7,498(8,0);7,481(5,1);7,475(3,9);7,466(0,4);7,458(2,8);7,001(8,2);6,994(8,1);3,405(0,4);3,377(1,2);3,343(385,4);3,300(0,6);3,289(0,4);2,677(0,5);2,672(0,6);2,668(0,4);2,542(2,7);2,526(2,0);2,512(36,4);2,508(71,9);2,503(94,1);2,499(67,9);2,494(32,4);2,334(0,4);2,330(0,6);2,325(0,4);0,000(2,2)</p>
I-1-480:
<p>HPLC-EM: logP = 2,51; masa (m/z): 329,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,331(3,0);8,249(5,7);8,245(5,7);8,212(7,3);8,205(7,2);7,669(3,7);7,663(3,7);7,656(0,4);7,649(3,9);7,643(6,7);7,636(3,8);7,622(3,7);7,616(3,6);7,180(4,1);7,160(7,2);7,141(7,1);7,085(7,8);7,078(7,7);7,053(0,4);7,035(16,0);7,016(11,7);5,447(3,3);2,432(0,7);2,275(112,3);2,237(1,8);2,156(117,0);2,125(0,4);2,120(0,5);2,114(1,1);2,107(0,6);2,101(0,4);1,964(4,4);1,958(5,5);1,952(35,9);1,946(65,2);1,940(88,4);1,934(61,0);1,928(31,0);1,915(0,3);1,774(0,4);1,768(0,5);1,762(0,3);1,340(0,4);1,285(0,7);1,269(1,7);1,254(0,5);0,146(0,4);0,008(3,7);0,000(104,2);-0,009(2,9);-0,150(0,4)</p>

(continuación)

Compuesto N°**Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾**

I-1-481:

HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 343,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 8,293(3,7);8,287(3,8);8,072(1,2);8,066(1,1);8,051(1,3);8,045(2,2);8,039(1,2);8,024(1,4);8,015(4,8);8,008(4,4);7,820(2,1);7,807(0,4);7,800(3,2);7,739(1,1);7,736(1,1);7,720(2,6);7,702(2,0);7,699(1,8);7,674(4,6);7,615(2,9);7,611(3,4);7,598(3,2);7,591(2,5);7,580(1,3);5,758(2,0);5,421(4,4);5,414(4,4);3,324(51,5);2,675(0,4);2,671(0,6);2,667(0,4);2,524(2,2);2,511(31,9);2,507(61,3);2,502(78,9);2,497(56,4);2,493(26,6);2,333(0,4);2,329(0,5);2,324(0,3);1,989(0,5);1,906(16,0);1,299(1,8);1,259(2,5);1,235(0,9);0,008(1,3);0,000(30,3);-0,009(0,9)

I-1-482:

HPLC-EM: logP = 1,77; masa (m/z): 382,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,525(11,7);8,485(13,0);8,479(16,0);8,470(8,4);8,465(8,0);8,370(10,6);8,364(10,5);8,333(0,4);8,326(0,4);8,316(3,3);8,288(3,8);8,282(3,6);8,267(4,1);8,261(6,9);8,254(3,6);8,239(3,8);8,233(3,3);8,126(0,3);8,099(0,3);8,056(0,4);8,048(0,4);8,000(7,7);7,995(7,9);7,981(8,7);7,977(8,1);7,565(8,4);7,553(8,0);7,546(7,8);7,534(7,6);7,000(13,9);6,994(13,7);5,825(0,5);5,819(0,4);5,756(5,9);5,213(0,5);3,395(0,3);3,381(0,4);3,321(476,1);2,752(0,4);2,740(0,5);2,679(3,5);2,675(6,9);2,671(9,5);2,666(7,1);2,644(0,6);2,524(30,1);2,510(548,2);2,506(1095,4);2,502(1433,5);2,497(1029,5);2,492(494,2);2,337(3,1);2,333(6,6);2,328(9,0);2,324(6,5);0,147(0,4);0,008(3,2);0,000(94,4);-0,009(3,3);-0,149(0,4)

I-1-483:

HPLC-EM: logP = 2,51; masa (m/z): 364,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,327(2,2);8,481(2,2);8,475(2,3);8,347(1,9);8,341(1,9);8,283(0,7);8,277(0,7);8,262(0,8);8,256(1,4);8,249(0,7);8,235(0,8);8,228(0,7);7,435(2,8);7,413(3,1);7,148(2,4);7,141(2,8);7,065(1,8);7,057(1,5);7,043(1,6);7,035(1,4);6,996(2,7);6,989(2,7);3,805(16,0);3,329(65,6);2,542(0,4);2,525(0,6);2,520(1,0);2,511(12,0);2,507(24,3);2,502(32,1);2,498(23,0);2,493(10,7);0,000(5,8)

I-1-484:

HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 353,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,649(5,5);8,486(5,6);8,480(5,8);8,371(5,1);8,364(5,0);8,288(1,8);8,282(1,7);8,267(1,9);8,261(3,4);8,255(1,7);8,240(1,8);8,234(1,6);7,558(1,3);7,542(1,6);7,537(3,1);7,521(3,2);7,516(2,3);7,501(2,2);7,428(5,2);7,408(3,5);7,373(2,4);7,371(2,3);7,350(4,0);7,329(1,9);7,327(1,8);6,993(7,0);6,987(6,9);5,757(16,0);3,322(50,0);3,028(0,5);2,813(0,5);2,675(0,8);2,671(1,0);2,666(0,8);2,524(3,3);2,511(61,4);2,506(118,6);2,502(153,3);2,497(110,0);2,493(52,7);2,333(0,8);2,328(1,0);2,324(0,7);2,319(0,4);1,336(0,9);1,298(0,4);1,259(0,6);1,249(1,1);1,235(0,4);0,146(0,4);0,008(3,7);0,000(82,2);-0,009(2,8);-0,150(0,4)

I-1-485:

HPLC-EM: logP = 1,89; masa (m/z): 337,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,635(9,8);8,786(0,4);8,772(13,7);8,766(15,8);8,702(16,0);8,695(13,3);8,497(10,5);8,491(10,8);8,409(9,8);8,039(9,6);8,300(3,1);8,294(2,8);8,279(3,4);8,273(5,7);8,266(3,0);8,252(3,1);8,245(2,8);7,016(12,8);7,009(12,5);3,339(200,7);2,682(0,5);2,678(0,7);2,673(0,5);2,548(34,4);2,531(2,2);2,517(41,0);2,513(79,5);2,508(102,4);2,504(73,7);2,500(35,5);2,340(0,5);2,335(0,7);2,331(0,5)

I-1-486:

HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 341,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,154(6,6);8,478(6,9);8,472(7,1);8,326(6,0);8,320(6,0);8,278(2,1);8,272(2,0);8,256(2,5);8,251(3,9);8,245(2,4);8,229(2,2);8,224(2,0);7,406(4,1);7,387(5,1);7,375(2,8);7,356(4,8);7,337(3,0);7,235(3,5);7,217(5,4);7,198(2,3);7,022(6,3);7,016(6,3);6,988(5,4);6,969(4,9);4,038(0,5);4,020(0,5);3,322(67,7);2,671(1,1);2,502(177,6);2,328(1,1);2,253(0,7);2,240(1,6);2,232(2,0);2,220(2,9);2,207(2,1);2,199(1,7);2,186(0,8);1,989(1,9);1,397(16,0);1,193(0,5);1,175(1,0);1,157(0,5);0,944(2,1);0,933(5,9);0,929(6,5);0,918(4,4);0,912(6,2);0,908(6,3);0,898(2,6);0,700(2,7);0,686(8,2);0,674(7,6);0,662(2,4);0,146(0,3);0,000(66,2);-0,150(0,3)

I-1-487:

HPLC-EM: logP = 2,69; masa (m/z): 347,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,432(4,2);8,481(4,3);8,475(4,5);8,347(3,6);8,340(3,6);8,315(0,8);8,281(1,5);8,275(1,4);8,261(1,6);8,254(2,8);8,248(1,4);8,233(1,5);8,227(1,3);7,438(1,1);7,423(1,3);7,418(2,0);7,403(2,0);7,398(1,5);7,383(1,4);7,168(3,3);7,148(2,9);7,142(1,8);7,119(2,7);7,098(1,4);7,006(5,6);7,000(5,6);3,394(0,4);3,327(714,8);3,326(732,3);3,286(0,5);2,680(1,5);2,675(4,1);2,671(4,1);2,666(2,9);2,661(1,8);2,656(5,0);2,637(5,1);2,618(1,8);2,541(34,6);2,524(10,1);2,519(15,4);2,511(203,4);2,506(415,9);2,502(549,7);2,497(392,9);2,492(185,1);2,454(0,5);2,419(0,4);2,338(1,1);2,333(2,5);2,328(3,5);2,324(2,5);2,319(1,2);2,074(15,6);1,298(0,6);1,259(0,9);1,244(0,5);1,235(1,3);1,196(7,0);1,177(16,0);1,158(6,9);0,008(2,4);0,000(81,5);-0,009(2,5)

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-488:
HPLC-EM: logP = 2,69; masa (m/z): 329,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,140(3,2);8,485(4,5);8,479(4,6);8,332(3,1);8,326(3,1);8,283(1,4);8,277(1,3);8,262(1,5);8,256(2,5);8,250(1,3);8,235(1,4);8,229(1,3);7,455(2,1);7,435(3,0);7,414(3,0);7,411(2,5);7,395(2,3);7,392(1,9);7,334(3,6);7,317(2,3);7,295(2,0);7,292(1,7);7,276(2,9);7,274(2,6);7,258(1,2);7,255(1,1);7,012(3,0);7,006(3,0);3,434(0,4);3,429(0,4);3,416(0,5);3,408(0,5);3,349(446,7);3,298(0,7);2,786(1,5);2,767(4,5);2,749(4,7);2,730(1,6);2,718(1,2);2,682(0,6);2,678(0,8);2,673(0,6);2,583(0,4);2,572(0,8);2,548(246,6);2,531(2,8);2,518(49,0);2,513(94,0);2,509(120,2);2,504(86,9);2,500(42,3);2,374(1,1);2,340(0,6);2,335(0,8);2,331(0,6);1,241(0,4);1,195(7,3);1,176(16,0);1,157(7,1)
I-1-489:
HPLC-EM: logP = 2,42; masa (m/z): 331,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,212(4,2);8,765(5,0);8,759(5,2);8,591(4,9);8,585(4,5);8,491(4,3);8,485(4,5);8,381(4,1);8,375(4,0);8,316(0,4);8,296(1,3);8,290(1,2);8,275(1,4);8,269(2,4);8,263(1,3);8,248(1,3);8,242(1,1);7,025(5,0);7,018(4,9);3,325(444,3);3,286(0,3);3,104(1,9);3,085(5,9);3,067(6,1);3,048(2,0);2,675(1,9);2,671(2,5);2,666(1,9);2,541(2,1);2,524(7,6);2,510(154,0);2,506(297,2);2,502(383,3);2,497(279,7);2,493(137,9);2,333(1,8);2,328(2,4);2,324(1,8);2,074(7,7);1,298(0,6);1,284(7,6);1,265(16,0);1,247(7,6);1,235(1,2);0,008(2,5);0,000(62,0);-0,008(2,2)
I-1-490:
HPLC-EM: logP = 1,29; masa (m/z): 330,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,352(2,0);8,589(1,4);8,584(1,5);8,577(1,5);8,572(1,5);8,484(2,3);8,478(2,5);8,351(1,9);8,345(1,9);8,316(0,7);8,285(0,7);8,279(0,7);8,264(0,9);8,258(1,5);8,252(1,2);8,237(0,9);8,231(0,7);7,859(1,1);7,855(1,2);7,840(1,3);7,836(1,3);7,324(1,3);7,312(1,3);7,305(1,3);7,292(1,2);7,017(2,0);7,011(2,0);3,327(785,0);2,909(1,0);2,890(2,9);2,871(3,0);2,852(1,0);2,675(3,0);2,671(4,2);2,666(3,1);2,662(1,5);2,541(11,4);2,524(12,2);2,519(19,0);2,511(236,8);2,506(479,5);2,502(634,6);2,497(460,5);2,492(222,5);2,419(0,4);2,337(1,4);2,333(2,9);2,328(4,1);2,324(3,0);2,289(0,5);2,074(16,0);1,298(0,5);1,258(0,7);1,241(4,3);1,222(8,7);1,203(3,9);1,148(0,4);0,146(0,3);0,008(3,1);0,000(87,1);-0,009(2,4);-0,150(0,4)
I-1-491:
HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 387,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,702(10,0);8,486(9,8);8,480(10,4);8,376(9,7);8,369(9,8);8,285(2,7);8,279(2,5);8,264(2,9);8,258(5,1);8,251(2,7);8,237(2,7);8,230(2,5);7,778(0,8);7,757(2,6);7,748(1,5);7,738(5,3);7,722(8,2);7,701(16,0);7,684(4,6);7,679(3,9);6,981(12,1);6,974(12,0);3,518(1,0);3,343(97,1);3,002(0,4);2,716(0,5);2,571(0,3);2,563(0,7);2,546(116,6);2,530(0,6);2,525(0,9);2,516(12,3);2,512(25,3);2,507(34,0);2,502(25,0);2,498(12,2);2,372(0,5);0,000(1,4)
I-1-492:
HPLC-EM: logP = 2,56; masa (m/z): 443,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,544(6,4);8,486(6,4);8,480(6,7);8,368(5,7);8,362(5,6);8,288(2,0);8,282(1,8);8,267(2,1);8,261(3,7);8,255(1,9);8,240(2,0);8,234(1,8);7,739(4,8);7,737(4,8);7,720(5,2);7,718(5,0);7,379(1,9);7,377(1,9);7,356(4,5);7,335(3,0);7,333(2,7);7,285(2,5);7,270(3,0);7,265(3,2);7,250(3,3);7,244(1,7);7,229(1,5);6,994(7,9);6,987(7,8);3,323(53,2);2,675(0,7);2,671(1,0);2,666(0,7);2,524(3,7);2,511(59,4);2,506(113,0);2,502(143,6);2,497(101,7);2,493(47,6);2,337(0,3);2,333(0,7);2,328(0,9);2,324(0,6);1,989(0,9);1,398(16,0);1,175(0,5);0,008(3,0);0,000(72,0);-0,009(2,3)
I-1-493:
HPLC-EM: logP = 2,31; masa (m/z): 319,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,232(10,4);8,483(15,3);8,477(16,0);8,354(11,8);8,347(11,6);8,286(4,6);8,280(4,3);8,265(5,0);8,259(8,7);8,253(4,5);8,238(4,6);8,232(4,2);7,701(3,5);7,697(4,0);7,683(6,7);7,678(7,5);7,664(4,0);7,659(4,2);7,603(2,2);7,598(2,2);7,589(2,6);7,585(5,0);7,582(3,9);7,580(3,8);7,578(3,4);7,570(4,2);7,566(3,9);7,564(5,2);7,559(2,9);7,550(2,9);7,546(2,5);7,348(5,9);7,328(13,2);7,324(7,6);7,311(12,6);7,309(11,8);7,303(5,1);7,301(4,9);7,293(6,3);7,290(5,2);7,000(10,8);6,994(10,6);3,441(0,5);3,429(0,5);3,344(925,4);3,268(0,4);2,996(1,7);2,713(1,0);2,682(0,6);2,677(1,1);2,672(1,5);2,668(1,1);2,663(0,5);2,576(0,4);2,543(275,3);2,526(4,7);2,521(7,4);2,512(85,2);2,508(171,2);2,503(226,8);2,499(163,8);2,494(77,8);2,369(1,0);2,339(0,5);2,335(1,1);2,330(1,5);2,326(1,1);2,321(0,5);0,000(2,7)
I-1-494:
HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 433,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,058(15,7);8,492(14,4);8,486(15,8);8,343(13,4);8,336(13,9);8,295(4,1);8,289(4,1);8,274(4,6);8,268(7,9);8,263(4,7);8,247(4,2);8,241(4,0);7,807(15,1);7,793(16,0);7,410(14,0);7,396(13,2);6,994(9,7);6,989(10,0);6,966(0,5);3,481(0,4);3,437(0,5);3,426(0,5);3,421(0,6);3,336(696,2);3,284(1,3);3,259(0,9);3,218(0,3);3,002(1,1);2,718(3,7);2,677(2,7);2,654(0,7);2,634(0,7);2,596(2,0);2,548(688,0);2,509(383,3);2,433(1,2);2,374(3,7);2,335(2,5);2,297(0,4);1,241(1,2);1,155(0,4)

(continuación)

Compuesto N°**Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾**

I-1-495:

HPLC-EM: logP = 1,79; masa (m/z): 428,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 13,527(0,3);11,480(13,3);10,125(0,3);8,493(13,0);8,487(13,7);8,429(8,8);8,424(9,5);8,417(9,7);8,412(9,2);8,397(0,5);8,376(11,6);8,370(11,6);8,294(4,1);8,288(3,7);8,273(4,3);8,267(7,6);8,261(3,9);8,246(4,1);8,240(3,7);7,839(8,5);7,834(8,7);7,820(10,1);7,815(9,3);7,534(0,5);7,527(9,9);7,515(9,3);7,508(8,8);7,496(8,7);7,209(0,9);7,081(1,0);7,006(16,0);6,999(15,9);6,954(0,7);3,891(0,3);3,876(0,4);3,802(0,4);3,743(0,4);3,739(0,3);3,691(0,4);3,681(0,4);3,665(0,5);3,647(0,5);3,631(0,4);3,608(0,4);3,577(0,4);3,568(0,5);3,554(0,6);3,537(0,7);3,505(0,8);3,498(0,8);3,484(0,6);3,466(1,4);3,458(1,2);3,443(1,4);3,430(1,3);3,414(1,8);3,395(3,2);3,341(3202,7);3,309(7,4);3,295(3,7);3,276(1,5);3,258(0,9);3,232(0,8);3,220(0,8);3,200(0,5);3,192(0,6);3,138(0,3);3,102(0,3);3,098(0,4);3,024(0,4);3,002(0,5);2,718(1,3);2,687(2,4);2,682(5,1);2,678(7,1);2,673(5,2);2,669(2,6);2,639(0,5);2,605(0,7);2,599(0,7);2,590(0,8);2,569(1,8);2,548(310,4);2,531(22,0);2,526(34,8);2,518(413,6);2,513(826,0);2,509(1080,9);2,504(770,7);2,500(365,0);2,442(0,8);2,421(0,5);2,411(0,4);2,391(0,4);2,374(1,2);2,357(0,4);2,344(2,3);2,340(5,0);2,335(6,8);2,331(4,9);2,326(2,1);2,297(0,8);2,253(0,4);1,440(0,5);1,295(0,4);1,265(0,5);1,251(1,2);1,243(2,5);1,162(0,4);1,154(0,7);-1,685(0,3);-3,450(0,4)

I-1-496:

HPLC-EM: logP = 2,55; masa (m/z): 331,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 10,622(2,6);8,482(2,9);8,476(3,0);8,329(2,2);8,322(2,2);8,316(0,5);8,286(1,0);8,280(0,9);8,265(1,1);8,259(1,9);8,253(1,0);8,238(1,0);8,232(0,9);7,773(1,5);7,769(1,6);7,754(1,6);7,750(1,6);7,557(0,9);7,553(0,9);7,539(1,2);7,536(1,4);7,532(1,2);7,518(1,1);7,514(1,0);7,216(2,2);7,196(1,9);7,105(1,3);7,103(1,3);7,087(2,3);7,085(2,2);7,068(1,2);7,066(1,1);7,011(2,9);7,004(2,8);3,941(16,0);3,767(0,4);3,324(38,4);2,671(0,4);2,525(1,2);2,520(1,8);2,511(19,4);2,507(38,7);2,502(51,0);2,497(36,7);2,493(17,5);2,329(0,3);1,336(0,4);1,250(0,6);0,008(1,0);0,000(28,8);-0,009(0,9)

I-1-497:

HPLC-EM: logP = 2,35; masa (m/z): 390,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,855(1,7);8,488(2,9);8,482(3,1);8,367(2,5);8,361(2,4);8,317(0,4);8,297(0,9);8,291(0,9);8,276(1,0);8,270(1,7);8,264(0,9);8,249(0,9);8,243(0,8);6,934(1,6);6,928(1,6);5,757(0,4);3,322(176,6);2,759(16,0);2,675(2,2);2,671(2,9);2,666(2,1);2,541(6,7);2,523(11,8);2,510(170,2);2,506(326,4);2,501(421,8);2,497(306,9);2,493(151,0);2,333(2,0);2,328(2,8);2,324(2,0);0,146(0,4);0,008(4,1);0,000(97,2);-0,008(3,7);-0,150(0,5)

I-1-498:

HPLC-EM: logP = 2,17; masa (m/z): 339,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 10,506(2,1);8,466(2,1);8,465(2,2);8,459(2,3);8,288(1,9);8,281(1,9);8,273(0,9);8,267(0,8);8,252(0,9);8,246(1,5);8,239(0,8);8,225(0,8);8,218(0,8);6,851(2,6);6,844(2,6);5,756(0,4);4,289(1,9);4,281(1,5);4,278(2,0);4,275(1,5);4,266(2,0);3,324(33,6);3,045(2,0);3,037(1,5);3,033(2,1);3,030(1,5);3,022(1,9);2,525(0,5);2,520(0,8);2,512(10,8);2,507(21,7);2,502(28,8);2,498(20,8);2,493(9,7);2,013(16,0);0,000(8,1)

I-1-499:

HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 315,2 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,101(2,5);8,479(3,6);8,473(3,8);8,327(2,6);8,321(2,6);8,279(1,2);8,273(1,1);8,258(1,3);8,252(2,2);8,246(1,2);8,231(1,2);8,225(1,1);7,484(1,8);7,465(2,0);7,395(0,8);7,392(0,8);7,376(2,1);7,373(2,1);7,358(1,8);7,354(1,6);7,293(3,0);7,284(1,9);7,274(2,1);7,265(2,4);7,246(0,9);7,010(2,1);7,004(2,1);5,757(6,0);3,322(23,1);2,675(0,4);2,671(0,5);2,666(0,3);2,524(1,6);2,510(30,4);2,506(57,8);2,502(73,8);2,497(53,5);2,493(26,1);2,396(16,0);2,333(0,4);2,328(0,5);2,324(0,4);1,336(0,5);1,250(0,6);0,008(1,5);0,000(36,4);-0,008(1,4)

I-1-500:

HPLC-EM: logP = 2,06; masa (m/z): 373,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 10,918(4,5);8,488(5,1);8,482(5,3);8,348(4,3);8,342(4,3);8,298(1,5);8,292(1,4);8,277(1,6);8,271(2,8);8,264(1,5);8,250(1,5);8,244(1,4);7,271(2,3);7,137(5,3);7,002(2,5);6,922(4,9);6,916(4,8);4,180(0,7);3,822(16,0);3,540(0,9);3,335(197,1);2,718(0,5);2,682(0,8);2,678(1,1);2,673(0,7);2,548(117,1);2,531(3,7);2,518(65,5);2,513(129,3);2,509(168,3);2,504(120,5);2,500(57,3);2,374(0,5);2,340(0,8);2,336(1,1);2,331(0,8);1,242(0,5)

I-1-501:

HPLC-EM: logP = 2,20; masa (m/z): 371,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆):
 δ = 11,704(11,9);9,091(10,1);9,085(11,9);9,031(12,3);9,025(10,1);8,902(0,4);8,893(0,3);8,497(12,5);8,490(13,1);8,410(11,6);8,403(11,4);8,296(3,7);8,290(3,4);8,275(4,0);8,269(7,0);8,263(3,7);8,248(3,8);8,242(3,4);6,994(16,0);6,987(15,8);3,418(0,4);3,408(0,5);3,355(473,6);3,299(0,5);2,683(0,5);2,679(0,6);2,674(0,4);2,549(47,3);2,532(2,0);2,527(3,2);2,519(37,9);2,514(75,7);2,509(98,6);2,505(70,5);2,500(33,2);2,341(0,5);2,336(0,6);2,332(0,5)

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-502: HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 370,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,474(10,8);8,924(6,2);8,912(6,3);8,494(11,1);8,488(11,4);8,383(10,8);8,376(16,0);8,356(6,6);8,294(3,2);8,288(2,9);8,273(3,5);8,267(5,9);8,261(3,1);8,246(3,1);8,240(2,9);7,810(4,3);7,798(4,3);7,790(4,1);7,778(3,9);6,989(13,9);6,982(13,6);3,390(0,5);3,346(297,6);3,316(0,9);2,719(1,2);2,684(0,4);2,679(0,6);2,674(0,5);2,593(0,3);2,572(1,0);2,549(274,0);2,532(2,2);2,527(3,1);2,519(36,3);2,514(71,1);2,510(92,1);2,505(66,2);2,501(31,8);2,376(1,3);2,341(0,5);2,337(0,6);2,332(0,4);1,240(0,4)
I-1-503: HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 341,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,972(10,5);8,495(11,6);8,488(12,1);8,357(9,8);8,350(9,7);8,303(3,4);8,297(3,2);8,282(3,7);8,276(6,4);8,270(3,4);8,255(3,5);8,249(3,1);7,929(14,9);7,916(15,4);7,217(16,0);7,204(15,5);6,944(12,8);6,937(12,6);3,337(356,3);3,310(0,8);2,682(0,8);2,678(1,0);2,673(0,7);2,548(34,3);2,517(66,5);2,513(126,1);2,509(160,9);2,504(116,0);2,500(5,6,6);2,340(0,8);2,335(1,1);2,331(0,8);1,240(0,4)
I-1-504: HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 336,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,380(12,2);8,628(0,3);8,614(9,7);8,611(10,0);8,602(10,1);8,599(9,9);8,507(0,4);8,493(13,2);8,487(13,8);8,382(12,0);8,376(12,0);8,295(3,8);8,289(3,6);8,274(4,1);8,268(7,2);8,261(3,9);8,246(3,8);8,240(3,5);8,105(9,1);8,101(9,3);8,084(10,0);8,081(9,6);7,612(10,1);7,600(9,7);7,591(9,2);7,579(9,2);7,027(0,4);7,013(16,0);7,006(16,0);3,375(0,6);3,370(0,6);3,353(5,0);3,339(234,0);3,310(0,5);2,682(0,5);2,678(0,7);2,673(0,5);2,548(9,3);2,531(2,7);2,526(4,2);2,518(40,2);2,513(79,8);2,509(105,1);2,504(76,9);2,500(37,7);2,340(0,5);2,335(0,7);2,331(0,5);1,238(0,3)
I-1-505: HPLC-EM: logP = 1,50; masa (m/z): 331,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,667(2,1);9,259(2,6);9,246(2,7);8,491(2,1);8,485(2,3);8,385(1,9);8,378(1,9);8,316(0,5);8,295(0,7);8,289(0,6);8,274(0,7);8,268(1,3);8,261(0,7);8,247(0,7);8,241(0,7);7,761(2,7);7,748(2,7);7,015(2,7);7,008(2,7);3,326(667,3);3,081(1,0);3,062(3,0);3,043(3,1);3,024(1,0);2,995(0,5);2,680(1,2);2,675(2,5);2,671(3,5);2,666(2,5);2,661(1,2);2,541(12,6);2,524(9,9);2,519(15,2);2,511(195,0);2,506(395,4);2,502(520,7);2,497(370,7);2,492(174,1);2,419(0,3);2,337(1,2);2,333(2,5);2,328(3,4);2,324(2,4);2,319(1,1);2,074(16,0);1,308(3,9);1,298(0,7);1,289(8,6);1,271(3,8);1,258(0,7);1,244(0,5);1,235(1,1);1,148(0,3);0,146(0,4);0,008(3,0);0,000(91,5);-0,009(2,5);-0,150(0,3)
I-1-506: HPLC-EM: logP = 2,65; masa (m/z): 387,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,525(12,5);8,485(12,6);8,479(13,1);8,361(11,1);8,355(11,0);8,286(4,1);8,280(3,8);8,265(4,4);8,259(7,7);8,252(4,0);8,238(4,1);8,231(3,7);7,931(4,6);7,918(4,8);7,909(5,2);7,896(5,0);7,681(4,5);7,674(4,9);7,659(4,7);7,652(4,7);7,570(2,5);7,565(2,2);7,549(4,7);7,543(3,9);7,528(2,3);7,522(1,9);6,971(16,0);6,965(15,9);3,512(2,4);3,492(0,4);3,478(0,4);3,424(0,6);3,411(0,7);3,397(0,7);3,388(0,8);3,334(794,3);2,995(0,4);2,681(0,6);2,676(1,3);2,672(1,7);2,667(1,3);2,662(0,6);2,542(38,7);2,525(4,8);2,520(7,3);2,512(95,5);2,507(193,4);2,502(257,2);2,498(186,6);2,493(88,4);2,338(0,6);2,334(1,2);2,329(1,7);2,325(1,2);2,320(0,5);2,074(0,7);1,249(0,4);1,235(0,9);0,000(4,9)
I-1-507: HPLC-EM: logP = 2,69; masa (m/z): 433,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,088(9,2);8,496(9,8);8,490(10,2);8,355(7,7);8,348(7,7);8,301(3,0);8,295(2,8);8,280(3,2);8,274(5,6);8,268(2,9);8,253(3,0);8,247(2,7);7,808(14,7);7,796(15,3);7,285(16,0);7,272(15,2);6,951(11,2);6,944(11,1);3,365(0,4);3,335(236,3);3,315(0,6);2,682(0,7);2,678(0,9);2,673(0,6);2,548(79,9);2,531(2,8);2,526(4,5);2,518(52,9);2,513(106,2);2,509(139,2);2,504(99,2);2,499(46,7);2,374(0,3);2,344(0,3);2,340(0,7);2,335(0,9);2,331(0,6);1,240(0,4)
I-1-508: HPLC-EM: logP = 3,02; masa (m/z): 406,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,995(2,5);8,492(2,5);8,486(2,8);8,414(2,4);8,407(2,5);8,297(0,8);8,291(0,7);8,276(0,8);8,270(1,5);8,264(0,8);8,249(0,8);8,243(0,7);7,021(3,1);7,014(3,1);3,857(16,0);3,326(251,2);2,995(0,5);2,754(4,0);2,737(4,3);2,675(0,6);2,671(0,9);2,666(0,7);2,541(47,1);2,524(2,2);2,506(97,0);2,502(127,5);2,497(94,3);2,493(47,3);2,333(0,6);2,328(0,8);2,324(0,6);2,052(0,4);2,035(0,8);2,018(1,0);2,001(0,8);1,984(0,4);1,235(0,5);0,946(14,4);0,930(14,0);0,000(4,9)
I-1-509: HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 392,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,970(2,8);8,492(2,5);8,486(2,7);8,409(2,3);8,402(2,4);8,315(0,3);8,297(0,7);8,291(0,7);8,276(0,8);8,269(1,4);8,263(0,7);8,248(0,8);8,242(0,7);7,016(3,0);7,010(3,0);3,855(16,0);3,520(0,4);3,503(1,1);3,486(1,5);3,469(1,2);3,452(0,5);3,325(243,8);2,995(0,4);2,675(0,8);2,671(1,0);2,666(0,8);2,541(46,0);2,524(2,6);2,510(59,1);2,506(119,6);2,502(158,6);2,497(116,6);2,493(57,8);2,333(0,7);2,329(1,0);2,324(0,8);1,280(15,5);1,263(15,3);1,236(0,6);0,008(0,5);0,000(15,5);-0,008(0,6)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-510: HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 321,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,801(2,4);8,488(2,6);8,482(2,7);8,327(2,0);8,321(2,0);8,293(0,9);8,287(0,8);8,272(0,9);8,266(1,6);8,260(0,8);8,245(0,9);8,239(0,8);7,682(2,8);7,669(2,9);7,025(2,8);7,013(2,7);6,940(3,2);6,933(3,2);3,408(0,4);3,350(409,2);3,303(0,5);3,298(0,5);2,718(0,3);2,682(0,4);2,678(0,6);2,673(0,4);2,548(92,8);2,531(1,9);2,526(3,1);2,518(35,8);2,513(70,6);2,508(91,3);2,504(65,3);2,499(30,9);2,473(16,0);2,374(0,3);2,340(0,4);2,335(0,6);2,331(0,4)
I-1-511: HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 374,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,788(0,9);8,491(1,9);8,485(2,0);8,387(1,7);8,380(1,7);8,316(0,8);8,300(0,6);8,294(0,6);8,279(0,7);8,273(1,1);8,267(0,6);8,251(0,6);8,246(0,5);6,961(2,3);6,955(2,3);3,323(629,4);2,679(1,7);2,675(3,5);2,670(4,8);2,666(3,5);2,661(1,7);2,541(3,7);2,524(14,5);2,519(22,5);2,510(272,2);2,506(546,9);2,501(719,1);2,497(518,4);2,492(247,3);2,418(12,0);2,337(1,5);2,333(3,3);2,328(4,6);2,324(3,3);2,319(1,5);2,074(16,0);1,298(0,7);1,258(0,9);1,244(0,4);1,236(0,7);1,147(0,5);0,146(0,8);0,008(6,3);0,000(196,3);-0,009(6,1);-0,150(0,8)
I-1-512: HPLC-EM: logP = 3,11; masa (m/z): 406,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,975(1,1);8,491(1,0);8,485(1,1);8,405(1,0);8,398(1,0);8,315(0,4);8,275(0,4);8,269(0,6);8,248(0,3);7,003(1,3);6,997(1,2);3,830(6,8);3,353(0,8);3,325(347,8);3,294(0,3);2,995(0,5);2,675(0,9);2,671(1,2);2,666(0,8);2,662(0,4);2,541(32,0);2,524(3,1);2,511(71,5);2,506(139,7);2,502(179,3);2,497(127,2);2,493(59,8);2,337(0,4);2,333(0,9);2,328(1,1);2,324(0,8);1,396(16,0);1,235(0,8);0,008(0,6);0,000(16,6);-0,009(0,6)
I-1-513: HPLC-EM: logP = 3,89; masa (m/z): 395,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,415(0,7);8,488(0,9);8,482(1,0);8,363(0,7);8,356(0,7);8,274(0,3);8,267(0,6);6,975(0,5);6,969(0,5);3,844(5,8);3,327(91,5);2,541(0,5);2,524(0,6);2,520(0,9);2,511(14,7);2,506(30,2);2,502(40,0);2,497(28,6);2,493(13,5);1,355(16,0);0,000(3,5)
I-1-514: HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 369,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,655(2,2);8,491(4,2);8,485(4,5);8,369(3,2);8,363(3,3);8,315(1,1);8,297(1,4);8,291(1,2);8,276(1,4);8,270(2,5);8,264(1,3);8,249(1,4);8,243(1,2);7,145(1,3);7,008(3,0);6,978(2,0);6,973(2,0);6,871(1,5);3,993(0,4);3,847(16,0);3,388(0,4);3,374(0,6);3,326(1334,4);3,282(1,0);3,275(0,7);3,246(0,4);2,995(1,1);2,675(2,6);2,671(3,6);2,666(2,6);2,541(37,1);2,524(8,4);2,519(13,0);2,511(200,2);2,506(410,1);2,502(544,2);2,497(389,5);2,493(184,5);2,423(0,5);2,37(1,2);2,333(2,6);2,328(3,5);2,324(2,5);2,319(1,2);2,289(0,7);2,262(14,1);1,298(0,4);1,259(0,6);1,235(2,0);0,008(0,6);0,000(16,9);-0,009(0,5)
I-1-515: HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 370,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,699(11,2);8,987(16,0);8,974(9,5);8,972(9,4);8,961(9,0);8,494(10,4);8,488(12,7);8,386(9,4);8,379(11,4);8,294(3,6);8,287(3,8);8,273(4,1);8,266(7,3);8,260(4,8);8,245(4,0);8,239(3,9);7,892(8,9);7,879(9,9);7,000(13,0);6,993(15,1);3,555(0,3);3,550(0,3);3,533(0,4);3,454(0,9);3,446(1,0);3,429(1,3);3,425(1,3);3,360(1310,0);3,352(358,2);3,299(2,3);3,281(1,3);3,272(0,9);3,262(0,8);3,256(0,7);3,237(0,6);3,228(0,7);3,217(0,6);3,207(0,6);3,198(0,5);3,002(1,3);2,719(2,3);2,688(0,5);2,683(0,9);2,679(1,4);2,674(1,2);2,607(0,3);2,601(0,4);2,587(0,9);2,583(0,9);2,579(0,9);2,576(1,1);2,573(1,1);2,549(641,4);2,542(88,5);2,539(84,7);2,528(8,3);2,519(70,7);2,514(154,9);2,510(223,4);2,505(190,9);2,501(128,5);2,462(0,8);2,426(0,4);2,418(0,4);2,395(0,3);2,386(0,3);2,375(2,4);2,370(0,7);2,368(0,7);2,345(0,6);2,341(1,1);2,336(1,5);2,332(1,3);2,327(0,9);1,240(0,6)
I-1-516: HPLC-EM: logP = 2,98; masa (m/z): 423,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,830(14,2);10,109(0,4);8,486(13,4);8,482(13,7);8,418(0,4);8,405(0,4);8,391(12,3);8,387(12,0);8,314(1,5);8,281(3,9);8,277(3,8);8,268(4,3);8,263(7,5);8,259(3,8);8,249(4,0);8,245(3,5);8,232(0,5);8,077(2,7);8,066(3,1);8,051(2,5);6,961(16,0);6,956(15,9);6,200(0,4);6,143(0,5);6,138(0,4);5,755(0,8);3,320(392,5);2,617(1,9);2,613(2,6);2,610(2,1);2,541(0,5);2,523(4,1);2,520(4,8);2,517(4,4);2,508(135,6);2,505(302,4);2,502(429,8);2,499(317,3);2,496(152,4);2,448(0,4);2,389(2,1);2,386(2,7);2,383(2,0);1,523(0,4);1,339(0,4);1,234(0,4);0,096(0,5);0,005(2,4);0,000(97,9);-0,006(4,1);-0,100(0,5);-1,806(0,4)
I-1-517: HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 397,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,351(1,9);8,490(2,7);8,484(2,8);8,365(2,1);8,359(2,1);8,315(1,0);8,297(0,9);8,291(0,8);8,276(1,0);8,270(1,6);8,263(0,9);8,249(0,9);8,242(0,8);6,979(1,4);6,974(1,3);3,871(16,0);3,354(0,7);3,323(551,5);2,679(1,0);2,675(2,1);2,671(2,9);2,666(2,1);2,662(0,9);2,541(5,7);2,524(6,9);2,519(10,6);2,510(162,2);2,506(330,6);2,501(436,1);2,497(310,9);2,492(146,9);2,337(1,0);2,333(2,0);2,328(2,9);2,324(2,1);2,319(1,0);2,288(0,4);2,161(14,8);1,259(0,4);1,234(0,7);0,008(1,1);0,000(36,9);-0,009(1,1)

