

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 674 660**

51 Int. Cl.:

C07D 249/14 (2006.01)

C07C 317/24 (2006.01)

C07C 317/44 (2006.01)

C07C 323/22 (2006.01)

C07C 323/62 (2006.01)

C07D 271/08 (2006.01)

C07D 271/113 (2006.01)

A01N 43/653 (2006.01)

A01N 43/82 (2006.01)

C07C 317/46 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **26.06.2015 PCT/EP2015/064485**

87 Fecha y número de publicación internacional: **07.01.2016 WO16001074**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **26.06.2015 E 15731085 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **06.06.2018 EP 3160946**

54 Título: **Amidas de ácido benzoico de acción herbicida**

30 Prioridad:

30.06.2014 EP 14174876

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

03.07.2018

73 Titular/es:

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

72 Inventor/es:

**AHRENS, HARTMUT;
TIEBES, JÖRG;
WALDRAFF, CHRISTIAN;
DÖRNER-RIEPING, SIMON;
HEINEMANN, INES;
DIETRICH, HANSJÖRG;
GATZWEILER, ELMAR;
ROSINGER, CHRISTOPHER y
SCHMUTZLER, DIRK**

74 Agente/Representante:

CARPINTERO LÓPEZ, Mario

ES 2 674 660 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

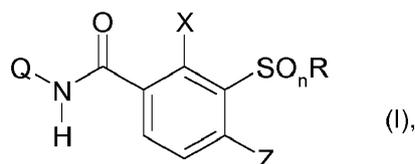
Amidas de ácido benzoico de acción herbicida

La invención se refiere al campo técnico de los herbicidas, en particular al de los herbicidas para la lucha selectiva contra malas hierbas y malezas en cultivos de plantas útiles.

5 Por el documento WO 2011/035874 A1 se conocen N-(1,2,5-oxadiazol-3-il)benzamidas y su uso como herbicidas. El documento WO 2012/028579 A1 describe amidas de ácido N-(tetrazol-5-il)- y N-(triazol-5-il)arilcarboxílico y su uso como herbicidas. El documento WO 2012/126932 A1 describe N-(1,3,4-oxadiazol-2-il)benzamidas y su uso como herbicidas. Los principios activos allí descritos no muestran siempre una acción suficiente contra plantas dañinas y/o éstos no son en parte suficientemente compatibles con algunas plantas de cultivo importantes, tal como tipos de cereales, maíz y arroz. En DATABASE PubChem Compound [Online], NCBI; 30 de noviembre de 2012 (30-11-2012), n.º de acceso de base de datos CID 67053732 se menciona el compuesto ácido 2,4-dimetil-3-metilsulfonilbenzoico.

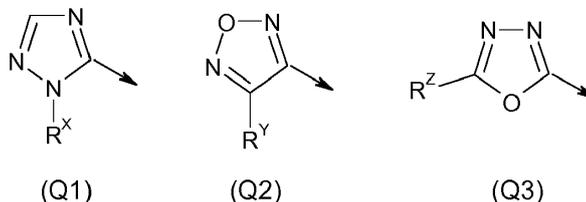
10 El objetivo de la presente invención es facilitar principios activos de acción herbicida alternativos. Este objetivo se soluciona mediante las amidas de ácido benzoico de acuerdo con la invención descritas a continuación, que llevan en posición 2 del anillo de fenilo un resto alquilo o cicloalquilo, en posición 4 un resto alquilo y en posición 3 un resto de azufre.

Un objeto de la presente invención son por consiguiente amidas de ácido benzoico de fórmula (I) o sus sales



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

20 Q significa un resto Q1, Q2 o Q3,



X significa alquilo (C₁-C₆) o cicloalquilo (C₃-C₆),

Z significa alquilo (C₁-C₆),

R significa alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), cicloalquil-(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₆), alquil-(C₁-C₆)-O-alquilo (C₁-C₆),

25 R^X significa metilo, etilo, n-propilo, prop-2-en-1-ilo, metoxietilo, etoxietilo o metoxietoxietilo,

R^Y significa metilo, etilo, n-propilo, cloro o amino,

R^Z significa metilo, etilo, n-propilo o metoximetilo,

n significa 0, 1 o 2.

30 En la fórmula (I) y en todas las fórmulas siguientes, los restos alquilo con más de dos átomos de carbono pueden ser de cadena lineal o ramificados. Los restos alquilo significan, por ejemplo, metilo, etilo, n- o i-propilo, n-, i-, t- o 2-butilo, pentilos, hexilos, como n-hexilo, i-hexilo y 1,3-dimetilbutilo. Análogamente alquenilo significa, por ejemplo, alilo, 1-metilprop-2-en-1-ilo, 2-metil-prop-2-en-1-ilo, but-2-en-1-ilo, but-3-en-1-ilo, 1-metil-but-3-en-1-ilo y 1-metil-but-2-en-1-ilo. Alquinilo significa, por ejemplo, propargilo, but-2-in-1-ilo, but-3-in-1-ilo, 1-metil-but-3-in-1-ilo. El enlace múltiple puede encontrarse respectivamente en cualquier posición del resto insaturado. Cicloalquilo significa un sistema anular carbocíclico, saturado con tres a seis átomos de C, p. ej. ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo o ciclohexilo.

35 Si un grupo está sustituido múltiples veces con restos, entonces ha de entenderse por esto que este grupo está sustituido con uno o varios restos iguales o diferentes de los mencionados.

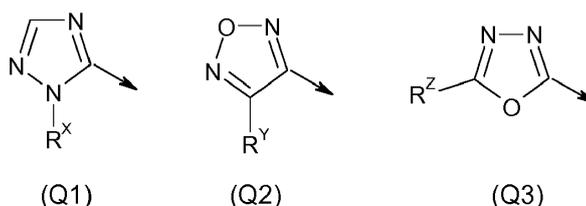
Dependiendo del tipo y del enlace de los sustituyentes, los compuestos de fórmula general (I) pueden existir como

estereoisómeros. Si, por ejemplo, están presentes uno o varios átomos de carbono sustituidos de manera asimétrica, entonces pueden producirse enantiómeros y diaestereómeros. Asimismo se producen estereoisómeros cuando n representa 1 (sulfóxidos). Los estereoisómeros pueden obtenerse a partir de las mezclas resultantes de la preparación según procedimientos de separación usuales, por ejemplo mediante procedimientos de separación cromatográficos. También pueden prepararse estereoisómeros selectivamente usando reacciones estereoselectivas y usando sustancias de partida y/o coadyuvantes ópticamente activos. La invención también se refiere a todos los estereoisómeros y mezclas de los mismos, que están comprendidos por la fórmula general (I), sin embargo no se han definido de manera específica.

Los compuestos de fórmula (I) pueden formar sales. La formación de sales puede realizarse por acción de una base sobre compuestos de fórmula (I). Las bases adecuadas son, por ejemplo, aminas orgánicas tales como trialkilaminas, morfolina, piperidina o piridina, así como hidróxidos, carbonatos e hidrogenocarbonatos de amonio, metal alcalino o metal alcalinotérreo, en particular hidróxido de sodio y de potasio, carbonato de sodio y de potasio e hidrogenocarbonato de sodio y de potasio. Estas sales son compuestos en los que el hidrógeno ácido se reemplaza por un catión agrícolamente adecuado, por ejemplo sales metálicas, en particular sales de metales alcalinos o sales de metales alcalinotérreos, en particular sales de sodio y de potasio, o también sales de amonio, sales con aminas orgánicas o sales de amonio cuaternario, por ejemplo con cationes de fórmula $[NR^aR^bR^cR^d]^+$, en la que R^a a R^d , en cada caso, independientemente unos de otros, representan un resto orgánico, en especial alquilo, arilo, aralquilo o alquilarilo. También se consideran sales de alquilsulfonio y de alquilsulfoxonio, tales como sales de trialkil (C_1 - C_4)-sulfonio y de trialkil (C_1 - C_4)-sulfoxonio.

Se prefieren compuestos de fórmula general (I), en la que

Q significa un resto Q1, Q2 o Q3,



X significa metilo, etilo o ciclopropilo,

Z significa metilo, etilo, n-propilo o isopropilo,

R significa metilo, etilo, ciclopropilo, ciclopropilmetilo o metoxietilo,

R^x significa metilo, etilo, n-propilo, prop-2-en-1-ilo, metoxietilo, etoxietilo o metoxietoxietilo,

R^y significa metilo, etilo, n-propilo, cloro o amino,

R^z significa metilo, etilo, n-propilo o metoximetilo,

n significa 0, 1 o 2.

En todas las fórmulas mencionadas a continuación tienen los sustituyentes y símbolos, siempre que no se defina de otra manera, el mismo significado tal como se ha descrito en la fórmula (I).

Los compuestos de acuerdo con la invención en los que Q representa Q1, así como los aminotriazoles en los que se basan estas amidas pueden prepararse por ejemplo según los procedimientos indicados en el documento WO 2012/028579.

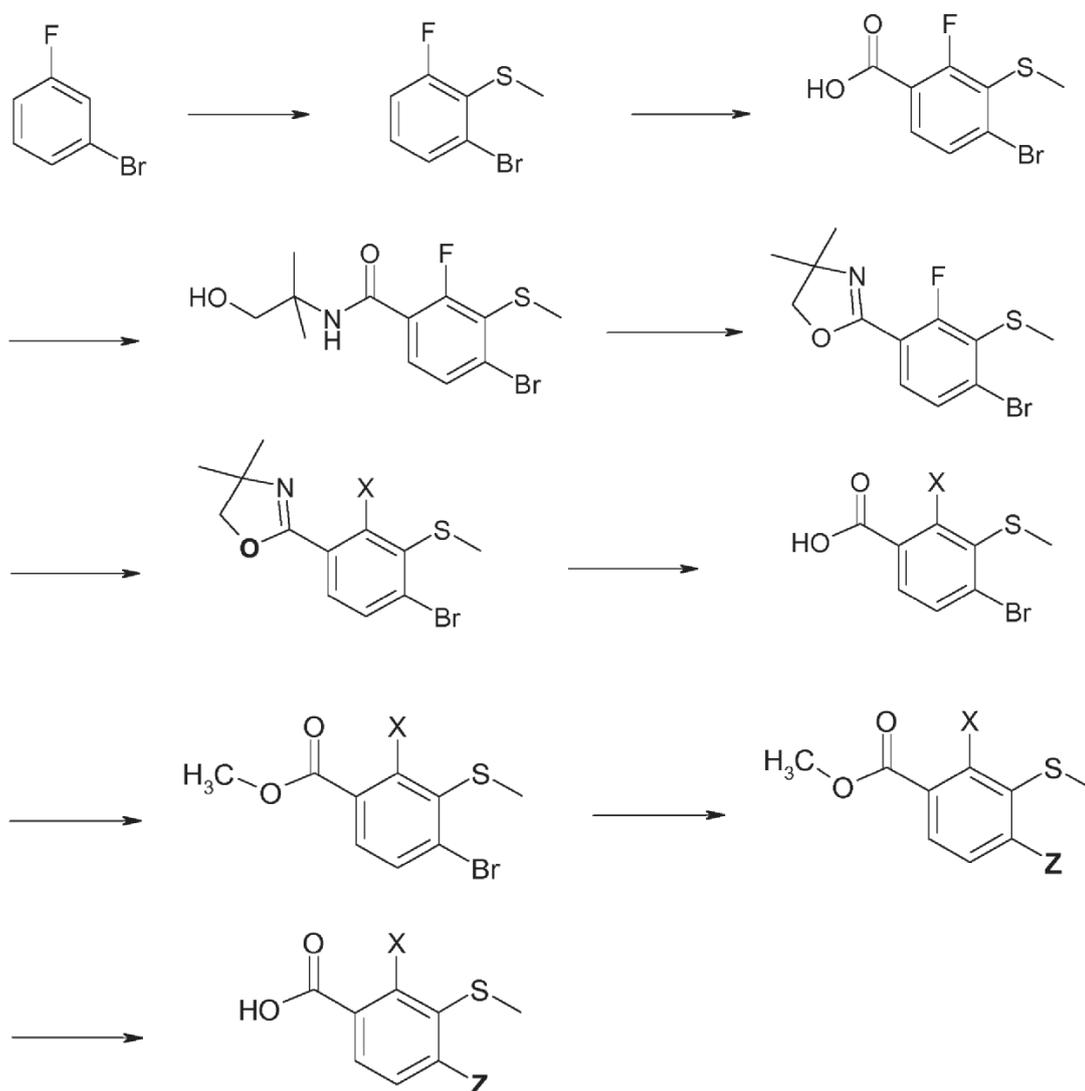
Los compuestos de acuerdo con la invención en los que Q representa Q2, así como los aminofurazanos en los que se basan estas amidas pueden prepararse por ejemplo según los procedimientos indicados en el documento WO 2011/035874.

Los compuestos de acuerdo con la invención en los que Q representa Q3, pueden prepararse por ejemplo según los procedimientos indicados en el documento WO 2012/126932. Los 2-amino-1,3,4-oxadiazoles en los que se basan estas amidas están disponibles comercialmente o bien son accesibles sintéticamente según procedimientos habituales y bien conocidos en la bibliografía.