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-518:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 397,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,474(2,1);8,491(4,4);8,485(4,6);8,369(3,4);8,363(3,4);8,315(1,3);8,299(1,4);8,293(1,3);8,278(1,5);8,271(2,6);8,265(1,3);8,251(1,4);8,244(1,2);7,661(8,1);6,987(2,6);6,981(2,6);4,290(1,7);4,272(5,3);4,254(5,4);4,235(1,8);3,322(718,9);3,279(0,6);2,679(1,4);2,675(3,0);2,670(4,2);2,666(3,1);2,661(1,6);2,541(15,3);2,524(18,3);2,510(235,9);2,506(480,5);2,501(643,1);2,497(474,8);2,492(235,1);2,337(1,4);2,333(3,0);2,328(4,2);2,323(3,1);2,319(1,5);2,288(0,6);1,359(7,2);1,341(16,0);1,323(7,0);1,298(0,4);1,258(0,5);1,233(1,0);0,008(1,8);0,000(52,7);-0,009(2,1)</p>
I-1-519:
<p>HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 413,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,387(2,0);8,490(2,9);8,484(3,1);8,360(2,3);8,354(2,3);8,315(0,5);8,297(0,9);8,291(0,9);8,276(1,0);8,270(1,8);8,264(0,9);8,249(1,0);8,243(0,9);6,978(1,6);6,973(1,6);4,223(1,0);4,205(3,3);4,187(3,3);4,169(1,1);3,359(0,5);3,325(474,0);3,295(0,7);2,675(1,1);2,671(1,6);2,666(1,2);2,541(5,2);2,524(3,6);2,511(88,2);2,506(182,2);2,502(243,4);2,497(178,3);2,493(87,5);2,333(1,2);2,329(1,6);2,324(1,2);2,173(16,0);1,338(4,4);1,320(9,8);1,302(4,4);1,235(0,5);0,008(0,4);0,000(11,8);-0,008(0,4)</p>
I-1-520:
<p>HPLC-EM: logP = 2,15; masa (m/z): 385,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,367(2,6);8,479(2,4);8,473(2,5);8,334(2,2);8,327(2,3);8,316(0,6);8,289(0,8);8,283(0,7);8,268(0,8);8,262(1,5);8,255(0,8);8,241(0,8);8,234(0,7);8,119(5,3);6,930(2,5);6,924(2,4);3,937(16,0);3,323(139,8);2,671(1,4);2,666(1,0);2,541(0,8);2,506(166,2);2,502(211,3);2,497(153,0);2,328(1,3);2,324(1,0);0,146(0,6);0,008(5,5);0,000(141,0);-0,009(5,4);-0,150(0,6)</p>
I-1-521:
<p>HPLC-EM: logP = 2,23; masa (m/z): 385,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,435(1,6);8,491(2,5);8,485(2,7);8,373(2,0);8,367(2,1);8,314(0,8);8,297(0,7);8,291(0,7);8,276(0,8);8,270(1,5);8,264(0,8);8,249(0,8);8,243(0,7);7,648(4,6);6,982(1,5);3,937(16,0);3,330(1166,4);2,675(2,0);2,671(2,7);2,667(2,0);2,541(6,1);2,524(7,5);2,511(151,5);2,506(301,2);2,502(394,8);2,497(286,7);2,493(139,0);2,333(1,9);2,329(2,6);2,324(1,9);2,290(0,3);1,258(0,4);1,233(0,7);0,000(8,1)</p>
I-1-522:
<p>HPLC-EM: logP = 3,19; masa (m/z): 451,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,777(3,2);8,497(3,4);8,491(3,6);8,401(3,0);8,395(3,0);8,315(1,5);8,304(1,1);8,298(1,0);8,283(1,1);8,277(1,9);8,271(1,0);8,256(1,1);8,250(0,9);6,998(3,4);6,991(3,3);4,022(16,0);3,406(0,4);3,374(0,7);3,324(1094,0);3,281(0,6);2,680(1,4);2,675(3,0);2,671(4,1);2,666(3,0);2,662(1,4);2,541(10,2);2,524(10,2);2,519(16,1);2,511(233,2);2,506(473,3);2,502(624,0);2,497(448,3);2,493(212,8);2,338(1,4);2,333(2,9);2,328(4,0);2,324(2,9);2,320(1,4);2,289(0,6);1,298(0,4);1,259(0,6);1,235(1,4);0,008(1,1);0,000(36,8);-0,008(1,2)</p>
I-1-523:
<p>HPLC-EM: logP = 3,18; masa (m/z): 399,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,849(3,1);8,478(3,3);8,472(3,5);8,326(2,8);8,320(2,8);8,284(1,0);8,278(0,9);8,263(1,1);8,256(1,9);8,250(1,0);8,235(1,0);8,229(0,9);6,950(2,3);6,943(2,3);5,757(1,6);3,327(126,0);2,675(0,6);2,671(0,9);2,667(0,7);2,510(54,2);2,506(108,6);2,502(143,0);2,498(104,2);2,493(52,0);2,400(16,0);2,333(0,7);2,329(0,9);2,324(0,7);2,251(15,4);2,233(0,6);1,351(0,3);1,259(0,4);1,234(0,7);0,008(1,3);0,000(31,0);-0,008(1,3)</p>
I-1-524:
<p>HPLC-EM: logP = 2,30; masa (m/z): 384,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,223(11,1);8,483(12,1);8,477(12,8);8,339(10,6);8,332(10,6);8,316(0,7);8,288(3,6);8,282(3,3);8,267(3,9);8,261(6,8);8,255(3,8);8,240(16,0);8,232(14,5);7,776(14,7);7,768(14,1);6,978(7,5);6,972(7,5);5,757(4,0);3,328(283,1);3,304(0,8);2,676(1,4);2,671(1,8);2,542(0,9);2,507(223,5);2,502(289,7);2,498(210,9);2,440(0,3);2,333(1,3);2,329(1,8);1,235(6,3);0,853(0,6);0,147(0,3);0,008(2,6);0,000(66,7);-0,008(2,8)</p>
I-1-525:
<p>HPLC-EM: logP = 2,84; masa (m/z): 389,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,735(2,7);8,495(3,8);8,489(3,8);8,384(3,0);8,378(2,9);8,315(0,6);8,304(1,1);8,298(1,0);8,283(1,2);8,277(2,0);8,271(1,1);8,256(1,1);8,250(1,0);7,984(1,2);7,840(2,8);7,696(1,4);6,970(2,9);6,964(2,8);3,388(0,5);3,328(805,5);2,675(1,4);2,671(1,9);2,666(1,4);2,541(8,2);2,510(116,4);2,506(221,4);2,502(286,3);2,497(208,7);2,493(101,9);2,333(1,4);2,329(1,8);2,324(1,4);2,290(0,4);2,269(16,0);1,234(0,6);0,000(8,1)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-526:
<p>HPLC-EM: logP = 2,42; masa (m/z): 353,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,387(3,9);8,481(3,9);8,475(4,1);8,338(3,4);8,331(3,4);8,316(0,6);8,291(1,3);8,285(1,2);8,270(1,4);8,264(2,5);8,258(1,3);8,243(1,3);8,237(1,2);8,183(10,3);6,941(3,9);6,934(3,8);4,230(1,9);4,211(6,1);4,193(6,2);4,175(2,0);3,323(310,6);2,680(0,6);2,675(1,2);2,671(1,7);2,666(1,2);2,662(0,6);2,541(4,0);2,524(3,9);2,519(6,1);2,511(94,7);2,506(194,4);2,502(257,6);2,497(184,0);2,493(86,8);2,337(0,6);2,333(1,2);2,328(1,7);2,324(1,2);2,319(0,5);1,453(7,3);1,435(16,0);1,417(7,2);1,234(0,5);0,008(0,6);0,000(21,0);-0,009(0,7)</p>
I-1-527:
<p>HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 367,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,354(2,2);8,490(2,8);8,484(3,0);8,361(2,3);8,355(2,2);8,297(0,9);8,290(0,8);8,276(1,0);8,270(1,7);8,263(0,9);8,249(0,9);8,242(0,8);6,975(1,4);6,971(1,4);4,236(1,0);4,218(3,3);4,200(3,4);4,182(1,1);3,376(0,4);3,331(300,3);2,676(0,4);2,671(0,6);2,667(0,5);2,542(2,8);2,525(1,5);2,511(35,2);2,507(70,9);2,502(93,4);2,498(67,7);2,493(32,8);2,334(0,5);2,329(0,6);2,325(0,5);2,177(16,0);1,339(4,3);1,321(9,7);1,303(4,3);0,000(1,8)</p>
I-1-528:
<p>HPLC-EM: logP = 3,11; masa (m/z): 412,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,011(3,1);8,501(2,9);8,495(3,0);8,416(2,6);8,409(2,6);8,315(0,4);8,311(0,9);8,305(0,8);8,290(0,9);8,284(1,6);8,278(0,9);8,263(0,9);8,257(0,8);7,007(3,4);7,001(3,4);4,901(0,4);4,885(1,1);4,868(1,6);4,852(1,2);4,835(0,4);3,324(142,5);2,995(2,2);2,676(0,5);2,671(0,7);2,667(0,5);2,541(90,6);2,524(1,6);2,520(2,4);2,511(38,9);2,507(80,6);2,502(107,3);2,497(77,0);2,493(36,5);2,368(0,3);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);1,478(16,0);1,462(16,0);1,235(0,4);0,000(8,1)</p>
I-1-529:
<p>HPLC-EM: logP = 2,23; masa (m/z): 339,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,413(1,4);8,492(2,5);8,486(2,5);8,374(1,9);8,368(1,9);8,300(0,8);8,294(0,7);8,279(0,8);8,273(1,4);8,267(0,8);8,252(0,8);8,246(0,7);7,658(4,7);6,985(1,2);6,980(1,1);3,939(16,0);3,322(85,9);2,675(0,5);2,671(0,6);2,666(0,5);2,541(2,1);2,524(1,8);2,511(38,7);2,506(76,8);2,502(100,6);2,497(71,7);2,492(33,8);2,333(0,5);2,328(0,6);2,324(0,5);0,008(0,3);0,000(8,8)</p>
I-1-530:
<p>HPLC-EM: logP = 2,50; masa (m/z): 384,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,918(0,7);11,103(2,4);8,500(0,7);8,490(2,4);8,484(2,5);8,414(0,6);8,408(0,6);8,361(2,0);8,354(2,0);8,315(0,8);8,300(0,8);8,294(0,8);8,284(0,5);8,279(1,0);8,273(1,5);8,267(0,8);8,252(0,8);8,246(0,7);7,001(0,7);6,995(0,7);6,948(1,8);6,941(1,8);5,756(0,8);4,242(16,0);4,075(4,0);3,322(231,2);2,675(1,4);2,670(2,0);2,666(1,5);2,541(3,6);2,524(8,8);2,510(108,9);2,506(219,9);2,501(292,2);2,497(214,6);2,493(105,6);2,333(1,4);2,328(1,9);2,324(1,4);1,233(0,5);0,146(0,7);0,008(6,7);0,000(170,1);-0,009(6,2);-0,150(0,7)</p>
I-1-531:
<p>HPLC-EM: logP = 3,42; masa (m/z): 381,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,334(1,3);8,489(2,6);8,483(2,7);8,365(2,1);8,359(2,1);8,315(0,6);8,297(0,8);8,291(0,7);8,276(0,9);8,270(1,5);8,263(0,8);8,249(0,8);8,242(0,7);6,974(1,3);3,882(16,0);3,323(324,1);2,675(1,4);2,670(2,0);2,666(1,5);2,541(4,7);2,524(7,6);2,519(7,7);2,510(108,7);2,506(224,1);2,501(296,3);2,497(215,9);2,493(105,2);2,337(0,6);2,333(1,4);2,328(1,9);2,324(1,4);1,656(1,3);1,637(2,4);1,619(2,4);1,600(1,3);1,234(0,6);0,947(3,8);0,929(7,8);0,911(3,5);0,008(0,8);0,000(26,4);-0,009(0,9)</p>
I-1-532:
<p>HPLC-EM: logP = 3,09; masa (m/z): 381,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,274(2,5);8,479(2,4);8,473(2,5);8,332(2,1);8,326(2,1);8,316(0,6);8,289(0,8);8,283(0,7);8,268(0,8);8,262(1,4);8,255(0,8);8,241(0,8);8,234(0,7);6,929(2,5);6,923(2,5);3,897(16,0);3,324(194,2);2,715(1,7);2,696(2,9);2,677(2,5);2,671(1,6);2,666(1,1);2,541(0,8);2,524(3,6);2,511(79,5);2,506(158,1);2,502(205,3);2,497(146,8);2,493(70,2);2,333(1,0);2,328(1,3);2,324(1,0);1,617(1,1);1,598(2,0);1,580(2,0);1,561(1,1);0,946(3,6);0,928(7,4);0,910(3,2);0,146(0,6);0,008(5,3);0,000(136,9);-0,008(4,9);-0,150(0,6)</p>
I-1-533:
<p>HPLC-EM: logP = 2,85; masa (m/z): 367,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,389(5,3);8,481(5,3);8,475(5,5);8,341(4,7);8,335(4,7);8,318(0,4);8,292(1,6);8,286(1,4);8,271(1,7);8,265(2,9);8,259(1,5);8,244(1,5);8,238(1,4);8,180(12,1);6,942(4,7);6,936(4,7);5,758(0,4);4,146(4,1);4,128(8,1);4,111(4,1);3,328(43,9);2,672(0,4);2,508(47,6);2,503(61,7);2,499(44,8);2,330(0,4);1,905(0,5);1,887(2,5);1,869(5,0);1,851(5,1);1,833(2,6);1,815(0,6);0,886(0,3);0,874(7,8);0,856(16,0);0,837(7,2);0,008(0,6);0,000(13,7)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-534: HPLC-EM: logP = 2,98; masa (m/z): 367,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,326(1,9);8,490(2,5);8,484(2,6);8,365(1,9);8,358(1,8);8,316(0,5);8,298(0,9);8,292(0,8);8,277(0,9);8,271(1,6);8,264(0,8);8,250(0,9);8,243(0,8);6,975(1,1);6,970(1,1);3,883(16,0);3,322(194,5);2,680(0,4);2,675(0,9);2,671(1,2);2,666(0,9);2,661(0,4);2,597(1,1);2,578(3,6);2,559(3,7);2,541(5,8);2,524(2,8);2,519(4,6);2,511(69,3);2,506(141,5);2,502(186,1);2,497(131,7);2,492(61,0);2,338(0,4);2,333(0,9);2,328(1,2);2,324(0,9);2,319(0,4);1,235(0,5);1,209(4,4);1,190(9,6);1,172(4,2);0,008(0,5);0,000(17,2);-0,009(0,5)
I-1-535: HPLC-EM: logP = 3,19; masa (m/z): 448,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 12,285(3,4);8,505(3,6);8,499(3,9);8,435(3,4);8,428(3,4);8,315(1,6);8,309(1,0);8,294(1,2);8,288(2,0);8,282(1,1);8,267(1,1);8,261(1,1);7,011(3,1);7,005(3,1);4,137(16,0);3,329(1158,1);2,995(1,5);2,676(1,7);2,671(2,3);2,667(1,6);2,541(57,7);2,524(6,6);2,511(130,2);2,507(257,5);2,502(336,2);2,497(239,4);2,493(112,6);2,333(1,6);2,329(2,2);2,324(1,6);2,290(0,3);1,298(0,3);1,259(0,4);1,235(1,4);0,000(6,8)
I-1-536: HPLC-EM: logP = 2,76; masa (m/z): 398,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 12,250(1,6);8,505(3,6);8,499(3,9);8,432(3,3);8,425(3,4);8,315(1,9);8,310(1,1);8,295(1,1);8,288(2,0);8,282(1,1);8,267(1,1);8,261(1,0);7,010(2,8);7,003(2,9);4,124(16,0);3,381(0,9);3,329(1809,3);3,271(0,9);3,257(0,7);3,216(0,4);2,676(2,7);2,671(3,7);2,667(2,8);2,541(10,1);2,524(9,7);2,511(207,6);2,507(421,9);2,502(559,4);2,497(405,9);2,493(196,3);2,333(2,7);2,329(3,7);2,324(2,7);2,290(0,5);1,298(0,5);1,259(0,7);1,235(1,3);0,000(14,8);-0,008(0,4)
I-1-537: HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 349,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,856(7,5);8,494(15,3);8,488(16,0);8,384(13,3);8,383(13,2);8,378(13,4);8,316(1,1);8,303(5,2);8,297(4,7);8,282(5,5);8,276(9,6);8,270(5,0);8,255(5,2);8,249(4,7);6,995(8,0);6,989(7,8);5,757(3,7);3,357(0,6);3,322(480,7);2,680(3,2);2,675(4,6);2,671(6,6);2,666(6,7);2,661(4,2);2,646(5,5);2,634(3,4);2,626(3,2);2,613(1,7);2,593(0,5);2,582(0,5);2,576(0,6);2,541(2,5);2,524(16,2);2,519(25,2);2,511(297,1);2,506(593,5);2,502(785,5);2,497(567,9);2,492(269,0);2,338(1,8);2,333(3,8);2,328(5,2);2,324(3,7);2,319(1,7);1,351(0,6);1,335(1,8);1,298(1,3);1,259(2,0);1,249(2,9);1,244(2,9);1,231(8,5);1,224(14,4);1,218(8,7);1,210(7,4);1,203(14,7);1,196(12,0);1,189(13,2);1,183(15,0);1,177(15,0);1,171(8,9);1,157(1,9);1,147(1,1);0,146(0,9);0,008(7,5);0,000(225,1);-0,009(7,0);-0,150(0,9)
I-1-538: HPLC-EM: logP = 2,03; masa (m/z): 323,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,162(2,5);8,489(3,1);8,483(3,3);8,367(2,7);8,361(2,7);8,315(0,4);8,299(1,0);8,293(0,9);8,278(1,1);8,272(1,9);8,266(1,0);8,251(1,0);8,245(0,9);7,620(3,3);7,609(3,3);6,965(2,7);6,958(2,7);3,968(16,0);3,327(374,8);3,303(0,7);2,676(0,8);2,671(1,1);2,667(0,8);2,541(2,3);2,524(3,0);2,511(61,7);2,507(122,4);2,502(159,4);2,498(113,9);2,493(54,1);2,333(0,7);2,329(1,0);2,324(0,7);2,320(0,3);0,008(0,4);0,000(12,8);-0,009(0,4)
I-1-539: HPLC-EM: logP = 3,28; masa (m/z): 473,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,439(2,3);8,491(2,7);8,485(3,1);8,363(2,1);8,357(2,3);8,314(0,8);8,296(0,8);8,290(0,8);8,275(0,9);8,268(1,6);8,263(0,9);8,248(0,9);8,241(0,8);7,615(6,2);6,975(1,9);6,969(1,9);4,085(3,4);4,066(3,5);3,420(0,4);3,330(1398,6);3,226(0,4);2,676(2,3);2,671(3,1);2,667(2,3);2,541(11,4);2,524(7,5);2,511(168,6);2,507(341,8);2,502(452,0);2,498(328,4);2,494(161,0);2,333(2,1);2,329(2,9);2,325(2,1);2,290(0,4);2,090(0,4);2,072(0,8);2,055(1,0);2,038(0,8);2,021(0,4);1,298(0,3);1,258(0,4);1,235(1,4);0,815(16,0);0,799(15,5);0,000(8,5)
I-1-540: HPLC-EM: logP = 2,20; masa (m/z): 431,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,393(1,2);8,493(2,8);8,486(3,0);8,372(2,1);8,365(2,2);8,315(1,3);8,297(0,9);8,291(0,8);8,276(0,9);8,270(1,6);8,264(0,9);8,249(0,9);8,243(0,8);7,599(5,3);6,990(1,5);6,984(1,5);3,939(16,0);3,323(791,9);2,675(3,1);2,671(4,2);2,666(3,2);2,541(8,9);2,524(11,2);2,511(241,7);2,506(488,2);2,502(644,7);2,497(467,3);2,493(229,9);2,333(3,1);2,328(4,1);2,324(3,0);2,288(0,6);1,298(0,4);1,259(0,5);1,233(1,2);0,008(1,6);0,000(46,7);-0,009(1,6)
I-1-541: HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 459,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,431(3,6);8,492(4,6);8,486(4,9);8,365(3,5);8,359(3,5);8,315(0,4);8,297(1,4);8,291(1,3);8,276(1,5);8,270(2,6);8,264(1,4);8,249(1,4);8,243(1,3);7,611(9,7);6,982(2,8);6,976(2,8);4,218(2,9);4,200(5,7);4,183(3,0);3,359(0,4);3,324(329,0);2,995(0,3);2,675(1,0);2,671(1,4);2,666(1,1);2,662(0,5);2,541(11,2);2,524(3,3);2,511(79,7);2,506(163,6);2,502(218,0);2,497(159,9);2,493(78,7);2,337(0,5);2,333(1,0);2,328(1,4);2,324(1,0);1,785(0,5);1,767(2,2);1,748(4,3);1,731(4,4);1,713(2,3);1,694(0,5);1,235(0,8);0,820(7,5);0,802(16,0);0,783(7,0);0,000(10,5);-0,008(0,4)

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-542:
<p>HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 307,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,909(7,2);8,500(14,3);8,494(14,6);8,388(12,3);8,387(12,9);8,381(12,4);8,380(12,2);8,310(4,6);8,303(4,2);8,289(5,1);8,282(8,6);8,276(4,5);8,261(4,7);8,255(4,2);6,963(16,0);6,956(15,7);5,757(3,1);5,336(0,4);5,325(0,6);5,313(0,3);3,427(0,3);3,396(0,5);3,390(0,6);3,330(776,8);2,710(0,6);2,680(0,9);2,676(1,8);2,671(2,4);2,667(1,7);2,662(0,8);2,547(94,3);2,524(8,4);2,511(137,0);2,507(265,0);2,502(344,8);2,497(250,9);2,493(121,2);2,407(0,5);2,381(0,5);2,338(0,8);2,333(1,6);2,329(2,2);2,324(1,6);2,320(0,7);2,027(0,6);2,009(1,1);1,989(1,1);1,973(0,5);1,454(0,4);1,336(2,3);1,298(1,0);1,258(2,2);1,249(4,7);1,235(5,0);1,187(0,3);1,153(0,3);1,148(0,4);0,870(0,5);0,854(1,6);0,836(0,6);0,008(1,1);0,000(27,2);-0,009(1,0)</p>
I-1-543:
<p>HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 306,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,494(2,0);8,684(4,8);8,496(2,5);8,490(2,7);8,357(2,3);8,351(2,4);8,305(0,7);8,299(0,7);8,284(0,8);8,278(1,4);8,272(0,8);8,257(0,8);8,251(0,7);6,941(2,6);6,935(2,6);3,331(62,7);3,329(60,7);2,672(0,3);2,507(42,4);2,503(54,1);2,498(39,8);2,329(0,3);2,281(16,0);0,000(6,9);-0,008(0,4)</p>
I-1-544:
<p>HPLC-EM: logP = 1,29; masa (m/z): 306,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,678(0,5);8,326(3,3);8,286(2,0);8,280(2,0);8,229(1,8);8,222(1,8);7,725(0,7);7,719(0,7);7,705(0,8);7,699(1,4);7,692(0,7);7,678(0,7);7,672(0,7);6,996(2,4);6,989(2,3);3,973(16,0);2,135(21,1);2,107(0,4);1,964(4,1);1,958(6,2);1,952(26,9);1,946(46,9);1,940(60,9);1,934(41,5);1,927(21,2);1,768(0,4);0,008(1,1);0,000(31,0);-0,009(1,0)</p>
I-1-545:
<p>HPLC-EM: logP = 1,92; masa (m/z): 337,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,690(6,9);9,260(15,6);9,147(16,0);8,494(6,7);8,488(7,1);8,403(6,4);8,397(6,5);8,316(0,9);8,299(2,1);8,292(1,9);8,278(2,2);8,271(3,9);8,265(2,1);8,250(2,1);8,244(2,0);6,995(7,9);6,988(7,9);5,756(1,4);3,324(317,6);2,675(1,7);2,671(2,4);2,666(1,8);2,565(0,8);2,541(1,2);2,524(5,4);2,506(284,6);2,502(372,5);2,497(273,9);2,333(1,8);2,329(2,4);2,324(1,8);1,258(0,4);1,234(0,6);0,146(0,6);0,008(5,0);0,000(142,6);-0,008(5,5);-0,150(0,6)</p>
I-1-546:
<p>HPLC-EM: logP = 2,15; masa (m/z): 323,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,269(1,9);8,496(2,2);8,490(2,3);8,377(1,9);8,370(1,9);8,304(0,7);8,298(0,7);8,283(0,8);8,277(1,4);8,271(0,7);8,256(0,8);8,250(0,7);6,996(1,8);6,990(1,8);3,403(0,8);3,322(72,1);3,033(0,8);2,910(1,1);2,903(16,0);2,891(1,0);2,732(0,7);2,675(0,4);2,671(0,5);2,666(0,4);2,524(1,6);2,511(31,0);2,506(60,5);2,502(78,5);2,497(56,7);2,493(27,5);2,333(0,4);2,329(0,5);2,324(0,4);0,146(0,4);0,008(5,3);0,000(103,4);-0,009(4,1);-0,150(0,5)</p>
I-1-547:
<p>HPLC-EM: logP = 1,37; masa (m/z): 306,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,237(1,0);8,385(1,0);8,379(1,0);8,198(1,5);8,179(1,5);8,167(0,7);8,160(1,2);8,153(1,0);8,146(0,4);8,140(0,3);6,961(1,5);6,942(1,4);6,851(1,1);6,844(1,1);3,313(1,4);3,157(13,5);3,096(0,3);2,725(1,6);2,485(6,8);2,481(8,5);2,477(6,4);1,995(5,6);0,961(0,5);-0,024(0,9)</p>
I-1-548:
<p>HPLC-EM: logP = 2,10; masa (m/z): 321,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 1,76 – 1,82 (m, 2H), 1,98 (s, 3H), 2,31 – 2,34 (m, 2H), 3,94 – 3,97 (m, 2H), 6,88 (d, 1H), 8,21 – 8,26 (m, 2H), 8,46 (d, 1H), 10,15 (s, 1H).</p>
I-1-549:
<p>HPLC-EM: logP = 2,42; masa (m/z): 411,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,425(0,5);11,359(11,9);8,586(0,6);8,580(0,8);8,567(8,5);8,563(9,0);8,555(9,0);8,551(8,7);8,364(8,6);8,360(8,4);8,344(9,2);8,340(8,5);8,218(14,5);8,212(14,1);7,836(6,8);7,817(8,2);7,783(2,4);7,766(6,9);7,747(6,3);7,711(5,6);7,692(16,0);7,673(7,7);7,477(8,9);7,465(8,7);7,457(8,4);7,445(8,3);6,949(0,6);6,943(0,7);6,921(15,7);6,915(15,3);3,327(570,7);3,285(0,4);2,995(0,4);2,711(0,4);2,679(0,9);2,675(1,7);2,671(2,3);2,666(1,7);2,662(0,8);2,541(107,5);2,524(7,5);2,510(143,4);2,506(276,2);2,502(354,1);2,497(253,6);2,493(121,1);2,367(0,5);2,333(1,7);2,328(2,3);2,324(1,6);2,319(0,8);2,074(2,4);1,258(0,4);1,235(0,8);0,008(1,8);0,000(44,9);-0,009(1,5)</p>
I-1-550:
<p>HPLC-EM: logP = 2,34; masa (m/z): 414,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,366(11,2);8,920(6,4);8,918(6,4);8,908(6,4);8,572(8,9);8,568(9,4);8,560(9,3);8,556(9,2);8,369(15,1);8,365(10,2);8,349(16,0);8,345(10,5);8,244(14,2);8,238(14,1);7,804(4,4);7,802(4,5);7,790(4,5);7,783(4,2);7,782(4,1);7,771(4,0);7,770(3,9);7,482(9,8);7,471(9,3);7,462(9,1);7,451(9,1);6,929(15,9);6,922(15,7);3,453(0,3);3,427(0,4);3,420(0,5);3,396(0,8);3,335(1022,8);3,297(0,8);2,680(0,7);2,676(1,5);2,671(2,0);2,667(1,5);2,662(0,7);2,542(85,1);2,525(6,4);2,520(9,9);2,511(117,1);2,507(234,5);2,502(307,5);2,498(219,7);2,493(103,6);2,338(0,7);2,334(1,4);2,329(2,0);2,325(1,4);2,320(0,6);2,074(1,3);1,298(0,3);1,258(0,5);1,235(0,8);0,008(0,3);0,000(10,8);-0,009(0,3)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
<p>I-1-551:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 379,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,650(0,4);11,583(10,1);8,603(0,5);8,597(0,5);8,570(9,0);8,566(9,5);8,559(9,5);8,555(9,3);8,368(9,3);8,364(9,2);8,348(10,1);8,344(9,2);8,237(14,4);8,230(14,2);7,776(0,4);7,609(1,5);7,592(3,4);7,587(2,9);7,575(2,3);7,571(6,1);7,566(2,3);7,554(3,0);7,549(3,6);7,533(1,6);7,484(10,1);7,473(9,6);7,464(9,4);7,453(9,5);7,250(1,7);7,247(2,0);7,240(11,0);7,220(14,6);7,200(8,9);7,192(1,6);6,957(0,5);6,950(0,6);6,931(16,0);6,924(15,8);3,399(0,6);3,379(1,1);3,334(980,8);3,279(0,3);2,712(0,5);2,680(0,7);2,676(1,4);2,671(1,9);2,667(1,4);2,662(0,6);2,541(152,4);2,525(6,2);2,520(9,8);2,511(109,8);2,507(218,6);2,502(285,8);2,498(203,4);2,493(95,2);2,367(0,5);2,338(0,6);2,333(1,4);2,329(1,8);2,324(1,3);2,320(0,6);2,074(1,8);1,258(0,4);1,235(0,6);0,008(0,4);0,000(11,8);-0,009(0,4)</p>
<p>I-1-552:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,31; masa (m/z): 423,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,326(0,5);11,260(12,8);8,586(0,6);8,579(0,8);8,566(8,7);8,562(9,5);8,555(9,2);8,551(9,3);8,362(8,7);8,359(8,9);8,342(9,3);8,339(9,0);8,215(14,7);8,208(14,7);7,773(0,4);7,752(0,4);7,704(8,3);7,701(8,6);7,684(9,7);7,682(9,7);7,548(5,6);7,544(6,7);7,530(9,8);7,525(10,1);7,489(4,9);7,486(5,3);7,476(10,4);7,471(10,5);7,468(11,0);7,465(11,2);7,456(9,5);7,452(6,2);7,449(5,7);7,445(9,2);7,433(0,7);7,422(6,1);7,418(6,2);7,403(7,3);7,398(7,2);7,384(3,4);7,379(3,1);6,969(0,6);6,962(0,6);6,940(16,0);6,934(15,9);3,330(609,4);2,995(0,9);2,711(1,4);2,675(1,3);2,671(1,8);2,666(1,3);2,662(0,7);2,586(0,3);2,541(354,6);2,524(6,4);2,511(101,4);2,506(202,1);2,502(265,6);2,497(194,3);2,493(95,7);2,367(1,4);2,337(0,6);2,333(1,3);2,328(1,7);2,324(1,3);2,320(0,6);2,074(8,2);1,258(0,4);1,235(0,9);0,008(0,0);0,000(23,2);-0,009(0,8)</p>
<p>I-1-553:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,23; masa (m/z): 379,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,344(0,5);11,278(13,1);8,588(0,6);8,581(0,7);8,567(8,9);8,563(9,5);8,555(9,3);8,551(9,3);8,363(9,0);8,359(9,0);8,343(9,7);8,339(9,1);8,216(15,3);8,210(15,1);7,775(0,4);7,754(0,4);7,579(6,9);7,575(7,5);7,561(9,4);7,556(10,3);7,550(6,5);7,533(11,5);7,530(11,9);7,510(4,9);7,506(5,3);7,492(8,8);7,488(7,7);7,477(10,2);7,472(5,9);7,466(10,9);7,457(9,6);7,445(15,3);7,430(8,7);7,427(8,4);7,412(3,2);7,409(3,0);6,972(0,5);6,965(0,6);6,943(16,0);6,937(15,7);3,438(0,3);3,421(0,4);3,413(0,5);3,333(1101,5);3,280(0,4);2,995(0,9);2,711(2,1);2,675(1,8);2,671(2,4);2,666(1,7);2,662(0,9);2,541(484,3);2,524(8,6);2,511(141,2);2,506(277,7);2,502(362,3);2,497(261,9);2,493(126,5);2,367(2,1);2,337(0,8);2,333(1,7);2,329(2,3);2,324(1,7);2,320(0,8);2,074(2,5);1,258(0,4);1,235(0,9);0,008(0,5);0,000(14,9);-0,008(0,5)</p>
<p>I-1-554:</p> <p>HPLC-EM: logP = 2,42; masa (m/z): 471,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,199(7,6);8,585(0,3);8,579(0,4);8,567(5,4);8,563(5,8);8,555(5,7);8,551(5,6);8,363(5,4);8,359(5,4);8,343(5,8);8,339(5,4);8,215(9,0);8,208(8,9);7,923(6,0);7,903(7,0);7,501(0,9);7,499(0,9);7,481(5,6);7,479(6,3);7,475(12,3);7,465(16,0);7,455(6,9);7,444(5,5);7,243(0,4);7,231(2,9);7,223(2,8);7,217(2,8);7,212(3,2);7,209(3,0);7,203(2,5);7,197(2,7);7,189(2,3);6,938(9,8);6,932(9,6);3,328(489,1);2,680(0,6);2,675(1,2);2,671(1,6);2,666(1,2);2,662(0,6);2,541(5,9);2,524(5,0);2,519(7,7);2,511(94,1);2,506(189,5);2,501(249,3);2,497(178,3);2,492(84,3);2,337(0,6);2,333(1,2);2,328(1,6);2,324(1,2);2,319(0,5);2,074(2,3);1,258(0,3);1,235(0,6);0,008(1,1);0,000(36,1);-0,009(1,1)</p>
<p>I-1-555:</p> <p>HPLC-EM: logP = 3,37; masa (m/z): 384,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,405(6,5);11,339(0,5);8,234(3,6);8,227(6,7);8,221(3,6);8,203(0,6);8,197(0,6);7,842(3,9);7,822(4,9);7,789(1,4);7,771(3,9);7,752(5,2);7,730(4,1);7,718(3,7);7,714(3,7);7,709(3,1);7,697(8,6);7,678(4,4);7,616(1,8);7,612(1,9);7,596(4,0);7,579(2,3);7,575(2,1);7,521(0,4);7,518(0,4);7,502(0,5);7,498(0,4);7,401(2,5);7,398(2,5);7,381(4,2);7,378(4,3);7,361(1,9);7,357(1,9);7,282(0,6);6,963(7,5);6,957(7,5);6,927(0,6);6,921(0,6);5,757(16,0);3,813(0,7);3,795(0,7);3,657(0,8);3,325(48,1);2,676(0,4);2,671(0,6);2,667(0,5);2,507(68,9);2,502(87,7);2,498(64,8);2,333(0,4);2,329(0,6);2,324(0,4);1,336(0,6);1,259(0,4);1,250(0,7);1,234(1,0);1,216(1,5);1,199(0,7);0,008(1,7);0,000(31,2);-0,008(1,5)</p>
<p>I-1-556:</p> <p>HPLC-EM: logP = 3,12; masa (m/z): 352,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,624(11,3);11,560(1,0);8,315(0,4);8,252(6,4);8,245(11,9);8,239(6,8);8,210(1,2);8,203(1,1);7,752(3,3);7,749(3,4);7,731(6,9);7,714(4,0);7,710(3,8);7,625(3,2);7,621(3,5);7,615(2,5);7,605(7,6);7,601(6,8);7,594(5,0);7,588(5,6);7,584(5,7);7,577(7,2);7,560(3,7);7,556(3,9);7,540(1,7);7,532(1,0);7,511(1,0);7,405(4,5);7,402(4,4);7,385(7,8);7,382(7,5);7,364(3,7);7,361(3,5);7,307(0,7);7,296(0,3);7,286(1,0);7,265(0,7);7,245(9,9);7,224(16,0);7,204(8,9);6,968(12,9);6,961(13,0);6,933(1,2);6,927(1,1);5,756(1,5);3,819(0,4);3,802(1,2);3,784(1,3);3,766(0,4);3,646(1,3);3,323(181,9);2,671(1,8);2,667(1,4);2,506(221,1);2,502(274,8);2,498(211,3);2,329(1,8);2,324(1,4);1,336(1,1);1,298(0,6);1,259(0,8);1,250(1,2);1,235(0,5);1,223(1,4);1,205(2,8);1,188(1,5);0,146(0,4);0,000(78,6);-0,150(0,4)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-557:
<p>HPLC-EM: logP = 3,31; masa (m/z): 394,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,303(15,1);11,241(1,2);8,316(0,3);8,232(8,0);8,226(14,6);8,219(7,9);8,202(1,6);8,196(1,4);7,751(4,3);7,747(4,6);7,730(9,0);7,709(15,2);7,689(12,2);7,662(0,5);7,644(0,5);7,628(0,4);7,615(4,2);7,611(4,4);7,594(9,1);7,578(5,7);7,574(4,9);7,551(6,6);7,547(7,2);7,532(12,0);7,528(11,9);7,491(6,3);7,475(11,5);7,473(11,6);7,456(6,1);7,454(6,0);7,428(7,2);7,424(7,5);7,409(9,5);7,404(12,0);7,390(4,7);7,382(10,7);7,379(10,2);7,361(4,5);7,358(4,6);7,304(0,8);7,292(0,4);7,283(1,2);7,263(0,6);6,980(16,0);6,974(15,8);6,946(1,5);6,940(1,3);5,757(1,3);3,826(0,5);3,809(1,5);3,791(1,6);3,774(0,5);3,654(1,6);3,324(136,1);2,671(1,8);2,506(212,6);2,502(265,7);2,498(197,4);2,333(1,2);2,329(1,6);1,352(0,7);1,298(0,5);1,259(0,8);1,234(3,1);1,217(3,6);1,199(1,6);1,188(0,3);0,146(0,5);0,000(81,9);-0,150(0,4)</p>
I-1-558:
<p>HPLC-EM: logP = 2,64; masa (m/z): 395,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,483(14,0);11,419(1,4);10,742(0,4);10,678(0,5);8,489(8,8);8,484(9,8);8,477(9,5);8,472(9,4);8,316(0,5);8,251(7,6);8,244(14,3);8,238(7,4);8,215(1,6);8,209(1,6);8,147(0,3);8,140(0,6);8,109(0,6);8,102(0,7);8,002(9,0);7,998(9,1);7,984(10,1);7,979(9,4);7,751(3,9);7,747(4,2);7,729(7,8);7,712(4,6);7,708(4,7);7,623(3,9);7,619(4,1);7,602(9,1);7,599(6,1);7,586(5,4);7,582(5,6);7,572(10,0);7,560(9,6);7,553(9,3);7,541(8,7);7,529(1,1);7,525(1,0);7,508(1,2);7,505(1,1);7,480(0,5);7,476(0,5);7,406(5,3);7,403(5,3);7,386(9,1);7,382(8,9);7,365(4,4);7,362(4,2);7,344(0,4);7,337(0,4);7,316(0,4);7,307(1,0);7,287(1,6);7,271(1,0);7,267(0,8);7,250(0,5);7,186(0,4);6,983(16,0);6,977(15,8);6,956(0,5);6,949(1,7);6,942(1,5);6,836(0,5);6,829(0,5);6,797(0,7);6,791(0,6);5,757(13,4);3,824(0,6);3,806(1,7);3,789(1,8);3,777(0,5);3,771(0,7);3,759(1,0);3,742(1,0);3,651(1,9);3,628(0,5);3,323(238,3);3,288(0,4);2,676(1,8);2,671(2,4);2,667(1,8);2,511(154,4);2,506(289,1);2,502(367,7);2,497(266,1);2,455(1,1);2,439(0,7);2,417(0,8);2,333(1,9);2,329(2,4);2,324(1,7);2,044(3,1);2,038(3,4);1,989(0,4);1,351(0,5);1,336(4,0);1,298(1,6);1,259(2,3);1,250(5,0);1,235(3,2);1,230(3,0);1,212(4,2);1,194(2,8);1,176(2,5);1,158(1,2);0,854(0,4);0,146(0,7);0,008(6,8);0,000(140,6);-0,009(5,2);-0,150(0,6)</p>
I-1-559:
<p>HPLC-EM: logP = 3,30; masa (m/z): 350,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,319(14,4);11,258(0,5);8,316(0,9);8,234(7,7);8,227(14,6);8,221(7,7);8,201(0,7);7,751(3,9);7,747(4,3);7,730(8,1);7,713(4,5);7,709(4,6);7,616(4,1);7,612(4,2);7,595(9,0);7,592(6,1);7,578(12,9);7,564(10,2);7,559(14,1);7,538(1,2,7);7,535(13,6);7,516(5,6);7,512(6,0);7,498(9,8);7,494(8,6);7,478(5,2);7,474(4,4);7,453(7,6);7,450(7,8);7,435(9,6);7,431(9,7);7,416(3,8);7,413(3,8);7,403(5,5);7,399(5,6);7,382(9,1);7,379(9,4);7,362(4,1);7,358(4,2);7,304(0,4);7,292(0,4);7,284(0,5);6,982(16,0);6,976(15,8);6,955(0,4);6,949(0,8);6,942(0,5);5,757(2,5);4,038(0,4);4,020(0,4);3,805(0,6);3,788(0,6);3,651(1,8);3,321(196,8);2,890(1,0);2,731(0,8);2,675(3,0);2,671(4,1);2,666(3,0);2,662(1,5);2,524(12,9);2,510(237,3);2,506(468,1);2,502(612,8);2,497(446,5);2,493(218,2);2,333(2,9);2,328(4,0);2,324(2,9);1,989(1,4);1,398(0,8);1,351(1,2);1,298(0,8);1,259(1,2);1,231(2,3);1,213(1,6);1,196(0,8);1,175(0,8);1,157(0,5);0,146(1,5);0,008(12,2);0,000(323,3);-0,008(10,9);-0,150(1,5)</p>
I-1-560:
<p>HPLC-EM: logP = 3,41; masa (m/z): 435,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,493(3,5);8,735(8,9);8,732(9,0);8,320(8,7);8,316(8,8);8,296(11,0);8,289(11,2);7,803(5,4);7,784(6,7);7,726(1,4);7,716(1,4);7,707(5,2);7,693(7,5);7,690(7,1);7,679(16,0);7,662(6,3);7,659(6,0);7,657(6,0);7,642(1,7);7,639(1,7);7,065(11,6);7,058(11,6);5,448(2,1);2,154(32,6);2,108(0,4);1,972(0,4);1,965(2,5);1,959(3,2);1,953(23,3);1,947(43,6);1,941(60,9);1,935(42,8);1,929(22,5);1,770(0,4);1,372(4,3);1,340(0,4);1,285(0,6);1,276(4,8);0,008(0,6);0,000(17,9);-0,009(0,8)</p>
I-1-561:
<p>HPLC-EM: logP = 3,30; masa (m/z): 401,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,455(4,7);8,734(11,2);8,732(11,3);8,321(10,4);8,317(10,4);8,299(11,4);8,292(11,5);7,592(6,4);7,576(7,4);7,573(7,6);7,499(1,8);7,495(3,1);7,475(16,0);7,461(9,3);7,456(8,4);7,441(3,3);7,436(3,0);7,426(0,5);7,414(7,0);7,408(6,0);7,395(7,2);7,390(6,7);7,378(3,6);7,373(3,3);7,089(11,0);7,083(11,0);5,448(1,8);2,144(27,6);2,115(0,4);2,108(0,6);2,102(0,4);1,965(3,7);1,959(4,4);1,953(34,0);1,947(63,6);1,941(88,7);1,935(61,8);1,929(32,2);1,776(0,4);1,769(0,5);1,763(0,3);1,372(4,6);1,340(0,4);1,285(0,6);1,276(5,0);0,008(0,9);0,000(27,8);-0,009(1,1)</p>
I-1-562:
<p>HPLC-EM: logP = 1,98; masa (m/z): 368,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,547(12,6);8,845(7,5);8,835(7,5);8,536(8,5);8,532(8,8);8,524(8,9);8,521(8,7);8,316(0,8);8,287(15,4);8,281(15,3);8,221(9,6);8,217(13,5);8,201(10,6);8,197(15,0);7,838(6,3);7,826(6,3);7,818(5,9);7,806(5,5);7,556(8,8);7,544(8,5);7,536(8,2);7,524(8,0);6,943(16,0);6,937(15,6);3,322(94,2);2,675(1,7);2,671(2,2);2,667(1,6);2,506(258,7);2,502(327,5);2,497(237,6);2,333(1,6);2,329(2,1);2,324(1,5);2,075(0,5);0,146(0,8);0,008(7,7);0,000(166,2);-0,008(6,4);-0,149(0,8)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-563: HPLC-EM: masa (m/z): 317,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,546(3,9);8,526(2,7);8,522(2,8);8,515(2,9);8,511(2,8);8,214(7,0);8,208(5,0);8,195(3,0);8,191(2,8);7,542(2,8);7,530(2,7);7,522(2,6);7,510(2,5);6,919(4,8);6,913(4,8);6,807(4,5);3,902(1,6);3,347(1,2);3,328(152,1);2,676(0,5);2,671(0,7);2,667(0,5);2,524(22,8);2,511(45,2);2,507(91,4);2,502(119,1);2,498(85,3);2,493(41,2);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);2,238(16,0)
I-1-564: HPLC-EM: logP = 2,12; masa (m/z): 335,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 13,913(0,7);11,602(10,9);8,537(7,9);8,533(7,8);8,525(8,3);8,521(7,8);8,316(0,7);8,283(13,0);8,277(13,0);8,222(8,0);8,218(7,7);8,202(8,6);8,198(7,8);7,608(1,5);7,592(3,5);7,587(3,3);7,571(6,2);7,558(9,3);7,547(9,0);7,538(8,0);7,533(2,4);7,526(7,6);7,239(10,1);7,219(16,0);7,199(9,8);7,178(0,9);6,945(13,7);6,938(13,6);5,756(0,7);3,322(32,0);2,675(1,7);2,671(2,2);2,666(1,5);2,506(269,1);2,502(337,6);2,497(244,0);2,437(0,5);2,333(1,8);2,329(2,2);1,337(0,4);1,299(0,4);1,259(0,5);1,250(0,6);1,234(0,4);1,146(0,3);0,000(2,0)
I-1-565: HPLC-EM: logP = 1,68; masa (m/z): 377,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,458(11,7);8,535(8,6);8,532(9,0);8,524(9,0);8,520(8,8);8,481(8,0);8,476(8,6);8,469(8,5);8,464(8,3);8,315(2,2);8,282(15,0);8,275(14,8);8,220(8,9);8,216(8,8);8,200(9,6);8,196(9,0);8,002(8,2);7,997(8,4);7,983(9,3);7,978(8,7);7,565(9,0);7,555(13,2);7,546(9,9);7,543(10,4);7,535(16,0);7,523(8,7);6,959(15,8);6,953(15,6);3,321(223,6);2,675(3,2);2,671(4,4);2,666(3,2);2,662(1,5);2,524(12,4);2,511(257,8);2,506(517,6);2,502(678,7);2,497(489,0);2,493(234,8);2,337(1,6);2,333(3,3);2,328(4,5);2,324(3,2);0,146(0,7);0,008(5,8);0,000(175,4);-0,008(6,3);-0,150(0,8)
I-1-566: HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 431,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,988(9,2);8,536(8,0);8,532(8,7);8,524(8,6);8,520(8,7);8,316(1,3);8,251(13,5);8,244(13,7);8,222(8,1);8,218(8,3);8,202(8,9);8,198(8,6);7,799(15,0);7,785(16,0);7,554(9,0);7,542(8,8);7,534(8,5);7,522(8,4);7,396(10,0);7,382(9,5);6,939(6,0);6,934(6,0);4,038(0,8);4,020(0,8);3,321(134,1);2,680(1,5);2,675(3,2);2,671(4,4);2,666(3,3);2,662(1,6);2,524(16,2);2,511(257,4);2,506(514,2);2,502(678,5);2,497(492,5);2,493(241,0);2,337(1,6);2,333(3,2);2,328(4,4);2,324(3,2);1,989(3,7);1,236(0,6);1,193(1,0);1,175(2,0);1,157(1,1);0,000(7,8)
I-1-567: HPLC-EM: logP = 3,15; masa (m/z): 386,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,570(11,4);8,542(10,5);8,535(10,7);7,837(5,6);7,819(7,8);7,788(2,0);7,771(5,7);7,752(5,3);7,719(4,9);7,701(13,8);7,683(6,6);7,366(16,0);7,029(11,0);7,022(11,1);4,102(0,4);4,089(0,4);3,326(149,7);3,176(1,4);3,163(1,4);2,699(0,4);2,692(0,4);2,675(0,7);2,671(0,9);2,667(0,7);2,541(57,3);2,532(55,5);2,507(97,5);2,502(130,4);2,498(101,0);2,379(0,3);2,369(0,3);2,333(0,6);2,329(0,9);2,325(0,7);1,233(0,7);1,178(0,5);0,146(0,5);0,008(4,4);0,000(103,4);-0,150(0,5)
I-1-568 ver el Ejemplo de síntesis 36
I-1-569 ver el Ejemplo de síntesis 31
I-1-570 ver el Ejemplo de síntesis 40
I-1-571 ver el Ejemplo de síntesis 33
I-1-572: HPLC-EM: logP = 2,92; masa (m/z): 372,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,595(3,4);8,578(3,2);8,572(3,2);8,322(3,3);8,302(3,4);7,839(1,6);7,820(2,4);7,790(0,6);7,772(1,7);7,753(1,7);7,720(1,5);7,705(3,7);7,686(1,8);7,406(3,3);7,386(3,1);7,047(3,3);7,040(3,3);3,326(4,9);2,595(16,0);2,507(13,0);2,503(16,3);2,499(11,9);0,007(0,6);0,000(11,1);-0,001(10,5);-0,008(0,5)
I-1-573 ver el Ejemplo de síntesis 39
I-1-574 ver el Ejemplo de síntesis 43
I-1-575 ver el Ejemplo de síntesis 25
I-1-576: HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 476,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 9,540(1,7);8,293(4,0);8,287(3,9);7,929(4,7);7,917(5,4);7,777(2,3);7,769(4,2);7,759(7,3);7,747(2,9);7,691(0,6);7,674(1,8);7,658(3,8);7,654(3,9);7,648(3,9);7,636(4,7);7,623(1,9);7,050(4,8);7,043(4,6);5,447(16,0);2,156(18,3);1,972(1,1);1,964(1,0);1,958(2,3);1,953(9,0);1,946(15,6);1,940(19,8);1,934(13,8);1,928(7,1);1,203(0,5);1,172(0,4);1,06(0,4);0,000(23,8)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-577:
<p>HPLC-EM: logP = 2,33; masa (m/z): 368,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,571(13,2);8,482(8,3);8,478(9,1);8,470(9,0);8,465(8,9);8,446(13,0);8,439(12,8);8,428(0,5);8,420(0,3);8,384(5,7);8,381(9,4);8,372(6,1);8,370(9,5);8,233(8,7);8,228(8,7);8,214(9,6);8,210(8,8);8,030(4,6);8,027(4,5);8,010(5,2);8,006(5,1);8,001(4,9);7,998(4,8);7,981(4,9);7,978(4,8);7,555(9,0);7,543(9,0);7,536(8,9);7,524(10,1);7,518(6,2);7,515(5,6);7,506(8,5);7,497(4,9);7,494(4,9);7,486(4,1);7,012(16,0);7,006(15,7);4,118(0,4);4,104(1,1);4,091(1,2);4,078(0,4);3,330(51,8);3,179(5,5);3,166(5,4);2,679(0,4);2,674(0,5);2,545(0,4);2,528(1,4);2,514(30,4);2,510(6,1);2,505(80,3);2,501(56,9);2,496(26,4);2,337(0,4);2,332(0,5);2,327(0,4);1,232(0,4);1,160(0,4);1,142(0,8);1,125(0,4);1,025(0,4);1,007(0,8);0,989(0,4);0,146(0,5);0,015(0,4);0,008(4,2);0,000(114,1);-0,009(3,7);-0,150(0,5)</p>
I-1-578:
<p>HPLC-EM: logP = 1,57; masa (m/z): 363,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,543(12,3);8,482(9,1);8,477(9,8);8,470(9,8);8,465(9,5);8,441(12,7);8,434(12,6);8,380(5,5);8,377(9,2);8,374(5,6);8,368(5,9);8,365(9,3);8,316(1,5);8,027(4,6);8,023(4,6);8,006(6,3);8,003(13,9);7,998(14,0);7,995(5,9);7,984(10,6);7,979(11,7);7,974(5,3);7,565(10,0);7,553(9,7);7,546(9,4);7,534(9,3);7,522(5,0);7,514(5,6);7,511(5,3);7,502(8,5);7,493(4,7);7,490(4,7);7,482(4,1);7,007(16,0);7,000(15,9);5,756(6,5);3,365(0,4);3,322(277,4);3,102(0,4);3,083(0,4);2,675(3,4);2,671(4,6);2,666(3,3);2,662(1,6);2,524(14,5);2,511(265,0);2,506(529,4);2,502(695,0);2,497(498,0);2,493(238,6);2,337(1,6);2,333(3,3);2,328(4,5);2,324(3,2);2,319(1,5);1,790(1,0);1,236(0,5);0,146(0,8);0,008(7,6);0,000(221,1);-0,009(7,8);-0,150(0,9)</p>
I-1-579:
<p>HPLC-EM: logP = 1,53; masa (m/z): 318,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,529(4,4);8,463(9,7);8,459(9,8);8,451(10,4);8,447(9,6);8,313(15,0);8,307(15,8);8,298(12,4);8,286(11,8);7,969(9,9);7,965(9,5);7,950(10,8);7,946(10,0);7,750(5,7);7,748(5,1);7,729(6,8);7,727(6,6);7,722(6,4);7,701(6,3);7,698(5,6);7,429(10,0);7,417(10,4);7,410(10,0);7,398(9,3);7,389(5,9);7,380(7,5);7,378(6,6);7,369(9,9);7,360(6,6);7,357(5,9);7,349(4,7);7,049(16,0);7,042(15,8);5,448(2,6);2,149(37,6);2,114(0,4);2,108(0,4);1,965(2,4);1,953(23,6);1,947(4,3,1);1,941(59,2);1,934(41,4);1,928(21,5);1,769(0,3);0,000(4,0)</p>
I-1-580:
<p>HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 369,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 14,226(0,5);11,712(9,7);8,441(9,1);8,434(9,2);8,377(6,5);8,366(6,6);8,026(3,2);8,023(3,2);8,005(3,6);8,002(3,7);7,997(3,5);7,994(3,4);7,976(3,5);7,973(3,4);7,772(0,8);7,753(2,6);7,744(1,9);7,734(5,4);7,719(8,8);7,697(16,0);7,680(4,8);7,675(4,5);7,523(3,1);7,514(3,9);7,512(3,8);7,502(5,5);7,493(3,4);7,491(3,4);7,482(2,7);6,979(10,5);6,972(10,5);5,757(1,1);3,324(6,8);2,672(0,8);2,507(108,0);2,503(137,3);2,498(103,0);2,329(0,9);0,000(0,8)</p>
I-1-581:
<p>HPLC-EM: logP = 2,30; masa (m/z): 431,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,070(6,4);8,405(5,8);8,399(5,9);8,377(4,8);8,368(3,2);8,365(4,9);8,025(2,5);8,021(2,5);8,004(2,8);8,001(2,7);7,996(2,6);7,992(2,5);7,975(2,7);7,972(2,6);7,801(9,5);7,794(0,7);7,787(10,1);7,517(2,5);7,509(3,0);7,506(2,8);7,497(4,4);7,488(2,5);7,485(2,5);7,477(2,1);7,416(7,3);7,402(6,9);7,001(3,8);6,995(3,8);5,757(0,6);4,117(1,2);4,104(3,4);4,091(3,5);4,078(1,2);3,331(12,5);3,179(16,0);3,166(15,4);2,527(0,8);2,514(11,5);2,509(22,3);2,505(29,0);2,500(21,1);2,496(10,3);0,000(1,6)</p>
I-1-582:
<p>HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 398,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,989(9,3);8,406(8,9);8,400(8,9);8,382(4,2);8,379(7,0);8,376(4,3);8,370(4,4);8,367(7,1);8,365(4,1);8,031(3,4);8,028(3,4);8,011(3,8);8,007(3,8);8,003(3,6);7,999(3,5);7,982(3,7);7,979(3,6);7,938(14,8);7,934(14,8);7,523(3,8);7,514(4,3);7,511(4,0);7,502(6,5);7,493(3,5);7,490(3,6);7,482(3,1);6,953(11,7);6,946(11,6);6,921(16,0);6,917(15,5);5,761(3,4);3,339(7,6);2,531(0,5);2,518(9,6);2,513(19,2);2,509(25,2);2,504(18,1);2,500(8,6);0,000(5,2)</p>
I-1-583 ver el Ejemplo de síntesis 42
I-1-584 ver el Ejemplo de síntesis 30
I-1-585 ver el Ejemplo de síntesis 37
I-1-586 ver el Ejemplo de síntesis 38
I-1-587:
<p>HPLC-EM: logP = 2,91; masa (m/z): 444,8 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,489(2,0);8,471(1,9);8,467(2,0);8,411(1,8);8,404(1,7);8,372(1,2);8,367(1,1);8,345(1,2);8,340(1,1);7,836(1,0);7,817(1,4);7,785(0,4);7,767(1,1);7,748(1,0);7,715(0,9);7,697(2,5);7,679(1,2);7,009(2,1);7,003(2,1);5,757(16,0);3,30(1,8);2,509(5,8);2,505(7,3);2,500(5,3);1,397(0,9);0,000(3,0)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-588:
HPLC-EM: logP = 2,60; masa (m/z): 448,8 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,712(6,0);8,477(6,3);8,472(7,1);8,432(5,7);8,425(5,7);8,383(4,4);8,378(3,9);8,356(4,3);8,350(4,0);7,612(0,8);7,596(1,7);7,591(1,5);7,579(1,2);7,574(3,2);7,570(1,2);7,558(1,6);7,553(1,9);7,537(0,8);7,247(1,0);7,240(5,6);7,220(7,8);7,199(4,7);7,192(1,0);7,010(7,4);7,003(7,4);5,757(16,0);4,101(0,4);4,088(0,5);3,324(30,2);3,176(1,9);3,163(2,0);2,676(0,4);2,672(0,5);2,667(0,4);2,525(1,7);2,520(2,6);2,512(29,9);2,507(59,8);2,503(78,4);2,498(56,2);2,494(26,7);2,334(0,4);2,329(0,5);2,325(0,4);1,145(0,3);0,000(2,4)
I-1-589:
HPLC-EM: logP = 2,78; masa (m/z): 351,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,387(6,8);8,470(6,6);8,465(6,6);8,408(6,1);8,402(5,8);8,371(4,0);8,366(3,4);8,344(3,9);8,339(3,4);7,703(4,6);7,683(5,2);7,553(3,0);7,548(3,1);7,534(5,0);7,530(4,7);7,489(2,6);7,470(5,1);7,452(2,8);7,425(3,2);7,420(2,9);7,405(3,9);7,401(3,5);7,386(1,7);7,382(1,4);7,027(7,0);7,020(6,6);5,758(16,0);3,328(4,0);2,508(21,8);2,504(26,0);2,500(18,4);0,000(6,3)
I-1-590:
HPLC-EM: logP = 2,74; masa (m/z): 442,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,404(5,5);8,470(5,5);8,465(5,9);8,410(4,9);8,403(4,8);8,372(3,5);8,367(3,1);8,345(3,5);8,340(3,2);7,585(2,7);7,581(2,9);7,566(3,6);7,562(3,7);7,552(2,1);7,549(2,4);7,532(4,8);7,529(4,9);7,513(2,2);7,508(2,3);7,495(3,7);7,490(3,1);7,475(2,1);7,470(1,7);7,448(2,9);7,445(2,8);7,430(3,7);7,427(3,5);7,412(1,4);7,408(1,3);7,030(5,9);7,023(5,8);5,758(16,0);3,329(4,6);2,526(0,5);2,513(8,9);2,509(17,3);2,504(22,2);2,500(15,8);2,495(7,5);1,231(0,4);0,000(6,2)
I-1-591:
HPLC-EM: logP = 2,98; masa (m/z): 353,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,746(4,7);8,475(4,8);8,470(5,4);8,433(4,3);8,426(4,3);8,377(3,2);8,372(2,9);8,350(3,2);8,344(3,0);7,778(0,4);7,758(1,1);7,748(0,7);7,738(2,3);7,723(3,2);7,700(7,0);7,683(2,0);7,678(1,9);7,005(5,5);6,998(5,5);5,759(16,0);3,33(3,1);2,529(0,3);2,516(5,9);2,511(11,7);2,507(15,3);2,502(11,1);2,498(5,4);1,992(0,5);1,396(2,0);0,000(0,5)
I-1-592:
HPLC-EM: logP = 2,99; masa (m/z): 394,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,093(6,2);8,475(6,3);8,470(6,8);8,393(5,3);8,386(5,5);8,379(4,2);8,374(3,6);8,352(3,9);8,347(3,6);7,802(7,6);7,788(8,0);7,410(6,5);7,396(6,1);7,016(3,7);7,010(3,6);5,758(16,0);3,326(9,6);2,512(16,3);2,508(31,2);2,503(40,2);2,499(29,1);0,008(0,6);0,000(14,7);-0,008(0,5)
I-1-593:
HPLC-EM: logP = 2,89; masa (m/z): 385,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,323(5,9);8,471(5,6);8,466(6,1);8,407(5,0);8,400(4,9);8,372(3,7);8,367(3,3);8,345(3,6);8,340(3,4);7,921(4,5);7,901(5,0);7,500(0,5);7,479(5,3);7,476(5,8);7,467(10,0);7,457(1,0);7,233(2,0);7,224(1,9);7,219(2,0);7,213(2,3);7,211(2,1);7,204(1,8);7,200(2,0);7,191(1,6);7,024(6,0);7,017(5,9);5,757(16,0);3,326(7,4);2,525(0,7);2,512(12,6);2,507(24,5);2,503(31,7);2,498(22,8);2,494(11,0);0,008(0,6);0,000(14,7);-0,009(0,4)
I-1-594:
HPLC-EM: logP = 2,34; masa (m/z): 359,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 19,999(0,4);11,791(6,4);9,293(16,0);9,239(15,8);9,048(0,5);8,780(0,6);8,756(6,8);8,749(6,8);8,315(2,4);7,850(3,3);7,831(5,5);7,801(1,3);7,783(3,6);7,764(3,7);7,734(3,9);7,722(5,6);7,705(3,3);7,159(6,4);7,151(6,2);5,756(6,5);3,319(151,2);2,675(5,7);2,670(7,7);2,666(5,7);2,540(4,9);2,510(464,4);2,506(895,7);2,501(1158,0);2,497(833,7);2,492(404,2);2,332(5,3);2,328(7,3);2,323(5,3);0,146(1,9);0,008(20,7);0,000(408,1);-0,008(16,0);-0,150(1,8)
I-1-595:
HPLC-EM: logP = 2,03; masa (m/z): 327,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,980(0,5);9,306(1,0);9,248(1,0);8,775(0,5);8,768(0,5);7,262(0,4);7,243(0,6);7,222(0,4);7,165(0,6);7,158(0,6);5,755(16,0);3,321(15,5);2,524(0,5);2,511(12,0);2,506(23,8);2,502(30,9);2,497(22,0);2,493(10,4);0,008(0,5);0,000(13,8);-0,009(0,5)
I-1-596:
HPLC-EM: logP = 2,88; masa (m/z): 351,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,423(2,8);8,528(3,4);8,521(3,3);8,493(2,8);8,486(2,7);7,967(0,9);7,960(0,8);7,947(1,3);7,945(1,4);7,939(1,2);7,937(1,3);7,924(1,1);7,917(1,0);7,847(1,5);7,828(2,0);7,807(1,8);7,797(2,2);7,784(1,7);7,778(1,9);7,775(2,0);7,775(1,5);7,725(1,3);7,707(3,7);7,688(1,8);6,954(3,7);6,948(3,5);4,119(1,3);4,106(3,5);4,093(3,5);4,079(1,2);3,334(16,7);3,179(16,0);3,166(15,0);2,514(7,1);2,509(12,3);2,505(15,2);2,500(10,6);2,496(5,1);0,008(0,9);0,000(10,4);-0,009(0,4)