Los cloruros de ácido benzoico en los que se basan los compuestos de acuerdo con la invención o bien los correspondientes ácidos benzoicos pueden prepararse por ejemplo de acuerdo con el procedimiento indicado en el esquema 1 (se indica a modo de ejemplo para el resto R = metilo). Para ello se somete 1-bromo-3-fluorobenceno a una litiación, que se dirige a la posición 2. El carbanión se transforma a continuación en el tioéter. Después se sintetiza el ácido benzoico a través de una litiación que dirige a orto mediada por el átomo de flúor con carboxilación

posterior (Matthew D. Morrison *et al.*, Organic Letters, 2009, vol. 11, # 5 pág. 1051 - 1054; Qiuping Wang *et al.*, Journal of Medicinal Chemistry, 2007, vol. 50, # 2 pág. 199 - 210). Tras la construcción del grupo oxazolina puede intercambiarse de manera nucleófila el átomo de flúor por restos de alquilo o cicloalquilo (A. I. Meyers *et al.*, Tetrahedron Letters, 1978, 3, 223-226; A. I. Meyers *et al.*, Tetrahedron, 1994, 50 (8), 2297-2360; T. W. Greene, P. G. M. Wuts, Protective Groups in Organic Synthesis, 2ª edición, John Wiley & Sons, Inc. 1991, pág. 265 y siguientes; Z. Hell *et al.*, Tetrahedron Letters, 2002, 43, 3985-3987.). La disociación de oxazolina posterior proporciona el ácido 4-bromo-3-metilbenzoico sustituido, que se somete como éster metílico a un acoplamiento cruzado. Con la incorporación del sustituyente en la posición 4 y la posterior saponificación de éster se completa la síntesis de ácido benzoico.

Esquema 1



10

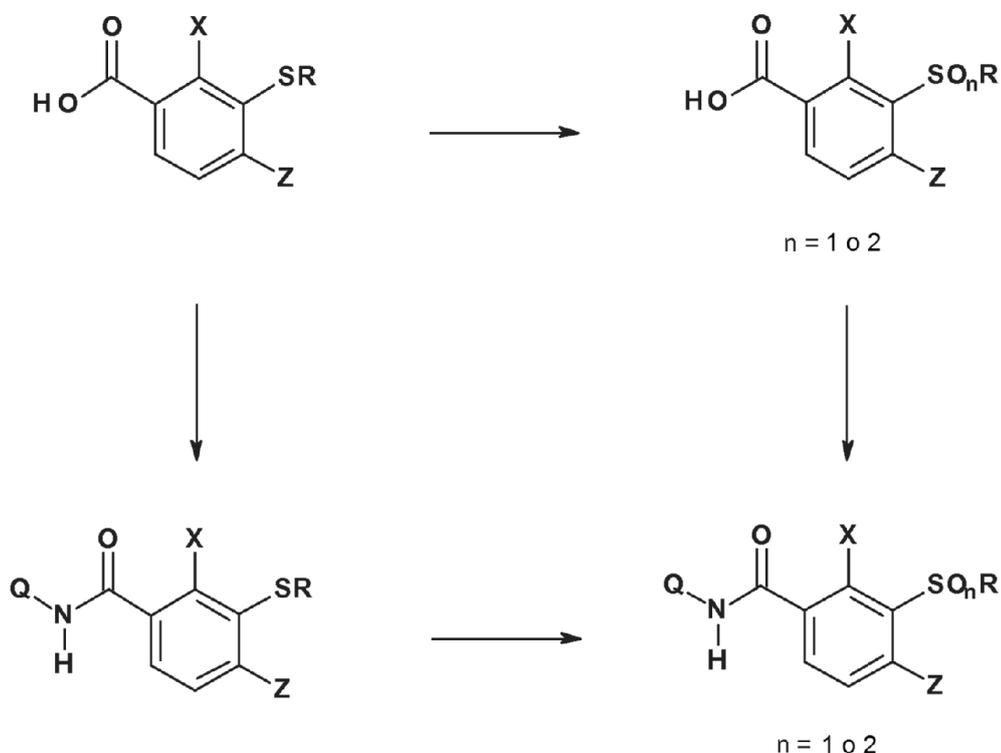
El tioéter puede oxidarse posteriormente para dar el correspondiente sulfóxido o sulfona (esquema 2). Los procedimientos de oxidación, que conducen de manera dirigida al sulfóxido o sulfona, se conocen en la bibliografía. Se ofrecen un número de sistemas de oxidación, por ejemplo perácidos tal como ácido meta-cloroperbenzoico, que se generan eventualmente *in situ* (por ejemplo ácido peracético en el sistema de ácido acético/peróxido de hidrógeno/wolframato(VI) de sodio) (Houben-Weyl, Methoden der Organischen Chemie, Georg Thieme Verlag Stuttgart, tomo E 11, Erweiterungs- und Folgebände zur vierten Auflage 1985, pág. 702 y siguientes, pág. 718 y siguientes así como pág. 1194 y siguientes).

15

Entre otras cosas depende del patrón de sustitución y del agente de oxidación, en qué sitio de la cascada de síntesis es conveniente la oxidación del tioéter. Una oxidación puede ser práctica por ejemplo en el estado del ácido benzoico libre o en el estado de la amida de fórmula (I) con $n = 0$ (esquema 2).

20

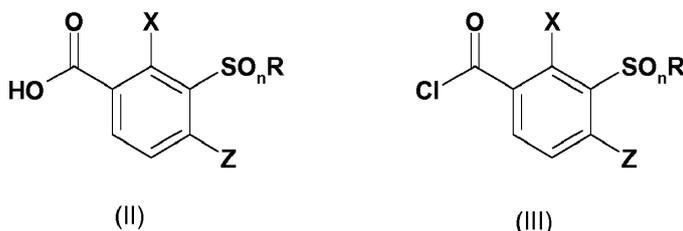
Esquema 2



5 Puede ser conveniente modificar el orden de las etapas de reacción. Así los ácidos benzoicos que llevan un sulfóxido no pueden transformarse sin más en sus cloruros de ácido. En el presente documento se ofrece preparar en primer lugar en el estado de tioéter la amida de fórmula (I) con $n = 0$ y después oxidar el tioéter para dar el sulfóxido.

El procesamiento de las respectivas mezclas de reacción se realiza por regla general según procedimientos conocidos, por ejemplo mediante cristalización, procesamiento acuoso-extractivo, mediante procedimientos cromatográficos o mediante combinación de estos procedimientos.

10 Los ácidos benzoicos de fórmula (II) y cloruros de ácido benzoico de fórmula (III) usados como compuestos intermedios en la preparación de los compuestos de fórmula (I) de acuerdo con la invención son nuevos con excepción del compuesto ácido 2,4-dimetil-3-metilsulfonilbenzoico e igualmente son un objeto de la presente invención.



15 Las colecciones de compuestos de fórmula (I) y/o sus sales que pueden sintetizarse según las reacciones antes mencionadas, también pueden prepararse de forma paralela, pudiéndose realizar esto de forma manual, semiautomática o totalmente automática. Por ejemplo, a este respecto es posible automatizar la realización de la reacción, el procesamiento o la purificación de los productos o bien los productos intermedios. En total, por esto se entiende una forma de proceder como la que ha descrito por ejemplo el D. Tiebes en *Combinatorial Chemistry - Synthesis, Analysis, Screening* (Herausgeber Günther Jung), Verlag Wiley 1999, en las páginas 1 a 34. Para la ejecución de la reacción y el procesamiento en forma paralela, pueden usarse una serie de equipos que pueden obtenerse en el mercado, por ejemplo bloques de reacción Calypso de la empresa Barnstead International, Dubuque, Iowa 52004-0797, EE.UU. o estaciones de reacción (*reaction stations*) de la empresa Radleys, Shirehill, Saffron Walden, Essex, CB 11 3AZ, Inglaterra o MultiPROBE Automated Workstations de la empresa Perkin Elmer, Waltham, Massachusetts 02451, EE.UU. Para la purificación paralela de compuestos de fórmula general (I) y sus sales o bien de productos intermedios que se producen durante la preparación se encuentran a disposición, entre

otras cosas, aparatos de cromatografía por ejemplo de la empresa ISCO, Inc., 4700 Superior Street, Lincoln, NE 68504, EE.UU.

Los equipos indicados conducen a un procedimiento modular, en el que las etapas de trabajo individuales están automatizadas, aunque entre las etapas de trabajo deben realizarse operaciones manuales. Esto puede evitarse usando sistemas de automatización integrados de manera total o parcial en los que los respectivos módulos de automatización son operados, por ejemplo, por robots. Tales sistemas de automatización pueden adquirirse, por ejemplo, por la empresa Caliper, Hopkinton, MA 01748, EE.UU.

La realización de algunos o de varios pasos de síntesis puede ayudarse mediante el uso de reactivos con soporte polimérico/resinas adsorbentes. En la bibliografía especializada se describe una serie de protocolos de ensayo, por ejemplo en ChemFiles, vol. 4, n.º 1, Polymer-Supported Scavengers and Reagents for Solution-Phase Synthesis (Sigma-Aldrich).

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

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

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

Los compuestos de acuerdo con la invención presentan una excelente actividad herbicida contra un amplio espectro de plantas perjudiciales anuales mono- y dicotiledóneas de importancia económica. También plantas perjudiciales perennes difíciles de combatir que brotan de rizomas, pies de injerto u otros órganos duraderos se captan bien por los principios activos.

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

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

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

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

En la aplicación de los principios activos sobre las partes de las plantas verdes en el procedimiento de post-

emergencia se produce tras el tratamiento la interrupción del crecimiento y las plantas perjudiciales se detienen en la fase de crecimiento existente en el momento de la aplicación o mueren tras un cierto tiempo por completo, de modo que de esta manera se suprime de manera duradera y muy temprana una concurrencia de malas hierbas perjudiciales para las plantas de cultivo.

- 5 Aunque los compuestos de acuerdo con la invención presentan una actividad herbicida excelente frente a malas hierbas mono- y dicotiledóneas, se dañan sólo de manera insignificante o no se dañan en absoluto plantas de cultivo de cultivos de importancia económica por ejemplo cultivos dicotiledóneos de los géneros *Arachis*, *Beta*, *Brassica*, *Cucumis*, *Cucurbita*, *Helianthus*, *Daucus*, *Glycine*, *Gossypium*, *Ipomoea*, *Lactuca*, *Linum*, *Lycopersicon*, *Miscanthus*, *Nicotiana*, *Phaseolus*, *Pisum*, *Solanum*, *Vicia*, o cultivos monocotiledóneos de los géneros *Allium*, *Ananas*, *Asparagus*, *Avena*, *Hordeum*, *Oryza*, *Panicum*, *Saccharum*, *Secale*, *Sorghum*, *Triticale*, *Triticum*, *Zea*, en particular *Zea* y *Triticum*, dependiendo de la estructura del respectivo compuesto de acuerdo con la invención y su cantidad de aplicación. Los presentes compuestos son muy adecuados por estos motivos para la lucha selectiva contra el crecimiento de plantas no deseadas en cultivos de plantas tales como plantaciones útiles agrícolas o plantaciones ornamentales.
- 10
- 15 Además, los compuestos de acuerdo con la invención, dependiendo de su respectiva estructura y de la cantidad de aplicación esparcida, presentan propiedades reguladoras del crecimiento excelentes en plantas de cultivo. Éstos intervienen de manera reguladora en el metabolismo propio de la planta y pueden usarse con ello para influir de manera dirigida en las sustancias constitutivas de la planta y para simplificar la cosecha tal como por ejemplo promoviendo la desecación y el acortamiento del crecimiento. Además son adecuados también para el control general y la inhibición del crecimiento vegetativo no deseado, sin destruir las plantas a este respecto. Una inhibición del crecimiento vegetativo desempeña en muchos cultivos monocotiledóneos y dicotiledóneos un gran papel, dado que por ejemplo puede reducirse o impedirse completamente la formación de depósitos mediante esto.
- 20

Debido a sus propiedades herbicidas y de regulación de crecimiento de las plantas, los principios activos también pueden usarse para combatir plantas nocivas en cultivos de plantas genéticamente modificadas conocidas o aún en desarrollo. En general, las plantas transgénicas se distinguen por propiedades especialmente ventajosas, por ejemplo, por resistencias a ciertos pesticidas, principalmente ciertos herbicidas, resistencias a enfermedades de plantas u organismos causantes de enfermedades de plantas, tales como ciertos insectos o microorganismos tales como hongos, bacterias o virus. Otras propiedades especiales se refieren, por ejemplo, al material recolectado con respecto a la cantidad, calidad, capacidad de almacenamiento, composición y sustancias constitutivas especiales. Así se conocen plantas transgénicas cuyo contenido de almidón está aumentado, o cuya calidad de almidón se ha alterado, o plantas en las que el material recolectado tiene una composición diferente de ácidos grasos. Otras propiedades especiales pueden encontrarse en una tolerancia o resistencia frente a estresores abióticos, por ejemplo calor, frío, sequedad, sal y radiación ultravioleta.

25

30

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

35

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

- 40 Las vías usuales para la preparación de nuevas plantas, que en comparación con las plantas que existen hasta ahora presentan propiedades modificadas, consisten por ejemplo en procedimientos clásicos de cultivo y en la producción de mutantes. De forma alternativa pueden producirse nuevas plantas con propiedades modificadas por medio de procedimientos de ingeniería genética (véase por ejemplo los documentos EP 0221044, EP 0131624). Se describieron por ejemplo en varios casos
- 45
- modificaciones mediante ingeniería genética de plantas de cultivo con la intención de modificar el almidón sintetizado en las plantas (por ejemplo, documentos WO 92/011376 A, WO 92/014827 A, WO 91/019806 A),
 - plantas de cultivo transgénicas que son resistentes a ciertos herbicidas del tipo de glufosinato (véanse, por ejemplo, los documentos EP 0242236 A, EP 0242246 A) del tipo de glifosato (documento WO 92/000377 A) o de las sulfonilureas (documentos EP 0257993 A, US 5.013.659) o a combinaciones o mezclas de estos herbicidas

50

 - mediante "apilamiento de genes" (*gene stacking*), tales como plantas de cultivo transgénicas por ejemplo maíz o soja con el nombre comercial o la denominación Optimum™ GAT™ (Glyphosate ALS Tolerant).
 - plantas de cultivo transgénicas, por ejemplo, algodón, con la capacidad de producir toxinas de *Bacillus thuringiensis* (toxinas Bt), que hacen que las plantas sean resistentes a ciertas plagas (documentos EP 0142924 A, EP 0193259 A)

55

 - plantas de cultivo transgénicas con una composición de ácidos grasos modificada (documento WO 91/013972 A).
 - plantas de cultivo modificadas mediante ingeniería genética con nuevos constituyentes o metabolitos secundarios, por ejemplo, nuevas fitoalexinas, que producen una mayor resistencia a enfermedades (documentos EP 0309862 A, EP 0464461 A)

60

 - plantas modificadas mediante ingeniería genética con una fotorrespiración reducida, que presentan mayores

rendimientos y mayor tolerancia a estrés (EP 0305398 A)

- plantas de cultivo transgénicas que producen proteínas importantes desde el punto de vista farmacéutico o de diagnóstico ("agricultura molecular"),
- plantas de cultivo transgénicas que se caracterizan por mayores rendimientos o mejor calidad
- 5 - plantas de cultivo transgénicas que se caracterizan por una combinación, por ejemplo, de las nuevas propiedades mencionadas anteriormente ("apilamiento de genes").

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

Para tales manipulaciones de ingeniería genética pueden introducirse moléculas de ácido nucleico en plásmidos que permiten una mutagénesis o una modificación de secuencia mediante la recombinación de secuencias de ADN. Con ayuda de procedimientos estándar pueden por ejemplo efectuarse cambios de bases, eliminarse secuencias parciales o agregarse secuencias naturales o sintéticas. Para la unión de los fragmentos de ADN entre sí, pueden colocarse adaptadores o conectores en los fragmentos, véase por ejemplo Sambrook *et al.*, 1989, *Molecular Cloning, A Laboratory Manual*, 2ª edic. Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, NY; o Winnacker "Gene und Klone", VCH Weinheim 2ª edición 1996.
15

Por ejemplo, la generación de células vegetales con una actividad reducida de un producto génico puede conseguirse mediante la expresión de al menos un ARN antisentido correspondiente, un ARN sentido para conseguir un efecto de cosupresión o mediante la expresión de al menos una ribozima construida de forma adecuada que escinda específicamente transcritos del producto génico mencionado anteriormente.
20

Para ello, por una parte pueden usarse moléculas de ADN, que incluyen toda la secuencia codificante de un producto génico incluyendo las secuencias flanqueantes eventualmente existentes, como también moléculas de ADN que sólo comprenden partes de la secuencia codificante, debiendo ser estas partes suficientemente largas para lograr el efecto anti-sentido en las células. También es posible usar secuencias de ADN que presentan un alto grado de homología con las secuencias codificantes de un producto génico, pero no son totalmente idénticas.
25

En la expresión de moléculas de ácido nucleico en plantas, la proteína sintetizada puede estar localizada en cualquier compartimiento de la célula vegetal. Pero para lograr la ubicación en un determinado compartimiento, la región codificante puede p. ej. enlazarse con secuencias de ADN, que aseguran la ubicación en un determinado compartimiento. Tal tipo de secuencias son conocidas por el experto en la técnica (véase por ejemplo, Braun *et al.*, *EMBO J.* 11 (1992), 3219-3227; Wolter *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 85 (1988), 846-850; Sonnewald *et al.*, *Plant J.* 1 (1991), 95-106). La expresión de las moléculas de ácido nucleico también puede tener lugar en las orgánulos de las células de las plantas.
30

Las células de plantas transgénicas pueden regenerarse según técnicas conocidas para formar plantas completas. En el caso de las plantas transgénicas puede tratarse principalmente de plantas de cualquier especie de plantas conocida, es decir tanto de plantas monocotiledóneas, como también de dicotiledóneas.
35

Así pueden obtenerse plantas transgénicas que presentan propiedades modificadas mediante la sobreexpresión, supresión o inhibición de genes o secuencias de genes homólogos (= naturales) o la expresión de genes o secuencias de genes heterólogos (= ajenos).

40 Los compuestos (I) de acuerdo con la invención preferentemente pueden aplicarse en cultivos transgénicos que son resistentes a sustancias de crecimiento, como p. ej. 2,4 D, dicamba o contra herbicidas que inhiben enzimas esenciales de plantas, p. ej. acetolactatosintas (ALS), EPSP sintasas, glutaminsintas (GS) o hidroxifenilpiruvato dioxigenasas (HPPD) o bien son resistentes a herbicidas del grupo de las sulfonilureas, los glifosatos, los glufosinatos o benzoilisoaxazoles y principios activos análogos, o a cualquier combinación de estos principios activos.

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

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

Por tanto es objeto de la invención también el uso de los compuestos de fórmula (I) de acuerdo con la invención

como herbicidas para la lucha contra plantas perjudiciales en plantas de cultivos transgénicas.

Los compuestos de acuerdo con la invención pueden usarse en forma de polvos humectables, concentrados emulsionables, soluciones pulverizables, productos de espolvoreo o productos granulados en las preparaciones habituales. Por tanto son objeto de la invención también agentes herbicidas y reguladores del crecimiento de las plantas que contienen los compuestos de acuerdo con la invención.

Los compuestos de acuerdo con la invención pueden formularse de diversas formas de acuerdo con los parámetros biológicos y/o fisicoquímicos que se requieren. Como posibles formulaciones se tienen en cuenta por ejemplo: polvos humectables (WP), polvos solubles en agua (SP), concentrados solubles en agua, concentrados emulsionables (EC), emulsiones (EW) tales como emulsiones de aceite en agua y de agua en aceite, soluciones pulverizables, concentrados en suspensión (SC), dispersiones basadas en aceite o en agua, soluciones miscibles con aceite, suspensiones de cápsulas (CS), productos de espolvoreo (DP), productos desinfectantes, productos granulados para dispersión y aplicación en el sustrato, productos granulados (GR) en forma de microgranulados, granulados de pulverización, granulados revestidos y granulados de adsorción, granulados dispersables en agua (WG), granulados solubles en agua (SG), formulaciones ULV, microcápsulas y ceras.

Estos distintos tipos de formulación en principio son conocidos y se describen por ejemplo en: Winnacker-Küchler, "Chemische Technologie", Tomo 7, C. Hauser Verlag München, 4ª edic. 1986, Wade van Valquenburg, "Pesticide Formulations", Marcel Dekker, N.Y., 1973; K. Martens, "Spray Drying" Handbook, 3ª ed. 1979, G. Goodwin Ltd. Londres.

Los coadyuvantes de formulación necesarios, como materiales inertes, agentes tensioactivos, disolventes y demás aditivos también son de conocimiento general y se describen por ejemplo en: Watkins, "Handbook of Insecticide Dust Diluents and Carriers", 2ª ed., Darland Books, Caldwell N.J., H.v. Olfen, "Introduction to Clay Colloid Chemistry"; 2ª ed., J. Wiley & Sons, N.Y., C. Marsden, "Solvents Guide", 2ª ed., Interscience, N.Y. 1963, McCutcheon's "Detergents and Emulsifiers Annual", MC Publ. Corp., Ridgewood N.J., Sisley and Wood, "Encyclopedia of Surface Active Agents", Chem. Publ. Co. Inc., N.Y. 1964, Schönfeldt, "Grenzflächenaktive Äthilenoxidaddukte", Wiss. Verlagsgesell., Stuttgart 1976, Winnacker-Küchler, "Chemische Technologie", Tomo 7, C. Hauser Verlag München, 4ª edic. 1986.

Los polvos humectables son preparaciones que pueden dispersarse uniformemente en agua que, además del principio activo, aparte de un diluyente o sustancia inerte también comprenden tensioactivos de tipo iónico y/o no iónico (agentes humectantes, dispersantes), por ejemplo alquifenoles polioxietilados, alcoholes grasos polioxietilados, aminas grasas polioxietiladas, sulfatos de poliglicol éter de alcohol graso, alcanosulfonatos, alquilbencenosulfonatos, lignosulfonato sódico, 2,2'-dinaftilmetano-6,6'-disulfonato sódico, dibutilnaftalenosulfonato sódico o también oleilmetilaurida sódica. Para preparar los polvos humectables, los principios activos herbicidas se trituran en partículas finas, por ejemplo en aparatos habituales tales como molinos de martillo, molinos mezcladores y molinos de chorro de aire y simultánea o posteriormente se mezclan con los coadyuvantes de formulación.

Los concentrados emulsionables se preparan disolviendo el principio activo en un disolvente orgánico, por ejemplo butanol, ciclohexanona, dimetilformamida, xileno o también compuestos aromáticos con punto de ebullición más alto o hidrocarburos o mezclas de los disolventes orgánicos con adición de uno o más tensioactivos de tipo iónico y/o no iónico (emulsionantes). Como emulsionantes pueden usarse por ejemplo: sales de calcio del ácido alquilarilsulfónico tales como dodecibencenosulfonato de calcio, o emulsionantes no iónicos tales como ésteres de poliglicol de ácidos grasos, alquilarilpoliglicoléteres, éteres de poliglicol de alcohol graso, productos de condensación de óxido de propileno-óxido de etileno, alquilpoliéteres, ésteres de sorbitano, tales como por ejemplo ésteres de ácidos grasos de sorbitano, o ésteres de polioxietileno-sorbitano, como por ejemplo ésteres de ácidos grasos de polioxietileno-sorbitano.

Los productos en polvo se obtienen triturando el principio activo con sustancias sólidas distribuidas finamente, por ejemplo talco, arcillas naturales tales como caolín, bentonita y pirofillita, o tierra de diatomeas.

Los concentrados de suspensión pueden estar basados en agua o en aceite. Pueden prepararse, por ejemplo, por trituración en húmedo por medio de molinos de perlas comerciales y eventualmente la adición de tensioactivos, tal como ya se ha indicado, por ejemplo, anteriormente para los otros tipos de formulación.

Pueden prepararse emulsiones, por ejemplo emulsiones de aceite en agua (EW), por ejemplo, por medio de agitadores, molinos coloidales y/o mezcladoras estáticas usando disolventes orgánicos acuosos y eventualmente tensioactivos como los que, por ejemplo, ya se han indicado anteriormente para los otros tipos de formulación.

Pueden prepararse productos granulados por pulverización del principio activo en un material inerte granulado con capacidad de adsorción o mediante aplicación de concentrados del principio activo en la superficie de sustancias de soporte, tales como arena, caolinitas o material inerte granulado, por medio de adhesivos, por ejemplo poli(alcohol vinílico), poli(acrilato sódico) o también aceites minerales. Los principios activos adecuados también pueden granularse de la manera habitual para la preparación de granulados de fertilizantes (si se desea como una mezcla con fertilizantes).

Los productos granulados dispersables en agua se preparan por regla general según los procedimientos habituales tales como secado por pulverización, granulación en lecho fluidizado, granulación en disco, mezclado con

mezcladoras de alta velocidad y extrusión sin material inerte sólido.

Para la preparación de productos granulados en disco, lecho fluidizado, prensa extrusora y pulverización véanse, por ejemplo, los procedimientos en "Spray-Drying Handbook" 3ª ed. 1979, G. Goodwin Ltd., London; J. E. Browning, "Agglomeration", Chemical and Engineering 1967, páginas 147 y siguientes, "Perry's Chemical Engineer's Handbook", 5ª Ed., McGraw-Hill, Nueva York 1973, pág. 8-57.

Para otros detalles con respecto a la formulación de agentes fitosanitarios véase, por ejemplo, G. C. Klingman, "Weed Control as a Science", John Wiley and Sons, Inc., Nueva York, 1961, páginas 81-96 y J. D. Freyer, S. A. Evans, "Weed Control Handbook", 5ª Ed., Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1968, páginas 101-103.

Las preparaciones agroquímicas por lo general contienen del 0,1 al 99 % en peso, en especial del 0,1 al 95 % en peso, de los compuestos de acuerdo con la invención.

En los polvos humectables, la concentración de principio activo asciende, por ejemplo, a de aproximadamente el 10 % al 90 % en peso, estando constituido el resto hasta el 100 % en peso por componentes de formulación habituales. En el caso de concentrados emulsionables, la concentración de principio activo puede ascender a de aproximadamente el 1 % al 90 %, preferentemente del 5 % al 80 % en peso. Las formulaciones en forma de polvo contienen del 1 % al 30 % en peso de principio activo, preferentemente en la mayoría de los casos del 5 % al 20 % en peso de principio activo, las soluciones pulverizables contienen de aproximadamente el 0,05 % al 80 % en peso, preferentemente del 2 % al 50 % en peso de principio activo. En el caso de productos granulados dispersables en agua, el contenido en principio activo depende parcialmente de si el compuesto activo está presente en forma líquida o sólida o de los auxiliares de granulación, cargas, etc. que se usen. En los productos granulados dispersables en agua, el contenido en principio activo se encuentra, por ejemplo, entre el 1 % y el 95 % en peso, preferentemente entre el 10 % y el 80 % en peso.