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-597:
<p>HPLC-EM: logP = 2,32; masa (m/z): 352,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,587(11,2);8,859(6,7);8,847(6,7);8,546(15,5);8,540(15,6);8,500(11,6);8,493(11,9);8,225(6,4);8,206(6,9);7,972(3,4);7,965(3,3);7,950(5,5);7,943(5,4);7,929(4,5);7,922(4,3);7,851(6,0);7,839(6,0);7,832(5,7);7,820(5,4);7,805(7,1);7,796(7,4);7,783(5,6);7,773(5,4);6,959(16,0);6,953(16,0);5,758(1,7);4,102(0,7);4,089(0,7);3,327(36,1);3,178(2,8);3,165(2,7);2,678(0,4);2,673(0,5);2,669(0,4);2,543(0,3);2,526(1,4);2,513(31,1);2,509(63,5);2,504(83,9);2,500(60,4);2,495(29,1);2,335(0,4);2,331(0,5);2,326(0,4);0,008(1,2);0,000(36,5);-0,008(1,3)</p>
I-1-598:
<p>HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 319,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,642(11,7);8,543(14,4);8,537(14,4);8,499(11,7);8,492(11,9);7,974(3,4);7,967(3,3);7,952(5,7);7,945(5,5);7,931(4,6);7,924(4,3);7,811(7,0);7,801(7,3);7,788(5,5);7,779(5,3);7,622(1,5);7,605(3,4);7,601(3,2);7,584(6,3);7,567(3,4);7,563(3,8);7,547(1,7);7,257(2,3);7,251(10,9);7,231(16,0);7,210(9,2);7,203(2,1);6,958(15,5);6,951(15,4);3,324(7,9,5);2,676(0,7);2,672(0,9);2,668(0,7);2,542(0,5);2,525(2,3);2,512(57,2);2,507(111,1);2,503(143,0);2,498(104,4);2,494(52,2);2,334(0,7);2,330(0,9);2,325(0,7);0,008(3,5);0,000(71,0);-0,008(3,5)</p>
I-1-599:
<p>HPLC-EM: logP = 2,78; masa (m/z): 409,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,265(4,0);8,526(4,3);8,520(4,2);8,490(3,7);8,482(3,7);7,967(1,1);7,960(1,1);7,945(2,0);7,934(3,5);7,924(1,7);7,914(3,8);7,810(2,1);7,801(2,2);7,788(1,7);7,778(1,6);7,512(0,3);7,491(3,9);7,488(4,2);7,479(6,9);7,470(0,8);7,244(1,4);7,235(1,4);7,231(1,5);7,222(1,5);7,215(1,3);7,212(1,5);7,202(1,2);6,974(4,6);6,967(4,4);5,757(16,0);3,330(7,3);2,513(5,9);2,509(11,4);2,504(14,7);2,500(10,3);2,495(4,9);0,000(3,6)</p>
I-1-600:
<p>HPLC-EM: logP = 2,13; masa (m/z): 352,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,559(3,9);8,9382(16,0);8,9378(16,0);8,581(4,9);8,575(4,9);7,848(2,2);7,828(2,7);7,796(0,7);7,779(2,1);7,760(1,9);7,725(1,7);7,704(4,7);7,685(2,3);6,999(5,3);6,992(5,3);5,758(2,3);3,327(25,0);2,526(0,6);2,521(0,9);2,512(11,2);2,508(22,5);2,503(29,7);2,499(21,3);2,494(10,0);0,008(0,4);0,000(13,6);-0,009(0,4)</p>
I-1-601:
<p>HPLC-EM: logP = 1,73; masa (m/z): 353,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,734(3,8);8,944(16,0);8,861(1,9);8,859(2,1);8,849(2,0);8,847(2,0);8,598(4,8);8,591(4,8);8,223(1,8);8,221(1,9);8,203(2,1);8,201(2,1);7,854(1,9);7,842(1,9);7,835(1,8);7,823(1,7);6,997(5,5);6,990(5,4);5,757(0,6);3,323(61,1);2,676(0,4);2,671(0,6);2,667(0,4);2,525(1,8);2,520(2,8);2,511(30,7);2,507(61,6);2,502(81,3);2,498(58,4);2,493(27,4);2,334(0,4);2,329(0,5);2,324(0,4);0,000(7,4)</p>
I-1-602:
<p>HPLC-EM: logP = 1,83; masa (m/z): 320,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,776(3,6);8,944(16,0);8,598(5,1);8,591(5,1);7,623(0,5);7,606(1,2);7,601(1,0);7,589(0,8);7,585(2,1);7,581(0,8);7,568(1,1);7,564(1,3);7,547(0,6);7,258(0,7);7,251(3,8);7,231(5,4);7,211(3,1);7,204(0,6);7,000(5,6);6,994(5,5);3,324(29,4);2,672(0,4);2,525(1,3);2,512(20,6);2,507(40,1);2,503(52,3);2,498(38,0);2,494(18,3);2,330(0,3);0,008(0,8);0,000(20,5);-0,009(0,7)</p>
I-1-603:
<p>HPLC-EM: logP = 1,94; masa (m/z): 362,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,446(3,9);8,937(16,0);8,580(4,1);8,573(4,0);7,713(2,6);7,712(2,7);7,694(3,1);7,692(3,1);7,560(1,7);7,556(1,8);7,541(2,9);7,537(2,9);7,499(1,5);7,496(1,6);7,480(3,1);7,478(3,0);7,462(1,6);7,459(1,5);7,434(2,0);7,429(2,0);7,414(2,4);7,410(2,3);7,396(1,1);7,391(1,0);7,017(4,3);7,010(4,2);4,038(0,5);4,020(0,5);3,322(59,5);2,675(0,5);2,671(0,7);2,666(0,5);2,510(43,3);2,506(82,4);2,502(106,7);2,497(78,5);2,493(39,2);2,333(0,6);2,328(0,7);2,324(0,5);1,989(2,3);1,193(0,6);1,175(1,2);1,157(0,6);0,008(0,4);0,000(8,2);-0,008(0,3)</p>
I-1-604:
<p>HPLC-EM: logP = 1,91; masa (m/z): 318,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,469(3,9);8,937(16,0);8,582(4,2);8,576(4,1);7,593(2,1);7,590(2,2);7,575(2,8);7,571(2,8);7,562(1,8);7,559(1,9);7,542(3,9);7,540(3,8);7,522(1,8);7,518(1,8);7,504(3,0);7,500(2,6);7,484(1,6);7,480(1,3);7,458(2,4);7,455(2,3);7,40(3,0);7,437(2,8);7,422(1,2);7,418(1,0);7,022(4,2);7,016(4,1);5,757(10,3);3,324(20,9);2,507(33,6);2,503(42,6);2,498(31,4);0,000(2,0)</p>
I-1-605:
<p>HPLC-EM: logP = 2,05; masa (m/z): 410,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,386(3,8);9,032(1,4);8,936(16,0);8,907(2,2);8,580(3,9);8,573(3,9);7,933(3,2);7,913(3,7);7,510(0,4);7,508(0,4);7,491(3,0);7,489(3,4);7,485(3,8);7,477(6,9);7,467(0,7);7,381(0,7);7,377(0,7);7,242(1,6);7,233(1,4);7,228(1,4);7,22(1,7);7,219(1,6);7,213(1,3);7,209(1,4);7,200(1,3);7,020(4,1);7,013(4,0);6,615(0,6);5,756(9,4);5,421(0,9);5,416(0,8);3,325(31,9);2,525(0,9);2,512(13,9);2,507(27,1);2,503(35,4);2,498(25,7);2,494(12,4);1,989(0,9);1,175(0,5);0,000(2,2)</p>

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-606 ver el Ejemplo de síntesis 44
I-1-607 ver el Ejemplo de síntesis 34
I-1-608 ver el Ejemplo de síntesis 35
I-1-609:
HPLC-EM: masa (m/z): 284,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,845(3,9);10,029(0,4);9,579(0,4);8,887(1,0);8,875(1,0);8,867(1,0);8,863(1,0);8,855(1,5);8,843(9,9);8,831(9,7);8,679(0,4);8,672(0,5);8,656(0,4);8,649(0,4);8,639(0,3);8,632(0,4);8,624(0,3);8,594(4,2);8,587(4,3);8,322(0,5);7,919(0,5);7,485(0,4);7,473(0,6);7,460(0,7);7,439(2,7);7,427(4,6);7,415(2,4);7,019(4,5);7,012(4,5);6,923(0,4);6,916(0,4);6,849(4,7);3,909(12,1);3,395(0,9);3,389(0,8);3,337(100,1);3,174(4,7);2,712(0,8);2,677(1,3);2,535(22,2);2,513(184,6);2,508(236,8);2,504(179,1);2,443(1,5);2,422(0,8);2,396(0,6);2,389(0,6);2,371(0,5);2,339(1,3);2,335(1,6);2,304(0,4);2,290(0,5);2,248(16,0);1,915(1,2);1,836(1,1);1,819(0,3);1,799(0,4);1,575(0,3);1,241(0,3);0,005(0,4)
I-1-610:
HPLC-EM: logP = 3,00; masa (m/z): 382,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,222(11,4);8,056(8,8);8,053(8,9);7,654(6,7);7,641(7,4);7,628(1,4);7,617(2,9);7,613(2,7);7,603(5,3);7,593(2,9);7,589(3,4);7,578(1,5);7,545(2,2);7,543(2,4);7,531(6,7);7,521(6,4);7,519(6,3);7,496(9,5);7,485(8,2);7,475(7,2);7,462(2,9);7,460(2,7);7,396(9,1);7,382(16,0);7,368(7,7);6,940(12,3);6,935(12,4);4,029(2,4);4,010(7,6);3,991(8,1);3,971(2,8);3,331(356,1);2,996(0,5);2,654(0,8);2,617(1,4);2,613(1,9);2,611(1,4);2,541(225,8);2,523(3,2);2,520(4,1);2,517(4,2);2,508(99,9);2,505(213,4);2,502(294,6);2,499(217,0);2,496(103,9);2,425(0,9);2,389(1,4);2,386(1,9);2,383(1,4);2,076(0,4);1,235(0,8);0,005(2,2);0,000(69,8);-0,006(2,3)
I-1-611:
HPLC-EM: logP = 2,53; masa (m/z): 374,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,987(7,9);8,038(9,0);8,032(8,8);7,637(1,3);7,622(2,9);7,616(2,5);7,606(2,1);7,600(5,7);7,594(2,3);7,584(2,7);7,579(3,6);7,563(1,6);7,394(9,6);7,373(16,0);7,352(7,4);6,809(8,1);6,803(8,0);6,779(3,3);6,648(7,6);6,517(3,7);4,386(9,1);4,375(10,7);4,364(9,3);3,339(103,8);3,304(0,3);3,193(9,1);3,182(10,6);3,171(8,6);2,543(57,8);2,526(0,8);2,512(16,0);2,508(31,7);2,503(41,0);2,499(29,5);2,495(14,3);0,000(2,9)
I-1-612:
HPLC-EM: logP = 3,53; masa (m/z): 411,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 12,182(6,1);11,414(7,9);8,081(12,1);8,061(6,4);7,997(5,0);7,978(5,3);7,661(3,1);7,641(5,9);7,622(4,2);7,613(4,1);7,591(2,7);7,575(1,1);7,406(7,8);7,385(16,0);7,364(7,9);6,920(7,4);6,915(7,6);3,325(43,8);2,671(0,8);2,502(115,1);2,328(0,7);2,074(0,5);1,234(0,3);0,001(26,4)
I-1-613:
HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 396,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (601,6 MHz, DMSO-D ₆): δ = 19,968(0,6);11,302(1,1);8,073(1,1);7,743(0,7);7,734(0,7);7,728(0,7);7,720(0,7);7,603(0,6);7,526(0,7);7,521(0,8);7,512(0,7);7,507(0,8);7,395(1,1);7,381(1,9);7,367(1,0);7,300(0,8);6,937(2,0);6,933(2,1);3,329(1933,2);2,616(11,4);2,613(16,0);2,610(11,6);2,541(53,2);2,523(25,7);2,520(33,1);2,516(34,2);2,508(809,0);2,505(1748,8);2,502(241,5,0);2,499(1771,5);2,496(834,3);2,389(11,2);2,386(15,6);2,383(11,3);2,286(0,6);2,076(0,8);1,298(1,0);1,258(1,5);1,235(4,3);0,854(0,7);0,097(2,1);0,005(17,1);0,000(554,1);0,006(18,0);0,100(2,3)
I-1-614:
HPLC-EM: logP = 2,86; masa (m/z): 402,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,484(11,8);8,079(9,4);8,074(9,4);7,909(7,6);7,889(9,2);7,827(7,4);7,808(9,9);7,712(5,4);7,692(8,2);7,672(3,4);7,636(1,3);7,620(2,7);7,615(2,6);7,599(5,5);7,583(2,8);7,578(3,5);7,562(1,6);7,400(9,2);7,379(16,0);7,358(7,2);6,924(13,3);6,918(13,3);5,758(3,4);3,329(71,3);2,671(0,9);2,506(114,6);2,502(145,6);2,498(107,8);2,329(0,9);1,235(0,4);1,141(0,5);1,030(0,5);0,008(2,4);0,000(56,9)
I-1-615:
HPLC-EM: logP = 2,42; masa (m/z): 322,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 9,625(2,3);7,996(1,8);7,990(1,8);7,605(0,6);7,599(0,5);7,589(0,4);7,584(1,2);7,578(0,5);7,568(0,6);7,563(0,8);7,547(0,3);7,382(2,0);7,361(3,4);7,340(1,5);6,825(2,9);6,819(2,8);4,171(1,7);4,162(2,4);4,157(2,1);4,152(2,5);4,066(2,5);4,060(2,1);4,055(2,4);4,046(1,7);3,337(54,7);2,542(4,0);2,511(8,1);2,507(15,8);2,503(20,3);2,498(14,6);2,197(16,0);0,000(1,3)
I-1-616:
HPLC-EM: logP = 1,80; masa (m/z): 370,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 10,832(3,1);8,317(0,4);8,049(3,1);7,634(0,4);7,618(0,9);7,612(0,9);7,597(1,8);7,580(1,0);7,575(1,2);7,560(0,5);7,396(3,0);7,375(5,1);7,354(2,4);6,846(3,0);6,841(3,1);5,757(2,8);4,736(2,6);4,723(2,9);4,709(2,8);3,597(2,8);3,584(2,9);3,570(2,7);3,328(96,3);2,671(1,6);2,506(198,1);2,502(252,4);2,329(1,6);2,028(16,0);1,259(0,4);1,235(0,5);0,146(0,4);0,000(89,8);0,150(0,4)

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-617: HPLC-EM: logP = 2,72; masa (m/z): 374,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,520(7,9);8,452(8,3);8,445(8,4);7,932(1,7);7,916(2,2);7,911(4,1);7,895(4,2);7,890(2,9);7,874(2,3);7,842(4,5);7,822(5,6);7,790(1,6);7,773(4,4);7,754(4,1);7,720(3,7);7,699(16,0);7,679(10,0);7,545(3,4);7,523(6,0);7,501(3,1);7,038(8,5);7,031(8,5);5,757(8,9);3,326(82,1);2,671(0,6);2,667(0,5);2,507(75,0);2,502(97,7);2,498(73,2);2,329(0,6);1,989(0,6);1,175(0,3);0,146(0,6);0,008(6,6);0,000(128,8);-0,008(6,7);-0,150(0,6)
I-1-618: HPLC-EM: logP = 2,26; masa (m/z): 375,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,665(15,1);8,854(8,8);8,842(8,8);8,472(15,5);8,466(15,4);8,317(1,0);8,220(8,2);8,201(9,0);7,936(3,3);7,920(4,2);7,915(7,5);7,899(7,7);7,894(5,0);7,878(4,3);7,845(7,2);7,833(7,3);7,826(6,8);7,814(6,3);7,708(12,6);7,687(10,3);7,553(6,3);7,531(11,0);7,509(5,5);7,043(16,0);7,037(15,9);5,758(3,0);3,328(363,0);3,037(0,7);2,671(3,4);2,667(2,6);2,541(2,2);2,506(412,2);2,502(525,5);2,498(388,1);2,333(2,6);2,329(3,3);1,299(0,7);1,259(1,2);1,235(1,3);0,146(0,9);0,008(8,3);0,000(200,8);-0,149(1,0)
I-1-619: HPLC-EM: logP = 2,45; masa (m/z): 343,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,735(11,8);8,469(14,5);8,462(14,6);7,936(3,0);7,920(3,5);7,915(7,0);7,899(7,0);7,894(4,6);7,878(4,0);7,709(1,0,8);7,688(8,9);7,619(1,5);7,602(3,3);7,598(3,2);7,581(6,3);7,564(3,4);7,560(4,1);7,553(5,5);7,543(2,1);7,531(9,4);7,509(4,6);7,253(2,1);7,246(10,9);7,226(16,0);7,206(9,1);7,199(1,9);7,046(15,1);7,039(15,2);5,757(3,3);4,038(0,4);4,020(0,5);3,326(90,4);2,676(0,6);2,672(0,8);2,667(0,6);2,542(0,4);2,525(2,3);2,511(47,8);2,507(96,5);2,503(127,0);2,498(91,9);2,494(44,8);2,334(0,6);2,329(0,8);2,325(0,6);1,989(2,0);1,235(0,5);1,193(0,5);1,175(1,0);1,158(0,5);0,146(0,7);0,008(6,4);0,000(164,4);-0,009(6,4);-0,150(0,8)
I-1-620: HPLC-EM: logP = 2,61; masa (m/z): 384,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,431(15,3);8,450(15,9);8,443(16,0);8,316(0,4);7,931(3,4);7,915(4,3);7,910(8,0);7,894(8,1);7,889(5,4);7,873(4,5);7,707(10,9);7,697(13,7);7,688(12,9);7,676(10,9);7,551(6,4);7,546(10,5);7,533(11,5);7,528(12,4);7,522(13,2);7,500(6,9);7,495(6,4);7,476(11,3);7,457(5,8);7,431(6,8);7,427(6,7);7,412(8,5);7,407(8,3);7,393(3,7);7,388(3,3);7,055(16,0);7,049(15,9);5,756(1,8);4,038(0,4);4,020(0,4);3,325(165,0);2,675(0,9);2,671(1,2);2,667(0,9);2,506(142,6);2,502(185,6);2,498(135,4);2,333(0,9);2,329(1,2);2,325(0,9);1,989(1,7);1,397(0,4);1,259(0,5);1,234(0,6);1,193(0,5);1,175(0,9);1,157(0,5);0,146(1,2);0,008(10,3);0,000(240,6);-0,008(10,1);-0,150(1,2)
I-1-621: HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 340,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,444(15,0);8,450(16,0);8,444(16,0);8,316(0,4);7,932(3,5);7,915(4,5);7,911(8,2);7,894(8,3);7,890(5,6);7,873(4,6);7,697(12,5);7,676(10,4);7,582(7,5);7,578(8,2);7,563(10,5);7,559(14,8);7,545(8,5);7,538(14,5);7,535(14,8);7,523(13,5);7,514(7,1);7,500(15,9);7,497(9,8);7,480(5,4);7,476(4,5);7,454(7,9);7,451(7,8);7,436(9,9);7,433(9,7);7,418(3,7);7,415(3,5);7,057(15,9);7,051(15,9);5,756(5,7);3,325(140,0);2,675(1,0);2,671(1,3);2,667(1,0);2,506(151,5);2,502(197,2);2,498(143,7);2,333(0,9);2,329(1,2);2,324(0,9);1,989(0,8);1,259(0,4);1,234(0,8);1,175(0,4);0,146(1,1);0,007(10,3);0,000(219,7);-0,008(9,9);-0,150(1,1)
I-1-622: HPLC-EM: logP = 1,95; masa (m/z): 342,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,597(13,9);11,528(0,5);8,527(8,6);8,523(9,3);8,515(9,2);8,511(9,1);8,469(15,7);8,463(15,8);8,354(0,6);8,347(0,5);8,316(1,4);8,077(8,7);8,072(8,9);8,058(9,6);8,053(9,2);7,936(3,4);7,920(4,0);7,915(7,6);7,899(7,8);7,894(5,0);7,878(4,4);7,832(0,4);7,819(0,4);7,783(0,3);7,705(11,9);7,684(9,9);7,555(10,9);7,543(9,8);7,537(9,9);7,530(11,9);7,525(10,4);7,508(5,5);7,061(16,0);7,054(15,9);7,013(0,5);7,007(0,6);5,757(1,2);3,324(396,8);3,038(0,4);2,675(3,0);2,671(4,1);2,666(2,9);2,524(11,9);2,511(244,1);2,506(484,8);2,502(632,6);2,497(450,9);2,493(215,8);2,333(3,0);2,329(4,1);2,324(3,0);2,074(0,9);1,299(0,5);1,259(0,8);1,235(0,8);0,146(2,3);0,008(19,6);0,000(508,7);-0,008(18,2);-0,150(2,5)
I-1-623: HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 393,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ= 11,751(10,1);8,469(11,2);8,463(11,1);8,316(0,7);7,932(2,5);7,916(3,0);7,911(5,4);7,895(5,6);7,890(3,6);7,874(3,1);7,781(0,9);7,761(2,6);7,752(1,7);7,742(5,1);7,727(7,4);7,711(10,4);7,704(16,0);7,690(9,1);7,682(4,3);7,548(4,1);7,526(7,3);7,503(3,6);7,044(0,5);7,031(12,0);7,024(11,8);3,324(199,3);3,295(0,5);2,680(0,7);2,676(1,3);2,671(1,2);2,667(1,4);2,558(0,6);2,511(113,7);2,506(221,7);2,502(287,0);2,498(207,1);2,333(1,4);2,329(1,8);2,325(1,4);1,259(0,5);1,235(0,5);0,146(1,2);0,008(11,1);0,000(251,8);-0,009(10,5);-0,027(0,5);-0,030(0,5);-0,150(1,2)