Además, las formulaciones de principios activos mencionadas contienen eventualmente los adhesivos, agentes humectantes, dispersantes, emulsionantes, agentes de penetración, conservantes, disolventes y agentes anticongelantes, cargas, vehículos y colorantes, antiespumantes, inhibidores de la evaporación y agentes que influyen en el pH y la viscosidad respectivamente habituales.

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

Con las condiciones externas como la temperatura, humedad, el tipo de herbicida usado, entre otras varía la cantidad de aplicación necesaria de los compuestos de fórmula (I). Ésta puede oscilar dentro de límites amplios, por ejemplo entre 0,001 y 1,0 kg/ha o más de sustancia activa, preferentemente se encuentra sin embargo entre 0,005 y 750 g/ha.

Los siguientes ejemplos explican la invención.

A. Ejemplos químicos

2,4-Dimetil-3-(metilsulfonyl)-N-(1-metil-1H-1,2,4-triazol-5-yl)benzamida

(Ejemplo n.º 1-3)

Etapa 1: Síntesis de 1-bromo-3-fluoro-2-(metilsulfanil)benzeno

Se disolvieron 1028 ml de una solución 2,5 M (2,57 mol) de *n*-butil-litio en *n*-hexano en 1600 ml de THF seco. A 0 °C se añadieron 400 ml (2,83 mol) de diisopropilamina. La mezcla de reacción se agitó durante 15 min a esta temperatura. A continuación se enfrió la mezcla hasta -78 °C. A esta temperatura se añadieron gota a gota 287 ml (2,57 mol) de 1-bromo-3-fluorobenceno. La mezcla se agitó durante 1 h a esta temperatura. Después se añadieron 254 ml (2,82 mol) de disulfuro de dimetilo. A continuación se descongeló la mezcla de reacción hasta temperatura ambiente (TA). Tras el procesamiento acuoso, el residuo de la fase orgánica se sometió con un vacío de 0,05 kPa a una destilación fraccionada. A 87 °C se obtuvieron 504 g del producto deseado.

Etapa 2: Síntesis de ácido 4-bromo-2-fluoro-3-(metilsulfanil)benzoico

Se añadieron 452 ml de una solución 2,5 M (1,13 mol) de *n*-butil-litio en *n*-hexano a -78 °C gota a gota a una solución de 176 ml (1,24 mol) de diisopropilamina en 550 ml de tetrahidrofurano seco. La solución se agitó durante 5 min a esta temperatura y a continuación durante 15 min a 0 °C. Después se enfrió la solución de nuevo hasta -78 °C. A continuación se añadió gota a gota una solución de 250 g (1,13 mol) de 1-bromo-3-fluoro-2-(metilsulfanil)benzeno en 150 ml de tetrahidrofurano seco. La solución se agitó durante 1,5 h a -78 °C. Después se añadieron 298 g (6,78 mol) de dióxido de carbono como hielo seco. La mezcla de reacción se descongeló lentamente hasta TA. Para el procesamiento se acidificó la mezcla con ácido clorhídrico diluido hasta pH = 1. El producto se extrajo a continuación

seis veces con dietiléter. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con una solución saturada, acuosa de cloruro de sodio. A continuación se extrajo el producto tres veces con una solución saturada, acuosa de hidrogenocarbonato de sodio. Los extractos acuosos, combinados se lavaron a pH = 9 tres veces con dietiléter y después se acidificaron lentamente con ácido clorhídrico concentrado hasta pH = 1. El producto se extrajo tres veces con dietiléter y las

5 fases orgánicas combinadas se lavaron con una solución saturada, acuosa de cloruro de sodio. Finalmente se secaron las fases orgánicas combinadas sobre sulfato de magnesio, el filtrado se liberó del disolvente. Para el procesamiento posterior se recristalizó el producto en agua, obteniéndose 275 g del producto deseado.

Etapa 3: Síntesis de 4-bromo-2-fluoro-N-(1-hidroxi-2-metilpropan-2-il)-3-(metilsulfanil)benzamida

Se mezclaron 340 g (1,28 mol) de ácido 4-bromo-2-fluoro-3-(metilsulfanil)benzoico en 1000 ml de diclorometano con 2 ml de N,N-dimetilformamida y a continuación se calienta hasta una temperatura de 35 °C. Se añadieron 271 ml (3,20 mol) de cloruro de oxalilo lentamente y gota a gota a esta temperatura. Tras finalizar el desarrollo de gases se calentó la mezcla con reflujo hasta que ya no mostraba el control de la reacción ningún material de partida. A continuación se liberó la mezcla del disolvente. Al residuo se añadieron 600 ml de tolueno y se liberó la mezcla otra vez en un rotavapor del disolvente. El cloruro de ácido se suspendió en 600 ml de diclorometano libre de agua. A 5 °C - 25 °C se añadió esta solución gota a gota a una mezcla de 305 ml (3,20 mol) de 2-amino-2-metilpropan-1-ol y 100 ml de diclorometano. La mezcla de reacción se agitó durante 1,5 h a 0 °C y después durante 16 h a TA. Para el procesamiento se filtró la mezcla y el filtrado se liberó del disolvente. Como residuo se obtuvieron 330 g de producto que se usaron sin purificación posterior en la siguiente etapa.

Etapa 4: Síntesis de 2-[4-bromo-2-fluoro-3-(metilsulfanil)fenil]-4,4-dimetil-4,5-dihidro-1,3-oxazol

Se mezclaron 330 g (0,98 mol) de 4-bromo-2-fluoro-N-(1-hidroxi-2-metilpropan-2-il)-3-(metilsulfanil)-benzamida a TA con 384 ml (5,3 mol) de cloruro de tionilo. Tras finalizar el desarrollo de gases se agitó la mezcla de reacción aún durante 1 h a TA. Para el procesamiento se vertió la mezcla cuidadosamente en agua. A continuación se extrajo la mezcla con dietiléter. La fase acuosa se enfrió hasta 0 °C y se alcalinizó con solución de hidróxido de sodio al 20 por ciento. La mezcla se extrajo después inmediata y rápidamente con diclorometano. La fase orgánica se secó y el filtrado se liberó del disolvente. El producto bruto se recristalizó en diisopropiléter, aislándose 165 g del producto deseado.

Etapa 5: Síntesis de 2-[4-bromo-2-metil-3-(metilsulfanil)fenil]-4,4-dimetil-4,5-dihidro-1,3-oxazol

Se mezclaron 45 g (141 mmol) de 2-[4-bromo-2-fluoro-3-(metilsulfanil)fenil]-4,4-dimetil-4,5-dihidro-1,3-oxazol a TA en 440 ml de dietiléter seco y bajo gas inerte lentamente y gota a gota con yoduro de metilmagnesio (recién preparado a partir de 12,37 g (507 mmol) de magnesio y 71,24 g (501 mmol) de yodometano). Se prestó atención a que la temperatura no ascendiera por encima de 30 °C. Después se agitó la mezcla de reacción a TA hasta que el control de la reacción ya no mostrara ningún material inicial. Para el procesamiento se vertió la mezcla lenta y cuidadosamente en una mezcla de hielo y ácido clorhídrico diluido. A continuación se añadió solución de hidróxido de sodio hasta que el valor de pH se encontraba entre 7 y 8. La fase acuosa se extrajo dos veces con dietiléter. Las fases orgánicas combinadas se secaron y el filtrado se liberó del disolvente. El residuo se recristalizó en diisopropiléter, obteniéndose 38 g del producto deseado.

Etapa 6: Síntesis de ácido 4-bromo-2-metil-3-(metilsulfanil)benzoico

Se mezclaron 250 g (0,8 mol) de 2-[4-bromo-2-metil-3-(metilsulfanil)fenil]-4,4-dimetil-4,5-dihidro-1,3-oxazol con 1300 ml de ácido clorhídrico 6 M. La mezcla de reacción se calentó durante 24 h con reflujo. Para el procesamiento se alcalinizó la mezcla y se lavó dos veces con dietiléter. La fase acuosa se acidificó con ácido clorhídrico. El producto cristalizó y la mezcla se filtró. Como residuo se obtuvieron 167 g del producto deseado.

Etapa 7: Síntesis de 4-bromo-2-metil-3-(metilsulfanil)benzoato de metilo

Se mezclaron 10,1 g (38,7 mmol) de ácido 4-bromo-2-metil-3-(metilsulfanil)benzoico en 100 ml de metanol con 5 ml de ácido sulfúrico concentrado. La mezcla de reacción se calentó durante 8 h con reflujo. La mezcla se enfrió hasta TA y se liberó del disolvente. El residuo se suspendió en agua y se enfrió en un baño de hielo. La mezcla se filtró y el residuo se lavó con solución saturada acuosa de hidrogenocarbonato de sodio. El residuo se secó, obteniéndose 9,82 g del producto deseado.

Etapa 8: Síntesis de ácido 2,4-dimetil-3-(metilsulfanil)benzoico

(Ejemplo n.º 6-1)

Bajo argón se mezclaron 1,60 g (37,7 mmol) de cloruro de litio con 350 ml de tetrahidrofurano seco. La mezcla se agitó a TA hasta que se había disuelto el cloruro de litio. A continuación se añadieron 200 ml (1 M; 200 mmol) de una solución de bromuro de metilmagnesio en tetrahidrofurano. La mezcla se enfrió después hasta -20 °C. A esta temperatura se añadieron lentamente gota a gota 228 ml (0,7 M; 160 mmol) de una solución de cloruro de cinc en tetrahidrofurano seco. La mezcla se agitó aún durante 10 min a esta temperatura. A continuación se descongeló el contenido hasta TA y se agitó aún durante 1 h. Después, para la separación de oxígeno en un matraz de reacción se

aplicó vacío de manera repetida y se aireó con argón. A esta mezcla se añadió una solución de 20,0 g (72,7 mmol) de 4-bromo-2-metil-3-(metilsulfanil)benzoato de metilo y 5,04 g (4,36 mmol) de tetrakis(trifenilfosfina)paladio(0) en 350 ml de tetrahidrofurano seco (preparada de manera que en primer lugar se disolvió el éster de ácido benzoico sustituido, en el recipiente para la separación de oxígeno se aplicó vacío de manera repetida y se aireó con argón, a continuación se añadió el catalizador de paladio y finalmente se aplicó vacío en el recipiente otra vez para la separación de oxígeno de manera repetida y se aireó con argón). La mezcla de reacción se calentó durante 1,5 h con reflujo y a continuación se enfrió hasta TA. Para el procesamiento se enfrió el contenido hasta TA y se mezcló con 1 l de una solución saturada, acuosa de cloruro de amonio. La mezcla se extrajo dos veces con dietiléter. Las fases orgánicas combinadas se secaron, se filtraron y finalmente se liberaron cuidadosamente del disolvente de modo que no pasará conjuntamente nada de producto. El residuo se mezcló con 250 ml de metanol y 30 ml de solución de hidróxido de sodio al 20 por ciento. La mezcla se calentó durante 4 h con reflujo. El contenido se enfrió hasta TA, se concentró y el residuo se suspendió en agua. La mezcla se filtró a través de Celite y el residuo se lavó con solución de hidróxido de sodio diluida. El filtrado se lavó dos veces con diclorometano. La fase acuosa se acidificó con ácido clorhídrico y se extrajo a continuación con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron y se filtraron. El filtrado se liberó del disolvente, obteniéndose 14,2 g del producto deseado.

Etapa 9: Síntesis de 2,4-dimetil-3-(metilsulfanil)-N-(1-metil-1H-1,2,4-triazol-5-il)benzamida

(Ejemplo n.º 1-1)

Se mezclaron 900 mg (90 por ciento; 4,13 mmol) de ácido 2,4-dimetil-3-(metilsulfanil)benzoico y 526 mg (5,37 mmol) de 5-amino-1-metil-1H-1,2,4-triazol en 20 ml de piridina gota a gota 733 mg (5,78 mmol) de dicloruro de ácido oxálico. La mezcla se agitó a TA. Para completar la reacción se añadieron tras 3 h 244 mg (1,93 mmol) de dicloruro de ácido oxálico así como tras 5 d 183 mg (1,45 mmol) de dicloruro de ácido oxálico. El contenido se agitó después tras 2 h a TA. Para el procesamiento se liberó la mezcla del disolvente. El residuo se suspendió en diclorometano y una solución saturada acuosa de hidrogenocarbonato de sodio y se agitó. Tras la separación de fases se extrajo la fase acuosa tres veces con diclorometano. Las fases orgánicas combinadas se liberaron del disolvente. El residuo se purificó mediante cromatografía, aislándose 400 mg del producto deseado.

Etapa 10: Síntesis de 2,4-dimetil-3-(metilsulfonil)-N-(1-metil-1H-1,2,4-triazol-5-il)benzamida

(Ejemplo n.º 1-3)

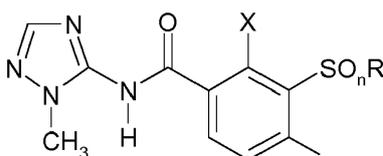
Se mezclaron 145 mg (0,53 mmol) de 2,4-dimetil-3-(metilsulfanil)-N-(1-metil-1H-1,2,4-triazol-5-il)benzamida a TA en 10 ml de ácido acético con una cantidad catalítica de wolframato de sodio. La mezcla se calentó hasta 60 °C y a esta temperatura se mezcló con 153 mg (35 por ciento; 1,57 mmol) de una solución acuosa de peróxido de hidrógeno. La mezcla de reacción se agitó a 60 °C hasta que el control de reacción ya no mostró ningún material inicial y nada de sulfóxido. Para el procesamiento se añadió metabisulfito de sodio hasta que ya no pudo detectarse nada de peróxido. La mezcla se concentró y el residuo se suspendió en un poco de agua. Tras la adición de ácido clorhídrico 1 M se agitó brevemente la mezcla. La mezcla se extrajo dos veces con diclorometano. Las fases orgánicas combinadas se liberaron del disolvente. El residuo se purificó mediante cromatografía, aislándose 95 mg del producto deseado.

Los compuestos expuestos en las siguientes tablas se prefieren muy especialmente.

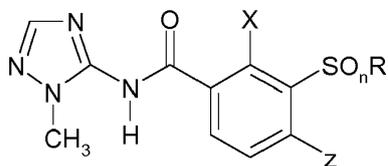
Las abreviaturas usadas significan:

Me = metilo Et = etilo Pr = propilo c-Pr = ciclo-propilo

Tabla 1: Compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención, en la que Q representa Q1 y R^x representa un grupo metilo

				
N.º	X	n	R	Z
1-1	Me	0	Me	Me
1-2	Me	1	Me	Me

continuación



N.º	X	n	R	Z
1-3	Me	2	Me	Me
1-4	Me	0	Et	Me
1-5	Me	1	Et	Me
1-6	Me	2	Et	Me
1-7	Me	0	c-Pr	Me
1-8	Me	1	c-Pr	Me
1-9	Me	2	c-Pr	Me
1-10	Me	0	CH ₂ c-Pr	Me
1-11	Me	1	CH ₂ c-Pr	Me
1-12	Me	2	CH ₂ c-Pr	Me
1-13	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-14	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-15	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-16	Me	0	Me	Et
1-17	Me	1	Me	Et
1-18	Me	2	Me	Et
1-19	Me	0	Et	Et
1-20	Me	1	Et	Et
1-21	Me	2	Et	Et
1-22	Me	0	c-Pr	Et
1-23	Me	1	c-Pr	Et
1-24	Me	2	c-Pr	Et
1-25	Me	0	CH ₂ c-Pr	Et
1-26	Me	1	CH ₂ c-Pr	Et
1-27	Me	2	CH ₂ c-Pr	Et
1-28	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-29	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-30	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et

continuación



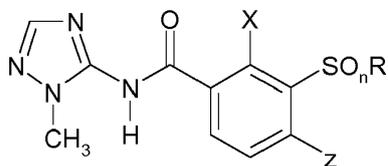
N.º	X	n	R	Z
1-31	Me	0	Me	i-Pr
1-32	Me	1	Me	i-Pr
1-33	Me	2	Me	i-Pr
1-34	Me	0	Et	i-Pr
1-35	Me	1	Et	i-Pr
1-36	Me	2	Et	i-Pr
1-37	Me	0	c-Pr	i-Pr
1-38	Me	1	c-Pr	i-Pr
1-39	Me	2	c-Pr	i-Pr
1-40	Me	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-41	Me	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-42	Me	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-43	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-44	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-45	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-46	Et	0	Me	Me
1-47	Et	1	Me	Me
1-48	Et	2	Me	Me
1-49	Et	0	Et	Me
1-50	Et	1	Et	Me
1-51	Et	2	Et	Me
1-52	Et	0	c-Pr	Me
1-53	Et	1	c-Pr	Me
1-54	Et	2	c-Pr	Me
1-55	Et	0	CH ₂ c-Pr	Me
1-56	Et	1	CH ₂ c-Pr	Me
1-57	Et	2	CH ₂ c-Pr	Me
1-58	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me

continuación



N.º	X	n	R	Z
1-59	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-60	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-61	Et	0	Me	Et
1-62	Et	1	Me	Et
1-63	Et	2	Me	Et
1-64	Et	0	Et	Et
1-65	Et	1	Et	Et
1-66	Et	2	Et	Et
1-67	Et	0	c-Pr	Et
1-68	Et	1	c-Pr	Et
1-69	Et	2	c-Pr	Et
1-70	Et	0	CH ₂ c-Pr	Et
1-71	Et	1	CH ₂ c-Pr	Et
1-72	Et	2	CH ₂ c-Pr	Et
1-73	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-74	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-75	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-76	Et	0	Me	i-Pr
1-77	Et	1	Me	i-Pr
1-78	Et	2	Me	i-Pr
1-79	Et	0	Et	i-Pr
1-80	Et	1	Et	i-Pr
1-81	Et	2	Et	i-Pr
1-82	Et	0	c-Pr	i-Pr
1-83	Et	1	c-Pr	i-Pr
1-84	Et	2	c-Pr	i-Pr
1-85	Et	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-86	Et	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr

continuación

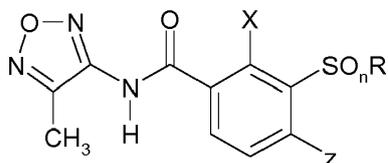


N.º	X	n	R	Z
1-87	Et	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-88	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-89	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-90	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-91	c-Pr	0	Me	Me
1-92	c-Pr	1	Me	Me
1-93	c-Pr	2	Me	Me
1-94	c-Pr	0	Et	Me
1-95	c-Pr	1	Et	Me
1-96	c-Pr	2	Et	Me
1-97	c-Pr	0	c-Pr	Me
1-98	c-Pr	1	c-Pr	Me
1-99	c-Pr	2	c-Pr	Me
1-100	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Me
1-101	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Me
1-102	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Me
1-103	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-104	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-105	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
1-106	c-Pr	0	Me	Et
1-107	c-Pr	1	Me	Et
1-108	c-Pr	2	Me	Et
1-109	c-Pr	0	Et	Et
1-110	c-Pr	1	Et	Et
1-111	c-Pr	2	Et	Et
1-112	c-Pr	0	c-Pr	Et
1-113	c-Pr	1	c-Pr	Et
1-114	c-Pr	2	c-Pr	Et

continuación

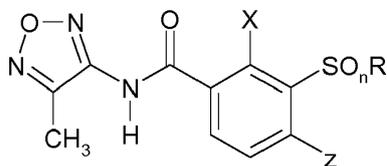
N.º	X	n	R	Z
1-115	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Et
1-116	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Et
1-117	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Et
1-118	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-119	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-120	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
1-121	c-Pr	0	Me	i-Pr
1-122	c-Pr	1	Me	i-Pr
1-123	c-Pr	2	Me	i-Pr
1-124	c-Pr	0	Et	i-Pr
1-125	c-Pr	1	Et	i-Pr
1-126	c-Pr	2	Et	i-Pr
1-127	c-Pr	0	c-Pr	i-Pr
1-128	c-Pr	1	c-Pr	i-Pr
1-129	c-Pr	2	c-Pr	i-Pr
1-130	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-131	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-132	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
1-133	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-134	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
1-135	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr

Tabla 2: Compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención, en la que Q representa Q₂ y R^y representa un grupo metilo



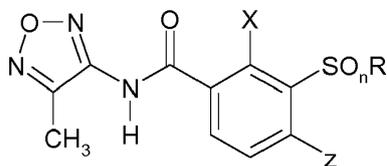
N.º	X	n	R	Z
2-1	Me	0	Me	Me
2-2	Me	1	Me	Me
2-3	Me	2	Me	Me
2-4	Me	0	Et	Me
2-5	Me	1	Et	Me
2-6	Me	2	Et	Me
2-7	Me	0	c-Pr	Me
2-8	Me	1	c-Pr	Me
2-9	Me	2	c-Pr	Me
2-10	Me	0	CH ₂ c-Pr	Me
2-11	Me	1	CH ₂ c-Pr	Me
2-12	Me	2	CH ₂ c-Pr	Me
2-13	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-14	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-15	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-16	Me	0	Me	Et
2-17	Me	1	Me	Et
2-18	Me	2	Me	Et
2-19	Me	0	Et	Et
2-20	Me	1	Et	Et
2-21	Me	2	Et	Et
2-22	Me	0	c-Pr	Et
2-23	Me	1	c-Pr	Et
2-24	Me	2	c-Pr	Et
2-25	Me	0	CH ₂ c-Pr	Et
2-26	Me	1	CH ₂ c-Pr	Et
2-27	Me	2	CH ₂ c-Pr	Et
2-28	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et

(continuación)



N.º	N.º	N.º	N.º	N.º
2-29	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-30	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-31	Me	0	Me	i-Pr
2-32	Me	1	Me	i-Pr
2-33	Me	2	Me	i-Pr
2-34	Me	0	Et	i-Pr
2-35	Me	1	Et	i-Pr
2-36	Me	2	Et	i-Pr
2-37	Me	0	c-Pr	i-Pr
2-38	Me	1	c-Pr	i-Pr
2-39	Me	2	c-Pr	i-Pr
2-40	Me	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-41	Me	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-42	Me	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-43	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-44	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-45	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-46	Et	0	Me	Me
2-47	Et	1	Me	Me
2-48	Et	2	Me	Me
2-49	Et	0	Et	Me
2-50	Et	1	Et	Me
2-51	Et	2	Et	Me
2-52	Et	0	c-Pr	Me
2-53	Et	1	c-Pr	Me
2-54	Et	2	c-Pr	Me
2-55	Et	0	CH ₂ c-Pr	Me

(continuación)



N.º	N.º	N.º	N.º	N.º
2-56	Et	1	CH ₂ c-Pr	Me
2-57	Et	2	CH ₂ c-Pr	Me
2-58	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-59	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-60	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-61	Et	0	Me	Et
2-62	Et	1	Me	Et
2-63	Et	2	Me	Et
2-64	Et	0	Et	Et
2-65	Et	1	Et	Et
2-66	Et	2	Et	Et
2-67	Et	0	c-Pr	Et
2-68	Et	1	c-Pr	Et
2-69	Et	2	c-Pr	Et
2-70	Et	0	CH ₂ c-Pr	Et
2-71	Et	1	CH ₂ c-Pr	Et
2-72	Et	2	CH ₂ c-Pr	Et
2-73	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-74	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-75	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-76	Et	0	Me	i-Pr
2-77	Et	1	Me	i-Pr
2-78	Et	2	Me	i-Pr
2-79	Et	0	Et	i-Pr
2-80	Et	1	Et	i-Pr
2-81	Et	2	Et	i-Pr
2-82	Et	0	c-Pr	i-Pr

(continuación)



N.º	N.º	N.º	N.º	N.º
2-83	Et	1	c-Pr	i-Pr
2-84	Et	2	c-Pr	i-Pr
2-85	Et	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-86	Et	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-87	Et	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-88	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-89	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-90	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-91	c-Pr	0	Me	Me
2-92	c-Pr	1	Me	Me
2-93	c-Pr	2	Me	Me
2-94	c-Pr	0	Et	Me
2-95	c-Pr	1	Et	Me
2-96	c-Pr	2	Et	Me
2-97	c-Pr	0	c-Pr	Me
2-98	c-Pr	1	c-Pr	Me
2-99	c-Pr	2	c-Pr	Me
2-100	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Me
2-101	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Me
2-102	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Me
2-103	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-104	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-105	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
2-106	c-Pr	0	Me	Et
2-107	c-Pr	1	Me	Et
2-108	c-Pr	2	Me	Et
2-109	c-Pr	0	Et	Et

(continuación)

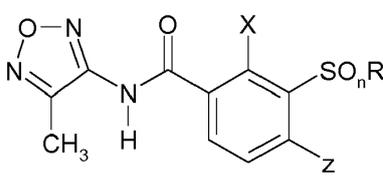
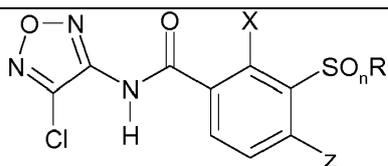
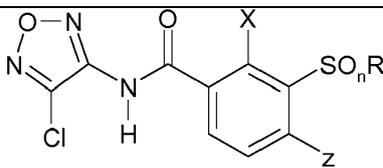
				
N.º	N.º	N.º	N.º	N.º
2-110	c-Pr	1	Et	Et
2-111	c-Pr	2	Et	Et
2-112	c-Pr	0	c-Pr	Et
2-113	c-Pr	1	c-Pr	Et
2-114	c-Pr	2	c-Pr	Et
2-115	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Et
2-116	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Et
2-117	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Et
2-118	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-119	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-120	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
2-121	c-Pr	0	Me	i-Pr
2-122	c-Pr	1	Me	i-Pr
2-123	c-Pr	2	Me	i-Pr
2-124	c-Pr	0	Et	i-Pr
2-125	c-Pr	1	Et	i-Pr
2-126	c-Pr	2	Et	i-Pr
2-127	c-Pr	0	c-Pr	i-Pr
2-128	c-Pr	1	c-Pr	i-Pr
2-129	c-Pr	2	c-Pr	i-Pr
2-130	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-131	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-132	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
2-133	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-134	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
2-135	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr

Tabla 3: Compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención, en la que Q representa Q₂ y R^y representa un átomo de cloro