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM ¹⁾ y RMN de ¹ H ²⁾
I-1-624:
<p>HPLC-EM: logP = 2,79; masa (m/z): 438,8 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 20,005(0,4);11,109(10,4);8,659(0,6);8,652(0,6);8,521(0,4);8,493(0,4);8,434(12,9);8,428(12,8);8,316(6,1);8,308(1,2);8,301(1,1);8,277(0,4);8,157(0,4);8,140(1,5);7,997(0,4);7,939(2,8);7,923(3,4);7,918(6,4);7,902(6,7);7,897(4,2);7,881(3,6);7,821(0,9);7,809(15,2);7,795(16,0);7,784(1,1);7,771(0,8);7,696(9,5);7,675(8,2);7,650(1,0);7,555(4,5);7,532(8,1);7,511(4,2);7,389(13,3);7,375(12,3);7,347(0,4);7,285(0,7);7,271(0,6);7,236(0,4);7,215(0,5);7,192(0,4);7,170(0,4);7,062(0,7);7,055(0,9);7,038(7,0);7,032(6,8);6,965(0,4);6,359(0,7);6,347(1,1);6,340(1,1);5,757(6,0);3,411(0,6);3,384(0,7);3,324(1622,0);3,092(2,7);3,058(1,0);3,035(3,2);2,946(3,2);2,679(5,0);2,675(10,3);2,671(14,3);2,666(10,1);2,662(4,7);2,541(6,4);2,524(38,4);2,519(61,1);2,511(807,8);2,506(1644,2);2,502(2160,1);2,497(1531,6);2,493(717,1);2,427(1,0);2,338(4,8);2,333(10,1);2,328(14,0);2,324(10,1);2,212(0,4);2,074(1,3);1,259(0,6);1,235(1,6);0,146(8,1);0,008(67,0);0,000(1989,3);-0,009(68,7);-0,081(0,7);-0,150(8,5)</p>
I-1-625
<p>HPLC-EM: logP = 2,63; masa (m/z): 433,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 7,05 – 7,06 (m, 1H), 7,20 – 7,25 (m, 1H), 7,46 – 7,52 (m, 3H), 7,68 – 7,70 (m, 1H), 7,87 – 7,93 (m, 2H), 8,45 (d, 1H), 11,38 (s, 1H).</p>
I-1-626:
<p>HPLC-EM: logP = 2,67; masa (m/z): 375,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,444(15,0);8,337(15,5);8,330(15,7);8,316(0,7);8,071(7,0);8,064(7,3);8,051(7,2);8,043(7,2);7,850(4,8);7,838(1,2,2);7,827(11,2);7,818(11,6);7,815(12,6);7,795(6,0);7,788(7,8);7,775(7,4);7,768(13,6);7,751(8,2);7,716(6,3);7,693(12,8);7,673(7,3);6,990(15,9);6,984(16,0);5,756(3,5);3,772(0,5);3,325(125,6);2,675(0,9);2,671(1,2);2,667(0,9);2,506(139,1);2,502(183,6);2,498(135,7);2,333(0,8);2,329(1,1);2,324(0,9);1,989(0,3);1,259(0,4);1,235(1,1);0,146(1,1);0,008(9,6);0,000(235,1);-0,008(10,4);-0,150(1,1)</p>
I-1-627:
<p>HPLC-EM: logP = 2,21; masa (m/z): 375,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 20,011(0,4);11,597(15,1);8,849(8,5);8,838(8,6);8,407(0,8);8,400(0,8);8,356(15,1);8,316(2,5);8,283(0,5);8,264(0,4);8,210(8,1);8,191(9,0);8,110(1,0);8,076(6,6);8,069(7,1);8,055(6,9);8,048(7,0);7,998(0,6);7,976(0,7);7,940(0,5);7,858(4,7);7,841(8,6);7,835(11,1);7,829(8,8);7,822(15,5);7,809(6,7);7,800(6,1);7,793(5,4);7,780(6,5);7,773(6,2);7,757(3,2);7,750(3,0);7,639(0,4);7,617(0,5);7,604(0,5);7,559(0,8);7,553(0,8);7,342(0,4);7,333(0,5);7,310(0,4);6,995(15,7);6,988(16,0);6,313(0,7);6,307(0,7);6,283(0,6);5,756(4,3);5,618(0,7);5,612(0,7);4,945(1,2);3,325(8,81,4);3,025(1,5);2,997(1,6);2,934(1,6);2,671(7,1);2,506(829,8);2,502(1086,7);2,498(822,1);2,328(7,1);1,235(0,7);0,146(6,1);0,008(51,9);0,000(1266,1);-0,150(6,2)</p>
I-1-628:
<p>HPLC-EM: logP = 2,39; masa (m/z): 343,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,662(12,5);8,353(14,6);8,347(14,6);8,316(0,4);8,076(6,4);8,068(6,6);8,055(6,6);8,048(6,5);7,859(4,3);7,847(4,8);7,837(8,9);7,824(8,5);7,800(5,3);7,793(4,9);7,780(5,8);7,773(5,3);7,758(2,7);7,751(2,5);7,613(1,5);7,597(3,3);7,592(3,1);7,575(6,2);7,559(3,3);7,554(3,7);7,538(1,6);7,249(2,0);7,242(10,9);7,222(16,0);7,202(9,2);7,195(2,0);6,997(15,4);6,991(15,4);5,757(4,3);4,056(0,6);4,038(1,8);4,020(1,9);4,002(0,6);3,325(107,8);3,024(0,6);2,857(0,5);2,676(0,7);2,671(1,0);2,667(0,7);2,524(2,8);2,511(56,8);2,507(114,6);2,502(151,2);2,498(109,0);2,493(52,7);2,333(0,7);2,329(1,0);2,325(0,7);1,989(8,0);1,397(0,6);1,193(2,1);1,175(4,2);1,157(2,1);0,146(0,9);0,008(7,9);0,000(205,6);)-0,009(7,8);-0,150(0,9)</p>
I-1-629:
<p>HPLC-EM: logP = 2,55; masa (m/z): 384,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,351(10,5);8,335(11,3);8,328(11,3);8,316(0,5);8,070(5,2);8,063(5,3);8,049(5,3);8,042(5,3);7,846(3,0);7,833(3,6);7,823(7,2);7,811(6,9);7,795(4,5);7,788(4,1);7,775(4,9);7,768(4,5);7,752(2,1);7,745(2,0);7,706(6,7);7,704(6,7);7,686(7,8);7,684(7,6);7,547(4,1);7,542(4,7);7,528(7,7);7,523(7,8);7,492(3,8);7,489(4,0);7,473(7,6);7,471(7,2);7,455(3,9);7,452(3,6);7,427(4,8);7,422(4,8);7,407(5,8);7,403(5,6);7,389(2,7);7,384(2,4);7,008(11,9);7,001(11,8);5,756(1,6,0);4,056(1,2);4,038(3,6);4,020(3,7);4,002(1,2);3,324(64,7);2,675(0,5);2,671(0,7);2,666(0,5);2,541(0,4);2,524(2,2);2,511(42,8);2,506(85,1);2,502(110,9);2,497(79,1);2,493(37,7);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);1,989(15,8);1,397(5,7);1,193(4,3);1,175(8,6);1,157(4,2);1,045(0,5);1,030(0,5);0,146(0,7);0,008(6,9);0,000(166,9);-0,009(6,2);-0,150(0,7)</p>
I-1-630:
<p>HPLC-EM: logP = 2,52; masa (m/z): 341,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,366(10,9);8,335(11,6);8,329(11,7);8,316(0,6);8,071(5,5);8,064(5,7);8,050(5,7);8,043(5,7);7,846(3,1);7,833(3,7);7,823(7,4);7,811(7,1);7,795(4,7);7,788(4,4);7,775(5,1);7,768(4,7);7,753(2,2);7,746(2,1);7,577(5,1);7,573(5,7);7,558(7,8);7,554(11,2);7,535(9,3);7,532(9,7);7,514(4,1);7,510(4,4);7,496(7,1);7,492(6,1);7,476(4,0);7,472(3,2);7,451(5,6);7,448(5,6);7,433(7,0);7,429(6,9);7,415(2,6);7,411(2,5);7,010(12,2);7,004(12,2);5,756(16,0);4,056(0,6);4,038(1,7);4,020(1,8);4,002(0,6);3,325(92,6);2,675(0,6);2,671(0,9);2,666(0,6);2,541(0,4);2,524(2,5);2,511(48,8);2,506(99,4);2,502(131,4);2,497(94,2);2,493(44,9);2,333(0,6);2,329(0,8);2,324(0,6);1,989(7,6);1,397(1,3);1,234(0,4);1,193(2,1);1,175(4,1);1,157(2,0);0,146(0,8);0,008(7,2);0,000(187,3);-0,009(6,7);-0,150(0,8)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-1-631:
<p>HPLC-EM: logP = 1,91; masa (m/z): 342,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,528(13,9);8,524(8,2);8,519(8,9);8,512(8,9);8,507(8,7);8,354(15,3);8,347(15,3);8,316(2,7);8,076(7,3);8,070(1 3,8);8,066(10,5);8,055(8,6);8,052(11,9);8,048(14,7);7,872(0,4);7,854(4,2);7,842(4,8);7,831(9,5);7,819(9,0);7,801(5,8);7,793(5,3);7,781(6,3);7,773(5,8);7,758(2,8);7,751(2,7);7,552(8,9);7,540(8,7);7,534(8,6);7,522(8,3);7,013(16,0);7,007(16,0);5,844(0,4);5,838(0,5);5,233(0,6);3,324(675,9);2,997(0,7);2,675(4,7);2,671(6,5);2,666(4,7);2,541(3,0);2,524(17,9);2,510(372,2);2,506(747,8);2,502(976,6);2,497(698,4);2,493(333,4);2,333(4,6);2,328(6,4);2,324(4,6);2 ,074(1,9);0,146(3,7);0,008(30,3);0,000(825,1);-0,009(29,7);-0,150(3,6)</p>
I-1-632:
<p>HPLC-EM: logP = 2,64; masa (m/z): 393,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,679(10,7);8,355(11,9);8,348(11,7);8,072(5,3);8,064(5,4);8,051(5,4);8,043(5,2);7,865(3,7);7,853(4,2);7,842(7 ,0);7,830(6,7);7,797(4,1);7,790(3,8);7,777(5,5);7,770(4,6);7,755(4,3);7,747(3,7);7,738(5,3);7,722(7,8);7,701(16,0) ;7,684(4,6);7,678(3,9);6,984(12,3);6,978(12,2);5,757(1,7);3,325(82,1);2,676(0,6);2,671(0,8);2,667(0,6);2,541(0,5) ;2,511(52,9);2,507(101,6);2,502(130,2);2,498(93,0);2,333(0,7);2,329(0,9);2,325(0,6);1,989(1,2);1,260(0,4);1,193(0, 3);1,175(0,6);1,157(0,3);0,146(0,6);0,008(6,1);0,000(124,0);-0,008(4,6);-0,150(0,6)</p>
I-1-633:
<p>HPLC-EM: logP = 2,73; masa (m/z): 438,8 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,046(10,4);8,427(0,3);8,324(11,9);8,317(12,3);8,187(0,5);8,180(0,5);8,112(0,6);8,082(5,2);8,075(5,3);8,062(5 ,3);8,055(5,3);7,847(3,0);7,835(3,7);7,825(7,7);7,812(7,9);7,805(13,9);7,801(6,1);7,792(16,0);7,781(5,5);7,773(5,1);7,758(2,4);7,751(2,0);7,733(0,4);7,696(0,4);7,676(0,4);7,511(0,3);7,386(11,2);7,372(10,6);7,266(0,3);7,253(0,4); 7,246(0,5);7,233(0,4);6,993(6,8);6,987(6,6);6,595(0,4);6,290(0,4);6,283(0,4);5,757(12,1);3,324(197,3);3,039(1,1); 3,026(1,0);3,014(0,6);2,999(1,2);2,934(1,0);2,675(1,8);2,671(2,3);2,666(1,7);2,541(1,2);2,506(279,3);2,502(358,7) ;2,497(256,6);2,333(1,7);2,329(2,3);2,324(1,7);1,235(0,4);0,146(1,4);0,008(11,5);0,000(303,0);-0,009(12,0);- 0,150(1,3)</p>
I-1-634:
<p>HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 433,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,294(10,1);8,336(10,0);8,329(10,0);8,316(0,8);8,071(4,8);8,064(4,9);8,050(4,9);8,043(4,9);7,924(7,4);7,904(8 ,3);7,848(2,8);7,835(3,3);7,825(6,4);7,813(6,0);7,796(4,0);7,789(3,6);7,776(4,4);7,769(4,1);7,753(1,9);7,746(1,7);7 ,501(1,4);7,482(6,4);7,472(9,3);7,466(16,0);7,454(2,2);7,250(0,3);7,236(3,3);7,229(3,2);7,220(3,5);7,216(4,0);7,20 9(3,1);7,201(2,9);7,193(2,6);7,007(10,3);7,000(10,3);5,756(3,6);4,055(0,7);4,038(2,1);4,020(2,1);4,002(0,7);3,323(134,2);2,671(1,5);2,506(176,0);2,502(229,1);2,497(168,3);2,328(1,4);2,324(1,1);1,989(9,0);1,398(0,4);1,259(0,4);1 ,235(0,6);1,193(2,5);1,175(4,8);1,157(2,4);0,146(0,9);0,008(8,2);0,000(189,4);-0,008(8,2);-0,150(0,9)</p>
I-1-635:
<p>HPLC-EM: logP = 2,80; masa (m/z): 383,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,396(0,9);11,342(11,1);8,486(15,4);8,482(16,0);8,337(11,4);8,333(11,4);8,298(1,6);8,283(4,7);8,279(4,4);8,2 69(5,0);8,265(8,8);8,261(4,7);8,251(4,8);8,247(4,4);8,237(2,7);8,227(0,8);8,214(0,4);7,661(8,9);7,648(9,6);7,560(0 ,5);7,549(3,8);7,547(4,3);7,535(9,6);7,524(8,3);7,522(8,0);7,505(2,3);7,495(13,5);7,491(9,8);7,483(7,2);7,478(10,2);7,466(3,7);7,464(3,4);7,027(1,6);7,023(1,6);6,991(13,4);6,986(13,5);4,024(3,3);4,005(10,2);3,986(10,7);3,967(3, 8);3,330(740,6);2,654(0,3);2,617(4,2);2,614(5,8);2,610(4,3);2,608(2,0);2,541(107,4);2,523(9,6);2,520(12,2);2,517(12,2);2,508(293,4);2,505(638,6);2,502(886,8);2,499(648,0);2,496(303,5);2,425(0,5);2,389(4,2);2,386(5,7);2,383(4, 2);2,076(0,4);1,298(0,5);1,258(0,7);1,235(2,0);0,854(0,4);0,096(0,9);0,005(6,4);0,000(218,1);-0,006(7,0);- 0,100(0,8)</p>
I-1-636:
<p>HPLC-EM: logP = 2,31; masa (m/z): 375,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,101(11,1);8,477(15,8);8,471(16,0);8,320(14,0);8,314(13,5);8,288(4,9);8,282(4,4);8,267(5,4);8,261(9,0);8,25 5(4,8);8,240(4,9);8,234(4,4);6,855(10,9);6,849(10,5);6,767(4,7);6,636(11,5);6,505(5,5);4,389(12,5);4,379(14,5);4, 367(12,6);3,333(181,6);3,196(12,5);3,185(14,3);3,174(11,6);2,998(0,4);2,677(0,4);2,673(0,6);2,668(0,4);2,543(53, 4);2,513(37,1);2,508(71,2);2,504(90,8);2,499(64,8);2,495(31,1);2,335(0,4);2,331(0,6);2,326(0,4);1,234(0,5);0,000(7,8)</p>
I-1-637:
<p>HPLC-EM: logP = 2,50; masa (m/z): 397,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (601,6 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,433(6,9);8,485(12,8);8,481(13,4);8,359(11,9);8,354(11,8);8,312(0,7);8,282(3,6);8,278(3,5);8,268(3,9);8,264(6,9);8,260(3,8);8,250(3,8);8,246(3,7);8,219(0,4);7,742(6,2);7,734(6,5);7,727(6,6);7,719(6,3);7,523(6,3);7,518(6,6); 7,508(6,7);7,503(6,3);7,317(3,7);7,312(3,5);7,303(6,5);7,298(5,8);7,289(3,5);7,284(3,0);7,020(1,0);7,015(1,0);6,98 9(15,9);6,985(16,0);3,330(826,5);2,996(0,4);2,654(0,9);2,617(3,9);2,614(5,4);2,611(4,0);2,541(226,1);2,523(8,7);2 ,520(11,0);2,517(11,5);2,507(274,7);2,505(587,5);2,502(810,6);2,499(609,9);2,425(1,0);2,389(3,8);2,386(5,3);2,38 3(3,9);1,298(0,4);1,258(0,6);1,235(2,2);0,854(0,3);0,097(0,7);0,005(5,5);0,000(168,9);-0,006(6,3);-0,100(0,7)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-1-638:
<p>HPLC-EM: logP = 2,70; masa (m/z): 403,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,627(14,4);11,483(0,9);8,484(13,8);8,478(14,6);8,367(12,7);8,361(12,8);8,317(0,7);8,287(4,1);8,280(3,9);8,266(4,4);8,259(7,7);8,253(4,1);8,238(4,2);8,232(3,8);8,079(0,8);7,907(9,1);7,887(11,0);7,826(8,7);7,806(12,0);7,713(6,5);7,693(9,8);7,673(4,0);7,599(0,5);7,400(0,7);7,379(1,3);7,358(0,6);6,980(16,0);6,973(15,9);6,923(1,1);6,917(1,1);5,758(1,3);3,328(207,6);3,101(0,5);3,086(0,4);2,676(1,5);2,671(2,1);2,667(1,5);2,507(244,3);2,502(317,7);2,498(231,5);2,333(1,5);2,329(2,0);2,325(1,5);1,259(0,4);1,235(0,7);1,191(0,8);1,173(1,4);1,158(0,9);1,141(0,6);1,030(0,5);0,146(0,6);0,008(5,7);0,000(133,5);-0,008(5,4);-0,150(0,6)</p>
I-1-639:
<p>HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 323,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 9,672(2,2);8,462(2,4);8,456(2,4);8,293(2,2);8,287(2,1);8,270(0,7);8,264(0,6);8,249(0,8);8,243(1,3);8,236(0,7);8,221(0,7);8,215(0,6);6,883(2,8);6,877(2,7);4,183(1,7);4,174(2,4);4,169(2,1);4,163(2,5);4,084(2,6);4,079(2,1);4,074(2,4);4,065(1,6);3,345(19,7);2,545(7,8);2,514(3,6);2,510(6,9);2,506(8,8);2,501(6,2);2,497(2,9);2,199(16,0);0,000(0,5)</p>
I-1-640 ver el Ejemplo de síntesis 23
I-1-641 ver el Ejemplo de síntesis 32
I-1-642:
<p>HPLC-EM: logP = 3,40; masa (m/z): 445,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,458(4,1);8,430(3,2);8,424(3,4);8,417(5,1);8,405(5,1);8,080(1,3);7,852(0,3);7,837(2,1);7,830(0,7);7,819(3,0);7,791(2,3);7,786(1,8);7,778(2,8);7,769(4,3);7,759(2,6);7,756(2,3);7,750(2,3);7,714(1,8);7,697(4,8);7,679(2,3);7,639(2,1);7,627(4,0);7,614(2,1);7,450(0,5);7,442(3,7);7,437(1,2);7,425(1,4);7,420(6,9);7,415(1,4);7,403(1,1);7,398(3,3);7,390(0,3);7,144(0,4);6,998(4,5);6,991(4,5);4,056(1,2);4,038(3,7);4,020(3,8);4,003(1,3);3,326(23,2);2,671(0,3);2,511(20,3);2,507(40,2);2,503(52,7);2,498(38,1);2,494(18,4);2,329(0,3);1,989(16,0);1,193(4,3);1,175(8,5);1,157(4,2);0,008(0,9);0,000(22,5);-0,009(0,8)</p>
I-1-643 ver el Ejemplo de síntesis 24
I-1-644:
<p>HPLC-EM: logP = 0,99; masa (m/z): 304,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,958(1,2);8,035(0,9);8,032(0,9);8,029(0,9);7,937(1,9);7,935(1,8);7,829(1,7);7,598(0,6);7,576(0,4);7,397(1,1);7,376(1,8);7,355(0,8);6,905(1,6);6,899(1,6);4,123(1,2);4,109(3,7);4,096(3,8);4,083(1,3);3,877(7,2);3,341(27,3);3,177(16,0);3,164(15,3);2,513(3,4);2,508(6,8);2,504(8,8);2,499(6,4);2,495(3,1);0,008(0,6);0,000(13,6);-0,008(0,6)</p>
I-1-645:
<p>HPLC-EM: logP = 2,41; masa (m/z): 303,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,571(2,6);8,001(2,0);7,996(2,0);7,611(0,6);7,605(0,6);7,595(0,5);7,589(1,3);7,584(0,5);7,573(0,6);7,568(0,8);7,552(0,4);7,390(2,2);7,369(3,7);7,348(1,7);7,188(1,6);7,184(1,8);7,178(1,8);7,174(1,7);7,009(1,6);7,004(2,4);6,999(1,6);6,899(3,2);6,893(3,2);6,064(1,8);6,058(1,9);6,055(1,9);6,048(1,7);5,757(1,7);3,896(16,0);3,330(11,0);2,511(5,0);2,507(9,8);2,503(12,8);2,498(9,2);2,494(4,6)</p>
I-1-646:
<p>HPLC-EM: logP = 0,70; masa (m/z): 305,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,065(3,1);8,480(2,8);8,474(2,9);8,320(2,5);8,314(2,5);8,288(0,8);8,282(0,8);8,267(0,9);8,261(1,6);8,255(0,9);8,240(0,8);8,234(0,8);7,985(4,6);7,839(4,1);6,967(3,2);6,960(3,2);3,878(16,0);3,330(8,2);2,508(14,0);2,504(18,1);2,500(13,7)</p>
I-1-647:
<p>HPLC-EM: logP = 2,16; masa (m/z): 304,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,673(2,9);8,472(2,6);8,466(2,7);8,291(2,3);8,285(2,3);8,276(0,9);8,270(0,8);8,255(0,9);8,249(1,5);8,243(0,8);8,228(0,8);8,222(0,8);7,241(1,7);7,237(1,8);7,231(1,8);7,227(1,8);7,021(1,7);7,017(2,5);7,012(1,7);6,962(3,1);6,956(3,1);6,075(1,7);6,069(1,9);6,065(1,9);6,059(1,7);3,898(16,0);3,332(19,5);2,508(11,1);2,504(14,2);2,500(10,4)</p>
I-4-1
<p>HPLC-EM: logP = 2,75; masa (m/z): 336,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H [CD₃CN] 3,45 (t, 2H), 3,79 (t, 2H), 6,93 – 7,01 (m, 2H), 7,10 – 7,18 (m, 1H), 7,39 – 7,51 (m, 3H), 7,54 – 7,57 (m, 1H), 9,01 (s a, 1H).</p>
I-4-2
ver el Ejemplo de síntesis 6
I-4-3
<p>HPLC-EM: logP = 2,59; masa (m/z): 338,1 (M+H)⁺; RMN de ¹H [DMSO-D₆] 3,41 (t, 2H), 3,76 (t, 2H), 7,06 – 7,12 (m, 2H), 7,17 – 7,23 (m, 3H), 7,53 – 7,61 (m, 1H), 11,46 (s a, 1H).</p>

(continuación)

Compuesto N°**Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾**

I-4-4:

HPLC-EM: logP = 2,31; masa (m/z): 428,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,772(2,9);7,888(4,7);7,886(4,5);7,868(4,9);7,866(4,6);7,455(2,4);7,453(2,2);7,437(5,6);7,434(5,3);7,418(3,8);7,415(3,5);7,382(0,4);7,338(4,8);7,333(5,2);7,319(3,6);7,314(3,5);7,214(1,0);7,199(2,3);7,195(3,8);7,191(4,1);7,184(1,4);7,177(6,7);7,172(5,3);7,164(1,9);7,161(2,0);7,157(5,3);7,153(2,7);7,142(1,6);7,133(0,4);7,036(0,7);7,030(1,1);7,020(6,5);7,014(0,9);7,010(1,0);6,999(8,3);6,997(8,4);6,987(1,2);6,976(4,5);6,965(0,9);6,961(0,6);6,954(0,4);6,932(0,6);6,910(0,3);3,815(2,6);3,812(4,3);3,809(2,5);3,799(5,4);3,796(8,9);3,792(5,0);3,783(3,0);3,780(4,6);3,776(2,6);2,816(8,0);2,800(16,0);2,784(7,5);2,626(0,5);2,132(38,3);2,119(0,6);2,113(0,7);2,107(0,9);2,100(0,6);1,971(1,2);1,964(4,9);1,957(6,0);1,952(53,4);1,945(100,4);1,939(140,1);1,933(95,4);1,927(48,4);1,920(1,6);1,914(0,8);1,780(0,3);1,774(0,6);1,768(0,9);1,762(0,6);1,437(5,1);1,372(0,8);1,285(0,4);1,277(1,0);1,270(0,4);1,203(0,6);0,146(1,0);0,008(9,1);0,000(253,6);-0,009(7,8);-0,150(1,1)

I-4-5:

HPLC-EM: logP = 2,21; masa (m/z): 316,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,768(3,7);7,470(0,3);7,426(0,4);7,420(0,4);7,371(2,1);7,368(2,3);7,349(10,6);7,331(10,4);7,307(0,6);7,287(0,8);7,270(1,0);7,267(1,0);7,246(7,6);7,228(7,7);7,207(2,5);7,183(1,3);7,168(2,3);7,163(2,1);7,161(1,8);7,153(1,6);7,147(4,2);7,141(2,3);7,133(2,0);7,130(2,1);7,126(3,2);7,111(1,8);7,095(0,5);7,087(0,5);7,074(0,5);7,068(0,4);7,062(0,4);7,058(0,4);7,054(0,5);7,039(0,4);7,029(0,9);7,023(1,3);7,012(6,9);7,003(1,3);6,990(9,4);6,989(9,4);6,978(1,6);6,968(5,2);6,956(1,2);6,952(1,1);6,940(1,1);6,927(0,5);6,918(0,7);6,905(0,4);6,882(0,4);3,832(0,5);3,813(4,9);3,797(9,8);3,781(5,3);3,692(0,5);3,669(0,9);3,645(0,6);3,130(0,6);3,106(1,1);3,082(0,7);2,881(0,4);2,765(8,2);2,749(16,0);2,733(7,8);2,452(0,7);2,430(0,7);2,407(1,2);2,391(1,5);2,353(0,4);2,343(0,4);2,308(1,5);2,275(38,7);2,248(0,8);2,225(4,0);2,136(25,8);2,119(0,4);2,112(0,6);2,106(0,6);2,100(0,4);1,963(2,8);1,957(3,5);1,951(27,3);1,945(50,8);1,939(70,1);1,933(47,4);1,926(24,0);1,912(1,0);1,767(0,4);1,599(0,6);1,372(5,8);1,362(0,5);1,340(2,7);1,294(0,7);1,285(3,4);1,276(7,0);1,271(1,8);1,263(0,8);1,260(0,7);1,243(0,4);1,215(1,3);1,197(2,4);1,179(1,2);1,001(1,2);0,983(2,3);0,966(1,1);0,146(0,6);0,008(5,4);0,000(132,4);-0,009(4,1);-0,150(0,6)

I-4-6:

HPLC-EM: logP = 4,45; masa (m/z): 434,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 7,618(1,8);7,598(1,9);7,381(0,7);7,378(0,7);7,362(1,9);7,359(1,8);7,343(1,4);7,340(1,2);7,261(1,3);7,242(2,2);7,235(2,3);7,223(1,0);7,216(1,7);7,153(0,4);7,148(0,4);7,132(0,9);7,126(0,3);7,118(0,4);7,111(0,6);6,949(1,5);6,928(2,2);6,906(1,1);3,841(1,2);3,816(2,6);3,791(1,4);3,159(1,4);3,134(2,7);3,109(1,2);2,352(16,0);2,141(6,7);1,963(0,5);1,957(0,7);1,951(4,8);1,945(8,9);1,939(12,2);1,933(8,3);1,927(4,2);1,341(0,3);1,285(0,4);0,008(0,9);0,000(19,9);;-0,009(0,6)

I-4-7:

HPLC-EM: logP = 2,34; masa (m/z): 370,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,897(2,7);7,763(3,1);7,745(4,3);7,698(1,3);7,682(3,7);7,680(3,6);7,664(4,0);7,659(3,5);7,655(3,1);7,653(3,5);7,636(3,3);7,634(3,2);7,617(1,4);7,604(0,7);7,594(0,5);7,541(3,9);7,540(3,9);7,524(3,0);7,523(3,2);7,240(0,3);7,218(1,1);7,203(2,1);7,198(1,5);7,196(1,5);7,188(1,2);7,182(4,0);7,176(1,6);7,168(1,5);7,166(1,7);7,161(2,9);7,146(1,5);7,035(0,7);7,030(1,2);7,020(6,6);7,014(1,1);7,009(1,1);6,997(8,9);6,986(1,4);6,975(4,8);6,965(0,9);6,960(0,7);6,945(0,5);6,922(0,7);6,901(0,4);3,797(2,7);3,794(4,5);3,791(2,8);3,781(5,5);3,778(9,1);3,775(5,3);3,765(3,0);3,762(4,7);3,759(2,7);3,445(0,7);3,427(0,4);3,279(0,5);3,266(0,5);2,754(8,2);2,738(16,0);2,721(7,6);2,146(9,8);1,963(0,8);1,957(1,1);1,951(8,9);1,945(16,6);1,939(23,0);1,932(15,7);1,926(8,0);1,373(2,1);1,341(0,9);1,285(1,2);1,276(2,8);1,270(1,5);1,171(0,5);1,006(0,5);0,008(1,9);0,000(47,8);-0,009(1,5)

I-4-8:

HPLC-EM: logP = 2,37; masa (m/z): 378,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,819(2,3);7,650(4,1);7,631(4,4);7,629(4,4);7,498(3,4);7,495(3,7);7,478(4,5);7,474(4,7);7,458(0,7);7,450(1,6);7,445(4,2);7,439(9,8);7,432(7,3);7,422(8,8);7,421(8,8);7,404(1,5);7,401(1,4);7,397(0,6);7,384(3,2);7,377(2,6);7,368(2,1);7,364(3,1);7,361(2,2);7,358(2,5);7,348(3,5);7,343(3,3);7,328(3,8);7,325(3,8);7,308(2,4);7,304(2,2);7,290(0,4);7,286(0,4);7,259(0,3);7,253(0,5);7,245(0,6);7,236(0,6);7,231(0,4);7,149(2,8);7,146(2,9);7,130(3,7);7,127(3,8);7,111(1,9);7,107(1,9);5,447(2,0);3,813(5,6);3,797(11,7);3,780(6,0);3,390(0,4);3,373(0,9);3,355(0,4);2,876(7,8);2,860(16,0);2,843(7,4);2,713(0,5);2,172(41,2);2,169(40,4);1,964(1,2);1,958(1,5);1,952(12,1);1,946(22,9);1,940(32,1);1,934(22,5);1,928(12,0);1,372(2,2);1,340(0,8);1,285(1,0);1,276(2,5);1,271(1,0);0,008(0,7);0,000(19,6)

I-2-1

ver el Ejemplo de síntesis 20

I-2-2

HPLC-EM: logP = 2,89; masa (m/z): 333,0 (M+H)⁺; RMN de ¹H [CD₃CN] 7,43 – 7,47 (m, 1H), 7,48 – 7,55 (m, 4H), 7,60 – 7,66 (m, 3H), 8,38 (s, 1H), 9,50 (s a, 1H).

I-2-3

HPLC-EM: logP = 3,03; masa (m/z): 424,9 (M+H)⁺; RMN de ¹H [CD₃CN] 7,22 – 7,26 (m, 1H), 7,48 – 7,55 (m, 4H), 7,61 – 7,66 (m, 2H), 7,97 – 7,99 (m, 1H), 8,38 (s, 1H), 9,43 (s a, 1H).

(continuación)

Compuesto N°	Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-4	HPLC-EM: logP = 2,54; masa (m/z): 368,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,48 – 7,56 (m, 2H), 7,62 – 7,66 (m, 2H), 7,73 – 7,76 (m, 1H), 8,11 – 8,13 (m, 1H), 8,36 (s, 1H), 8,83 – 8,84 (m, 1H), 9,68 (s a, 1H).
I-2-5	HPLC-EM: logP = 2,20; masa (m/z): 334,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,46 – 7,56 (m, 3H), 7,56 – 7,66 (m, 2H), 8,01 – 8,03 (m, 1H), 8,38 (s, 1H), 8,51 – 8,53 (m, 1H), 9,64 (s a, 1H).
I-2-6	HPLC-EM: logP = 3,03; masa (m/z): 410,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,45 – 7,47 (m, 1H), 7,53 – 7,56 (m, 1H), 7,58 – 7,60 (m, 1H), 7,69 – 7,77 (m, 3H), 7,81 – 7,85 (m, 2H), 8,35 (s, 1H), 9,50 (s a, 1H).
I-2-7	HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 376,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,42 – 7,64 (m, 7H), 7,81 – 7,83 (m, 1H), 8,37 (s, 1H), 9,59 (s a, 1H).
I-2-8	HPLC-EM: logP = 2,58; masa (m/z): 411,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,43 – 7,49 (m, 1H), 7,53 – 7,61 (m, 2H), 7,73 – 7,76 (m, 1H), 7,81 – 7,83 (m, 1H), 8,11 – 8,13 (m, 1H), 8,35 (s, 1H), 8,83 – 8,84 (m, 1H), 9,67 (s a, 1H).
I-2-9	HPLC-EM: logP = 2,29; masa (m/z): 377,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,44 – 7,50 (m, 2H), 7,53 – 7,61 (m, 2H), 7,81 – 7,83 (m, 1H), 8,01 – 8,03 (m, 1H), 8,37 (s, 1H), 8,51 – 8,53 (m, 1H), 9,62 (s a, 1H).
I-2-10	HPLC-EM: logP = 2,38; masa (m/z): 368,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,70 – 7,81 (m, 4H), 7,87 – 7,88 (m, 1H), 8,32 – 8,34 (m, 1H), 8,42 (s, 1H), 8,61 – 8,63 (m, 1H), 11,85 (s a, 1H).
I-2-11	HPLC-EM: logP = 2,60; masa (m/z): 402,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [CD ₃ CN] 7,58 – 7,61 (m, 1H), 7,72 – 7,76 (m, 3H), 7,84 – 7,86 (m, 1H), 8,12 – 8,14 (m, 1H), 8,55 – 8,56 (m, 1H), 8,94 (s a, 1H).
I-2-12	HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 334,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,45 – 7,49 (m, 1H), 7,51 – 7,60 (m, 2H), 7,64 – 7,66 (m, 1H), 7,70 – 7,73 (m, 1H), 8,32 – 8,34 (m, 1H), 8,44 (s, 1H), 8,61 – 8,63 (m, 1H), 11,77 (s, 1H).
I-2-13	HPLC-EM: logP = 2,26; masa (m/z): 377,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,43 – 7,47 (m, 1H), 7,49 – 7,53 (m, 1H), 7,60 – 7,63 (m, 1H), 7,71 – 7,75 (m, 2H), 8,32 – 8,34 (m, 1H), 8,44 (s, 1H), 8,61 – 8,63 (m, 1H), 11,75 (s, 1H).
I-2-14	HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 425,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,23 – 7,28 (m, 1H), 7,49 – 7,56 (m, 2H), 7,70 – 7,72 (m, 1H), 7,94 – 7,96 (m, 1H), 8,32 – 8,34 (m, 1H), 8,43 (s, 1H), 8,61 – 8,63 (m, 1H), 11,69 (s, 1H).
I-2-15	HPLC-EM: logP = 2,09; masa (m/z): 336,1 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,25 – 7,30 (m, 2H), 7,59 – 7,67 (m, 1H), 7,71 – 7,74 (m, 1H), 8,32 – 8,35 (m, 1H), 8,44 (s, 1H), 8,62 – 8,63 (m, 1H), 12,07 (s, 1H).
I-2-16	HPLC-EM: logP = 2,19; masa (m/z): 389,9 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 3,88 (s, 3H), 7,70 – 7,73 (m, 1H), 8,31 – 8,34 (m, 1H), 8,38 (s, 1H), 8,61 – 8,63 (m, 1H), 11,60 (s, 1H).
I-2-17	HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 412,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,61 – 7,65 (m, 1H), 7,72 – 7,83 (m, 3H), 7,87 – 7,88 (m, 1H), 8,39 (s, 1H), 8,45 – 8,47 (m, 1H), 8,64 – 8,66 (m, 1H), 11,84 (s, 1H).
I-2-18	HPLC-EM: logP = 2,43; masa (m/z): 469,8 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H [DMSO-D ₆] 7,23 – 7,28 (m, 1H), 7,49 – 7,56 (m, 2H), 7,61 – 7,64 (m, 1H), 7,94 – 7,96 (m, 1H), 8,40 (s, 1H), 8,44 – 8,47 (m, 1H), 8,64 – 8,65 (m, 1H), 11,68 (s, 1H).

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-19: HPLC-EM: logP = 3,21; masa (m/z): 401,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,142(10,9);7,903(4,9);7,884(7,4);7,855(2,3);7,837(5,7);7,818(6,2);7,811(6,5);7,807(6,4);7,792(11,9);7,787(10,1);7,773(16,0);7,764(8,2);7,673(2,6);7,670(2,9);7,655(6,0);7,651(5,8);7,635(4,5);7,631(4,3);7,621(5,3);7,618(5,3);7,602(6,0);7,599(6,0);7,583(2,5);3,324(66,4);2,675(0,9);2,671(1,2);2,666(0,9);2,662(0,4);2,524(4,5);2,511(67,9);2,506(132,1);2,502(171,5);2,497(123,4);2,493(59,6);2,333(0,8);2,329(1,1);2,324(0,8);1,989(0,4);1,397(1,3);1,336(1,5);1,299(2,5);1,259(3,5);1,249(1,5);1,235(1,4);0,008(0,4);0,000(9,1)
I-2-20: HPLC-EM: logP = 4,87; masa (m/z): 573,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 7,924(9,9);7,903(16,0);7,880(11,4);7,840(5,8);7,824(11,5);7,805(6,5);7,783(7,7);7,764(9,3);7,745(3,5);7,698(3,5);7,694(3,5);7,677(8,7);7,675(7,2);7,664(4,7);7,660(5,9);7,656(5,0);7,652(4,2);7,642(9,4);7,637(9,4);7,633(3,7);7,618(3,8);7,613(2,4);7,580(5,2);7,576(4,9);7,561(5,8);7,557(5,5);7,542(2,3);7,538(2,1);3,831(0,3);3,812(0,3);3,789(0,4);3,770(0,5);3,750(0,3);3,329(18,1);3,179(0,5);3,166(0,5);2,678(0,4);2,674(0,5);2,669(0,3);2,527(2,2);2,514(31,1);2,509(59,6);2,505(76,3);2,500(54,7);2,496(26,5);2,336(0,4);2,332(0,5);2,327(0,4);1,339(4,1);1,301(2,0);1,259(2,9);1,250(5,0);1,235(2,1);0,000(4,5)
I-2-21: HPLC-EM: logP = 2,93; masa (m/z): 381,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,847(1,0);7,854(1,4);7,834(1,9);7,760(2,3);7,752(4,9);7,732(0,4);7,721(0,9);7,712(1,0);7,701(1,0);7,692(0,8);7,680(0,4);7,649(1,1);7,643(1,0);7,635(0,9);7,630(1,2);7,625(1,9);7,622(1,5);7,615(1,1);7,610(1,0);7,607(1,1);7,605(1,1);7,597(1,7);7,528(0,6);7,516(1,9);7,510(2,8);7,502(2,9);7,492(2,1);7,475(0,4);5,446(2,0);2,367(16,0);2,141(22,9);1,963(0,7);1,952(7,5);1,945(13,8);1,939(19,2);1,933(13,2);1,927(6,7);0,000(1,4)
I-2-22: HPLC-EM: logP = 4,54; masa (m/z): 553,2 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 7,815(2,2);7,797(3,1);7,699(1,4);7,695(2,7);7,691(2,6);7,684(9,7);7,682(8,0);7,675(3,1);7,665(1,5);7,656(1,4);7,646(1,2);7,633(0,5);7,552(0,7);7,548(0,9);7,532(1,8);7,528(2,0);7,515(0,9);7,511(1,0);7,497(1,6);7,493(1,5);7,477(0,8);7,473(0,8);7,463(1,1);7,458(1,0);7,444(1,5);7,439(1,4);7,425(0,9);7,421(0,8);7,347(1,7);7,343(1,5);7,328(1,3);7,323(1,1);2,386(16,0);2,146(9,3);1,964(0,6);1,957(1,0);1,952(8,9);1,946(16,7);1,939(23,3);1,933(16,0);1,927(8,2);1,436(6,0);1,372(3,1);1,341(0,6);1,285(0,8);1,276(3,5);0,000(1,6)
I-2-23: HPLC-EM: logP = 3,64; masa (m/z): 550,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,489(11,3);8,484(11,6);8,477(11,6);8,472(11,4);8,050(11,4);8,045(11,2);8,031(12,2);8,026(11,6);7,778(4,5);7,775(4,8);7,759(5,7);7,755(5,9);7,572(1,6);7,568(1,9);7,553(5,2);7,549(4,8);7,534(6,1);7,530(5,4);7,522(3,8);7,516(6,0);7,502(4,3);7,497(7,6);7,490(7,9);7,485(5,2);7,478(2,6);7,472(16,0);7,466(4,2);7,460(12,3);7,453(11,8);7,441(11,3);7,426(0,4);7,420(0,4);7,241(0,4);7,235(0,4);5,448(4,6);2,464(0,4);2,269(0,4);2,224(0,6);2,161(62,5);2,114(0,5);2,108(0,6);2,102(0,4);2,042(0,4);1,965(5,5);1,959(9,0);1,953(39,4);1,947(68,6);1,940(89,5);1,934(60,7);1,928(3,0,8);1,915(0,3);1,775(0,4);1,769(0,5);1,763(0,4);1,386(0,7);1,372(9,0);1,340(2,1);1,285(3,0);1,276(10,2);1,270(1,9);1,216(0,4);0,881(0,4);0,146(0,6);0,008(6,2);0,000(143,9);-0,009(4,3);-0,150(0,6)
I-2-24: HPLC-EM: logP = 2,92; masa (m/z): 439,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 8,793(1,0);7,989(2,0);7,970(2,1);7,650(1,2);7,637(1,3);7,626(2,9);7,614(1,7);7,603(1,8);7,574(1,3);7,555(2,4);7,532(1,9);7,513(4,6);7,501(3,7);7,493(3,1);7,475(0,6);7,256(1,1);7,239(1,9);7,219(0,9);2,424(16,0);2,143(18,3);1,971(0,4);1,964(1,3);1,957(1,9);1,952(12,6);1,946(23,4);1,939(32,3);1,933(22,4);1,927(11,7);1,372(3,1);1,340(0,7);1,284(1,0);1,276(3,3);1,220(0,4);0,000(0,9)
I-2-25: HPLC-EM: logP = 4,68; masa (m/z): 668,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, CD ₃ CN): δ = 7,922(2,8);7,921(2,9);7,902(3,0);7,901(3,0);7,608(2,2);7,604(2,4);7,589(3,0);7,585(3,7);7,581(1,4);7,565(1,5);7,561(1,7);7,526(0,6);7,521(0,7);7,507(1,3);7,503(1,3);7,488(0,9);7,483(0,9);7,478(1,0);7,474(1,0);7,464(1,8);7,462(1,9);7,459(1,7);7,455(1,5);7,445(3,1);7,443(3,2);7,436(0,8);7,426(1,6);7,424(1,6);7,388(1,6);7,383(1,4);7,368(1,1);7,364(1,0);7,192(1,6);7,188(1,6);7,172(2,5);7,169(2,6);7,153(1,3);7,149(1,4);5,447(6,0);2,443(16,0);2,286(0,6);2,146(27,6);1,964(0,5);1,958(0,8);1,952(7,2);1,946(13,6);1,940(19,1);1,933(13,1);1,927(6,7);1,372(2,4);1,340(0,4);1,284(0,6);1,276(2,7);1,263(0,6);1,216(0,5);0,000(1,3)

(continuación)

Compuesto N°**Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾**

I-2-26:

HPLC-EM: logP = 3,22; masa (m/z): 444,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,914(3,7);7,860(6,0);7,844(9,7);7,830(7,3);7,758(15,3);7,735(5,1);7,715(4,7);7,651(4,2);7,632(6,7);7,592(4,0);7,573(7,0);7,554(3,9);7,517(4,8);7,497(6,6);7,480(2,9);7,447(0,4);7,426(0,8);7,420(0,8);7,262(0,4);7,257(0,4);7,241(0,6);7,236(0,5);7,171(0,5);7,165(0,5);7,150(0,3);5,447(1,4);2,144(88,5);2,119(0,6);2,113(0,9);2,107(1,0);2,101(0,7);2,095(0,4);1,964(7,6);1,958(11,2);1,952(60,9);1,946(110,3);1,940(148,5);1,933(101,8);1,927(52,0);1,914(0,8);1,780(0,3);1,774(0,6);1,768(0,9);1,762(0,6);1,756(0,4);1,402(0,4);1,396(0,4);1,386(0,6);1,372(14,2);1,340(2,3);1,284(3,2);1,276(16,0);1,216(0,5);0,881(0,3);0,146(0,8);0,008(7,3);0,000(194,2);-0,009(6,2);-0,150(0,8)

I-2-27:

HPLC-EM: logP = 4,87; masa (m/z): 617,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 7,837(6,5);7,819(8,5);7,816(8,0);7,779(0,4);7,769(2,5);7,765(3,8);7,745(16,0);7,741(10,2);7,726(14,8);7,722(12,9);7,704(8,4);7,686(5,6);7,682(5,1);7,668(1,9);7,664(1,7);7,552(1,5);7,549(1,8);7,534(4,8);7,530(5,0);7,515(5,3);7,511(4,8);7,504(3,8);7,499(5,1);7,485(4,1);7,480(5,3);7,473(0,4);7,466(1,9);7,461(1,7);7,443(6,0);7,438(5,4);7,424(3,6);7,419(3,7);2,467(0,3);2,463(0,5);2,458(0,3);2,269(0,5);2,148(89,1);2,119(0,6);2,113(0,8);2,107(1,0);2,101(0,7);2,095(0,4);1,964(8,3);1,958(13,5);1,952(65,0);1,946(116,5);1,940(154,0);1,933(105,1);1,927(53,8);1,914(0,8);1,780(0,4);1,774(0,7);1,768(0,9);1,762(0,6);1,756(0,3);1,437(2,0);1,376(1,5);1,372(6,0);1,340(1,2);1,285(1,6);1,276(6,7);1,217(0,4);0,146(1,0);0,008(8,3);0,000(245,9);-0,009(8,2);-0,150(1,0)

I-2-28:

HPLC-EM: logP = 2,77; masa (m/z): 445,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,999(3,6);8,855(6,0);8,844(6,1);8,816(0,7);8,156(5,6);8,137(6,1);8,100(0,6);7,852(5,8);7,832(6,5);7,771(4,5);7,759(5,2);7,752(4,8);7,740(4,5);7,723(0,9);7,711(0,7);7,693(0,4);7,680(0,5);7,651(4,3);7,632(7,4);7,596(3,9);7,577(6,8);7,558(3,7);7,521(4,5);7,502(6,3);7,484(2,9);7,464(0,8);7,458(0,8);7,447(0,7);7,426(1,0);7,420(0,9);7,261(0,4);7,256(0,4);7,241(0,7);7,235(0,7);7,171(0,5);7,165(0,5);7,150(0,4);7,144(0,3);5,447(0,4);2,141(55,3);2,113(2,5);2,107(2,2);2,101(1,5);2,095(0,9);1,964(9,6);1,958(15,8);1,952(80,9);1,946(144,9);1,940(193,5);1,934(133,4);1,927(6,9,0);1,780(0,5);1,774(0,9);1,768(1,2);1,762(0,8);1,756(0,5);1,386(0,8);1,372(15,0);1,340(4,2);1,285(5,5);1,276(16,0);1,217(0,6);0,881(0,6);0,858(0,4);0,146(1,0);0,008(9,4);0,000(227,6);-0,009(9,5);-0,150(1,1)

I-2-29:

HPLC-EM: logP = 3,09; masa (m/z): 412,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 8,843(1,6);7,844(3,2);7,825(3,6);7,644(4,1);7,588(2,8);7,569(5,0);7,549(4,4);7,537(5,5);7,515(6,5);7,495(6,1);7,472(4,0);7,453(3,1);7,426(1,5);7,420(1,2);7,261(0,4);7,256(0,4);7,240(0,6);7,235(0,6);7,171(0,5);7,165(0,5);7,150(0,3);7,143(0,3);5,446(0,7);2,139(37,2);2,119(0,4);2,113(0,5);2,107(0,7);2,101(0,4);1,964(4,9);1,958(7,3);1,952(39,9);1,946(71,4);1,939(95,7);1,933(65,2);1,927(33,2);1,914(0,4);1,774(0,4);1,768(0,6);1,762(0,4);1,432(1,3);1,386(0,7);1,372(15,0);1,340(2,8);1,284(3,7);1,276(16,0);1,216(0,8);0,881(0,4);0,857(0,4);0,146(0,6);0,008(4,8);0,000(27,1);-0,009(3,7);-0,149(0,6)

I-2-30:

HPLC-EM: logP = 4,87; masa (m/z): 550,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 7,774(2,2);7,771(2,3);7,755(2,8);7,751(2,8);7,685(3,0);7,682(4,9);7,679(3,7);7,666(3,5);7,664(5,0);7,663(4,8);7,661(4,2);7,560(0,8);7,556(1,0);7,541(2,6);7,537(2,8);7,522(2,8);7,518(2,6);7,512(0,7);7,508(2,2);7,503(2,8);7,495(0,5);7,488(2,3);7,484(3,2);7,474(0,9);7,463(11,2);7,460(5,3);7,454(16,0);7,451(8,7);7,446(1,2);7,440(2,0);7,435(2,2);7,431(1,0);7,425(1,2);7,414(4,3);7,403(5,0);7,395(3,7);7,393(2,8);7,386(2,7);7,383(2,8);7,374(1,9);5,446(0,8);2,547(1,0);2,295(0,3);2,137(11,6);1,964(2,5);1,958(4,0);1,952(18,6);1,946(32,8);1,940(43,2);1,933(29,8);1,927(15,3);1,372(2,4);1,340(0,4);1,284(0,6);1,276(2,6);1,217(0,3);0,015(0,3);0,008(2,5);0,000(69,8);-0,009(2,3)

I-2-31:

HPLC-EM: logP = 2,46; masa (m/z): 411,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN):
 δ = 9,068(2,5);8,524(4,9);8,045(3,9);8,028(4,2);7,848(4,7);7,828(5,3);7,650(3,1);7,632(4,7);7,591(3,9);7,573(6,6);7,554(3,8);7,517(5,4);7,498(9,7);7,482(6,7);7,426(1,0);7,420(1,0);7,411(0,4);7,399(0,3);7,393(0,3);7,261(0,4);7,256(0,4);7,240(0,6);7,235(0,6);7,171(0,5);7,165(0,5);7,150(0,3);2,465(0,4);2,460(0,5);2,455(0,4);2,158(128,3);2,120(0,7);2,114(0,9);2,107(1,1);2,101(0,8);2,095(0,4);1,964(8,6);1,958(14,3);1,952(67,7);1,946(119,5);1,940(156,8);1,934(106,8);1,928(54,6);1,915(1,0);1,781(0,4);1,775(0,7);1,769(1,0);1,762(0,7);1,756(0,4);1,386(1,1);1,372(14,4);1,340(3,8);1,308(0,4);1,297(0,7);1,284(5,1);1,276(16,0);1,270(3,4);1,217(0,7);1,200(0,6);1,017(0,5);0,963(0,4);0,881(0,6);0,856(0,5);0,708(0,4);0,146(1,1);0,008(9,6);0,000(260,2);-0,009(8,5);-0,019(0,5);-0,150(1,2)

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-32:
<p>HPLC-EM: logP = 3,24; masa (m/z): 502,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,786(1,3);7,997(1,8);7,978(1,9);7,846(2,2);7,827(2,4);7,634(1,8);7,589(2,2);7,572(4,2);7,554(3,4);7,540(2,1);7,516(3,8);7,496(3,6);7,477(1,4);7,448(0,4);7,426(0,8);7,420(0,8);7,262(1,4);7,256(1,6);7,248(1,9);7,241(1,7);7,235(1,6);7,171(0,5);7,165(0,6);7,150(0,4);7,143(0,4);5,446(0,5);4,055(0,5);2,134(27,2);2,119(0,4);2,113(0,5);2,107(0,5);2,101(0,4);1,971(1,1);1,964(4,1);1,958(6,4);1,952(33,2);1,946(59,2);1,939(78,9);1,933(54,2);1,927(27,9);1,774(0,3);1,768(0,5);1,437(1,0);1,432(0,4);1,386(0,6);1,372(15,5);1,340(2,9);1,285(4,0);1,276(16,0);1,216(1,6);1,203(0,5);0,881(0,4);0,146(0,5);0,008(4,5);0,000(110,1);-0,009(4,0);-0,150(0,5)</p>
I-2-33:
<p>HPLC-EM: logP = 3,06; masa (m/z): 471,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 9,482(2,7);8,371(16,0);7,986(6,8);7,967(6,9);7,833(5,6);7,830(5,7);7,813(6,3);7,810(6,3);7,611(3,1);7,607(3,7);7,591(7,6);7,587(7,8);7,571(4,4);7,568(4,4);7,553(8,0);7,550(8,3);7,534(11,2);7,529(15,7);7,511(6,6);7,509(6,6);7,492(2,3);7,490(2,3);7,483(4,4);7,479(4,1);7,463(5,2);7,460(4,8);7,445(2,6);7,440(2,4);7,264(3,4);7,258(3,4);7,246(4,0);7,244(4,4);7,241(4,4);7,238(3,9);7,226(2,8);7,221(2,7);2,462(0,4);2,148(212,3);2,146(201,8);2,119(0,9);2,113(1,2);2,107(1,3);2,101(0,9);2,095(0,5);1,964(12,7);1,958(20,2);1,952(86,6);1,946(151,0);1,940(197,2);1,933(135,1);1,927(69,2);1,780(0,5);1,774(0,8);1,768(1,1);1,762(0,8);1,756(0,4);0,146(1,2);0,008(12,3);0,000(262,3);-0,009(9,9);-0,150(1,2)</p>
I-2-34:
<p>HPLC-EM: logP = 5,06; masa (m/z): 732,7 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 7,934(7,3);7,932(7,5);7,914(7,8);7,912(7,8);7,782(3,0);7,778(3,2);7,763(3,6);7,759(3,9);7,664(6,0);7,660(6,3);7,645(7,5);7,641(7,4);7,569(1,0);7,565(1,2);7,550(3,3);7,546(3,2);7,531(3,7);7,527(3,3);7,515(2,2);7,510(3,7);7,496(2,8);7,490(7,0);7,487(5,3);7,483(5,5);7,478(3,6);7,470(8,9);7,468(8,7);7,460(2,5);7,451(4,2);7,449(4,4);7,420(0,4);7,212(4,3);7,208(4,4);7,192(6,8);7,188(6,8);7,173(3,6);7,169(3,6);5,446(1,7);4,068(0,5);4,050(0,5);2,306(0,4);2,140(20,6);2,113(0,4);2,107(0,5);2,101(0,3);1,971(2,4);1,964(3,9);1,958(6,4);1,952(31,1);1,946(55,0);1,940(72,4);1,933(49,2);1,927(25,2);1,914(0,4);1,768(0,4);1,436(16,0);1,386(0,3);1,371(4,8);1,340(0,9);1,284(1,2);1,276(5,1);1,221(0,6);1,204(1,1);1,186(0,6);0,146(0,6);0,008(4,8);0,000(132,6);-0,009(4,1);-0,150(0,6)</p>
I-2-35 ver el Ejemplo de síntesis 21
I-2-36:
<p>HPLC-EM: logP = 2,71; masa (m/z): 381,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,736(7,7);8,464(16,0);7,773(0,9);7,757(2,0);7,751(2,2);7,742(6,1);7,735(4,2);7,725(6,0);7,722(6,6);7,714(2,6);7,698(1,1);7,627(3,7);7,622(4,1);7,608(5,1);7,603(5,4);7,526(2,3);7,523(2,6);7,507(5,3);7,505(5,6);7,488(6,5);7,485(8,6);7,464(12,2);7,446(5,5);7,442(8,8);7,427(2,0);7,423(1,8);5,757(4,0);3,327(14,2);2,957(0,4);2,511(18,0);2,507(35,2);2,503(45,8);2,498(33,8);2,087(1,6);1,990(0,3);0,008(1,3);0,000(30,5);-0,008(1,2)</p>
I-2-37:
<p>HPLC-EM: logP = 2,09; masa (m/z): 380,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,907(8,8);8,526(4,9);8,522(5,6);8,515(5,4);8,510(5,4);8,476(16,0);8,089(4,9);8,084(5,2);8,070(5,5);8,065(5,4);7,777(0,9);7,761(2,0);7,756(2,0);7,739(3,8);7,723(2,1);7,718(2,5);7,702(1,1);7,609(4,9);7,597(5,0);7,590(5,0);7,78(4,5);7,490(6,1);7,469(10,8);7,447(5,0);7,355(0,4);7,333(0,6);5,758(1,2);5,461(0,4);3,328(16,4);2,672(0,3);2,508(43,2);2,504(54,1);2,499(42,0);2,330(0,3);2,087(0,8);0,000(0,8)</p>
I-2-38:
<p>HPLC-EM: logP = 2,66; masa (m/z): 335,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,753(7,9);8,470(16,0);7,774(0,9);7,758(2,1);7,752(1,8);7,736(3,9);7,731(1,6);7,720(2,0);7,715(2,4);7,699(1,1);7,659(4,3);7,656(4,3);7,641(5,3);7,637(5,1);7,595(3,1);7,593(3,3);7,575(7,2);7,573(6,9);7,555(3,2);7,551(3,2);7,537(5,1);7,533(4,5);7,517(2,7);7,513(2,3);7,486(9,9);7,465(15,1);7,449(3,2);7,444(5,7);5,758(2,2);3,330(10,7);2,508(30,3);2,504(37,8);2,499(27,3);2,087(0,8);0,000(26,6);-0,008(1,1)</p>
I-2-39:
<p>HPLC-EM: logP = 2,88; masa (m/z): 387,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,099(5,7);8,465(16,0);7,828(0,5);7,809(1,7);7,800(1,1);7,789(3,6);7,776(6,4);7,754(10,5);7,739(5,2);7,731(3,6);7,723(1,8);7,718(2,2);7,702(1,1);7,603(0,4);7,492(5,1);7,470(8,8);7,449(4,0);7,446(2,8);7,376(0,5);7,355(0,9);7,333(1,6);5,758(1,8);5,462(0,8);3,327(8,0);2,960(2,0);2,673(0,3);2,526(1,2);2,513(20,5);2,509(40,7);2,504(53,3);2,500(38,8);2,495(18,9);2,331(0,3);0,000(1,2)</p>
I-2-40:
<p>HPLC-EM: logP = 2,90; masa (m/z): 432,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,440(9,1);8,458(13,3);8,393(0,6);7,844(12,1);7,830(12,8);7,772(1,1);7,756(2,5);7,750(2,2);7,740(1,8);7,734(4,8);7,728(2,5);7,718(2,3);7,713(3,0);7,697(1,4);7,488(7,2);7,467(12,5);7,444(16,0);7,430(10,8);7,134(0,7);7,120(0,6);5,757(1,5);3,326(19,4);2,677(0,3);2,672(0,5);2,668(0,4);2,526(1,6);2,512(30,0);2,508(60,1);2,503(79,2);2,499(8,5);2,495(29,4);2,335(0,4);2,330(0,5);2,326(0,4);0,000(1,7)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-41: HPLC-EM: logP = 2,81; masa (m/z): 427,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,679(7,8);8,465(16,0);7,961(5,4);7,942(5,6);7,773(0,9);7,757(1,9);7,751(1,7);7,741(1,3);7,735(3,6);7,730(1,4);7,719(1,8);7,714(2,2);7,698(1,0);7,559(1,9);7,554(2,6);7,540(6,5);7,535(6,3);7,528(4,4);7,527(4,4);7,509(5,1);7,489(4,7);7,485(5,7);7,464(9,6);7,443(4,5);7,275(2,6);7,269(2,7);7,255(3,6);7,250(3,6);7,237(2,3);7,232(2,2);5,757(4,2);3,333(39,2);2,512(11,3);2,508(22,1);2,503(28,8);2,499(20,7);2,495(9,9);2,087(1,1);0,008(0,9);0,000(21,4);-0,009(0,7)
I-2-42: HPLC-EM: logP = 3,02; masa (m/z): 402,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 12,014(3,8);8,987(2,7);8,985(2,6);8,983(2,6);8,981(2,6);8,529(8,6);8,498(0,6);8,480(1,6);8,474(1,6);8,457(1,7);8,452(1,7);8,169(2,7);8,148(2,4);7,894(2,0);7,874(2,5);7,841(0,8);7,822(1,7);7,806(2,2);7,786(3,2);7,772(2,1);7,755(1,7);7,737(0,7);5,759(16,0);3,328(8,6);2,528(0,6);2,523(0,9);2,515(10,1);2,510(19,8);2,505(26,0);2,501(18,8);2,496(8,9);1,397(0,9);1,338(2,5);1,301(0,5);1,260(0,8);1,251(3,1);1,123(0,5);0,984(0,5);0,008(0,9);0,000(23,4);-0,009(0,7)
I-2-43: HPLC-EM: logP = 3,04; masa (m/z): 460,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,850(8,8);8,986(6,2);8,984(6,2);8,983(6,2);8,980(6,1);8,539(16,0);8,479(3,7);8,473(3,7);8,456(4,3);8,451(4,1);8,168(6,2);8,146(5,4);7,972(6,8);7,953(6,9);7,564(1,4);7,558(2,6);7,545(8,7);7,540(13,0);7,523(6,2);7,521(6,2);7,504(2,0);7,502(2,0);7,288(3,8);7,282(3,6);7,271(3,6);7,268(4,2);7,265(4,0);7,262(3,9);7,251(3,0);7,245(3,1);5,757(1,3);3,325(84,7);2,676(0,6);2,672(0,8);2,667(0,5);2,525(2,5);2,520(3,9);2,512(42,4);2,507(83,7);2,503(110,3);2,498(79,8);2,494(37,8);2,334(0,6);2,330(0,7);2,325(0,5);1,233(0,4);0,008(1,0);0,000(27,0);-0,009(0,8)
I-2-44: HPLC-EM: logP = 2,18; masa (m/z): 352,1 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,905(6,1);8,481(2,6);8,478(4,0);8,476(2,7);8,469(3,0);8,467(4,7);8,462(16,0);8,150(2,2);8,146(2,2);8,129(2,5);8,125(2,6);8,123(2,5);8,119(2,2);8,102(2,4);8,098(2,3);7,883(3,1);7,864(4,0);7,829(0,9);7,811(2,7);7,794(3,7);7,776(5,3);7,761(3,8);7,742(2,7);7,725(1,1);7,711(2,6);7,702(2,9);7,700(2,6);7,691(4,3);7,681(2,3);7,679(2,3);7,670(2,0);5,758(1,5);4,039(0,8);4,021(0,9);3,326(24,9);2,754(0,4);2,742(0,4);2,673(0,4);2,526(1,1);2,521(1,7);2,513(20,7);2,508(41,2);2,503(53,8);2,499(38,0);2,494(17,5);2,330(0,4);1,990(3,9);1,337(1,5);1,300(0,3);1,259(0,5);1,250(1,9);1,234(0,6);1,193(1,1);1,175(2,2);1,158(1,1);0,008(1,2);0,000(33,9);-0,009(1,0)
I-2-45: HPLC-EM: logP = 1,76; masa (m/z): 352,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 12,069(5,8);8,893(3,2);8,881(3,2);8,482(3,9);8,474(16,0);8,302(3,1);8,283(3,3);8,154(1,9);8,151(1,9);8,133(2,1);8,130(2,4);8,128(2,3);8,124(1,9);8,107(2,1);8,103(2,0);7,890(2,8);7,878(2,8);7,870(2,7);7,858(2,5);7,717(1,9);7,708(2,5);7,706(2,3);7,696(3,5);7,687(2,1);7,685(2,0);7,676(1,6);3,328(28,6);3,177(0,6);3,164(0,6);2,526(0,9);2,513(18,0);2,508(35,9);2,504(47,0);2,499(33,7);2,495(16,1);0,008(1,2);0,000(33,5);-0,009(1,1)
I-2-46: HPLC-EM: logP = 2,04; masa (m/z): 363,9 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,804(6,0);8,476(16,0);8,466(4,4);8,147(2,1);8,143(2,0);8,126(2,4);8,122(2,8);8,120(2,6);8,116(2,2);8,099(2,4);8,096(2,2);7,747(3,9);7,745(3,8);7,728(4,7);7,725(4,3);7,710(2,2);7,701(2,8);7,698(2,5);7,689(3,9);7,680(2,4);7,677(2,2);7,668(1,9);7,624(2,9);7,620(3,2);7,606(4,1);7,601(4,3);7,592(0,4);7,530(2,0);7,528(2,0);7,512(4,5);7,509(4,2);7,493(2,7);7,490(2,4);7,470(2,9);7,465(3,0);7,451(3,5);7,446(3,4);7,432(1,6);7,427(1,4);7,373(0,6);5,757(13,5);5,571(0,3);4,057(0,9);4,039(2,9);4,021(2,9);4,004(1,0);3,336(102,3);2,527(0,7);2,513(15,4);2,509(30,7);2,504(39,9);2,500(28,4);2,496(13,7);1,990(12,5);1,194(3,3);1,176(6,6);1,158(3,2);0,008(1,6);0,000(40,4);-0,009(1,5)
I-2-47: HPLC-EM: logP = 1,49; masa (m/z): 365,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,976(5,7);8,528(3,6);8,523(3,8);8,516(3,9);8,511(3,7);8,494(0,3);8,482(16,0);8,469(3,8);8,152(1,9);8,148(1,8);8,131(2,2);8,127(2,5);8,125(2,3);8,121(2,0);8,104(2,1);8,100(2,0);8,081(3,6);8,076(3,7);8,062(4,1);8,057(3,8);7,715(1,9);7,706(2,5);7,703(2,2);7,694(3,5);7,685(2,1);7,683(2,0);7,674(1,6);7,611(3,9);7,599(3,8);7,592(3,7);7,580(3,6);5,756(6,7);3,324(56,1);2,676(0,4);2,672(0,5);2,668(0,3);2,542(0,3);2,525(1,4);2,512(28,8);2,507(56,4);2,503(2,6);2,498(51,9);2,494(24,9);2,334(0,3);2,330(0,4);2,325(0,3);0,146(0,4);0,008(3,4);0,000(83,3);-0,009(3,1);-0,150(0,4)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-48:
<p>HPLC-EM: logP = 1,99; masa (m/z): 318,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,819(5,6);8,478(16,0);8,466(4,2);8,147(2,1);8,144(2,1);8,126(2,4);8,123(2,6);8,120(2,5);8,117(2,2);8,099(2,3);8,096(2,3);7,709(2,4);7,700(2,7);7,698(2,6);7,689(4,2);7,680(2,3);7,677(2,3);7,668(2,0);7,656(3,1);7,652(3,2);7,637(3,9);7,633(4,0);7,597(2,1);7,593(2,5);7,577(5,2);7,574(5,4);7,558(2,5);7,554(2,6);7,540(3,9);7,535(3,5);7,520(2,1);7,515(1,8);7,489(3,1);7,486(3,1);7,471(4,1);7,467(4,0);7,452(1,6);7,449(1,5);5,757(2,8);4,039(0,5);4,021(0,5);3,328(41,2);2,672(0,3);2,526(1,0);2,512(19,3);2,508(38,8);2,503(51,0);2,499(36,4);2,494(17,3);1,990(2,1);1,193(0,7);1,175(1,3);1,158(0,6);0,008(1,9);0,000(49,7);-0,009(1,8)</p>
I-2-49:
<p>HPLC-EM: logP = 2,26; masa (m/z): 370,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,170(5,7);8,483(4,0);8,474(16,0);8,461(0,7);8,155(1,9);8,152(2,1);8,135(2,2);8,131(2,5);8,129(2,4);8,125(2,1);8,108(2,2);8,104(2,1);8,059(0,3);7,832(0,5);7,811(1,5);7,802(0,9);7,792(3,1);7,778(5,1);7,755(7,9);7,738(2,3);7,732(2,7);7,719(2,1);7,710(2,5);7,707(2,4);7,698(3,7);7,689(2,1);7,686(2,1);7,677(1,8);7,614(0,4);7,602(0,4);7,594(0,3);7,582(0,4);7,376(1,0);5,760(1,6);5,575(0,6);4,058(0,6);4,041(1,7);4,023(1,7);4,005(0,6);3,332(12,9);2,529(0,5);2,515(11,8);2,511(23,1);2,506(30,0);2,502(21,6);1,992(7,3);1,195(1,9);1,177(3,9);1,159(1,9);0,008(1,2);0,000(29,7);-0,009(1,0)</p>
I-2-50:
<p>HPLC-EM: logP = 2,20; masa (m/z): 415,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,536(8,6);8,477(16,0);8,464(5,3);8,147(2,6);8,144(2,6);8,126(3,0);8,123(3,2);8,120(3,1);8,117(2,7);8,099(2,9);8,096(2,8);7,850(9,6);7,836(10,3);7,703(2,7);7,694(3,2);7,691(3,1);7,682(4,8);7,673(2,7);7,671(2,7);7,662(2,2);7,476(9,7);7,463(9,0);5,757(0,4);3,329(61,9);2,674(0,3);2,513(19,2);2,509(38,1);2,505(49,9);2,500(36,1);2,496(17,6);1,990(0,5);0,008(1,8);0,000(45,1);-0,008(1,7)</p>
I-2-51:
<p>HPLC-EM: logP = 2,14; masa (m/z): 410,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,745(6,8);8,474(16,0);8,469(4,1);8,466(4,9);8,449(0,3);8,147(2,3);8,143(2,2);8,126(2,6);8,122(2,9);8,120(2,8);8,117(2,4);8,099(2,5);8,096(2,4);7,963(5,1);7,944(5,3);7,709(2,4);7,700(3,1);7,698(2,8);7,689(4,2);7,679(2,5);7,677(2,4);7,668(2,0);7,556(1,1);7,551(2,0);7,537(6,4);7,531(9,8);7,514(4,6);7,512(4,5);7,495(1,5);7,493(1,4);7,372(0,4);7,277(2,4);7,272(2,4);7,260(2,7);7,258(3,0);7,254(3,0);7,240(2,0);7,235(2,0);5,756(14,7);4,039(0,7);4,021(0,7);3,333(94,6);2,513(17,3);2,508(33,6);2,504(43,3);2,499(31,0);2,495(15,1);1,990(3,0);1,193(0,8);1,176(1,5);1,158(0,7);0,008(1,7);0,000(40,5);-0,008(1,6)</p>
I-2-52:
<p>HPLC-EM: logP = 3,74; masa (m/z): 540,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 8,600(3,9);8,596(4,1);8,588(4,1);8,585(4,1);8,424(16,0);8,256(4,0);8,252(4,0);8,235(4,4);8,231(4,2);8,023(4,7);8,004(5,4);7,867(5,2);7,847(6,4);7,792(2,6);7,790(2,7);7,774(5,8);7,771(5,5);7,755(3,9);7,736(4,6);7,724(8,0);7,716(4,5);7,704(8,9);7,686(1,9);3,326(20,7);2,672(0,4);2,525(1,3);2,521(1,9);2,512(23,3);2,508(47,0);2,503(62,0);2,498(44,2);2,494(21,0);2,330(0,4);1,337(1,3);1,300(0,3);1,259(0,6);1,250(1,6);1,235(0,5);1,091(0,4);0,000(7,9)</p>
I-2-53:
<p>HPLC-EM: logP = 2,33; masa (m/z): 382,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,899(0,8);8,530(1,7);8,521(1,8);8,101(1,5);8,098(1,5);8,080(1,6);8,078(1,6);7,855(1,5);7,836(1,9);7,769(3,2);7,758(4,3);7,736(0,4);7,723(0,9);7,712(1,1);7,703(1,0);7,692(0,8);7,683(0,4);7,554(1,4);7,543(1,4);7,534(1,4);7,522(1,3);4,068(0,6);4,050(0,6);2,385(16,0);2,142(10,7);1,971(2,8);1,964(0,8);1,952(10,4);1,946(19,4);1,939(27,2);1,933(18,7);1,927(9,5);1,372(4,0);1,340(0,8);1,285(1,2);1,277(4,5);1,221(0,7);1,203(1,4);1,186(0,7);0,000(3,4)</p>
I-2-54:
<p>HPLC-EM: logP = 3,93; masa (m/z): 554,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,491(1,5);8,487(1,5);8,479(1,6);8,475(1,5);8,009(1,5);8,006(1,5);7,989(1,7);7,985(1,6);7,808(2,4);7,790(3,2);7,697(4,6);7,687(8,8);7,672(2,2);7,660(1,8);7,653(1,4);7,641(1,3);7,630(0,5);7,554(1,7);7,542(1,6);7,534(1,5);7,522(1,5);2,409(16,0);2,138(12,5);2,137(12,4);1,964(0,9);1,952(11,7);1,946(21,9);1,939(30,7);1,933(21,1);1,927(10,8);1,372(4,0);1,341(0,8);1,285(1,0);1,276(4,3);0,000(3,7)</p>
I-2-55:
<p>HPLC-EM: logP = 1,95; masa (m/z): 369,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,994(1,1);8,890(2,9);8,881(2,8);8,879(2,9);8,630(4,1);8,626(4,3);8,618(4,3);8,615(4,3);8,434(16,0);8,346(4,2);8,342(4,2);8,326(4,7);8,322(4,4);8,317(0,4);8,307(2,6);8,305(2,8);8,288(3,0);8,285(3,0);7,887(2,7);7,875(2,7);7,867(2,5);7,855(2,5);7,735(4,8);7,724(4,5);7,715(4,4);7,703(4,3);3,327(33,8);3,176(0,6);3,164(0,6);2,672(0,4);2,525(1,1);2,521(1,7);2,512(21,3);2,508(43,0);2,503(56,8);2,498(40,9);2,494(19,4);2,330(0,4)</p>

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-56:
<p>HPLC-EM: logP = 1,66; masa (m/z): 369,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,930(5,8);8,630(4,9);8,626(5,2);8,618(5,2);8,615(5,2);8,566(4,2);8,561(4,5);8,554(4,5);8,549(4,4);8,527(0,5);8,522(0,5);8,515(0,5);8,510(0,5);8,448(16,0);8,444(2,8);8,345(5,0);8,341(5,0);8,325(5,5);8,321(5,2);8,158(4,3);8,153(4,4);8,139(4,8);8,134(4,5);8,086(0,5);8,081(0,5);8,067(0,5);8,062(0,5);7,735(5,6);7,724(5,3);7,715(5,2);7,703(5,1);7,610(0,5);7,594(4,7);7,582(4,6);7,575(4,5);7,563(4,4);5,757(0,6);3,324(21,5);2,676(0,4);2,671(0,5);2,667(0,4);2,525(1,6);2,512(29,7);2,507(58,9);2,502(77,0);2,498(55,1);2,493(26,1);2,334(0,4);2,329(0,5);2,325(0,3);0,008(2,1);0,000(57,1);-0,009(1,8)</p>
I-2-57:
<p>HPLC-EM: logP = 2,48; masa (m/z): 335,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,107(6,3);8,630(4,7);8,627(4,9);8,619(4,9);8,615(4,9);8,434(16,0);8,347(4,8);8,343(4,8);8,326(5,3);8,323(5,0);7,829(0,5);7,809(1,5);7,800(0,9);7,790(3,4);7,776(5,4);7,754(9,0);7,737(7,7);7,731(3,0);7,725(5,3);7,716(5,0);7,705(4,9);4,117(0,4);4,103(1,1);4,090(1,1);4,077(0,4);3,329(21,5);3,178(5,2);3,165(5,0);2,526(0,8);2,521(1,2);2,513(14,6);2,509(29,3);2,504(38,6);2,499(27,7);2,495(13,2);1,338(0,8);1,250(1,0);0,008(1,0);0,000(27,6);-0,009(0,9)</p>
I-2-58:
<p>HPLC-EM: logP = 2,44; masa (m/z): 386,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,470(3,1);8,626(2,6);8,622(2,8);8,614(2,7);8,610(2,7);8,430(4,9);8,341(2,7);8,337(2,7);8,320(2,9);8,317(2,8);7,846(5,0);7,833(5,3);7,725(3,0);7,714(2,9);7,705(2,7);7,694(2,8);7,454(4,4);7,440(4,2);3,323(22,8);2,671(0,4);2,524(1,2);2,520(1,8);2,511(21,9);2,507(44,0);2,502(57,8);2,497(41,3);2,493(19,6);2,329(0,4);2,075(16,0);0,008(1,3);0,000(36,9);-0,009(1,2)</p>
I-2-59:
<p>HPLC-EM: logP = 2,28; masa (m/z): 439,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,788(1,4);8,529(2,2);8,519(2,2);8,097(1,8);8,077(2,0);7,990(2,0);7,970(2,1);7,583(1,3);7,564(2,4);7,552(2,0);7,540(2,2);7,532(3,0);7,516(2,5);7,496(1,0);7,426(0,5);7,420(0,5);7,257(1,2);7,240(2,1);7,220(0,9);7,171(0,4);7,165(0,3);5,446(0,7);4,068(0,9);4,050(0,9);2,438(16,0);2,136(22,3);1,971(3,9);1,964(0,8);1,952(10,2);1,946(19,1);1,939(26,8);1,933(18,5);1,927(9,6);1,372(8,9);1,340(1,9);1,285(2,5);1,276(9,5);1,221(1,1);1,216(0,3);1,203(2,0);1,185(1,0);0,000(2,4)</p>
I-2-60:
<p>HPLC-EM: logP = 2,57; masa (m/z): 459,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,818(1,7);8,562(4,4);8,560(4,4);8,551(4,5);8,135(3,4);8,115(3,6);8,040(0,5);8,019(0,7);7,998(3,0);7,978(3,0);7,612(4,6);7,600(4,9);7,591(5,0);7,580(5,6);7,563(2,9);7,540(2,5);7,522(3,0);7,503(1,3);7,481(0,4);7,470(0,6);7,458(0,5);7,449(0,6);7,426(0,6);7,420(0,6);7,269(1,8);7,262(1,6);7,250(2,9);7,241(1,8);7,235(1,9);7,171(0,5);7,165(0,4);6,986(0,5);5,446(0,8);4,597(0,4);3,598(0,3);2,133(31,8);2,119(0,5);2,113(0,5);2,107(0,7);2,101(0,5);1,971(1,3);1,964(4,1);1,952(40,8);1,946(73,8);1,940(99,7);1,933(67,6);1,927(34,1);1,914(0,7);1,774(0,5);1,768(0,6);1,762(0,4);1,386(1,1);1,372(14,7);1,340(5,7);1,310(1,1);1,294(1,9);1,285(8,3);1,276(16,0);1,271(7,7);1,221(0,6);1,216(1,4);1,204(0,6);1,186(0,4);0,898(0,7);0,881(1,7);0,874(1,1);0,864(1,1);0,857(1,3);0,838(0,8);0,000(6,2)</p>
I-2-61:
<p>HPLC-EM: logP = 4,03; masa (m/z): 669,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, CD₃CN): δ= 8,511(1,4);8,507(1,4);8,499(1,5);8,495(1,4);8,043(1,5);8,039(1,4);8,022(1,6);8,019(1,5);7,910(3,2);7,890(3,4);7,614(2,4);7,610(2,4);7,595(3,1);7,591(3,0);7,565(1,5);7,553(1,4);7,545(1,4);7,533(1,3);7,462(1,9);7,460(1,8);7,443(3,5);7,424(1,8);7,422(1,7);7,185(1,7);7,181(1,6);7,165(2,9);7,162(2,7);7,146(1,5);7,142(1,3);5,446(1,5);2,467(16,0);2,133(18,1);1,972(0,5);1,964(0,7);1,952(9,5);1,946(17,8);1,939(24,7);1,933(17,0);1,927(8,7);1,372(2,9);1,341(0,6);1,285(0,8);1,276(3,1);0,000(2,4)</p>
I-2-62:
<p>HPLC-EM: logP = 2,77; masa (m/z): 370,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,988(6,4);8,511(16,0);8,459(1,5);8,452(1,9);8,440(2,3);8,433(2,9);8,422(1,3);8,415(2,1);8,401(4,6);8,396(4,8);8,389(3,2);7,879(3,5);7,860(4,2);7,826(1,0);7,805(3,3);7,790(3,6);7,763(8,3);7,743(4,6);7,724(1,1);5,756(0,9);3,323(34,1);2,676(0,5);2,672(0,6);2,667(0,5);2,525(2,0);2,512(36,4);2,507(72,3);2,503(94,3);2,498(67,4);2,493(32,1);2,334(0,4);2,329(0,6);2,325(0,4);1,352(0,6);1,336(2,4);1,299(0,8);1,259(1,3);1,250(2,6);1,234(0,8);1,188(0,3);0,008(2,3);0,000(62,3);-0,009(2,0)</p>
I-2-63: ver el Ejemplo de síntesis 45
I-2-64:
<p>HPLC-EM: logP = 2,54; masa (m/z): 402,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,039(7,3);8,888(3,7);8,878(3,6);8,720(7,2);8,715(8,3);8,655(8,1);8,649(6,8);8,459(16,0);8,316(0,9);8,299(3,5);8,281(3,8);7,884(3,1);7,872(3,1);7,865(2,9);7,853(2,8);3,320(137,4);2,675(2,0);2,671(2,7);2,666(2,0);2,524(7,9);2,510(156,8);2,506(305,6);2,501(398,3);2,497(293,2);2,493(143,3);2,333(2,0);2,328(2,7);2,324(2,0);2,102(0,3);1,36(1,9);1,298(0,3);1,259(0,5);1,250(2,3);1,135(0,4);0,989(0,4);0,000(2,0)</p>