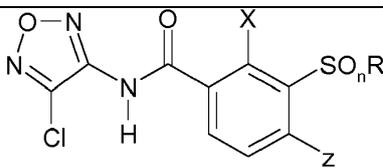


N.º	X	n	R	Z
3-1	Me	0	Me	Me
3-2	Me	1	Me	Me
3-3	Me	2	Me	Me
3-4	Me	0	Et	Me
3-5	Me	1	Et	Me
3-6	Me	2	Et	Me
3-7	Me	0	c-Pr	Me
3-8	Me	1	c-Pr	Me
3-9	Me	2	c-Pr	Me
3-10	Me	0	CH ₂ c-Pr	Me
3-11	Me	1	CH ₂ c-Pr	Me
3-12	Me	2	CH ₂ c-Pr	Me
3-13	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-14	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-15	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-16	Me	0	Me	Et
3-17	Me	1	Me	Et
3-18	Me	2	Me	Et
3-19	Me	0	Et	Et
3-20	Me	1	Et	Et
3-21	Me	2	Et	Et
3-22	Me	0	c-Pr	Et
3-23	Me	1	c-Pr	Et
3-24	Me	2	c-Pr	Et
3-25	Me	0	CH ₂ c-Pr	Et
3-26	Me	1	CH ₂ c-Pr	Et
3-27	Me	2	CH ₂ c-Pr	Et
3-28	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-29	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-30	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et

(continuación)

				
N.º	X	n	R	Z
3-31	Me	0	Me	i-Pr
3-32	Me	1	Me	i-Pr
3-33	Me	2	Me	i-Pr
3-34	Me	0	Et	i-Pr
3-35	Me	1	Et	i-Pr
3-36	Me	2	Et	i-Pr
3-37	Me	0	c-Pr	i-Pr
3-38	Me	1	c-Pr	i-Pr
3-39	Me	2	c-Pr	i-Pr
3-40	Me	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-41	Me	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-42	Me	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-43	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-44	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-45	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-46	Et	0	Me	Me
3-47	Et	1	Me	Me
3-48	Et	2	Me	Me
3-49	Et	0	Et	Me
3-50	Et	1	Et	Me
3-51	Et	2	Et	Me
3-52	Et	0	c-Pr	Me
3-53	Et	1	c-Pr	Me
3-54	Et	2	c-Pr	Me
3-55	Et	0	CH ₂ c-Pr	Me
3-56	Et	1	CH ₂ c-Pr	Me
3-57	Et	2	CH ₂ c-Pr	Me
3-58	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me

(continuación)

				
N.º	X	n	R	Z
3-59	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-60	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-61	Et	0	Me	Et
3-62	Et	1	Me	Et
3-63	Et	2	Me	Et
3-64	Et	0	Et	Et
3-65	Et	1	Et	Et
3-66	Et	2	Et	Et
3-67	Et	0	c-Pr	Et
3-68	Et	1	c-Pr	Et
3-69	Et	2	c-Pr	Et
3-70	Et	0	CH ₂ c-Pr	Et
3-71	Et	1	CH ₂ c-Pr	Et
3-72	Et	2	CH ₂ c-Pr	Et
3-73	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-74	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-75	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-76	Et	0	Me	i-Pr
3-77	Et	1	Me	i-Pr
3-78	Et	2	Me	i-Pr
3-79	Et	0	Et	i-Pr
3-80	Et	1	Et	i-Pr
3-81	Et	2	Et	i-Pr
3-82	Et	0	c-Pr	i-Pr
3-83	Et	1	c-Pr	i-Pr
3-84	Et	2	c-Pr	i-Pr
3-85	Et	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-86	Et	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr

(continuación)

N.º	X	n	R	Z
3-87	Et	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-88	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-89	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-90	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-91	c-Pr	0	Me	Me
3-92	c-Pr	1	Me	Me
3-93	c-Pr	2	Me	Me
3-94	c-Pr	0	Et	Me
3-95	c-Pr	1	Et	Me
3-96	c-Pr	2	Et	Me
3-97	c-Pr	0	c-Pr	Me
3-98	c-Pr	1	c-Pr	Me
3-99	c-Pr	2	c-Pr	Me
3-100	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Me
3-101	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Me
3-102	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Me
3-103	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-104	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-105	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
3-106	c-Pr	0	Me	Et
3-107	c-Pr	1	Me	Et
3-108	c-Pr	2	Me	Et
3-109	c-Pr	0	Et	Et
3-110	c-Pr	1	Et	Et
3-111	c-Pr	2	Et	Et
3-112	c-Pr	0	c-Pr	Et
3-113	c-Pr	1	c-Pr	Et
3-114	c-Pr	2	c-Pr	Et

(continuación)

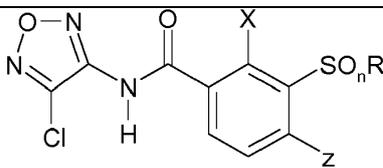
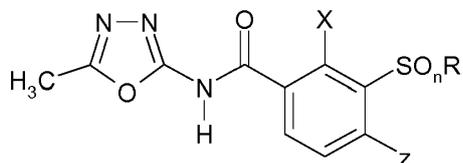
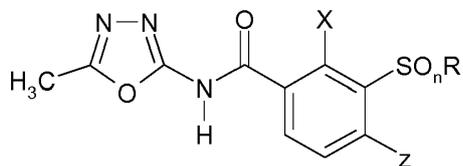
				
N.º	X	n	R	Z
3-115	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Et
3-116	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Et
3-117	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Et
3-118	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-119	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-120	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
3-121	c-Pr	0	Me	i-Pr
3-122	c-Pr	1	Me	i-Pr
3-123	c-Pr	2	Me	i-Pr
3-124	c-Pr	0	Et	i-Pr
3-125	c-Pr	1	Et	i-Pr
3-126	c-Pr	2	Et	i-Pr
3-127	c-Pr	0	c-Pr	i-Pr
3-128	c-Pr	1	c-Pr	i-Pr
3-129	c-Pr	2	c-Pr	i-Pr
3-130	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-131	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-132	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
3-133	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-134	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
3-135	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr

Tabla 4: Compuestos de fórmula general (I) de acuerdo con la invención, en la que Q representa Q³ y R^Z representa un grupo metilo



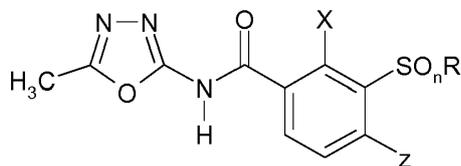
N.º	X	n	R	Z
4-1	Me	0	Me	Me
4-2	Me	1	Me	Me
4-3	Me	2	Me	Me
4-4	Me	0	Et	Me
4-5	Me	1	Et	Me
4-6	Me	2	Et	Me
4-7	Me	0	c-Pr	Me
4-8	Me	1	c-Pr	Me
4-9	Me	2	c-Pr	Me
4-10	Me	0	CH ₂ c-Pr	Me
4-11	Me	1	CH ₂ c-Pr	Me
4-12	Me	2	CH ₂ c-Pr	Me
4-13	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-14	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-15	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-16	Me	0	Me	Et
4-17	Me	1	Me	Et
4-18	Me	2	Me	Et
4-19	Me	0	Et	Et
4-20	Me	1	Et	Et
4-21	Me	2	Et	Et
4-22	Me	0	c-Pr	Et
4-23	Me	1	c-Pr	Et
4-24	Me	2	c-Pr	Et
4-25	Me	0	CH ₂ c-Pr	Et
4-26	Me	1	CH ₂ c-Pr	Et
4-27	Me	2	CH ₂ c-Pr	Et
4-28	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et

(continuación)



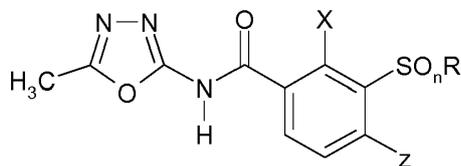
N.º	X	n	R	Z
4-29	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-30	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-31	Me	0	Me	i-Pr
4-32	Me	1	Me	i-Pr
4-33	Me	2	Me	i-Pr
4-34	Me	0	Et	i-Pr
4-35	Me	1	Et	i-Pr
4-36	Me	2	Et	i-Pr
4-37	Me	0	c-Pr	i-Pr
4-38	Me	1	c-Pr	i-Pr
4-39	Me	2	c-Pr	i-Pr
4-40	Me	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-41	Me	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-42	Me	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-43	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-44	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-45	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-46	Et	0	Me	Me
4-47	Et	1	Me	Me
4-48	Et	2	Me	Me
4-49	Et	0	Et	Me
4-50	Et	1	Et	Me
4-51	Et	2	Et	Me
4-52	Et	0	c-Pr	Me
4-53	Et	1	c-Pr	Me
4-54	Et	2	c-Pr	Me
4-55	Et	0	CH ₂ c-Pr	Me

(continuación)



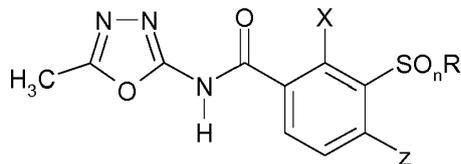
N.º	X	n	R	Z
4-56	Et	1	CH ₂ c-Pr	Me
4-57	Et	2	CH ₂ c-Pr	Me
4-58	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-59	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-60	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-61	Et	0	Me	Et
4-62	Et	1	Me	Et
4-63	Et	2	Me	Et
4-64	Et	0	Et	Et
4-65	Et	1	Et	Et
4-66	Et	2	Et	Et
4-67	Et	0	c-Pr	Et
4-68	Et	1	c-Pr	Et
4-69	Et	2	c-Pr	Et
4-70	Et	0	CH ₂ c-Pr	Et
4-71	Et	1	CH ₂ c-Pr	Et
4-72	Et	2	CH ₂ c-Pr	Et
4-73	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-74	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-75	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-76	Et	0	Me	i-Pr
4-77	Et	1	Me	i-Pr
4-78	Et	2	Me	i-Pr
4-79	Et	0	Et	i-Pr
4-80	Et	1	Et	i-Pr
4-81	Et	2	Et	i-Pr
4-82	Et	0	c-Pr	i-Pr

(continuación)



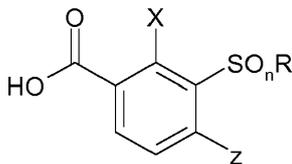
N.º	X	n	R	Z
4-83	Et	1	c-Pr	i-Pr
4-84	Et	2	c-Pr	i-Pr
4-85	Et	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-86	Et	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-87	Et	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-88	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-89	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-90	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-91	c-Pr	0	Me	Me
4-92	c-Pr	1	Me	Me
4-93	c-Pr	2	Me	Me
4-94	c-Pr	0	Et	Me
4-95	c-Pr	1	Et	Me
4-96	c-Pr	2	Et	Me
4-97	c-Pr	0	c-Pr	Me
4-98	c-Pr	1	c-Pr	Me
4-99	c-Pr	2	c-Pr	Me
4-100	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Me
4-101	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Me
4-102	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Me
4-103	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-104	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-105	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
4-106	c-Pr	0	Me	Et
4-107	c-Pr	1	Me	Et
4-108	c-Pr	2	Me	Et
4-109	c-Pr	0	Et	Et

(continuación)

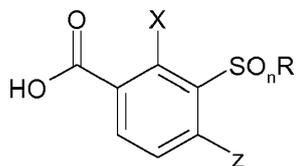


N.º	X	n	R	Z
4-110	c-Pr	1	Et	Et
4-111	c-Pr	2	Et	Et
4-112	c-Pr	0	c-Pr	Et
4-113	c-Pr	1	c-Pr	Et
4-114	c-Pr	2	c-Pr	Et
4-115	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Et
4-116	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Et
4-117	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Et
4-118	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-119	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-120	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
4-121	c-Pr	0	Me	i-Pr
4-122	c-Pr	1	Me	i-Pr
4-123	c-Pr	2	Me	i-Pr
4-124	c-Pr	0	Et	i-Pr
4-125	c-Pr	1	Et	i-Pr
4-126	c-Pr	2	Et	i-Pr
4-127	c-Pr	0	c-Pr	i-Pr
4-128	c-Pr	1	c-Pr	i-Pr
4-129	c-Pr	2	c-Pr	i-Pr
4-130	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-131	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-132	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
4-133	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-134	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
4-135	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr

Tabla 5: Ácidos benzoicos de fórmula (II) de acuerdo con la invención

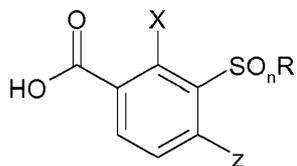
				
N.º	X	n	R	Z
5-1	Me	0	Me	Me
5-2	Me	1	Me	Me
5-3				
5-4	Me	0	Et	Me
5-5	Me	1	Et	Me
5-6	Me	2	Et	Me
5-7	Me	0	c-Pr	Me
5-8	Me	1	c-Pr	Me
5-9	Me	2	c-Pr	Me
5-10	Me	0	CH ₂ c-Pr	Me
5-11	Me	1	CH ₂ c-Pr	Me
5-12	Me	2	CH ₂ c-Pr	Me
5-13	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-14	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-15	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-16	Me	0	Me	Et
5-17	Me	1	Me	Et
5-18	Me	2	Me	Et
5-19	Me	0	Et	Et
5-20	Me	1	Et	Et
5-21	Me	2	Et	Et
5-22	Me	0	c-Pr	Et
5-23	Me	1	c-Pr	Et
5-24	Me	2	c-Pr	Et
5-25	Me	0	CH ₂ c-Pr	Et
5-26	Me	1	CH ₂ c-Pr	Et
5-27	Me	2	CH ₂ c-Pr	Et
5-28	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et

(continuación)