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-65:
<p>HPLC-EM: logP = 3,04; masa (m/z): 459,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,722(8,3);8,716(8,8);8,711(10,3);8,649(8,8);8,643(7,5);8,470(0,5);8,459(16,0);8,444(0,7);7,961(5,5);7,942(5,7);7,880(0,3);7,553(1,3);7,547(2,2);7,534(7,3);7,529(11,1);7,511(5,0);7,509(5,1);7,493(1,7);7,490(1,7);7,451(0,3);7,444(0,3);7,337(0,4);7,332(0,4);7,276(3,0);7,270(3,0);7,258(3,2);7,256(3,5);7,253(3,3);7,250(3,3);7,239(2,6);7,233(2,5);7,187(0,7);7,182(0,8);7,176(0,4);5,756(7,2);3,322(49,2);2,676(0,5);2,671(0,8);2,666(0,5);2,524(2,3);2,520(3,6);2,511(41,0);2,506(82,0);2,502(108,7);2,497(78,3);2,493(36,7);2,333(0,5);2,329(0,7);2,324(0,5);1,336(7,0);1,299(1,5);1,259(2,4);1,249(9,4);1,234(0,8);1,195(0,6);1,187(0,3);1,177(1,3);1,159(0,6);1,013(0,5);0,995(1,2);0,977(0,5);0,146(0,3);0,008(3,2);0,000(90,9);-0,009(2,7);-0,150(0,4)</p>
I-2-66:
<p>HPLC-EM: logP = 2,43; masa (m/z): 370,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,900(6,8);11,873(0,6);8,770(0,9);8,638(0,6);8,632(0,7);8,582(6,3);8,576(6,6);8,511(0,5);8,462(16,0);8,436(0,3);8,404(2,2);8,397(2,1);8,389(0,4);8,383(2,3);8,377(3,5);8,372(2,1);8,357(2,2);8,351(2,0);7,882(3,5);7,862(4,4);7,827(1,1);7,808(3,1);7,792(3,9);7,772(5,7);7,761(3,6);7,757(4,0);7,742(3,3);7,724(1,2);5,756(7,4);3,324(31,3);2,676(0,5);2,672(0,6);2,667(0,4);2,525(2,1);2,520(3,2);2,512(34,8);2,507(69,2);2,503(90,5);2,498(64,6);2,494(30,5);2,334(0,4);2,330(0,6);2,325(0,4);1,989(1,2);1,352(0,7);1,337(3,0);1,299(1,1);1,259(1,6);1,250(3,5);1,234(1,0);1,193(0,4);1,175(0,7);1,158(0,4);0,008(2,2);0,000(63,5);-0,009(2,1)</p>
I-2-67:
<p>HPLC-EM: logP = 2,00; masa (m/z): 371,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,060(7,9);8,890(4,1);8,879(4,1);8,586(6,9);8,580(7,3);8,472(16,0);8,409(2,2);8,403(2,1);8,388(2,4);8,382(3,8);8,377(2,2);8,362(2,2);8,356(2,0);8,316(0,6);8,296(3,9);8,278(4,3);7,887(3,5);7,875(3,5);7,867(3,3);7,855(3,2);5,756(3,5);3,321(104,9);2,675(1,5);2,671(2,0);2,666(1,5);2,541(1,0);2,524(5,1);2,510(117,0);2,506(231,7);2,502(303,0);2,497(221,1);2,493(108,8);2,333(1,5);2,329(2,0);2,324(1,5);0,146(1,1);0,008(9,9);0,000(246,6);-0,008(9,3);-0,150(1,2)</p>
I-2-68:
<p>HPLC-EM: logP = 2,27; masa (m/z): 382,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,802(7,3);8,582(6,5);8,576(6,7);8,477(13,5);8,401(2,2);8,395(2,0);8,380(2,4);8,375(3,6);8,369(2,1);8,354(2,1);8,348(1,9);7,747(4,4);7,727(5,1);7,725(4,6);7,622(3,2);7,618(3,4);7,603(4,6);7,599(4,5);7,530(2,3);7,527(2,2);7,511(5,1);7,509(4,5);7,493(3,0);7,490(2,6);7,470(3,2);7,465(3,2);7,450(4,0);7,446(3,7);7,431(1,8);7,427(1,5);5,757(1,6);0,328(19,5);2,509(22,6);2,504(28,4);2,500(20,2);1,990(0,7);1,396(0,4);1,178(0,4);1,176(0,5);1,161(0,7);0,993(0,6);0,008(0,5);0,000(10,7);-0,009(0,4)</p>
I-2-69:
<p>HPLC-EM: logP = 1,71; masa (m/z): 382,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,973(7,3);8,586(6,8);8,580(7,4);8,529(4,4);8,524(5,0);8,517(4,8);8,512(4,8);8,484(16,0);8,406(2,2);8,400(2,1);8,385(2,5);8,380(3,8);8,374(2,4);8,359(2,2);8,353(2,0);8,079(4,4);8,074(4,8);8,060(5,0);8,056(4,9);7,611(4,8);7,599(4,7);7,592(4,6);7,580(4,3);4,114(0,3);4,101(1,0);4,088(1,0);4,074(0,4);3,326(70,4);3,177(3,9);3,163(3,8);2,673(0,4);2,508(46,7);2,503(61,5);2,499(46,2);2,330(0,4);0,008(1,7);0,000(37,9)</p>
I-2-70:
<p>HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 336,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,818(7,9);8,582(7,7);8,576(8,0);8,481(16,0);8,402(2,6);8,395(2,4);8,381(2,8);8,375(4,2);8,370(2,5);8,355(2,6);8,349(2,3);7,655(3,9);7,651(4,1);7,636(5,1);7,632(5,0);7,597(2,7);7,594(3,1);7,577(6,8);7,574(6,8);7,558(3,3);7,554(3,3);7,540(5,1);7,536(4,4);7,521(2,8);7,516(2,3);7,490(4,1);7,486(3,8);7,471(5,3);7,468(5,0);7,453(2,2);7,449(2,0);5,757(8,1);3,328(19,6);2,948(0,6);2,527(0,6);2,513(13,9);2,509(27,4);2,504(35,2);2,500(24,7);2,495(11,5);1,991(1,0);1,397(0,7);1,176(0,6);1,173(0,4);1,155(0,8);1,138(0,4);1,006(0,3);0,988(0,7);0,970(0,3);0,008(0,6);0,000(14,6);-0,009(0,5)</p>
I-2-71:
<p>HPLC-EM: logP = 2,51; masa (m/z): 388,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,166(6,6);8,587(6,2);8,580(6,6);8,475(16,0);8,408(2,2);8,402(2,0);8,387(2,3);8,382(3,5);8,376(2,1);8,362(2,2);8,355(2,0);7,832(0,5);7,811(1,5);7,802(0,9);7,792(3,1);7,777(5,0);7,754(8,2);7,737(2,3);7,731(2,7);5,758(4,8);3,330(26,6);2,528(0,5);2,515(11,2);2,510(22,7);2,506(29,8);2,501(21,1);2,497(9,8);1,991(0,7);1,397(0,8);1,177(0,4);0,000(18,8)</p>
I-2-72:
<p>HPLC-EM: logP = 2,44; masa (m/z): 433,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,525(10,8);8,580(10,3);8,574(11,0);8,476(16,0);8,402(3,5);8,396(3,2);8,381(3,6);8,377(4,6);8,371(3,6);8,356(3,4);8,349(3,0);7,848(13,6);7,834(14,4);7,769(0,4);7,756(0,5);7,735(0,7);7,721(0,8);7,468(13,5);7,454(12,7);7,127(0,7);7,113(0,8);6,941(0,5);6,928(0,5);5,757(5,9);4,039(0,7);4,021(0,7);3,325(73,9);2,677(0,4);2,673(0,6);2,668(0,4);2,543(0,5);2,526(1,7);2,513(34,4);2,508(68,7);2,504(89,4);2,499(63,3);2,495(29,6);2,335(0,4);2,330(0,5);2,326(0,4);1,990(2,9);1,397(1,2);1,193(0,8);1,176(1,9);1,158(1,4);1,006(0,6);0,000(4,6)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-73:
<p>HPLC-EM: logP = 2,39; masa (m/z): 427,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,738(5,5);8,581(5,5);8,575(5,9);8,471(11,4);8,402(1,7);8,396(1,6);8,381(1,9);8,376(3,0);8,370(1,8);8,355(1,8);8,349(1,6);8,315(0,6);7,960(4,4);7,941(4,4);7,551(0,8);7,545(1,5);7,532(5,8);7,526(8,6);7,511(3,9);7,510(3,9);7,492(1,2);7,276(2,1);7,270(2,0);7,259(2,2);7,256(2,5);7,253(2,5);7,250(2,3);7,239(1,8);7,233(1,7);3,321(141,3);2,942(0,7);2,675(1,1);2,671(1,5);2,666(1,1);2,541(0,9);2,524(3,8);2,510(86,2);2,506(171,5);2,502(223,6);2,497(160,3);2,493(77,4);2,333(1,1);2,328(1,5);2,324(1,1);1,989(1,4);1,398(16,0);1,193(0,4);1,175(0,8);1,157(0,4);0,146(0,4);0,008(2,9);0,000(80,1);-0,008(3,0);-0,150(0,4)</p>
I-2-74:
<p>HPLC-EM: logP = 3,28; masa (m/z): 436,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,968(6,7);9,050(4,1);9,048(4,7);9,045(4,7);9,043(4,1);9,034(0,4);8,881(4,6);8,880(4,8);8,876(4,5);8,526(16,0);7,889(3,0);7,869(3,9);7,834(0,7);7,816(2,5);7,800(3,9);7,797(3,8);7,787(5,2);7,771(3,2);7,769(3,0);7,751(2,3);7,749(2,4);7,747(2,2);7,734(1,0);7,732(1,0);7,729(0,9);7,716(0,3);5,758(8,3);3,329(22,1);2,528(0,6);2,523(1,0);2,514(11,4);2,510(22,8);2,505(30,4);2,500(21,9);2,496(10,2);1,339(1,3);1,301(0,7);1,260(1,0);1,250(1,4);1,233(0,9);1,123(0,4);0,984(0,5);0,008(0,8);0,000(24,4);-0,009(0,7)</p>
I-2-75:
<p>HPLC-EM: logP = 3,28; masa (m/z): 493,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,805(8,4);9,047(6,3);9,044(6,3);8,879(6,5);8,875(6,1);8,534(16,0);7,967(5,6);7,948(5,8);7,563(1,6);7,558(2,4);7,544(7,0);7,538(7,2);7,536(6,2);7,533(5,2);7,518(5,1);7,516(5,2);7,499(1,8);7,497(1,8);7,282(2,9);7,277(3,0);7,264(3,3);7,262(3,6);7,259(3,5);7,257(3,5);7,245(2,5);7,239(2,4);5,757(6,5);3,328(105,2);3,310(0,6);2,677(0,3);2,672(0,4);2,525(1,6);2,512(25,0);2,508(48,3);2,503(62,9);2,498(45,7);2,494(21,9);2,330(0,4);1,235(0,6);0,008(0,5);0,000(11,6);-0,009(0,4)</p>
I-2-76:
<p>HPLC-EM: logP = 2,40; masa (m/z): 370,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,998(7,3);8,892(4,0);8,880(3,9);8,470(16,0);8,316(3,7);8,299(4,0);8,297(4,0);7,887(3,3);7,875(3,4);7,868(3,2);7,856(3,0);7,778(0,8);7,762(1,8);7,756(1,6);7,746(1,2);7,741(3,4);7,735(1,3);7,725(1,7);7,719(2,2);7,703(1,0);7,604(0,4);7,492(5,3);7,471(9,2);7,450(4,3);7,377(0,5);7,356(0,9);7,335(1,7);5,759(0,3);5,465(0,8);3,334(18,9);3,179(1,1);3,166(1,1);2,528(0,5);2,514(12,6);2,510(25,4);2,505(33,5);2,501(24,3);2,497(11,9);0,008(0,7);0,000(17,6);-0,008(0,6)</p>
I-2-77:
<p>HPLC-EM: logP = 2,59; masa (m/z): 337,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,063(11,5);8,481(14,2);8,479(15,2);8,476(16,0);7,781(0,9);7,778(1,0);7,762(3,3);7,745(4,6);7,741(4,9);7,724(3,8);7,719(2,6);7,708(1,3);7,704(1,2);7,668(1,0);7,665(1,1);7,649(3,7);7,631(5,0);7,628(5,1);7,611(4,0);7,593(1,2);7,590(1,1);7,495(7,9);7,473(13,4);7,471(13,1);7,449(6,8);7,296(7,3);7,293(7,4);7,276(13,1);7,273(13,1);7,255(6,3);7,252(6,6);5,764(1,8);5,762(2,0);5,759(2,1);3,336(28,5);3,334(30,6);2,674(0,4);2,510(66,0);2,505(64,1);2,336(0,4);2,332(0,4);0,005(49,3);0,003(48,7);0,000(50,2)</p>
I-2-78:
<p>HPLC-EM: logP = 2,22; masa (m/z): 355,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,486(3,8);8,592(3,9);8,419(8,0);7,765(0,4);7,749(0,9);7,743(0,8);7,733(0,6);7,728(1,7);7,722(0,6);7,712(0,8);7,706(1,0);7,690(0,5);7,495(1,9);7,487(2,7);7,465(4,6);7,444(2,1);7,360(3,5);7,225(1,6);5,758(0,5);3,968(16,0);3,32(44,8);3,006(0,8);2,513(12,8);2,508(24,4);2,504(30,9);2,500(21,7);2,495(10,1);0,007(0,7);0,000(12,2);-0,009(0,4)</p>
I-2-79:
<p>HPLC-EM: logP = 2,60; masa (m/z): 370,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 12,149(4,7);9,134(5,2);9,128(6,1);9,079(6,3);9,073(5,1);8,511(0,3);8,497(16,0);7,785(0,8);7,769(1,6);7,763(1,4);7,753(1,1);7,748(3,2);7,742(1,2);7,731(1,5);7,726(2,0);7,710(0,9);7,499(4,8);7,478(8,3);7,457(3,8);7,454(2,6);5,760(1,4);3,339(13,6);2,975(0,5);2,531(0,4);2,517(8,1);2,513(16,4);2,508(21,6);2,504(15,5);2,499(7,3);0,008(0,4);0,000(12,4);-0,009(0,4)</p>
I-2-80:
<p>HPLC-EM: logP = 2,78; masa (m/z): 370,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,930(7,0);8,958(4,3);8,947(4,3);8,469(16,0);8,421(4,1);8,402(4,4);7,856(2,9);7,843(2,9);7,836(2,8);7,823(2,6);7,779(0,9);7,763(1,8);7,757(1,7);7,747(1,3);7,741(3,6);7,736(1,4);7,726(1,8);7,720(2,2);7,704(1,0);7,493(5,6);7,472(9,8);7,451(4,5);7,332(0,3);5,758(7,4);3,330(45,4);2,673(0,4);2,513(23,6);2,508(46,7);2,504(60,9);2,500(43,9);2,331(0,4);1,233(0,3);0,008(2,3);0,000(57,5);-0,009(2,1)</p>

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-2-81: HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 370,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 12,093(0,6);9,120(3,0);9,046(1,8);9,033(1,9);8,464(5,2);8,104(1,3);8,100(1,0);8,091(1,0);8,087(1,3);7,883(1,7);7,870(1,7);7,763(0,6);7,757(0,5);7,747(0,4);7,741(1,1);7,736(0,4);7,725(0,5);7,720(0,7);7,492(1,7);7,471(2,9);7,450(1,4);7,331(0,3);6,592(1,4);6,588(1,0);6,579(1,0);6,575(1,4);3,329(11,6);2,946(16,0);2,525(0,7);2,508(22,8);2,503(29,5);2,499(21,4);1,990(1,0);1,235(0,4);1,175(0,5);0,008(1,0);0,000(25,6);-0,008(1,1)
I-2-82: HPLC-EM: logP = 2,95; masa (m/z): 375,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,997(6,7);8,436(16,0);7,993(5,7);7,980(6,1);7,779(1,0);7,763(2,1);7,757(1,8);7,747(1,4);7,741(4,1);7,735(1,5);7,725(1,9);7,720(2,5);7,704(1,2);7,500(12,0);7,496(4,4);7,493(6,9);7,487(10,9);7,472(10,8);7,450(5,0);7,447(3,2);5,758(6,3);3,329(36,3);2,673(0,4);2,527(1,1);2,513(22,2);2,509(44,8);2,504(58,7);2,500(42,0);2,495(20,1);2,331(0,4);0,008(2,5);0,000(66,7);-0,009(2,5)
I-2-83: HPLC-EM: logP = 2,36; masa (m/z): 370,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 12,077(3,7);9,083(8,7);9,012(4,2);9,000(4,3);8,477(14,7);8,103(1,2);8,099(0,9);8,091(0,9);8,087(1,2);7,933(4,9);7,920(4,7);7,779(0,7);7,763(1,5);7,757(1,3);7,747(1,1);7,742(2,9);7,736(1,1);7,726(1,4);7,720(1,8);7,704(0,8);7,494(4,4);7,473(7,7);7,452(3,6);6,590(1,3);6,586(0,9);6,578(0,9);6,574(1,3);5,758(0,5);3,329(32,2);2,946(16,0);2,673(0,3);2,513(20,1);2,508(40,0);2,504(52,1);2,499(37,0);2,495(17,4);2,330(0,3);1,990(0,6);0,008(2,1);0,000(53,2);-0,009(1,9)
I-2-84: HPLC-EM: logP = 2,28; masa (m/z): 371,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,997(6,7);8,964(4,3);8,952(4,4);8,591(7,1);8,585(7,4);8,495(0,3);8,483(16,0);8,471(0,4);8,423(4,2);8,411(2,6);8,404(6,0);8,390(2,5);8,385(3,8);8,379(2,4);8,364(2,2);8,358(2,1);7,859(2,9);7,847(2,9);7,839(2,8);7,827(2,6);5,760(3,2);3,338(40,7);2,954(1,4);2,511(22,6);2,507(29,2);2,503(21,5);1,992(0,7);1,177(0,4);0,007(1,1);0,000(27,4);-0,008(1,4)
I-2-85: HPLC-EM: logP = 2,50; masa (m/z): 376,0 (M+H) ⁺ ; RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 12,078(7,2);8,587(7,8);8,581(8,2);8,459(0,4);8,448(16,0);8,411(2,5);8,405(2,3);8,390(2,7);8,385(4,2);8,379(2,4);8,364(2,4);8,358(2,2);7,998(5,8);7,985(6,1);7,503(9,7);7,490(9,2);5,758(1,4);3,332(55,4);2,510(35,3);2,505(45,2);2,501(32,4);0,008(1,9);0,000(44,2);-0,008(1,8)
I-5-1
I-5-2 ver el Ejemplo de síntesis 22
I-5-3: HPLC-EM: logP = 3,09; masa (m/z): 429,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,274(11,8);8,586(12,2);8,580(12,5);8,356(3,1);8,352(3,1);8,331(5,7);8,316(2,4);8,310(3,2);8,305(2,9);8,032(1,5);8,011(12,2);7,929(14,5);7,908(16,0);7,770(6,9);7,751(7,9);7,688(5,8);7,670(7,1);7,577(7,1);7,558(12,6);7,538(12,2);7,516(4,6);7,476(5,0);7,457(6,6);7,439(2,9);7,358(9,7);7,339(13,8);7,321(7,6);7,320(7,8);5,757(14,0);3,324(114,0);2,687(2,8);2,680(0,9);2,674(3,7);2,666(1,4);2,662(0,7);2,541(1,3);2,524(6,1);2,511(106,3);2,506(212,0);2,502(277,8);2,497(198,5);2,493(94,1);2,338(0,6);2,333(1,3);2,328(1,7);2,324(1,3);2,086(5,7);1,755(0,4);1,233(1,1);0,146(1,0);0,008(9,1);0,000(232,6);-0,009(8,0);-0,150(1,0)
I-5-4: HPLC-EM: logP = 2,67; masa (m/z): 427,0 (M+H) ⁺ ;RMN de ¹ H (400,0 MHz, DMSO-D ₆): δ = 11,256(3,7);8,643(2,5);8,634(2,5);8,205(2,0);8,188(2,1);8,055(2,6);8,035(2,8);7,953(0,9);7,768(2,3);7,749(2,6);7,730(2,0);7,718(2,1);7,710(2,1);7,698(1,8);7,673(2,0);7,655(2,4);7,549(1,3);7,531(2,6);7,522(2,2);7,502(3,1);7,483(2,5);7,474(1,8);7,454(2,1);7,436(1,0);7,414(0,5);7,392(0,5);7,365(0,5);7,337(0,8);7,332(0,9);7,318(3,5);7,310(3,6);7,293(4,2);7,290(4,3);7,272(2,6);7,182(1,0);7,176(0,6);5,757(16,0);3,325(98,5);2,890(6,8);2,731(5,5);2,675(0,6);2,671(0,8);2,666(0,6);2,524(2,6);2,510(42,6);2,506(82,0);2,502(106,3);2,497(77,2);2,493(37,2);2,333(0,5);2,328(0,7);2,324(0,5);1,397(0,3);1,352(1,1);1,336(11,6);1,317(0,4);1,298(6,1);1,258(8,6);1,249(13,2);1,234(1,7);1,225(1,0);1,187(0,5);0,008(0,6);0,000(14,6);-0,009(0,5)

ES 2 651 074 T3

(continuación)

Compuesto N° Datos de HPLC-EM¹) y RMN de ¹H²)
I-5-5:
<p>HPLC-EM: logP = 3,98; masa (m/z): 497,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,349(7,9);9,015(8,3);8,792(6,5);8,315(1,6);8,055(11,9);8,035(12,8);7,905(14,0);7,883(16,0);7,771(4,5);7,752(5,1);7,689(4,0);7,672(4,8);7,594(6,8);7,591(7,0);7,576(9,1);7,573(11,4);7,555(9,5);7,552(9,3);7,535(5,0);7,517(3,3);7,479(3,8);7,461(4,8);7,442(2,5);7,384(9,2);7,383(9,5);7,365(13,7);7,347(7,7);7,345(7,6);3,379(0,6);3,327(402,0);3,325(467,8);2,680(1,7);2,675(3,6);2,671(4,9);2,666(3,6);2,662(1,7);2,593(0,4);2,568(0,6);2,524(13,0);2,519(20,4);2,511(266,0);2,506(535,6);2,502(713,4);2,497(518,8);2,493(246,5);2,435(0,3);2,338(1,6);2,333(3,5);2,328(4,8);2,324(3,4);2,319(1,6);2,074(4,3);1,187(0,6);1,148(0,5);0,008(2,3);0,000(75,6);-0,009(2,3)</p>
I-5-6:
<p>HPLC-EM: logP = 3,05; masa (m/z): 428,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,307(10,7);8,437(8,1);8,402(3,7);8,053(7,8);8,033(8,3);7,952(1,8);7,933(0,4);7,772(5,1);7,753(5,8);7,672(4,3);7,654(5,4);7,576(16,0);7,561(10,0);7,538(7,1);7,518(3,6);7,479(3,9);7,460(5,2);7,441(2,4);7,352(4,3);7,349(3,9);7,333(6,8);7,317(3,4);7,314(3,5);5,757(1,2);3,862(1,1);3,325(54,6);3,023(0,3);3,017(0,5);3,007(0,5);2,890(9,9);2,730(9,3);2,701(0,6);2,689(0,6);2,670(0,9);2,501(138,1);2,328(0,9);2,086(0,9);1,954(0,3);1,939(0,8);1,754(1,2);1,745(0,3);1,737(0,3);1,729(0,7);1,722(0,3);1,233(0,6);0,146(0,4);0,000(66,9);-0,150(0,4)</p>
I-5-7:
<p>HPLC-EM: logP = 3,39; masa (m/z): 437,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,491(11,8);8,584(0,5);8,579(0,5);8,453(10,2);8,424(5,6);8,406(3,1);8,400(2,4);8,317(0,5);8,014(0,3);8,003(0,3);7,991(0,3);7,980(0,3);7,908(7,3);7,888(9,5);7,848(16,0);7,839(13,1);7,815(2,0);7,778(3,9);7,765(4,9);7,757(4,9);7,745(3,4);7,738(2,1);7,690(9,3);7,684(9,9);7,668(10,6);7,661(11,0);7,511(4,6);7,505(4,1);7,489(8,0);7,482(6,7);7,466(3,7);7,460(3,3);5,758(5,9);3,324(134,6);2,675(1,8);2,671(2,4);2,666(1,7);2,541(1,2);2,524(8,2);2,511(141,8);2,506(275,5);2,502(353,2);2,497(253,0);2,493(121,7);2,333(1,7);2,329(2,3);2,324(1,6);1,234(0,8);0,000(0,8)</p>
I-5-8: ver el Ejemplo de síntesis 47
I-5-9:
<p>HPLC-EM: logP = 3,11; masa (m/z): 417,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,497(9,5);8,897(5,0);8,885(4,9);8,345(4,7);8,327(5,0);7,993(6,0);7,973(6,5);7,902(4,2);7,890(4,2);7,882(4,0);7,870(3,8);7,800(4,4);7,794(4,5);7,783(3,4);7,780(4,1);7,776(5,6);7,763(0,4);7,678(3,4);7,673(2,9);7,670(2,9);7,661(5,1);7,654(6,9);7,644(1,6);7,639(2,4);7,626(6,0);7,620(5,1);7,614(6,5);7,608(9,7);7,601(4,3);7,595(4,6);7,591(3,8);7,577(1,3);7,572(0,9);7,502(3,0);7,483(5,2);7,465(4,0);7,463(3,9);7,297(5,0);7,279(6,5);7,260(3,9);7,259(3,9);7,222(7,5);7,200(6,4);5,757(16,0);3,327(152,8);2,676(0,6);2,671(0,9);2,667(0,6);2,541(0,5);2,524(2,4);2,511(48,1);2,507(96,2);2,502(126,0);2,497(89,9);2,493(42,5);2,333(0,6);2,329(0,8);2,324(0,6);1,397(0,4);0,008(1,6);0,000(41,2);-0,009(1,3)</p>
I-5-10:
<p>HPLC-EM: logP = 3,26; masa (m/z): 461,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,200(16,0);8,433(5,3);8,419(5,8);8,408(5,8);8,394(5,3);8,316(1,7);8,070(4,1);8,054(5,2);8,033(4,0);7,906(7,6);7,886(11,6);7,859(7,4);7,841(6,2);7,781(13,6);7,764(13,0);7,615(4,0);7,602(4,7);7,594(8,2);7,582(8,3);7,574(6,0);7,562(5,5);7,454(6,9);7,446(7,2);7,433(5,9);7,425(5,4);7,164(11,1);7,144(11,4);7,138(12,0);7,119(10,2);5,756(5,7);3,322(510,5);2,675(3,8);2,671(5,3);2,666(3,8);2,541(3,0);2,524(14,5);2,510(303,2);2,506(597,5);2,501(773,7);2,497(549,5);2,492(257,3);2,333(3,7);2,328(5,1);2,324(3,6);2,074(1,8);1,236(0,3);0,146(1,0);0,008(8,2);0,000(229,1);-0,009(7,4);-0,150(1,0)</p>
I-5-11:
<p>HPLC-EM: logP = 2,99; masa (m/z): 429,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 11,378(16,0);8,435(4,8);8,421(5,1);8,410(5,1);8,396(4,8);8,315(2,1);8,102(4,8);8,087(5,3);8,079(5,3);8,063(4,7);7,669(1,4);7,653(3,3);7,649(3,4);7,632(5,9);7,617(5,5);7,611(4,8);7,606(4,2);7,597(6,8);7,585(5,9);7,577(4,3);7,565(3,7);7,454(6,3);7,445(6,7);7,433(5,2);7,424(5,0);7,301(9,7);7,281(15,9);7,261(8,3);7,204(0,4);7,164(8,6);7,144(8,7);7,138(9,3);7,119(8,0);5,756(1,3);4,038(0,3);4,020(0,3);3,550(0,8);3,536(0,7);3,509(4,2);3,495(0,7);3,482(0,7);3,408(0,5);3,392(0,5);3,382(0,6);3,369(0,8);3,322(542,0);2,675(4,0);2,671(5,5);2,666(4,0);2,662(2,0);2,631(0,4);2,541(3,7);2,524(14,2);2,519(21,5);2,511(292,8);2,506(593,0);2,502(781,0);2,497(556,3);2,493(260,6);2,337(1,6);2,333(3,6);2,328(5,0);2,324(3,5);1,989(1,4);1,298(0,6);1,259(1,1);1,234(3,6);1,193(0,5);1,175(0,9);1,157(0,5);1,050(2,0);1,034(2,0);1,020(0,3);0,854(0,6);0,836(0,4);0,807(0,4);0,146(1,8);0,008(13,3);0,000(407,8);-0,008(12,8);-0,150(1,7)</p>
I-3-1: ver el Ejemplo de síntesis 46

(continuación)

Compuesto N°
Datos de HPLC-EM¹⁾ y RMN de ¹H²⁾
I-3-2:
<p>HPLC-EM: logP = 2,68; masa (m/z): 335,1 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,802(10,4);7,610(1,4);7,593(3,2);7,589(3,0);7,572(5,8);7,555(3,3);7,551(3,5);7,534(1,8);7,531(1,6);7,515(2,7);7,509(2,3);7,499(2,1);7,494(5,5);7,488(2,5);7,476(2,6);7,472(3,9);7,457(1,8);7,402(9,0);7,364(10,0);7,342(16,0);7,321(6,8);7,260(2,3);7,254(10,0);7,234(14,6);7,214(8,3);7,206(1,8);6,955(7,7);6,313(8,7);6,309(9,2);6,305(9,0);6,301(7,9);4,121(0,5);4,108(1,3);4,095(1,4);4,082(0,5);3,335(183,4);3,176(6,2);3,163(5,9);2,677(0,5);2,672(0,7);2,668(0,5);2,511(42,8);2,507(77,4);2,503(97,5);2,499(71,9);2,334(0,5);2,330(0,6);2,325(0,5);1,337(0,4);1,226(0,5);0,008(0,3);0,000(5,7)</p>
I-3-3:
<p>HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 424,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,802(10,5);7,610(1,4);7,593(3,2);7,589(3,0);7,572(5,8);7,556(3,2);7,551(3,6);7,534(1,8);7,531(1,6);7,515(2,7);7,510(2,3);7,499(2,0);7,493(5,5);7,488(2,5);7,476(2,6);7,472(3,9);7,457(1,8);7,405(9,0);7,364(10,0);7,342(16,0);7,321(7,4);7,298(0,6);7,261(2,1);7,254(10,0);7,235(14,6);7,214(8,4);7,207(1,9);6,956(7,7);6,315(8,5);6,311(9,3);6,307(9,1);6,303(8,2);4,119(0,5);4,106(1,5);4,093(1,5);4,080(0,5);3,330(20,7);3,177(6,7);3,164(6,4);2,676(0,3);2,667(0,4);2,668(0,3);2,507(45,6);2,503(58,5);2,499(43,6);2,330(0,4);1,339(1,1);1,233(0,4);1,226(1,5);0,000(4,7)</p>
I-3-4:
<p>HPLC-EM: logP = 2,97; masa (m/z): 363,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,484(2,3);7,508(0,5);7,501(0,5);7,492(0,4);7,486(1,1);7,481(0,6);7,472(0,5);7,469(0,6);7,465(0,9);7,447(2,9);7,425(3,0);7,396(1,8);7,359(2,1);7,348(0,5);7,338(3,2);7,317(1,3);7,119(2,3);7,111(3,2);7,069(1,8);7,062(1,5);7,047(1,6);7,039(1,5);6,927(1,6);6,329(1,7);6,325(1,9);6,322(2,1);6,318(2,0);3,804(16,0);3,323(34,4);2,670(0,5);2,666(0,4);2,524(1,2);2,519(1,8);2,510(22,0);2,506(47,2);2,501(66,3);2,497(54,3);2,492(32,5);2,328(0,4);2,324(0,4);2,075(0,5);0,000(0,7)</p>
I-3-5:
<p>HPLC-EM: logP = 2,52; masa (m/z): 368,0 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,705(11,0);8,849(6,4);8,839(6,2);8,837(6,3);8,192(6,0);8,174(6,5);8,172(6,6);7,852(5,7);7,840(5,6);7,832(5,3);7,820(5,0);7,529(1,2);7,514(2,6);7,509(2,0);7,507(2,1);7,498(1,8);7,492(5,4);7,487(2,3);7,478(2,1);7,475(2,4);7,471(4,0);7,456(1,8);7,385(8,4);7,373(1,9);7,368(2,6);7,362(10,1);7,341(16,0);7,320(6,4);6,955(7,1);6,320(8,2);6,316(9,0);6,312(8,9);6,308(8,3);5,758(0,6);3,325(92,7);2,676(0,7);2,671(1,0);2,666(0,7);2,541(0,4);2,524(3,0);2,511(4,5);2,506(108,3);2,502(142,7);2,497(104,9);2,493(51,3);2,338(0,4);2,333(0,7);2,329(1,0);2,324(0,7);0,000(2,5)</p>
I-3-6:
<p>HPLC-EM: logP = 2,96; masa (m/z): 430,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,453(9,0);7,992(0,5);7,987(0,5);7,931(15,0);7,927(14,9);7,513(1,1);7,498(2,3);7,494(1,6);7,491(1,7);7,482(1,5);7,477(4,5);7,471(1,9);7,463(1,6);7,459(1,9);7,455(3,4);7,440(1,8);7,430(4,8);7,425(6,3);7,365(1,3);7,360(2,0);7,355(8,4);7,343(1,4);7,333(12,9);7,323(1,3);7,313(5,2);7,306(1,5);7,204(0,4);6,949(0,7);6,945(0,7);6,926(1,9);6,922(3,8);6,919(4,9);6,915(5,4);6,909(3,7);6,906(2,0);6,893(16,0);6,889(15,8);6,491(6,8);6,487(7,1);6,483(7,0);6,479(6,6);5,757(13,2);3,821(0,5);3,327(14,6);2,672(0,4);2,526(1,5);2,512(24,8);2,508(49,5);2,503(65,0);2,499(46,5);2,494(21,8);2,330(0,4);2,325(0,3);1,233(0,4);0,008(1,5);0,000(40,7);-0,009(1,3)</p>
I-3-7:
<p>HPLC-EM: logP = 3,07; masa (m/z): 414,9 (M+H)⁺;RMN de ¹H (400,0 MHz, DMSO-D₆): δ= 10,224(11,0);8,316(0,6);7,822(14,7);7,808(15,4);7,518(1,3);7,502(2,7);7,497(2,1);7,495(2,2);7,486(1,9);7,481(5,5);7,475(2,4);7,467(2,2);7,464(2,5);7,460(4,0);7,444(2,0);7,419(8,5);7,367(1,6);7,356(10,2);7,335(16,0);7,314(6,3);7,308(2,0);7,284(15,4);7,271(14,7);6,926(7,2);6,380(8,4);6,377(9,0);6,373(8,9);6,369(8,1);5,756(3,0);3,321(26,0);2,675(1,3);2,671(1,7);2,666(1,3);2,524(6,2);2,510(97,7);2,506(190,1);2,502(247,7);2,497(180,7);2,493(88,6);2,333(1,1);2,328(1,6);2,324(1,1);1,989(0,6);1,398(0,3);1,384(2,4);1,234(0,6);1,175(0,4);0,000(2,1)</p>

1) Descripción del método para la determinación de los valores logP (método de ácido fórmico)

La determinación de los valores logP indicados en la tabla se realizó según la Directiva EEC 79/831 Anexo V.A8 por medio de HPLC (cromatografía líquida de alto rendimiento) en una columna de inversión de fases (C 18). Temperatura: 55 °C.

5

Eluyentes para la determinación en el rango ácido (pH 3,4):

Eluyente A: acetonitrilo + 1 ml de ácido fórmico/litro. Eluyente B: agua + 0,9 ml de ácido fórmico/litro.

Gradiente: del 10 % de eluyente A / 90 % de eluyente B al 95 % de eluyente A / 5 % de eluyente B en 4,25 min.

10 La calibración se realizó con alcan-2-onas no ramificadas (con 3 a 16 átomos de carbono), cuyos valores logP son conocidos (determinación de los valores logP por medio de los tiempos de retención por interpolación lineal entre

dos alcanonas consecutivas). Los valores máximos lambda se calcularon por medio de los espectros UV de 200 nm a 400 nm en los máximos de las señales cromatográficas.

2) Medición de los ejemplos seleccionados de los espectros RMN

Los espectros RMN se determinaron con un Bruker Avance 400, equipado con un cabezal de muestra de flujo (60 μ l de volumen). Como disolvente se usaron CD₃CN o DMSO-D₆, utilizando como referencia tetrametilsilano (0,00 ppm). En casos aislados, se determinaron los espectros RMN con un Bruker Avance II 600. Como disolvente, se usaron CD₃CN o DMSO-D₆, utilizando como referencia tetrametilsilano (0,00 ppm).

Los datos de RMN de ejemplos seleccionados se enumeran ya sea en forma clásica (valores d, cantidad de átomos de H, división de multiplete) o como listas de picos de RMN.

- 10 La división de las señales se describió de la siguiente manera: s (singulete), d (doblete), t (triplete), q (cuarteto), quin (quinteto), m (multiplete).

Procedimientos de listas de picos de RMN

Cuando los datos de RMN de ¹H de los ejemplos seleccionados se anotan en forma de listas de picos de RMN de ¹H, se enumeran para cada pico de señal primero el valor d en ppm y luego la intensidad de la señal entre paréntesis. Los pares numéricos valor d–intensidad de la señal de distintos picos de señales se enumeran por medio de punto y coma separados entre sí.

Por ello, la lista de picos de un ejemplo tiene la forma:

$$\delta_1 (\text{intensidad}_1); \delta_2 (\text{intensidad}_2); \dots; \delta_i (\text{intensidad}_i); \dots; \delta_n (\text{intensidad}_n)$$

- 20 La intensidad de señales agudas se correlaciona con la altura de las señales en un ejemplo expresado de un espectro de RMN en cm y muestra las relaciones reales de las intensidades de señales. En señales amplias, se pueden mostrar varios picos o la media de la señal y su intensidad relativa en comparación con la señal más intensa en el espectro.

- 25 Para la calibración del desplazamiento químico de los espectros de RMN de ¹H, utilizamos tetrametilsilano y/o el desplazamiento químico del disolvente, en especial en el caso de espectros que se miden en DMSO. Por ello, en las listas de picos de RMN puede aparecer el pico de tetrametilsilano, pero no es necesario que sea así.

Las listas de los picos de RMN de ¹H son similares a las expresiones clásicas de RMN de ¹H y contienen así usualmente todos los picos que se enumeran en una interpretación clásica de RMN.

Más allá de ello, pueden mostrar como expresiones clásicas de RMN de ¹H señales de disolventes, señales de estereoisómeros de los compuestos meta que también son objeto de la invención, y/o picos de impurezas.

- 30 Al indicar las señales de los compuestos en el intervalo delta de disolventes y/o agua, se muestran en nuestras listas de picos de RMN de ¹H los picos de disolventes usuales, por ejemplo, picos de DMSO en DMSO-D₆ y el pico de agua, que usualmente presentan en promedio una elevada intensidad.

Los picos de estereoisómeros de los compuestos objeto y/o picos de impurezas tienen usualmente en promedio una escasa intensidad como los picos de los compuestos objeto (por ejemplo, con una pureza de >90 %).

- 35 Estos estereoisómeros y/o impurezas pueden ser normalmente para el correspondiente procedimiento de preparación. Sus picos pueden ayudar a reconocer la reproducción de nuestro procedimiento de preparación por medio de "huellas digitales de subproductos".

- 40 Un experto, que calcula los picos de los compuestos objeto con los procedimientos conocidos (MestreC, simulación ACD, pero también con valores esperables empíricamente calculados), puede aislar según necesidad los picos de los compuestos objeto, usando filtros de intensidad eventualmente adicionales. Este aislamiento sería similar al correspondiente "peak-picking" en la interpretación clásica de RMN de ¹H.

Se pueden extraer otros detalles de las listas de picos de RMN de ¹H de la base de datos de la descripción de búsqueda número 564025.

Ejemplos de aplicación

- 45 Los siguientes ejemplos muestran la acción insecticida, acaricida y nematicida de los compuestos según la invención. En este caso, los compuestos mencionados según la invención se refieren a los compuestos enumerados en las tablas 1 a 5 con los correspondientes números de referencia, por ejemplo, I-1-1:

Ejemplo 1:**Ensayo de Boophilus microplus (DIP)**

Animales de ensayo: hembras adultas aspiradas de cepa Parkhurst de *Boophilus microplus* – (resistente a SP)

Disolvente: dimetilsulfóxido

- 5 10 mg de principio activo se disuelven en 0,5 ml de dimetilsulfóxido. Para la preparación de una formulación apropiada, se diluye la solución de principio activo a la concentración deseada en cada caso.

Esta preparación de principio activo se pipetea en tubitos. 8-10 garrapatas se pasan a otro tubito con agujeros. El tubito se sumerge en la preparación de principio activo en la que todas las garrapatas se humectan por completo. Despues de drenar el líquido, se pasan las garrapatas a discos de filtro en cubas de plástico y se conservan en un ambiente climatizado.

10 El control del efecto se produce después de 7 días sobre la deposición de huevos fértiles. Los huevos, cuya fertilidad no es visible exteriormente, se conservan hasta la eclosión de las larvas en una cámara climática. Un efecto del 100 % significa que ninguna de las garrapatas puso huevos fértiles.

- 15 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-32, I-1-82

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-39, I-1-53, I-1-91

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-5, I-1-33, I-1-48, I-1-83, I-1-96, I-1-99, I-2-1

- 20 **Ensayo de Boophilus microplus (inyección de BOOPMI)**

Disolvente: dimetilsulfóxido

Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 10 mg de principio activo con 0,5 ml de disolvente y el concentrado se diluye con disolvente hasta la concentración deseada.

- 25 La solución de principio activo se inyecta en el abdomen (*Boophilus microplus*), los animales se pasan a cubas y se conservan en un ambiente climatizado.