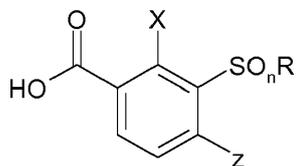
N.º	X	n	R	Z
5-29	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-30	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-31	Me	0	Me	i-Pr
5-32	Me	1	Me	i-Pr
5-33	Me	2	Me	i-Pr
5-34	Me	0	Et	i-Pr
5-35	Me	1	Et	i-Pr
5-36	Me	2	Et	i-Pr
5-37	Me	0	c-Pr	i-Pr
5-38	Me	1	c-Pr	i-Pr
5-39	Me	2	c-Pr	i-Pr
5-40	Me	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-41	Me	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-42	Me	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-43	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-44	Me	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-45	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-46	Et	0	Me	Me
5-47	Et	1	Me	Me
5-48	Et	2	Me	Me
5-49	Et	0	Et	Me
5-50	Et	1	Et	Me
5-51	Et	2	Et	Me
5-52	Et	0	c-Pr	Me
5-53	Et	1	c-Pr	Me
5-54	Et	2	c-Pr	Me
5-55	Et	0	CH ₂ c-Pr	Me

(continuación)



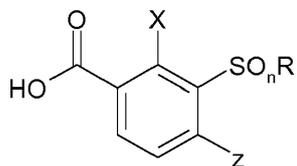
N.º	X	n	R	Z
5-56	Et	1	CH ₂ c-Pr	Me
5-57	Et	2	CH ₂ c-Pr	Me
5-58	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-59	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-60	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-61	Et	0	Me	Et
5-62	Et	1	Me	Et
5-63	Et	2	Me	Et
5-64	Et	0	Et	Et
5-65	Et	1	Et	Et
5-66	Et	2	Et	Et
5-67	Et	0	c-Pr	Et
5-68	Et	1	c-Pr	Et
5-69	Et	2	c-Pr	Et
5-70	Et	0	CH ₂ c-Pr	Et
5-71	Et	1	CH ₂ c-Pr	Et
5-72	Et	2	CH ₂ c-Pr	Et
5-73	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-74	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-75	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-76	Et	0	Me	i-Pr
5-77	Et	1	Me	i-Pr
5-78	Et	2	Me	i-Pr
5-79	Et	0	Et	i-Pr
5-80	Et	1	Et	i-Pr
5-81	Et	2	Et	i-Pr
5-82	Et	0	c-Pr	i-Pr

(continuación)



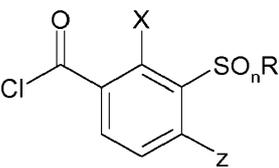
N.º	X	n	R	Z
5-83	Et	1	c-Pr	i-Pr
5-84	Et	2	c-Pr	i-Pr
5-85	Et	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-86	Et	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-87	Et	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-88	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-89	Et	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-90	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-91	c-Pr	0	Me	Me
5-92	c-Pr	1	Me	Me
5-93	c-Pr	2	Me	Me
5-94	c-Pr	0	Et	Me
5-95	c-Pr	1	Et	Me
5-96	c-Pr	2	Et	Me
5-97	c-Pr	0	c-Pr	Me
5-98	c-Pr	1	c-Pr	Me
5-99	c-Pr	2	c-Pr	Me
5-100	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Me
5-101	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Me
5-102	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Me
5-103	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-104	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-105	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
5-106	c-Pr	0	Me	Et
5-107	c-Pr	1	Me	Et
5-108	c-Pr	2	Me	Et
5-109	c-Pr	0	Et	Et

(continuación)

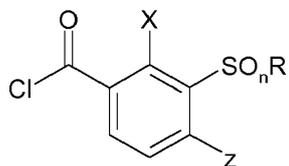


N.º	X	n	R	Z
5-110	c-Pr	1	Et	Et
5-111	c-Pr	2	Et	Et
5-112	c-Pr	0	c-Pr	Et
5-113	c-Pr	1	c-Pr	Et
5-114	c-Pr	2	c-Pr	Et
5-115	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Et
5-116	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	Et
5-117	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Et
5-118	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-119	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-120	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
5-121	c-Pr	0	Me	i-Pr
5-122	c-Pr	1	Me	i-Pr
5-123	c-Pr	2	Me	i-Pr
5-124	c-Pr	0	Et	i-Pr
5-125	c-Pr	1	Et	i-Pr
5-126	c-Pr	2	Et	i-Pr
5-127	c-Pr	0	c-Pr	i-Pr
5-128	c-Pr	1	c-Pr	i-Pr
5-129	c-Pr	2	c-Pr	i-Pr
5-130	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-131	c-Pr	1	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-132	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
5-133	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-134	c-Pr	1	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
5-135	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr

Tabla 6: Cloruros de ácido benzoico de fórmula (III) de acuerdo con la invención

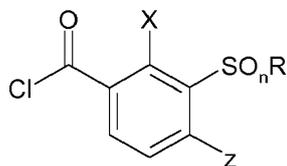
				
N.º	X	n	R	Z
6-1	Me	0	Me	Me
6-2	Me	2	Me	Me
6-3	Me	0	Et	Me
6-4	Me	2	Et	Me
6-5	Me	0	c-Pr	Me
6-6	Me	2	c-Pr	Me
6-7	Me	0	CH ₂ c-Pr	Me
6-8	Me	2	CH ₂ c-Pr	Me
6-9	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
6-10	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
6-11	Me	0	Me	Et
6-12	Me	2	Me	Et
6-13	Me	0	Et	Et
6-14	Me	2	Et	Et
6-15	Me	0	c-Pr	Et
6-16	Me	2	c-Pr	Et
6-17	Me	0	CH ₂ c-Pr	Et
6-18	Me	2	CH ₂ c-Pr	Et
6-19	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
6-20	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
6-21	Me	0	Me	i-Pr
6-22	Me	2	Me	i-Pr
6-23	Me	0	Et	i-Pr
6-24	Me	2	Et	i-Pr
6-25	Me	0	c-Pr	i-Pr
6-26	Me	2	c-Pr	i-Pr
6-27	Me	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
6-28	Me	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr

(continuación)



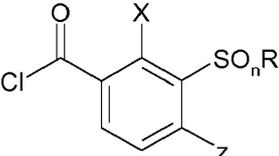
N.º	X	n	R	Z
6-29	Me	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
6-30	Me	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
6-31	Et	0	Me	Me
6-32	Et	2	Me	Me
6-33	Et	0	Et	Me
6-34	Et	2	Et	Me
6-35	Et	0	c-Pr	Me
6-36	Et	2	c-Pr	Me
6-37	Et	0	CH ₂ c-Pr	Me
6-38	Et	2	CH ₂ c-Pr	Me
6-39	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
6-40	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
6-41	Et	0	Me	Et
6-42	Et	2	Me	Et
6-43	Et	0	Et	Et
6-44	Et	2	Et	Et
6-45	Et	0	c-Pr	Et
6-46	Et	2	c-Pr	Et
6-47	Et	0	CH ₂ c-Pr	Et
6-48	Et	2	CH ₂ c-Pr	Et
6-49	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
6-50	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
6-51	Et	0	Me	i-Pr
6-52	Et	2	Me	i-Pr
6-53	Et	0	Et	i-Pr
6-54	Et	2	Et	i-Pr
6-55	Et	0	c-Pr	i-Pr

(continuación)



N.º	X	n	R	Z
6-56	Et	2	c-Pr	i-Pr
6-57	Et	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
6-58	Et	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
6-59	Et	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
6-60	Et	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
6-61	c-Pr	0	Me	Me
6-62	c-Pr	2	Me	Me
6-63	c-Pr	0	Et	Me
6-64	c-Pr	2	Et	Me
6-65	c-Pr	0	c-Pr	Me
6-66	c-Pr	2	c-Pr	Me
6-67	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Me
6-68	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Me
6-69	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
6-70	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Me
6-71	c-Pr	0	Me	Et
6-72	c-Pr	2	Me	Et
6-73	c-Pr	0	Et	Et
6-74	c-Pr	2	Et	Et
6-75	c-Pr	0	c-Pr	Et
6-76	c-Pr	2	c-Pr	Et
6-77	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	Et
6-78	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	Et
6-79	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
6-80	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	Et
6-81	c-Pr	0	Me	i-Pr
6-82	c-Pr	2	Me	i-Pr

(continuación)

				
N.º	X	n	R	Z
6-83	c-Pr	0	Et	i-Pr
6-84	c-Pr	2	Et	i-Pr
6-85	c-Pr	0	c-Pr	i-Pr
6-86	c-Pr	2	c-Pr	i-Pr
6-87	c-Pr	0	CH ₂ c-Pr	i-Pr
6-88	c-Pr	2	CH ₂ c-Pr	i-Pr
6-89	c-Pr	0	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr
6-90	c-Pr	2	CH ₂ CH ₂ OMe	i-Pr

5 Para los numerosos compuestos de fórmulas (I) y (II) de acuerdo con la invención mencionados en las tablas anteriores se divulgan a continuación los datos de RMN en los denominados procedimientos de listas de picos de RMN. A este respecto se anotan los datos de ¹H-RMN de ejemplos seleccionados en forma de listas de picos de ¹H-RMN. Con respecto a cada pico de señal se registra primero el valor δ en ppm y entonces la intensidad de señal entre paréntesis. El valor δ - pares de número de intensidad de señal de distintos picos de señal se enumeran separados uno de otro por punto y coma. Las listas de picos de un ejemplo tiene por tanto la forma:

δ_1 (Intensidad₁); δ_2 (Intensidad₂);.....; δ_i (Intensidad_i);.....; δ_n (Intensidad_n)

10 La intensidad de señales más puntiagudas se correlaciona con la altura de las señales en un ejemplo impreso de un espectro de RMN en cm y muestra las proporciones reales de las intensidades de señal. En caso de señales anchas pueden mostrarse varios picos o el centro de la señal y su intensidad relativa en comparación con la señal más intensa en el espectro. Las listas de los picos de ¹H-RMN son similares a los listados de ¹H-RMN clásicos y por consiguiente contienen habitualmente todos los picos que se exponen en caso de una interpretación de RMN
15 clásica. Además pueden mostrarse como listados de ¹H-RMN clásicos las señales de disolvente, señales de estereoisómeros de los compuestos objetivo, que igualmente son objeto de la invención, y/o picos de impurezas.

En caso de indicación de señales de compuestos en el intervalo de delta de disolventes y/o agua se muestran en nuestra lista de picos de ¹H-RMN los picos de disolventes habituales, por ejemplo picos de DMSO en DMSO-D₆ y el pico de agua, que presentan habitualmente en promedio una intensidad alta.

20 Los picos de estereoisómeros de los compuestos de acuerdo con la invención y/o picos de impurezas tienen habitualmente en promedio una intensidad más baja que los picos de los compuestos de acuerdo con la invención (por ejemplo con una pureza de > 90 %).

Tales estereoisómeros y/o impurezas pueden estar normalmente para el procedimiento de preparación respectivo. Por consiguiente sus picos pueden ayudar a reconocer la reproducción de nuestro procedimiento de preparación por
25 medio de "huellas de productos secundarios".

Un experto que calcule los picos de los compuestos objetivo con procedimientos conocidos (MestreC, simulación ACD, sin embargo también con valores esperados evaluados empíricamente), puede aislar en cada caso según la necesidad los picos de los compuestos de acuerdo con la invención, usándose eventualmente filtros de intensidad
30 adicionales. Este aislamiento sería similar a la respectiva recogida de picos en caso de la interpretación de ¹H-RMN clásica.

Compuestos de fórmula (I):

Ejemplo 2-46: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ = 7,711(0,7);7,399(1,4);7,380(1,8);7,262(52,3);7,236(1,6);7,216(1,3);3
--