El control de la acción se produce después de 7 días sobre la deposición de huevos fértiles. Los huevos, cuya fertilidad no es visible exteriormente, se conservan hasta la eclosión de las larvas después de aproximadamente 42 días en una cámara climática. Un efecto del 100 % significa que ninguna de las garrapatas puso huevos fértiles, 0 % significa que todos los huevos son fértiles.

- 30 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 20 µg / animal: I-1-55.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 20 µg / animal:

I-1-4	I-1-20	I-1-33	I-1-52	I-1-69	I-1-85	I-1-102	I-1-128	I-1-240	I-3-1
I-1-5	I-1-21	I-1-37	I-1-53	I-1-73	I-1-90	I-1-103	I-1-131	I-1-253	I-3-2
I-1-6	I-1-22	I-1-39	I-1-54	I-1-75	I-1-91	I-1-107	I-1-135	I-1-254	
I-1-9	I-1-23	I-1-43	I-1-63	I-1-81	I-1-93	I-1-109	I-1-136	I-1-562	
I-1-11	I-1-24	I-1-48	I-1-65	I-1-82	I-1-96	I-1-110	I-1-145	I-2-1	
I-1-13	I-1-25	I-1-50	I-1-67	I-1-83	I-1-99	I-1-113	I-1-186	I-2-10	
I-1-14	I-1-32	I-1-51	I-1-68	I-1-84	I-1-101	I-1-122	I-1-238	I-2-2	

- 35 **Ensayo oral de Ctenocephalides felis (CTECFE)**

Disolvente: 1 parte en peso de dimetilsulfóxido

Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 10 mg de principio activo con 0,5 ml de dimetilsulfóxido. Una parte del concentrado se diluye con sangre de vacuno citrada y se produce la concentración deseada.

- 5 Aproximadamente 20 pulgas adultas en ayunas (*Ctenocephalides felis*) se colocan en una cámara que está cerrada con gasa por arriba y por abajo. Sobre la cámara, se coloca un cilindro de metal cuya parte inferior está cerrada con parafilm. El cilindro contiene la preparación de sangre-principio activo, que puede ser absorbida por las pulgas a través de la membrana de parafilm.

Después de 2 días, se determina la mortalidad en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todas las pulgas; 0 % significa que no se mató ninguna pulga.

- 10 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-91, I-1-99

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 85 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-128

- 15 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-131, I-2-1, I-2-10

Ensayo de *Lucilia cuprina* (LUCICU)

Disolvente: dimetilsulfóxido

Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 10 mg de principio activo con 0,5 ml de dimetilsulfóxido y el concentrado se diluye con agua hasta la concentración deseada.

- 20 Los recipientes que contienen carne de caballo que se trató con la preparación de principio activo de la concentración deseada se llenan con aproximadamente 20 larvas de *Lucilia cuprina*.

Después de 2 días, se determina la mortalidad en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todas las larvas; 0 % significa que no se mató ninguna larva.

- 25 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-63, I-1-186, I-2-2, I-3-1.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-20, I-1-37, I-1-51, I-1-69, I-1-145.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 95 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-82.

- 30 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm:

I-1-5	I-1-32	I-1-50	I-1-65	I-1-81	I-1-93	I-1-107	I-1-128	I-1-562
I-1-6	I-1-33	I-1-52	I-1-67	I-1-83	I-1-96	I-1-109	I-1-131	I-2-1
I-1-11	I-1-39	I-1-53	I-1-73	I-1-85	I-1-99	I-1-110	I-1-135	
I-1-14	I-1-43	I-1-54	I-1-75	I-1-91	I-1-101	I-1-113	I-1-254	

Ensayo de *Musca domestica* (MUSCDO)

Disolvente: dimetilsulfóxido

- 35 Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 10 mg de principio activo con 0,5 ml de dimetilsulfóxido y el concentrado se diluye con agua hasta la concentración deseada.

Los recipientes que contienen una esponja que se trató con la preparación de principio activo de la concentración deseada, se cargan con adultos de *Musca domestica*.

- 40 Después de 2 días, se determina la mortalidad en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todas las moscas; 0 % significa que no se mató ninguna mosca.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 85 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm: I-1-91.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm: I-1-99.

- 5 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-562.

Ensayo de Cooperia curticei (COOPCU)

Disolvente: dimetilsulfóxido

- 10 Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 10 mg de principio activo con 0,5 ml de dimetilsulfóxido y el concentrado se diluye con solución de Ringer hasta la concentración deseada.

Los recipientes con la preparación de principio activo de la concentración deseada se ocupan con aproximadamente 40 larvas de nematodos (*Cooperia curticei*).

Después de 5 días, se determina la mortalidad en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todas las larvas; 0 % significa que no se mató ninguna larva.

- 15 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 4 ppm: I-2-7, I-1-284.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-44	I-1-219	I-1-288	I-1-421	I-1-495	I-1-591	I-2-18	I-2-58	I-2-66	I-3-3
I-1-156									

- 20 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm: I-1-22, I-1-69, I-1-121, I-1-211

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 4 ppm: I-1-221, I-1-555

- 25 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-63	I-1-465	I-1-484	I-1-488	I-1-501	I-1-587	I-2-2	I-2-49
I-1-284	I-1-470	I-1-487	I-1-499	I-1-581	I-1-593	I-2-37	

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm:

I-1-11	I-1-20	I-1-39	I-1-54	I-1-91	I-1-135	I-1-562
I-1-13	I-1-32	I-1-51	I-1-79	I-1-107	I-1-136	I-2-6
I-1-14	I-1-36	I-1-52	I-1-81	I-1-132	I-1-138	I-4-3

- 30 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 4 ppm: I-2-1

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-6	I-1-142	I-1-277	I-1-468	I-1-502	I-2-17	I-2-40	I-2-62
I-1-9	I-1-253	I-1-335	I-1-472	I-1-507	I-2-35	I-2-41	I-3-1
I-1-10	I-1-254	I-1-459	I-1-492	I-1-575	I-2-36	I-2-44	I-3-6
I-1-64	I-1-259	I-1-467	I-1-494	I-1-580	I-2-38	I-2-57	I-3-7

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm:

I-1-5	I-1-62	I-1-73	I-1-85	I-1-103	I-1-119	I-1-133	I-1-146	I-2-5
I-1-33	I-1-65	I-1-75	I-1-92	I-1-104	I-1-128	I-1-140	I-1-151	I-2-10
I-1-46	I-1-66	I-1-82	I-1-93	I-1-105	I-1-129	I-1-143	I-1-162	
I-1-50	I-1-67	I-1-83	I-1-96	I-1-109	I-1-130	I-1-144	I-1-491	
I-1-53	I-1-71	I-1-84	I-1-99	I-1-113	I-1-131	I-1-145	I-1-506	

5

Ensayo de *Haemonchus contortus* (HAEMCO)

Disolvente: dimetilsulfóxido

Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 10 mg de principio activo con 0,5 ml de dimetilsulfóxido y el concentrado se diluye con solución de Ringer hasta la concentración deseada.

10 Los recipientes con la preparación de principio activo de la concentración deseada se ocupan con aproximadamente 40 larvas de *Haemonchus contortus*.

Después de 5 días, se determina la mortalidad en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todas las larvas; 0 % significa que no se mató ninguna larva.

15 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 4 ppm: I-2-1, I-2-51.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-9	I-1-63	I-1-335	I-1-467	I-1-502	I-1-554	I-1-591	I-2-55
I-1-36	I-1-259	I-1-427	I-1-484	I-1-549	I-1-589	I-2-12	I-2-66

20 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm:

I-1-10	I-1-20	I-1-46	I-1-81	I-1-96	I-1-129	I-1-151	I-1-562
I-1-11	I-1-33	I-1-71	I-1-85	I-1-99	I-1-136	I-1-162	

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 4 ppm: I-1-221, I-2-49

25 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-64	I-1-186	I-1-277	I-1-366	I-1-472	I-1-582	I-1-593	I-2-48	I-2-62	I-3-7
I-1-66	I-1-252	I-1-288	I-1-378	I-1-492	I-1-587	I-2-13	I-2-58	I-3-6	

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm:

I-1-13	I-1-36	I-1-73	I-1-83	I-1-103	I-1-133	I-1-491
I-1-35	I-1-54	I-1-82	I-1-84	I-1-132	I-1-251	I-2-5

- 5 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-68	I-1-494	I-1-581	I-2-18	I-2-38	I-2-49	I-3-1
I-1-142	I-1-575	I-2-14	I-2-35	I-2-41	I-2-50	I-3-3
I-1-219	I-1-580	I-2-17	I-2-36	I-2-44	I-2-51	I-3-5

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 100 ppm:

I-1-66	I-1-104	I-1-105	I-1-130	I-1-140	I-1-143	I-1-144	I-1-145	I-1-146	I-2-10
--------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	--------

10 **Ensayo de Meloidogyne incognita (MELGIN)**

Disolvente: 125,0 partes en peso de acetona

Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 1 parte en peso de principio activo con la cantidad indicada de disolventes y el concentrado se diluye con agua hasta la concentración deseada.

- 15 Los recipientes se llenan con arena, solución de principio activo, una suspensión de huevos-larvas de *Meloidogyne incognita* y semillas de lechuga. Las semillas de lechuga germinan y las plántulas se desarrollan. En las raíces, se desarrollan agalles.

Después de 14 días, se determina la acción nematicida por medio de la formación de agalles en %. En este caso, 100 % significa que no se hallaron agalles; 0 % significa que la cantidad de agalles en las plantas tratadas corresponde al control no tratado.

- 20 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación, por ejemplo, mostraban una acción del 80 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm: I-1-137.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 90 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-6	I-1-130	I-1-255	I-1-354	I-1-419	I-1-492	I-1-535	I-1-641	I-2-56	I-4-4
I-1-20	I-1-131	I-1-256	I-1-395	I-1-438	I-1-499	I-1-540	I-2-2	I-2-68	
I-1-59	I-1-147	I-1-274	I-1-398	I-1-455	I-1-502	I-1-555	I-2-12	I-2-70	
I-1-77	I-1-190	I-1-284	I-1-409	I-1-466	I-1-512	I-1-588	I-2-18	I-2-76	
I-1-100	I-1-192	I-1-308	I-1-410	I-1-471	I-1-518	I-1-596	I-2-23	I-2-80	
I-1-120	I-1-205	I-1-335	I-1-415	I-1-482	I-1-528	I-1-598	I-2-37	I-2-84	
I-1-125	I-1-254	I-1-345	I-1-418	I-1-484	I-1-531	I-1-599	I-2-52	I-3-1	

- 25 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 100 % con una cantidad de aplicación de 20 ppm:

I-1-3	I-1-74	I-1-86	I-1-117	I-1-142	I-1-459	I-1-574	I-2-11	I-2-46	I-2-79
I-1-14	I-1-75	I-1-90	I-1-121	I-1-143	I-1-465	I-1-575	I-2-13	I-2-48	I-2-82
I-1-50	I-1-76	I-1-91	I-1-122	I-1-144	I-1-468	I-1-591	I-2-17	I-2-49	I-2-83
I-1-57	I-1-81	I-1-92	I-1-128	I-1-145	I-1-470	I-1-622	I-2-35	I-2-51	
I-1-65	I-1-82	I-1-93	I-1-129	I-1-146	I-1-472	I-1-626	I-2-36	I-2-62	
I-1-67	I-1-83	I-1-95	I-1-135	I-1-152	I-1-488	I-1-629	I-2-38	I-2-66	
I-1-70	I-1-84	I-1-96	I-1-140	I-1-191	I-1-491	I-1-631	I-2-41	I-2-67	
I-1-73	I-1-85	I-1-99	I-1-141	I-1-208	I-1-519	I-2-10	I-2-44	I-2-71	

Ensayo de pulverización de *Myzus persicae* (MYZUPK)

5 Disolvente: 78 partes en peso de acetona
1,5 partes en peso de dimetilformamida

Emulsionante: 0,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 1 parte en peso de principio activo con las cantidades indicadas de disolvente y emulsionante y el concentrado se diluye con agua con contenido de emulsionante hasta la concentración deseada.

10 Discos de hojas de col china (*Brassica pekiueusis*), que estaban infestados con todos los estadios del pulgón del duraznero verde (*Myzus persicae*), se rocían con una preparación de principio activo de la concentración deseada.

Después de 6 días, se determina la acción en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todos los piojos de las hojas; 0 % significa que no se mató ningún piojo de las hojas.

15 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 80 % con una cantidad de aplicación de 500 g/ha : I-1-25.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 90 % con una cantidad de aplicación de 500 g/ha : I-1-63, I-1-80, I-1-133, I-1-145, I-1-280, I-2-39, I-2-58.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 90 % con una cantidad de aplicación de 20 g/ha : I-1-86

Ensayo de pulverización de *Phaedon cochleariae* (PHAEKO)

Disolvente: 78,0 partes en peso de acetona
1,5 partes en peso de dimetilformamida

Emulsionante: 0,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

25 Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 1 parte en peso de principio activo con las cantidades indicadas de disolvente y emulsionante y el concentrado se diluye con agua con contenido de emulsionante hasta la concentración deseada.

Discos de hojas de col china (*Brassica pekinensis*) se pulverizan con una preparación de principio activo de la concentración deseada y después de secar, se ocupó con larvas de *Phaedon cochleariae*.

30 Después de 7 días, se determina la acción en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todas las larvas de escarabajo; 0 % significa que no se mató ninguna larva de escarabajo.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 83 % con una cantidad de aplicación de 500 g/ha:

I-1-10	I-1-19	I-1-77	I-1-108	I-1-275	I-1-415	I-1-433
I-1-16	I-1-34	I-1-102	I-1-124	I-1-317	I-1-426	I-1-551

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 100 % con una cantidad de aplicación de 500 g/ha :

I-1-1	I-1-28	I-1-50	I-1-74	I-1-103	I-1-132	I-1-259	I-1-555	I-2-8	I-3-1
I-1-3	I-1-29	I-1-51	I-1-75	I-1-107	I-1-133	I-1-260	I-1-556	I-2-9	I-3-2
I-1-4	I-1-31	I-1-52	I-1-76	I-1-109	I-1-134	I-1-261	I-1-559	I-2-10	I-3-5
I-1-5	I-1-32	I-1-53	I-1-78	I-1-110	I-1-135	I-1-262	I-1-562	I-2-12	I-4-1
I-1-6	I-1-33	I-1-54	I-1-81	I-1-111	I-1-136	I-1-263	I-1-564	I-2-13	I-4-2
I-1-7	I-1-35	I-1-55	I-1-82	I-1-113	I-1-137	I-1-264	I-1-565	I-2-15	I-4-3
I-1-9	I-1-36	I-1-57	I-1-83	I-1-114	I-1-138	I-1-335	I-1-566	I-2-17	
I-1-11	I-1-37	I-1-58	I-1-84	I-1-117	I-1-168	I-1-352	I-1-578	I-2-35	
I-1-12	I-1-38	I-1-60	I-1-85	I-1-118	I-1-190	I-1-372	I-1-580	I-2-36	
I-1-13	I-1-39	I-1-61	I-1-86	I-1-119	I-1-231	I-1-384	I-1-596	I-2-37	
I-1-14	I-1-40	I-1-63	I-1-90	I-1-120	I-1-238	I-1-395	I-1-599	I-2-38	
I-1-15	I-1-41	I-1-65	I-1-91	I-1-121	I-1-240	I-1-403	I-1-642	I-2-39	
I-1-17	I-1-42	I-1-66	I-1-92	I-1-122	I-1-243	I-1-406	I-2-1	I-2-41	
I-1-20	I-1-43	I-1-67	I-1-93	I-1-123	I-1-248	I-1-408	I-2-2	I-2-44	
I-1-21	I-1-44	I-1-68	I-1-94	I-1-125	I-1-253	I-1-410	I-2-3	I-2-45	
I-1-22	I-1-45	I-1-69	I-1-95	I-1-127	I-1-254	I-1-411	I-2-4	I-2-46	
I-1-23	I-1-46	I-1-70	I-1-96	I-1-128	I-1-255	I-1-417	I-2-5	I-2-49	
I-1-24	I-1-48	I-1-72	I-1-99	I-1-129	I-1-256	I-1-428	I-2-6	I-2-55	
I-1-25	I-1-49	I-1-73	I-1-101	I-1-131	I-1-258	I-1-550	I-2-7	I-2-57	

Ensayo de pulverización de Spodoptera frugiperda (SPODFR)

- 5 Disolvente: 78,0 partes en peso de acetona
1,5 partes en peso de dimetilformamida
- Emulsionante: 0,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter
- 10 Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 1 parte en peso de principio activo con las cantidades indicadas de disolvente y emulsionante y el concentrado se diluye con agua con contenido de emulsionante hasta la concentración deseada.
- Se pulverizan discos de hojas de maíz (*Zea mays*) con una preparación de principio activo de la concentración deseada y se ocupan después del secado con orugas *Spodoptera frugiperda*.
- Después de 7 días, se determina la acción en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todas las orugas; 0 % significa que no se mató ninguna oruga.
- 15 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 83 % con una cantidad de aplicación de 100 g/ha : I-1-118
- En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 83 % con una cantidad de aplicación de 500 g/ha : I-1-17, I-1-29, I-1-34
- 20 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, una acción del 100 % con una cantidad de aplicación de 500 g/ha : I-1-35, I-1-75, I-1-136, I-1-259, I-1-403, I-2-41

Ensayo de pulverización de *Tetranychus urticae*, resistente a OP (TETRUR)

Disolvente: 78,0 partes en peso de acetona
 1,5 partes en peso de dimetilformamida
 Emulsionante: 0,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

- 5 Para obtener una preparación apropiada de principio activo, se mezclan 1 parte en peso de principio activo con las cantidades indicadas de disolvente y emulsionante y el concentrado se diluye con agua con contenido de emulsionante hasta la concentración deseada.

Se pulverizan discos de hojas de frijoles (*Phaseolus vulgaris*), que están infestados de todos los estadios de *Tetranychus urticae*, con una preparación de principio activo de la concentración deseada.

- 10 Después de 6 días, se determina la acción en %. En este caso, 100 % significa que se mataron todos los ácaros; 0 % significa que no se mató ningún ácaro.

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 80 % con una cantidad de aplicación de 500 g /ha : I-1-10, I-1-18, I-1-39, I-1-248

- 15 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 85 % con una cantidad de aplicación de 500 g /ha: I-1-598

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 500 g /ha :

I-1-7	I-1-51	I-1-73	I-1-103	I-1-116	I-1-188	I-1-238	I-1-281	I-1-360	I-1-472
I-1-11	I-1-52	I-1-79	I-1-107	I-1-145	I-1-203	I-1-259	I-1-338	I-1-370	I-1-558
I-1-26	I-1-53	I-1-80	I-1-109	I-1-157	I-1-212	I-1-264	I-1-354	I-1-433	
I-1-32	I-1-69	I-1-99	I-1-113	I-1-186	I-1-213	I-1-275	I-1-355	I-1-463	

- 20 En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 90 % con una cantidad de aplicación de 100 g /ha: I-1-43

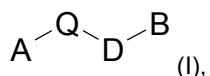
En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 95 % con una cantidad de aplicación de 500 g /ha : I-1-210, I-1-258, I-1-262, I-1-263, I-1-428, I-1-596

En este ensayo, los siguientes compuestos de los ejemplos de preparación mostraban, por ejemplo, un efecto del 100 % con una cantidad de aplicación de 500 g /ha :

I-1-5	I-1-20	I-1-35	I-1-48	I-1-66	I-1-83	I-1-185	I-1-253	I-1-372	I-2-62
I-1-6	I-1-33	I-1-37	I-1-64	I-1-67	I-1-101	I-1-214	I-1-254	I-1-403	

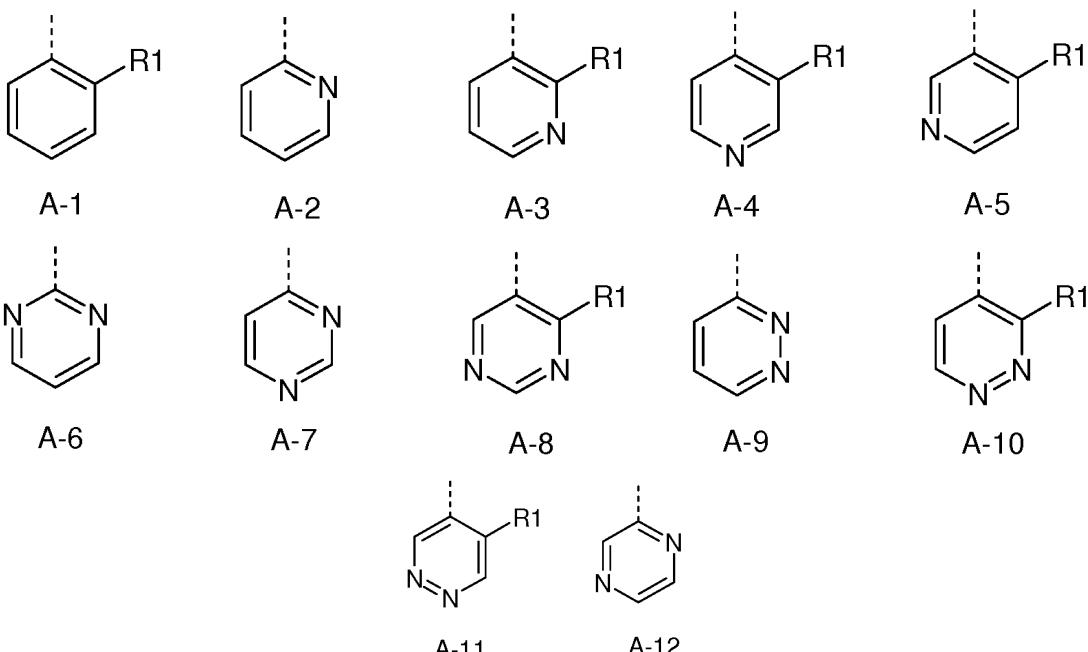
REIVINDICACIONES

1. Uso no terapéutico de compuestos de la fórmula (I)

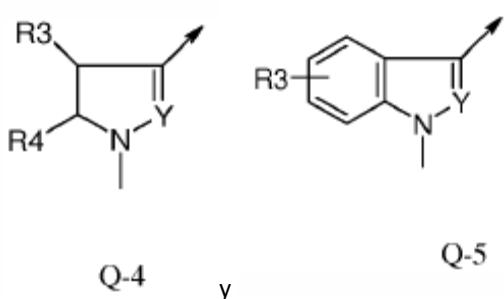
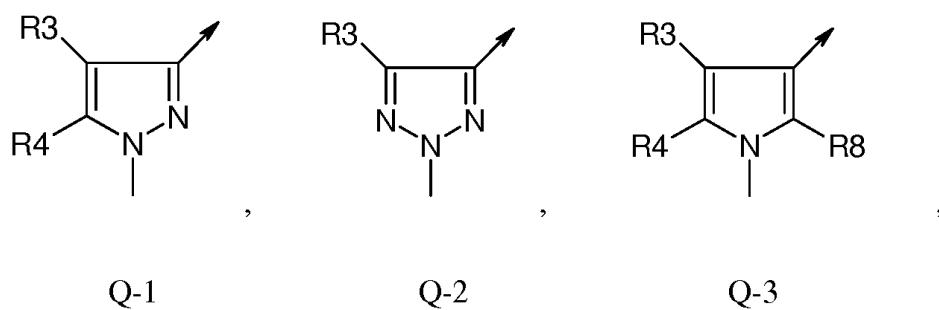


en donde

5 A representa un radical de la serie

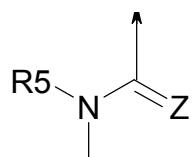


10 en donde la línea de puntos significa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2,
Q representa un radical de la serie

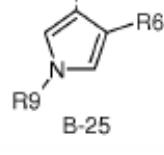
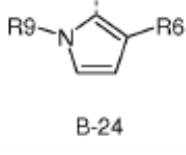
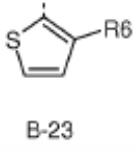
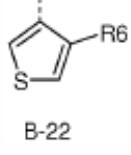
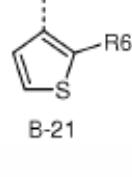
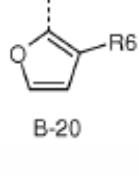
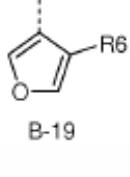
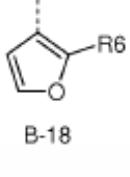
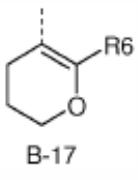
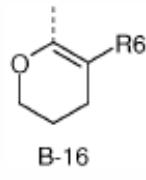
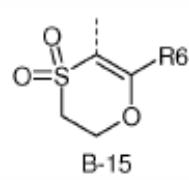
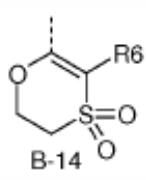
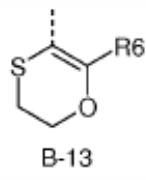
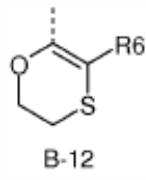
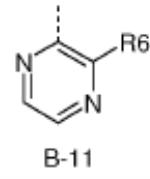
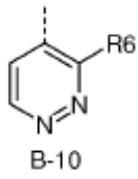
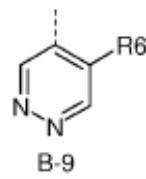
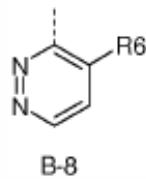
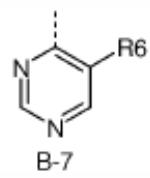
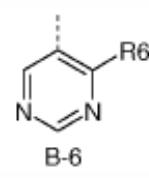
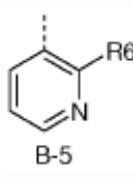
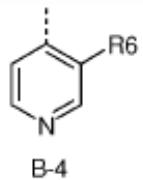
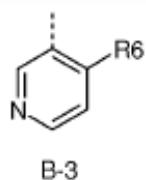
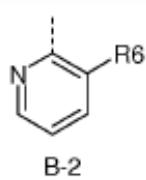
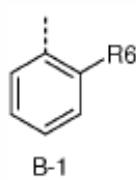


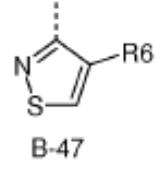
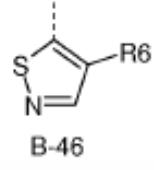
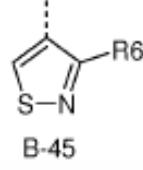
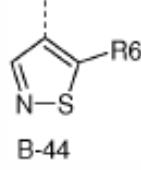
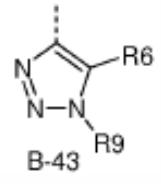
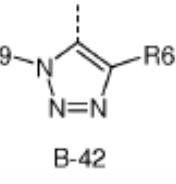
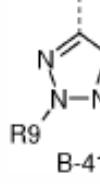
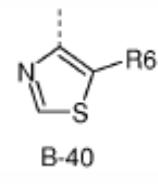
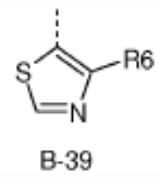
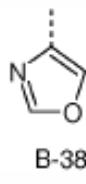
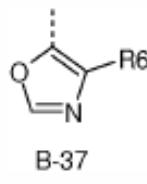
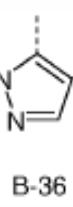
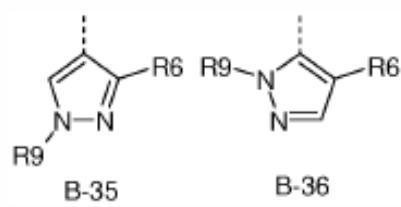
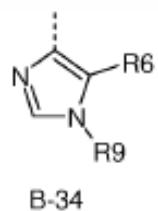
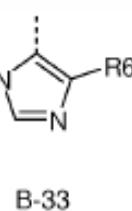
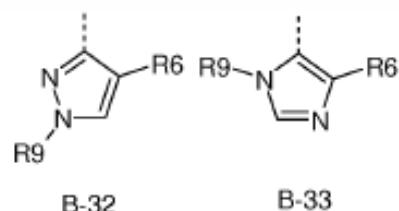
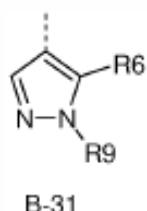
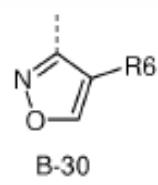
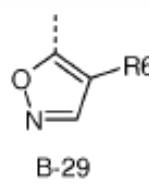
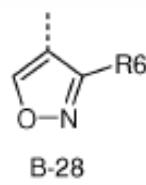
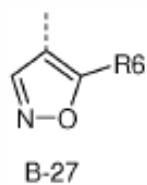
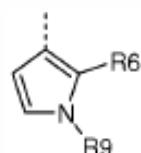
en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa en cada caso el enlace con D, y

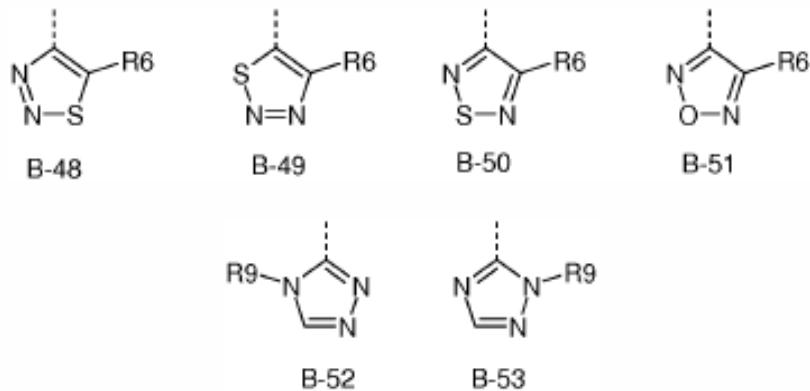
D representa el radical de la fórmula



en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B,
 B representa un radical de la serie







en donde la línea de puntos significa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7,

Y en el resto Q-4 representa CR8 o representa nitrógeno,

Y en el resto Q-5 representa nitrógeno,

Z representa oxígeno o azufre,

R1 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, representa alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquil C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquenil C₁-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquil C₃-C₆-amino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, cicloalquil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, cicloalquil C₃-C₆-tio, alquenil C₁-C₆-sulfinilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquenil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-tiocarbonilamino, bicicloalquilo C₄-C₁₂, arilo, ariloxi, arilamino, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi, heteroarilamino y heteroariltio dado el caso mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente entre sí, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₁-C₆-tio, arilo, ariloxi, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi y heteroariltio,

R2 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, representa alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalcoxi C₃-C₆, alquenil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquenil C₁-C₆-amino, di-(alquenil C₁-C₆)-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquil C₃-C₆-amino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, cicloalquil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, cicloalquil C₃-C₆-tio, alquenil C₁-C₆-sulfinilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquenil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-tiocarbonilamino, bicicloalquilo C₄-C₁₂, arilo, ariloxi, arilamino, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi, heteroarilamino y heteroariltio dado el caso mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente entre sí, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆ y alquenil C₁-C₆-tio, arilo, ariloxi, ariltio, heteroarilo, heteroariloxi y heteroariltio,

R3 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

R4 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

R5 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenil C₂-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquil C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo y haloalquil C₁-C₆-sulfonilo o representa C(=O)-B,

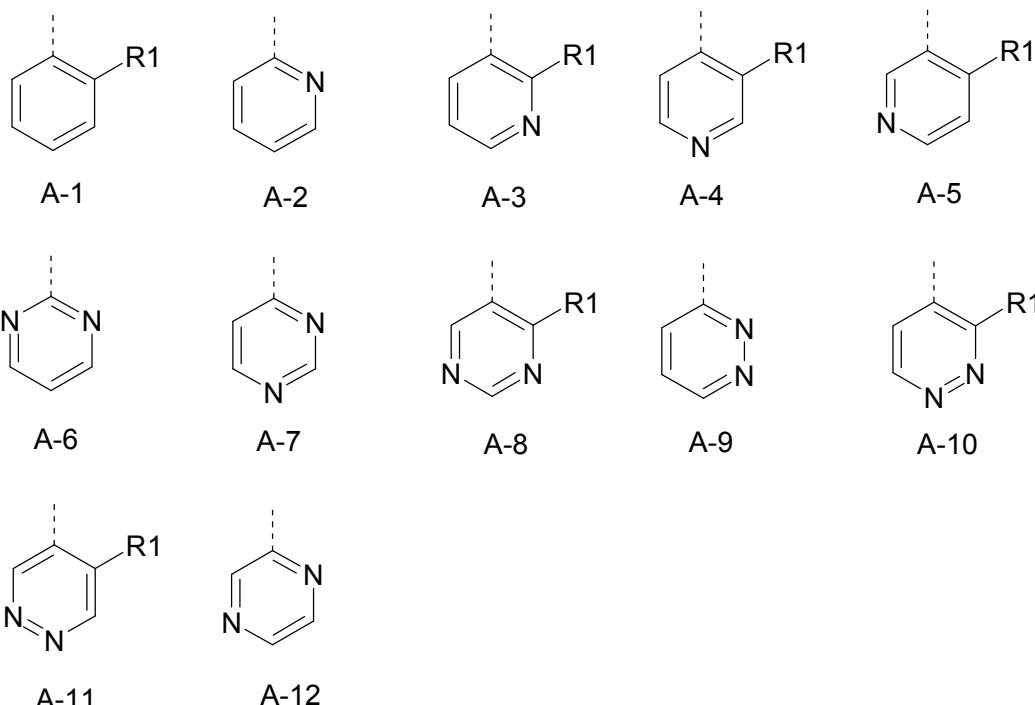
R6 representa un radical de la serie de hidrógeno (sólo en los radicales B-26, B-33, B-36 y B-42), halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, carboxilo, representa alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalcoxi C₃-C₆, alquenil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alquenil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, cicloalquil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-tio, alquenil C₁-C₆-sulfinilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquenil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, haloalquil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-tio)

C₆-tiocarbonilamino, bicicloalquilo C₄-C₁₂, arilo, ariloxi, heteroarilo, heteroariloxi dado el caso mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente entre sí, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆ y alquil C₁-C₆-tio,

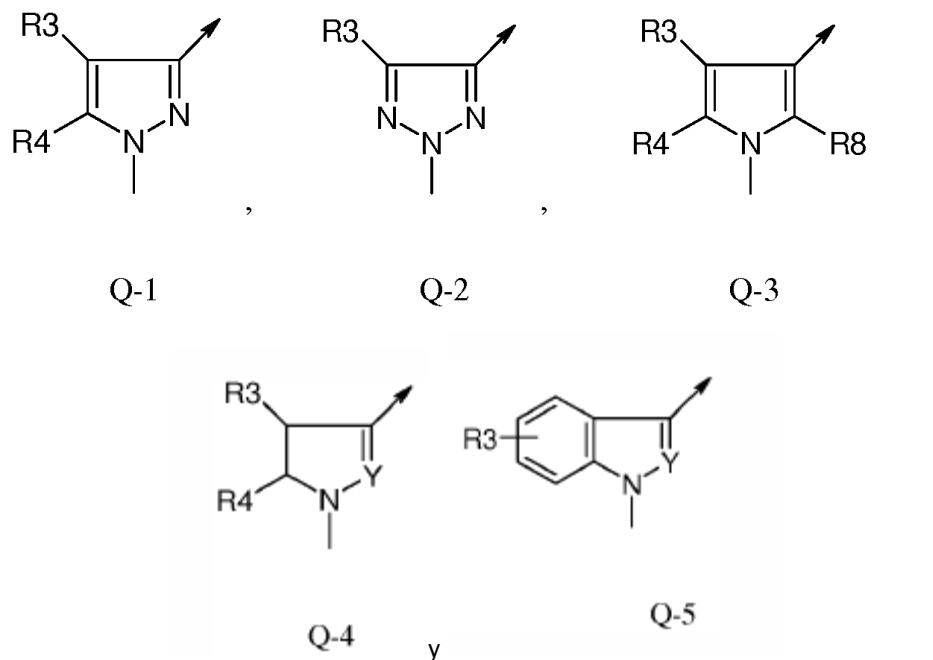
- 5 R7 representa un radical de la serie de halógeno, nitro, ciano, amino, hidroxi, representa alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₆, alquen C₃-C₆-oxi, alquin C₃-C₆-oxi, cicloalcoxí C₃-C₆, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquil C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, alquen C₃-C₆-carbonilamino, cicloalquil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, cicloalquil C₃-C₆-carbonilamino, alcoxi C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₂-C₆-carbonilamino, alquinil C₂-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-sulfonilo, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquilo C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquenil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilamino, alquenil C₁-C₆-carbonilamino, alquenil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo, heteroariloxi, bicicloalquilo C₄-C₁₂ dado el caso mono- o polisustituidos, igual o diferente, en donde los sustituyentes están seleccionados, de modo independiente entre sí, de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, amino, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₆ y alquil C₁-C₆-tio,
- 10 R8 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,
- 15 R9 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo, alquenilo C₃-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenil C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquilo C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₁-C₆-sulfonilo y haloalquilo C₁-C₆-sulfonilo,
- 20 m representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1 los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes y
- 25 n representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1 los radicales R7 pueden ser iguales o diferentes,
- para combatir plagas animales.

2. Uso no terapéutico de compuestos de la fórmula (I) de acuerdo con la reivindicación 1, en los que

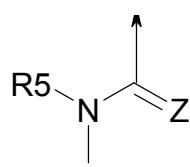
A representa un radical de la serie



- 30 en donde la línea de puntos significa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2,
Q representa un radical de la serie

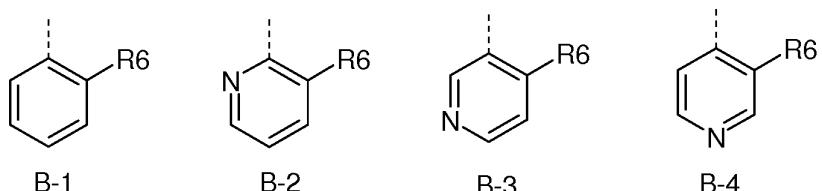


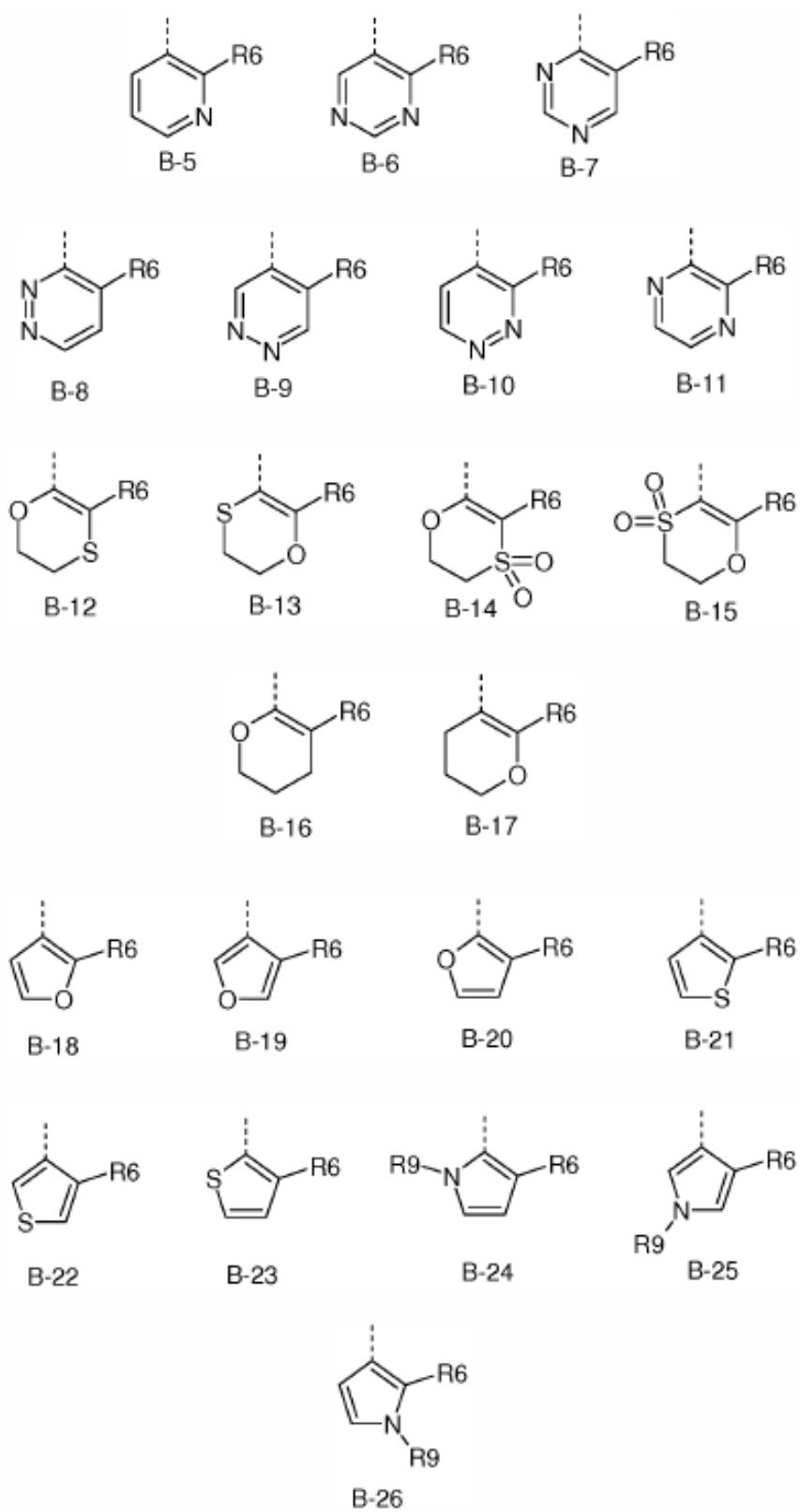
en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa en cada caso el enlace con D,
D representa el radical de la fórmula

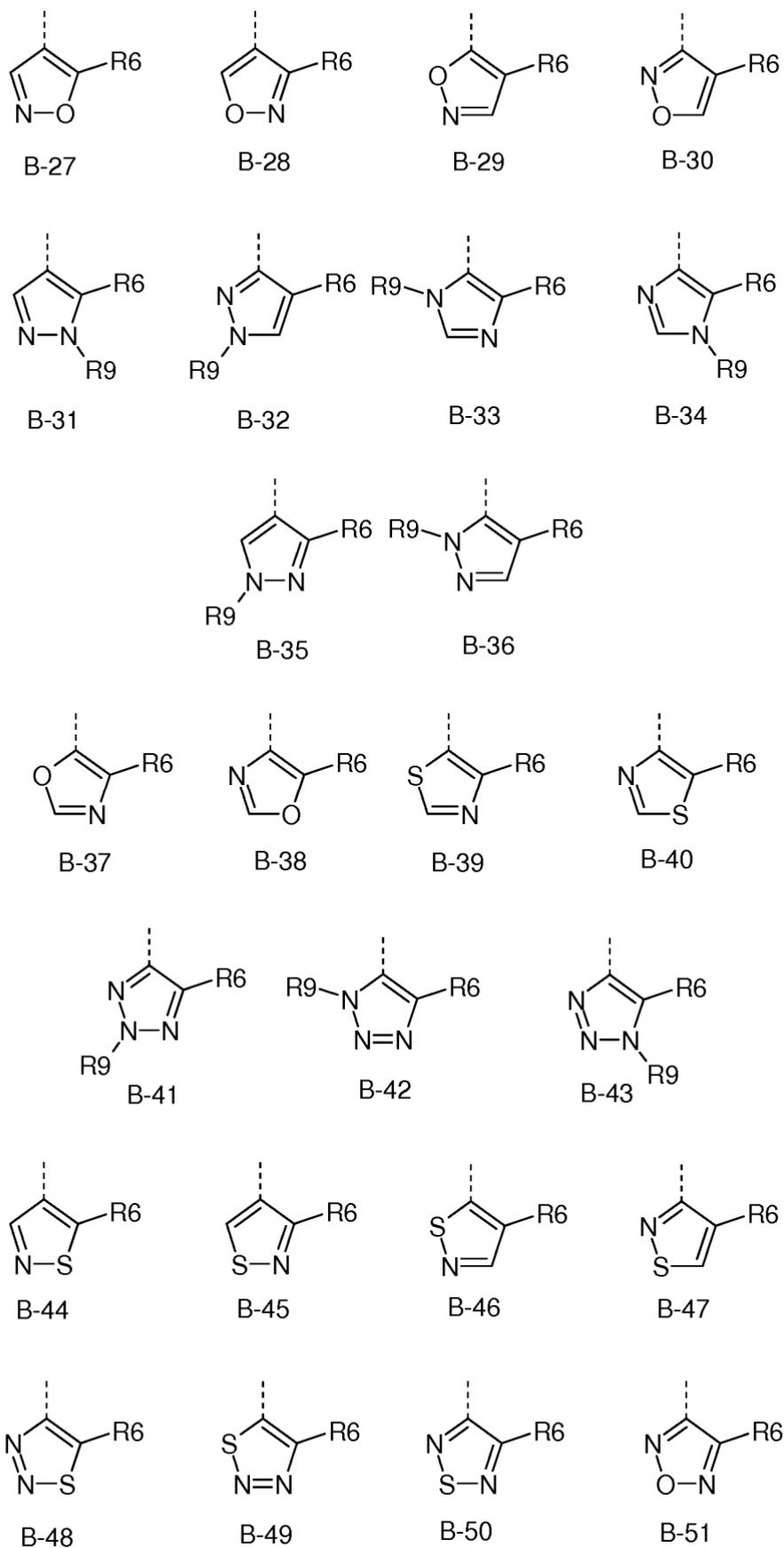


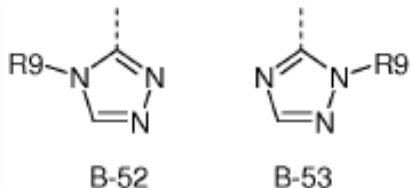
5

en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B
B representa un radical de la serie









en donde la línea de puntos significa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7,

Y en el resto Q-4 representa CR8 o representa nitrógeno,

Y en el resto Q-5 representa nitrógeno,

Z representa oxígeno o azufre,

R1 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquil C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquilo C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquil C₁-C₆-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquilo C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquilo C₃-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfinito, alquil C₁-C₆-sulfonilo, alquil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

R2 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquilo C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquil C₁-C₆-amino, di-(alquil C₁-C₆)-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquilo C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquilo C₃-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfinito, alquil C₁-C₆-sulfonilo, alquil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

R3 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₆ y haloalquilo C₁-C₆,

R4 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

R5 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilo C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alquil C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquilo C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilo, haloalquilo C₁-C₆-sulfonilo y C(=O)-B,

R6 representa un radical de la serie de hidrógeno (sólo en los radicales B-26, B-33, B-36 y B-42), halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, carboxilo, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilo C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquilo C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquil C₁-C₆-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquilo C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-sulfinito, alquenil C₃-C₆-sulfonilo, alquenil C₃-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, haloalquilo C₁-C₄-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

R7 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilo C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-carboniloxi, alquenil C₂-C₆-carboniloxi, alquinil C₂-C₆-carboniloxi, cicloalquilo C₃-C₆-carboniloxi, alcoxi C₁-C₆-carboniloxi, alquil C₁-C₆-sulfoniloxi, alquil C₁-C₆-amino, alquenil C₃-C₆-amino, alquinil C₃-C₆-amino, cicloalquilo C₃-C₆-amino, alquil C₁-C₆-tio, haloalquilo C₁-C₆-tio, alquenil C₃-C₆-tio, alquinil C₃-C₆-tio, cicloalquilo C₃-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfinito, alquil C₁-C₆-sulfonilo, alquil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, aminocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminocarbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-aminocarbonilo, aminotiocarbonilo, alquil C₁-C₆-aminosulfonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilamino, alquil C₁-C₆-carbonilamino, haloalquilo C₁-C₄-carbonilamino, alquil C₁-C₆-tiocarbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

R8 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

R9 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₆, alquenilo

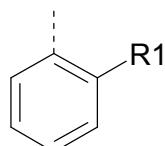
C₃-C₆, alquinilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquil C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquil C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquil C₁-C₆-sulfonilo y haloalquil C₁-C₆-sulfonilo,

5 m representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1 los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes y

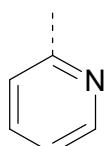
n representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1 los radicales R7 pueden ser iguales o diferentes.

3. Uso no terapéutico de compuestos de la fórmula (I) de acuerdo con la reivindicación 1, en los que

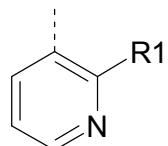
A representa un radical de la serie



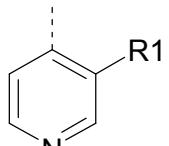
A-1



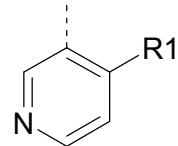
A-2



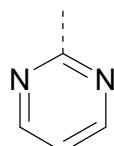
A-3



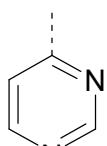
A-4



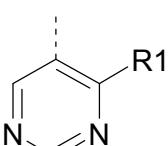
A-5



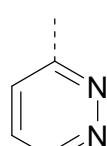
A-6



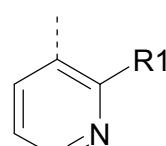
A-7



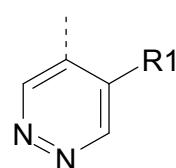
A-8



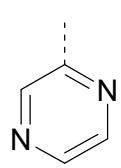
A-9



A-10



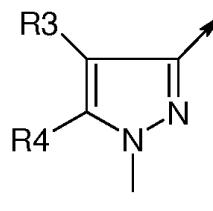
A-11



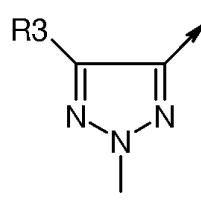
A-12

10

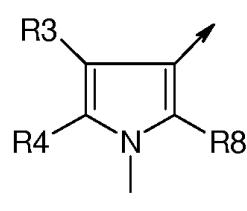
en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2, Q representa un radical de la serie



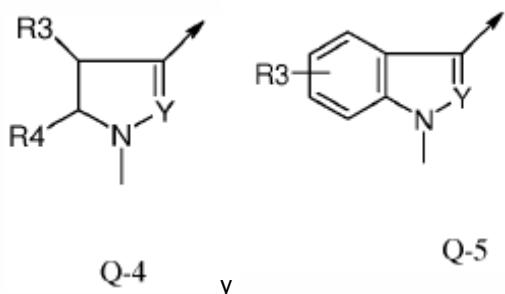
Q-1



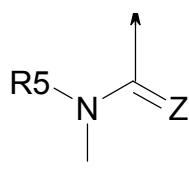
Q-2



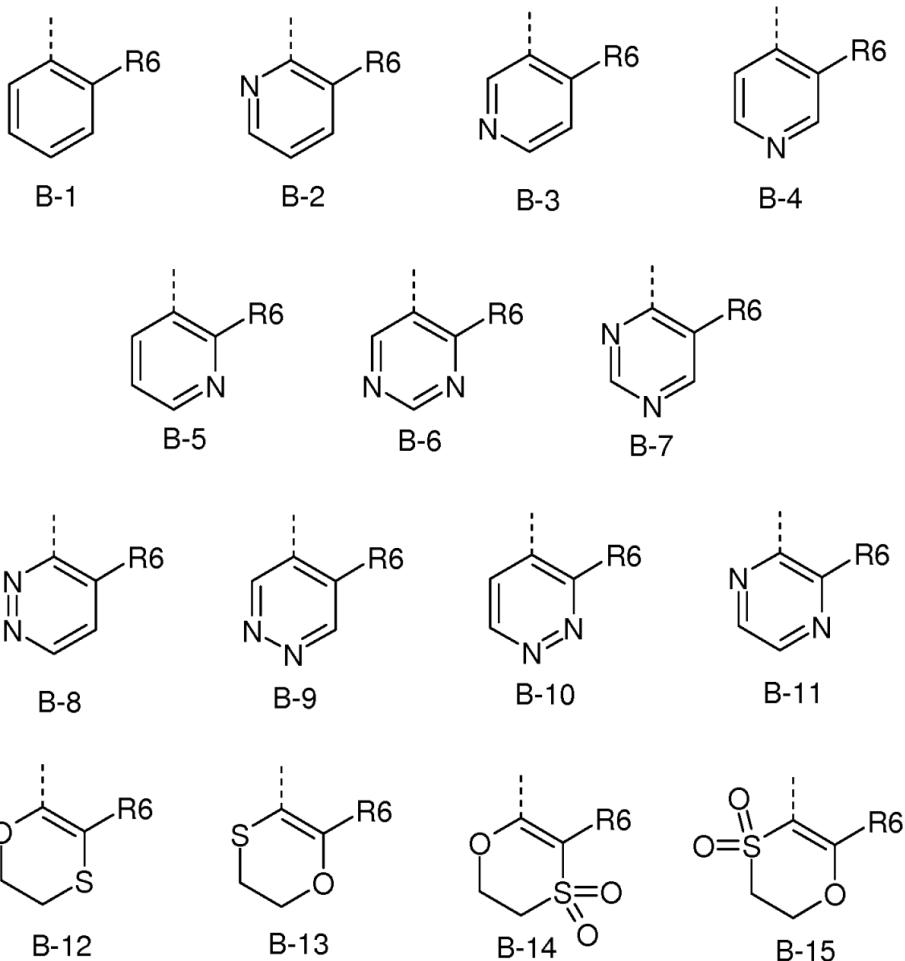
Q-3

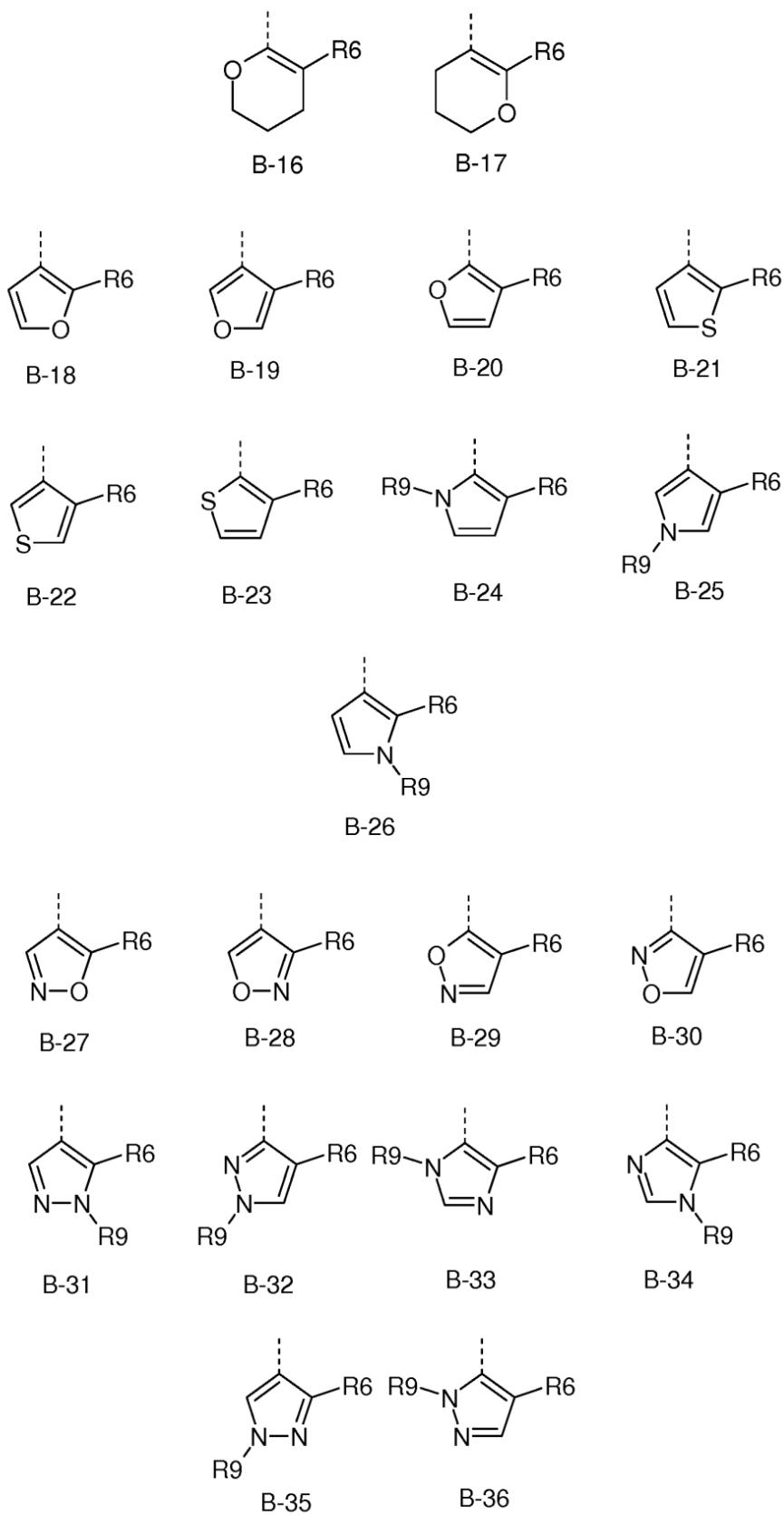


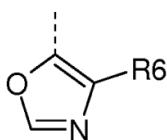
en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa en cada caso el enlace con D,
D representa el radical de la fórmula



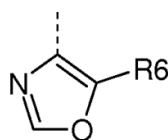
- 5 en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B,
B representa un radical de la serie



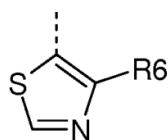




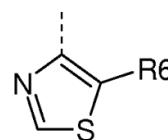
B-37



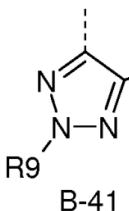
B-38



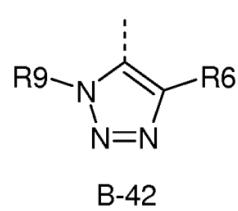
B-39



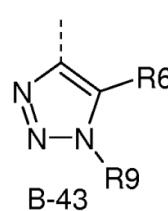
B-40



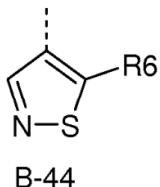
B-41



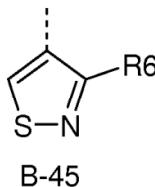
B-42



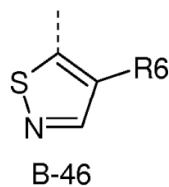
B-43



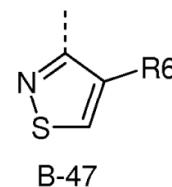
B-44



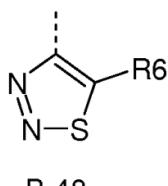
B-45



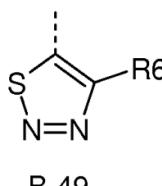
B-46



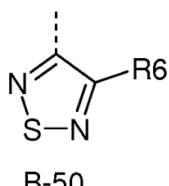
B-47



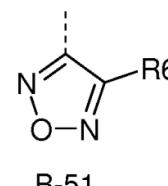
B-48



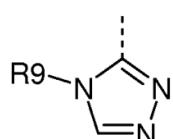
B-49



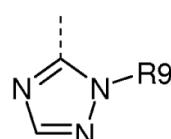
B-50



B-51



B-52



B-53

en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7,
Y en el resto Q-4 representa CR8 o representa nitrógeno,

Y en el resto Q-5 representa nitrógeno,

Z representa oxígeno o azufre,

R1 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-tio, haloalquil C₁-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfínico, alquil C₁-C₆-sulfónico, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

R2 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquilo C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-tio, haloalquil C₁-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfínico, alquil C₁-C₆-sulfónico, alquil C₁-C₆-carbonilo, di-(alquil C₁-C₆)-amino, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

R3 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₆ y haloalquilo C₁-C₆,

R4 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, amino, hidroxi, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

R5 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alquil C₁-C₆-carbonilo, alquenil C₂-C₆-carbonilo, haloalquil C₁-C₆-carbonilo, haloalquenil C₂-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆-carbonilo, alquil C₁-C₆-sulfónico, haloalquil C₁-C₆-sulfónico y C(=O)-B,

5 R6 representa un radical de la serie de hidrógeno (sólo en los radicales B-26, B-33, B-36 y B-42), halógeno, ciano, nitro, hidroxi, carboxilo, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquil C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-sulfínico, alquil C₁-C₆-tio, haloalquil C₁-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfónico, alquil C₁-C₆-carbonilo, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, alquil C₁-C₆-carbonilamino, haloalquil C₁-C₆-carbonilamino, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

10 R7 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, ciano-alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquenil C₃-C₆-oxi, alquinil C₃-C₆-oxi, cicloalquil C₃-C₆-oxi, alquil C₁-C₆-tio, haloalquil C₁-C₆-tio, alquil C₁-C₆-sulfínico, alquil C₁-C₆-sulfónico, alcoxi C₁-C₆-imino-alquilo C₁-C₆, arilo, ariloxi, heteroarilo y heteroariloxi,

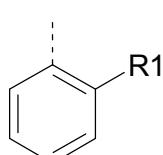
15 R8 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆ y haloalcoxi C₁-C₆,

15 m representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1, los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes y

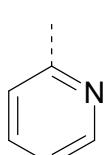
n representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1, los radicales R7 pueden ser iguales o diferentes.

4. Uso no terapéutico de compuestos de la fórmula (I) de acuerdo con la reivindicación 1, en los que

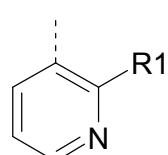
20 A representa un radical de la serie



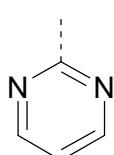
A-1



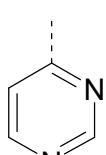
A-2



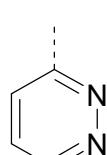
A-3



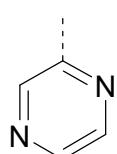
A-6



A-7

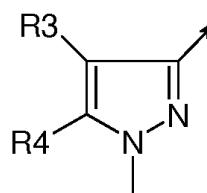


A-9

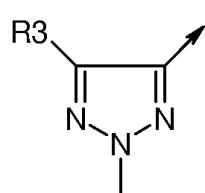


A-12

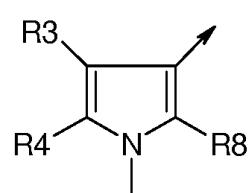
en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2, Q representa un radical de la serie



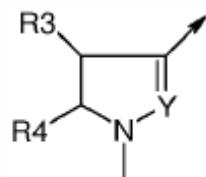
Q-1



Q-2

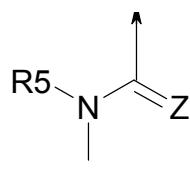


Q-3

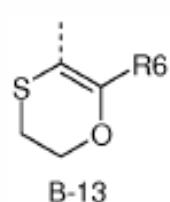
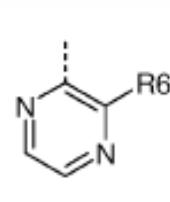
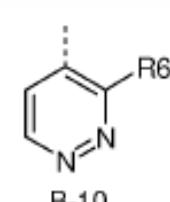
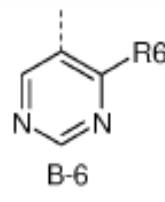
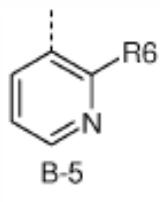
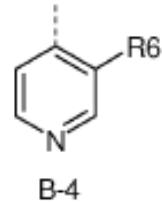
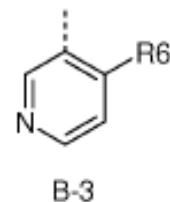
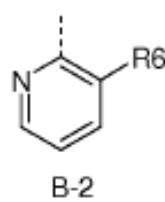
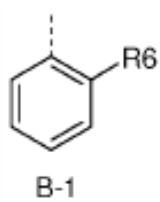


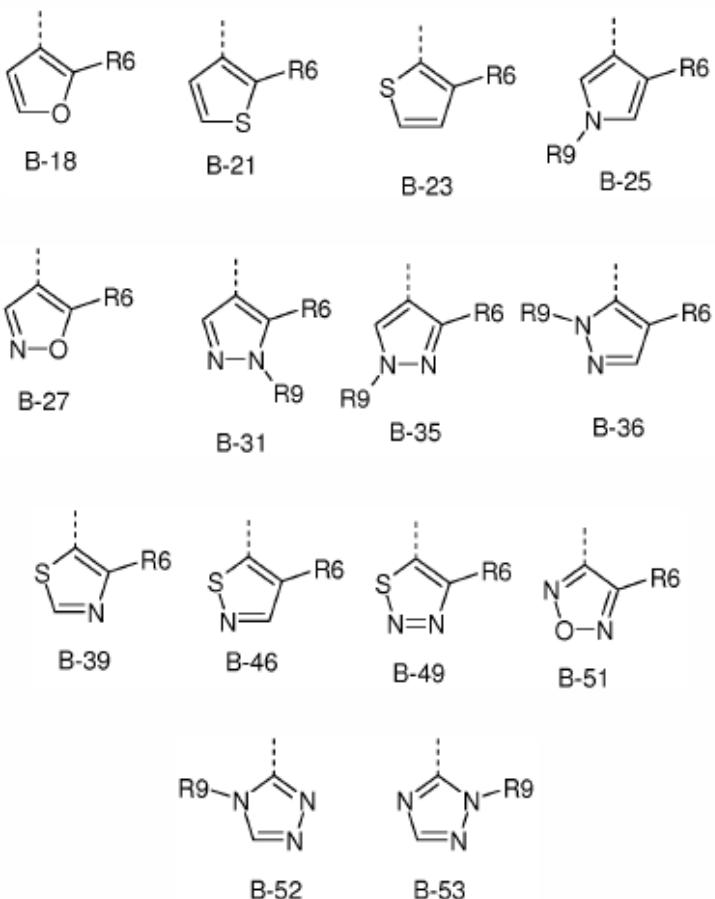
Q-4 y

en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa en cada caso el enlace con D,
D representa el radical de la fórmula



5 en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B,
B representa un radical de la serie





en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7,
 Z representa oxígeno o azufre,

R1 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄ y alquil C₁-C₄-sulfonilo,

R2 representa un radical de la serie de halógeno, alquilo C₁-C₄ y alcoxi C₁-C₄,

R3 representa un radical de la serie de hidrógeno y halógeno,

R4 representa un radical de la serie de hidrógeno y alquilo C₁-C₄,

R5 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₄, alquenilo C₃-C₄, alquinilo C₃-C₄, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₄, alquil C₁-C₄-carbonilo, ciano-alquilo C₁-C₄ y C(=O)-B,

R6 representa un radical de la serie de halógeno, nitro, hidroxi, alquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄, alquil C₁-C₄-tio, alquil C₁-C₄-sulfonilo, haloalquilo C₁-C₄, haloalcoxi C₁-C₄, haloalquil C₁-C₄-tio y heteroarilo,

R7 representa un radical de la serie de halógeno, alquilo C₁-C₄ y haloalquilo C₁-C₄,

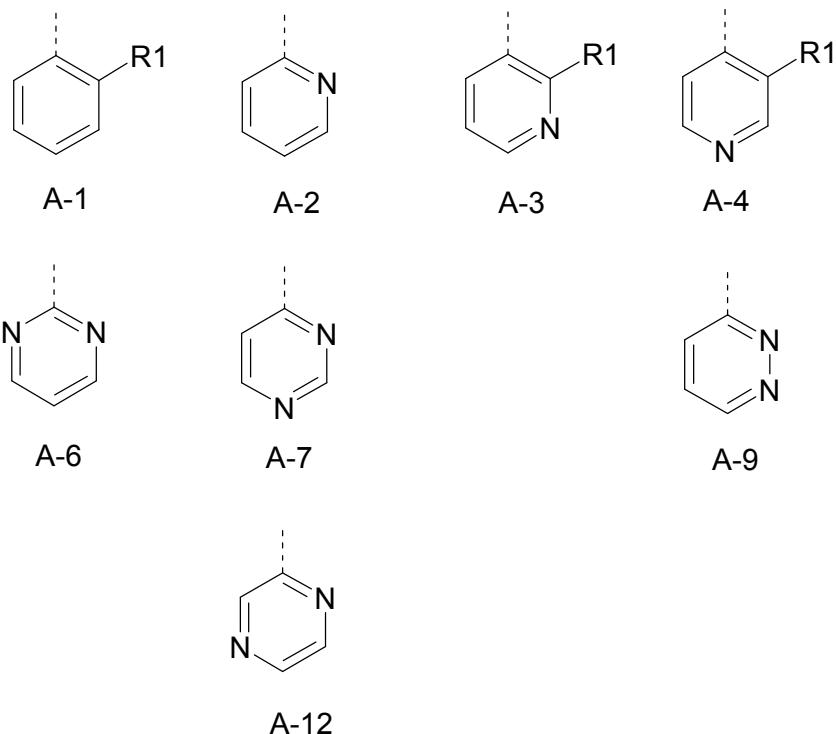
R9 representa un radical de la serie de alquilo C₁-C₄,

m representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1 los radicales R2 pueden ser iguales o diferentes y

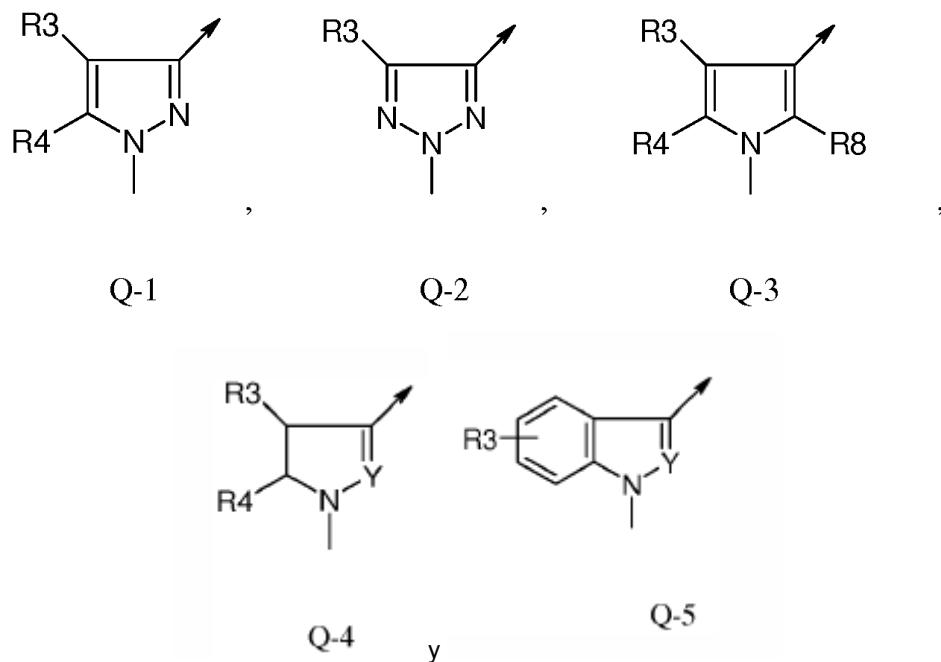
n representa un número de la serie 0 y 1.

5. Uso no terapéutico de compuestos de la fórmula (I) de acuerdo con la reivindicación 1, en los que

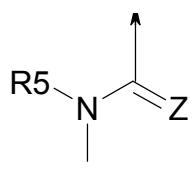
A representa un radical de la serie



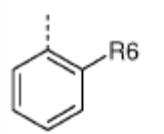
en donde la línea de puntos representa el enlace con Q y en donde A lleva además m sustituyentes R2,
 Q representa un radical de la serie



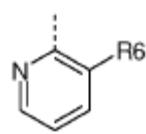
en donde el nitrógeno está unido al anillo A y la flecha significa el enlace con D,
 D representa el radical de la fórmula



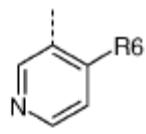
en donde el nitrógeno está unido a Q y la flecha significa el enlace con B,
B representa un radical de la serie



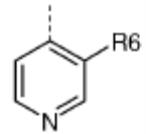
B-1



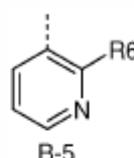
B-2



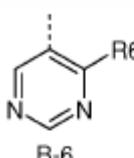
B-3



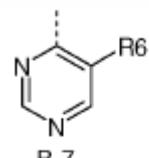
B-4



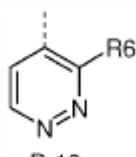
B-5



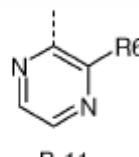
B-6



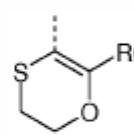
B-7



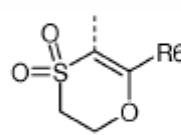
B-10



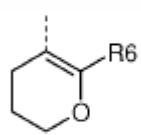
B-11



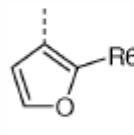
B-13



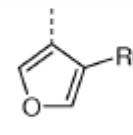
B-15



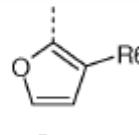
B-17



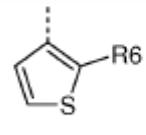
B-18



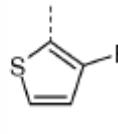
B-19



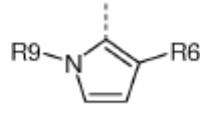
B-20



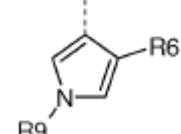
B-21



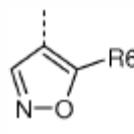
B-23



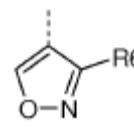
B-24



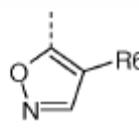
B-25



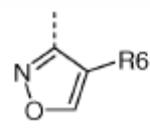
B-27



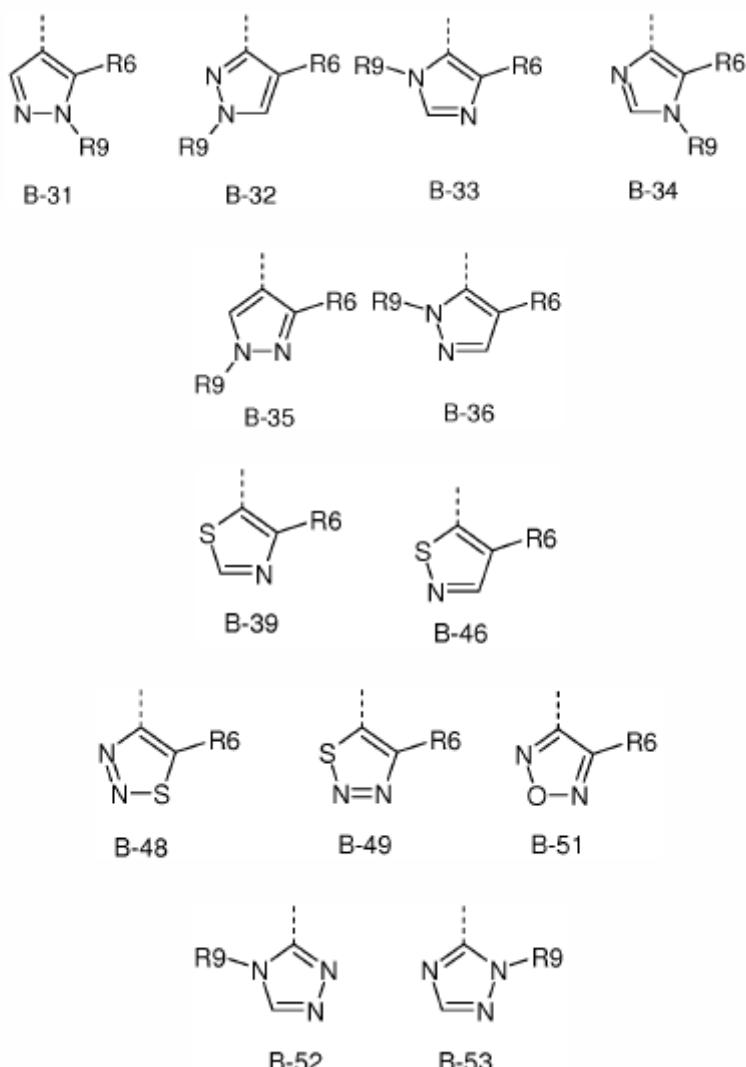
B-28



B-29



B-30



en donde la línea de puntos representa el enlace con D y en donde B lleva además n sustituyentes R7,
Z representa oxígeno o azufre,

R1 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄ y
5 alquil C₁-C₄-sulfonilo,

R2 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, amino, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄,
cicloalquilo C₃-C₆, alcoxi C₁-C₄, di-(alquil C₁-C₆)-amino, alquil C₁-C₄-carbonilo, arilo,

R3 representa un radical de la serie de hidrógeno, halógeno, ciano, nitro, alquilo C₁-C₄,

R4 representa un radical de la serie de hidrógeno, amino, alquilo C₁-C₄,

R5 representa un radical de la serie de hidrógeno, alquilo C₁-C₄, alquenilo C₃-C₄, alquinilo C₃-C₄, cicloalquil C₃-C₆-alquilo C₁-C₄, alquil C₁-C₄-carbonilo, ciano-alquilo C₁-C₄ y C(=O)-B,

R6 representa un radical de la serie de hidrógeno (sólo en los radicales B-33 y B-36), halógeno, ciano, nitro,
hidroxi, carboxilo, alquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄, alquil C₁-C₄-tio, alquil C₁-C₄-sulfonilo, haloalquilo C₁-C₄, cicloalquilo C₃-C₆, haloalcoxi C₁-C₄, haloalquil C₁-C₄-tio, alquil C₁-C₄-carbonilo, alquil C₁-C₄-carbonilamino, haloalquil C₁-C₄-carbonilamino y heteroarilo,

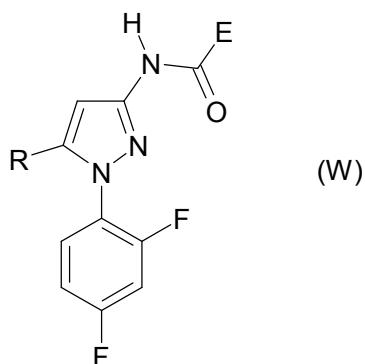
R7 representa un radical de la serie de halógeno, ciano, nitro, hidroxi, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄ y alcoxi C₁-C₄,

R9 representa un radical de la serie de alquilo C₁-C₄ y haloalquilo C₁-C₄,

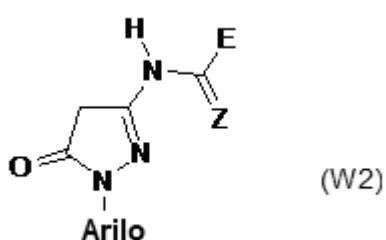
m representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para m > 1 los radicales R2 pueden ser iguales o
diferentes y

n representa un número de la serie 0, 1, 2 y 3, en donde para n > 1 los radicales R7 pueden ser iguales o
diferentes.

6. Compuestos de la fórmula (I) tal como se describe en cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5, salvo los siguientes compuestos



Nº	R	E
W-1	etilo	2-(trifluorometil)fenilo
W-2	etilo	2-bromofenilo
W-3	etilo	2-fluorofenilo
W-4	etilo	3-metil-2-tienilo
W-5	etilo	2,5-dimetil-3-furanilo
W-6	H	2,4-dimetoxifenilo
W-7	H	2-(trifluorometil)fenilo
W-8	H	2,4-difluorofenilo
W-9	metilo	2-bromofenilo
W-10	etilo	2,4-difluorofenilo
W-11	H	2,5-dimetil-3-furanilo
W-12	metilo	2,4-dimetoxifenilo



Nº	Z	E	
W2-1	O	2-nitrofenilo	arilo
W2-2	S	2,4-dihidroxifenilo	3,4-dicloro-2,5-dimetoxifenilo
W2-3	O	2-cloro-4-aminofenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-5	O	2-cloro-5-aminofenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-6	O	2-cloro-5-nitrofenilo	2,4,6-triclorofenilo
W2-7	O	2-cloro-3-(1-oxo-2-propen-1-il)amino	2,4,6-triclorofenilo
W2-8	O	2-cloro-5-(2-metil-1-oxo-2-propenil)amino	2,4,6-triclorofenilo
W2-9	O	2-cloro-5-(1-oxo-2-propen-1-il)amino	2,4,6-triclorofenilo

7. Compuesto de la fórmula (I) como se describe en la reivindicación 1, seleccionado de la siguiente lista:

N. ^o	A	Q	B	R3	R4	R5	Z
1	2-(trifluorometil)fenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
2	2-clorofenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
3	2-bromofenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
4	2-bromofenilo	Q-1	2-yodofenilo	H	H	H	O
5	2,5-difluorofenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
6	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-metilfenilo	H	H	H	O
7	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-difluorometilfenilo	H	H	H	O
8	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
9	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	F	H	H	O
10	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-clorofenilo	H	H	H	O
11	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-bromofenilo	H	H	H	O
12	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-yodofenilo	H	H	H	O
13	2,6-difluorofenilo	Q-1	2,6-difluorofenilo	H	H	H	O
14	2-etoxi-6-fluorofenilo	Q-1	2-clorofenilo	H	H	H	O
15	3,5-difluoropiridin-2-ilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
16	3-cloro-5-fluoropiridin-2-ilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
17	2,6-difluorofenilo	Q-1	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
18	2,6-difluorofenilo	Q-1	4-fluoro-2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
19	2-bromofenilo	Q-1	2-fluoro-6-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
20	2-ciano-4,6-difluorofenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
21	2-cianofenilo	Q-1	2-yodofenilo	H	H	H	O
22	3,5-difluoropiridin-2-ilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	F	H	H	O
23	3-cianpiridin-2-ilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
24	2-ciano-4-fluorofenilo	Q-1	2-(trifluorometil)fenilo	H	H	H	O
25	2,6-difluorofenilo	Q-2	2-(trifluorometil)fenilo	H	-	H	O

8. Agentes **caracterizados por** un contenido de al menos un compuesto de la fórmula (I) de acuerdo con las reivindicaciones 6 o 7.

9. Uso no terapéutico para combatir plagas, **caracterizado por que** se deja actuar un compuesto de la fórmula (I) tal como se describe en las reivindicaciones 1 a 5 o de acuerdo con las reivindicaciones 6 o 7 o un agente de acuerdo con la reivindicación 8 sobre las plagas y/o su hábitat.
- 5 10. Procedimiento de acuerdo con la reivindicación 9, **caracterizado por que** en el caso de las plagas se trata de insectos, arácnidos y nematodos.
11. Compuestos de la fórmula (I) tal como se describe en las reivindicaciones 1 a 5 o de acuerdo con las reivindicaciones 6 o 7 para su uso como antiendoparasitario.
12. Compuestos de la fórmula (I) tal como se describe en las reivindicaciones 1 a 5 o de acuerdo con las reivindicaciones 6 o 7 para su uso como antiectoparasitario.
- 10 13. 2-(3,5-difluoropiridin-2-il)-2H-1,2,3-triazol-4-amina.
14. 1-(3,5-difluoropiridin-2-il)-1H-pirazol-3-amina.
15. N-[1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-il]acetamida.
16. N-[1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-il]acetamida.
17. 1-(2,6-difluorofenil)-1H-pirazol-3-amina.
- 15 18. 1-(2,6-difluorofenil)-4,5-dihidro-1H-pirazol-3-amina.