ES 2 674 660 T3

,200(0,8);3,182(2,5);3,163(2,5);3,145(0,8);2,640(10,0);2,502(13,1);2,421(0,5);2,268(16,0);2,244(0,6);1,550(4,5);1,283(3,1);1,275(0,6);1,264(6,7);1,255(1,0);1,246(3,0);0,008(1,0);0,000(24,1);-0,009(0,9)
Ejemplo 2-47: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,504(1,5);7,485(1,7);7,263(14,4);7,144(1,4);7,124(1,2);3,046(0,6);3,028(0,5);2,961(14,8);2,830(0,6);2,673(8,1);2,471(16,0);1,194(2,1);1,176(5,0);1,157(2,1);0,000(5,2)
Ejemplo 2-48: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,567(0,9);7,548(1,0);7,280(1,5);7,263(16,7);3,296(0,5);3,278(1,5);3,260(1,6);3,241(0,5);3,121(16,0);2,722(8,6);2,497(13,0);1,302(2,0);1,284(4,3);1,265(2,0);0,000(5,7)
Ejemplo 2-1: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,410(0,9);7,390(1,1);7,266(0,5);7,260(63,5);7,224(0,9);7,204(0,8);2,743(7,1);2,622(6,6);2,502(1,0);2,496(10,1);2,245(16,0);2,090(0,7);1,543(22,5);0,008(0,7);0,000(22,1);-0,009(0,6)
Ejemplo 2-3: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,585(0,8);7,566(0,9);7,519(1,1);7,311(1,2);7,292(1,1);7,2734(0,5);7,2726(0,5);7,272(0,6);7,271(0,7);7,270(0,8);7,2694(0,9);7,2687(1,0);7,268(1,0);7,267(1,3);7,266(1,6);7,2654(2,0);7,2645(2,5);7,264(3,2);7,260(181,8);7,255(2,1);7,254(1,5);7,253(1,0);7,2524(0,8);7,2516(0,8);7,251(0,7);7,210(0,6);6,996(1,1);3,132(0,7);3,124(16,0);2,825(8,3);2,766(8,4);2,516(0,7);2,507(9,1);1,538(25,5);1,255(0,6);0,008(1,9);0,000(69,5);-0,009(2,0)
Ejemplo 2-2: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,519(0,6);7,509(1,4);7,489(1,5);7,271(0,6);7,270(0,6);7,260(109,4);7,145(1,2);7,126(1,1);6,996(0,6);2,863(14,8);2,590(7,8);2,580(7,6);2,483(16,0);1,542(15,9);0,008(1,4);0,000(41,3);-0,009(1,2)
Ejemplo 2-16: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,445(1,1);7,425(1,3);7,261(7,5);7,221(1,2);7,201(1,0);3,042(0,7);3,023(2,2);3,004(2,2);2,986(0,7);2,743(8,5);2,480(10,3);2,252(16,0);1,274(3,3);1,256(7,2);1,237(3,2);0,000(2,8)
Ejemplo 2-49: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,935(0,8);7,383(1,6);7,364(2,0);7,262(7,9);7,218(1,8);7,198(1,4);3,460(4,3);3,211(0,8);3,192(2,7);3,174(2,7);3,155(0,9);2,736(1,5);2,717(4,7);2,699(4,7);2,680(1,6);2,620(11,5);2,484(16,0);1,242(4,0);1,239(5,9);1,223(8,9);1,221(11,8);1,205(4,0);1,202(5,5);0,000(3,1)
Ejemplo 2-61: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,904(0,5);7,441(1,3);7,421(1,6);7,262(5,4);7,240(1,6);7,221(1,3);3,457(0,6);3,209(0,6);3,191(2,0);3,172(2,0);3,154(0,6);3,060(0,7);3,042(2,3);3,023(2,3);3,004(0,8);2,483(10,6);2,275(16,0);1,304(3,4);1,285(7,5);1,279(2,6);1,266(3,6);1,261(5,4);1,242(2,3);0,000(2,0)
Ejemplo 2-64: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,869(0,8);7,438(1,7);7,419(2,1);7,261(9,8);7,240(2,2);7,221(1,8);3,462(1,0);3,229(0,8);3,211(2,6);3,192(2,7);3,174(0,8);3,062(0,9);3,043(3,0);3,024(3,1);3,005(1,0);2,734(1,5);2,715(4,9);2,696(4,9);2,678(1,6);2,488(16,0);1,285(4,5);1,267(9,9);1,256(3,5);1,249(7,8);1,237(7,8);1,230(11,2);1,224(0,5);1,219(3,4);1,212(5,1);0,000(3,7)
Ejemplo 2-4: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,860(0,8);7,402(1,6);7,383(2,0);7,261(15,7);7,218(1,7);7,198(1,4);3,475(0,6);2,723(12,8);2,708(5,6);2,689(5,6);2,671(1,8);2,607(12,4);2,485(16,0);2,001(1,6);1,213(6,0);1,194(12,2);1,176(5,7);0,000(6,3)
Ejemplo 3-46: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,621(0,6);7,397(1,3);7,377(1,7);7,262(22,2);7,250(1,3);7,249(1,3);7,230(1,1);3,197(0,7);3,178(2,2);3,160(2,2);3,141(0,7);2,647(8,6);2,271(16,0);1,555(1,3);1,290(2,7);1,272(6,0);1,253(2,9);0,000(10,0)
Ejemplo 3-47: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,506(1,8);7,486(2,0);7,261(36,0);7,135(1,4);7,114(1,2);3,022(0,6);3,003(0,5);2,938(16,0);2,812(0,5);2,659(8,3);1,192(2,2);1,173(5,3);1,155(2,2);0,000(12,7)
Ejemplo 3-48: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,570(1,0);7,551(1,2);7,310(1,3);7,290(1,2);7,267(0,5);7,261(40,3);3,303(1,4);3,285(1,4);3,133(16,0);2,750(8,5);1,579(0,6);1,322(2,3);1,303(5,2);1,285(2,3);0,000(13,6)
Ejemplo 3-1: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,406(1,1);7,387(1,4);7,260(48,0);7,236(1,1);7,217(0,9);2,753(7,9);2,628(7,4);2,249(16,0);1,542(9,2);0,008(0,5);0,000(16,7)
Ejemplo 3-3: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,581(0,9);7,561(1,1);7,519(0,9);7,318(1,1);7,298(1,0);7,260(165,7);7,253(0,5);7,252(0,5);6,996(0,9);3,122(16,0);2,820(8,2);2,758(8,0);1,537(28,1);1,256(0,6);0,008(1,9);0,0064(0,7);0,0055(0,8);0,000(57,1);-0,009(1,5)
Ejemplo 3-2: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,519(0,8);7,511(1,7);7,491(1,9);7,260(122,2);7,252(0,5);7,143(1,3);7,124(1,3);6,996(0,7);2,851(16,0);2,580(8,9);2,549(8,7);2,043(1,4);1,541(22,1);1,258(1,1);0,008(1,4);0,000(44,3);-0,009(1,2)
Ejemplo 3-16: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,443(1,2);7,424(1,4);7,261(10,1);7,234(1,1);7,215(0,9);3,048(0,6);3,029(2,0);3,010(2,1);2,991(0,7);2,756(7,9);2,256(16,0);1,277(3,2);1,258(6,9);1,239(3,2);0,000(3,9)
Ejemplo 3-49: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,769(1,0);7,383(2,5);7,364(3,2);7,262(15,2);7,227(2,4);7,208(1,9);3,402(0,5);3,207(1,1);3,188(3,7);3,170(3,7);3,151(1,2);2,737(2,2);2,718(7,0);2,700(7,1);2,681(2,3);2,624(15,7);1,252(

ES 2 674 660 T3

4,7);1,243(7,8);1,233(10,9);1,224(16,0);1,215(4,8);1,210(0,9);1,206(7,3);1,200(0,8);0,000(5,7)
Ejemplo 3-61: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,439(1,4);7,419(1,7);7,263(6,2);7,249(1,5);7,229(1,2);3,455(2,6);3,204(0,6);3,185(1,8);3,166(1,9);3,148(0,6);3,064(0,7);3,045(2,1);3,026(2,1);3,007(0,7);2,276(16,0);1,305(3,2);1,287(8,3);1,267(7,7);1,263(0,6);1,249(2,3);0,000(2,4)
Ejemplo 3-64: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,761(1,1);7,433(2,7);7,413(3,3);7,263(11,4);7,249(3,0);7,229(2,5);3,451(2,3);3,221(1,1);3,202(3,5);3,184(3,6);3,165(1,1);3,065(1,3);3,047(4,0);3,028(4,1);3,009(1,3);2,734(2,1);2,716(6,9);2,697(7,0);2,679(2,2);1,287(6,2);1,269(13,9);1,259(4,7);1,252(8,6);1,250(7,4);1,241(10,5);1,233(16,0);1,222(4,5);1,215(7,2);0,000(4,2)
Ejemplo 3-4: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,699(1,0);7,396(2,2);7,377(2,8);7,261(22,1);7,226(2,2);7,207(1,7);2,731(16,0);2,710(7,1);2,691(7,1);2,673(2,3);2,612(15,5);1,217(7,5);1,198(15,7);1,180(7,1);0,000(8,2)
Ejemplo 4-46: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,408(0,5);7,261(75,6);7,211(1,2);7,190(1,0);5,300(0,9);3,204(0,6);3,185(1,8);3,167(1,8);3,148(0,6);2,631(10,0);2,555(9,3);2,260(16,0);2,228(0,6);1,553(0,8);1,270(1,7);1,252(3,7);1,233(1,7);0,008(0,9);0,000(29,3);-0,009(0,8)
Ejemplo 4-48: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,269(0,4);7,260(50,0);3,110(2,2);2,721(1,2);2,366(0,4);1,240(0,3);1,222(0,6);0,008(0,6);0,000(18,2);-0,009(0,5)
Ejemplo 4-47: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,531(0,6);7,519(2,0);7,512(0,6);7,294(0,6);7,260(302,1);7,149(1,4);7,130(1,3);6,996(1,7);2,960(16,0);2,944(1,1);2,741(8,4);2,530(6,9);1,555(1,4);1,244(2,2);1,226(4,8);1,207(2,1);0,008(3,2);0,000(108,5);-0,007(1,0);-0,009(3,2)
Ejemplo 4-16: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,519(0,6);7,479(1,0);7,459(1,1);7,260(104,5);7,212(1,6);7,192(1,4);6,996(0,6);3,036(0,9);3,017(2,7);2,999(2,7);2,980(0,9);2,763(11,0);2,552(13,5);2,250(16,0);1,270(3,6);1,251(7,5);1,232(3,4);0,008(1,5);0,000(36,4);-0,009(1,1)
Ejemplo 4-18: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,650(1,1);7,630(1,2);7,312(1,3);7,292(1,2);7,262(36,0);3,191(0,8);3,173(2,4);3,152(16,0);3,136(0,8);2,800(8,8);2,521(11,7);2,006(0,9);1,343(3,1);1,325(7,1);1,306(3,0);0,000(11,5)
Ejemplo 4-17: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,583(1,0);7,563(1,1);7,262(44,9);7,195(1,5);7,175(1,4);3,038(0,6);3,020(0,5);2,948(16,0);2,932(0,9);2,915(0,6);2,721(8,4);2,543(15,6);1,254(3,3);1,235(7,2);1,217(3,2);0,008(0,5);0,000(15,8)
Ejemplo 4-1: ¹ H-RMN(400,6 MHz, CDCl ₃): δ= 7,519(0,8);7,285(0,6);7,273(1,0);7,261(144,3);7,254(0,6);7,203(1,0);7,183(0,8);6,997(0,7);2,747(10,1);2,612(8,9);2,553(8,8);2,239(16,0);1,559(13,3);0,008(1,6);0,006(0,8);0,000(46,0);-0,009(1,2)
Ejemplo 4-2: ¹ H-RMN(400,0 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 11,942(0,9);7,503(1,0);7,484(1,1);7,255(1,2);7,235(1,0);3,307(77,5);3,175(0,6);3,162(0,5);2,931(16,0);2,669(0,6);2,593(8,6);2,567(7,0);2,551(0,6);2,523(1,7);2,518(2,5);2,509(34,9);2,505(76,5);2,500(107,2);2,495(74,6);2,491(33,7);2,478(12,2);2,455(0,5);2,451(0,6);2,327(0,6);0,008(0,6);0,000(21,8);-0,009(0,7)
Ejemplo 4-49: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,448(1,8);7,428(1,9);7,261(30,3);7,197(1,6);7,178(1,3);3,221(0,8);3,202(2,7);3,196(0,5);3,184(2,7);3,165(0,8);2,727(1,5);2,714(0,6);2,709(4,8);2,696(0,7);2,690(5,0);2,672(1,7);2,624(1,2);2,612(12,1);2,573(1,1);2,537(16,0);2,003(1,6);1,429(0,6);1,235(7,1);1,222(1,5);1,216(15,0);1,203(1,9);1,198(7,1);1,190(1,0);1,185(0,8);1,182(0,6);1,171(0,9);0,987(0,9);0,000(11,1)
Ejemplo 4-3: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,624(0,8);7,603(0,8);7,518(1,8);7,351(0,8);7,295(1,9);7,259(323,0);7,226(0,9);7,210(1,4);6,995(1,8);3,150(0,7);3,138(1,1);3,127(16,0);2,910(1,2);2,899(0,6);2,869(0,6);2,825(11,2);2,793(1,0);2,771(10,7);2,697(0,7);2,600(0,6);2,546(12,0);1,584(0,7);0,157(0,6);0,145(0,5);0,008(5,2);0,000(117,9);-0,009(3,9)
Ejemplo 4-61: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,509(1,5);7,489(1,7);7,263(10,6);7,215(1,5);7,195(1,3);3,467(1,1);3,217(0,5);3,199(1,8);3,180(1,9);3,162(0,6);3,051(0,7);3,032(2,2);3,014(2,3);2,995(0,8);2,526(11,5);2,266(16,0);2,241(1,0);1,298(3,3);1,279(7,4);1,271(0,6);1,265(2,0);1,260(3,6);1,252(1,0);1,246(4,2);1,233(0,6);1,228(1,8);0,000(4,1)
Ejemplo 4-64: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,500(2,1);7,480(2,5);7,263(15,6);7,216(2,3);7,196(2,0);3,234(0,8);3,216(2,7);3,197(2,7);3,179(0,8);3,053(1,0);3,035(3,3);3,016(3,4);2,997(1,2);2,725(1,6);2,707(5,3);2,688(5,4);2,670(1,7);2,525(16,0);1,280(4,8);1,261(10,8);1,252(0,7);1,242(11,5);1,234(1,3);1,224(14,2);1,221(7,9);1,215(1,2);1,205(6,6);0,000(6,0)
Ejemplo 4-4: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,479(1,5);7,459(1,7);7,262(17,4);7,187(1,3);7,168(1,2);3,477(1,8);2,728(9,9);2,719(1,7);2,701(4,5);2,682(4,6);2,664(1,5);2,597(10,4);2,529(16,0);1,208(5,3);1,190(11,2);1,171(5,0);0,000(6,8)

ES 2 674 660 T3

Ejemplo 1-46: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,519(1,5);7,496(0,8);7,443(1,0);7,423(1,1);7,260(260,9);7,237(1,4);7,227(1,9);7,217(1,0);6,996(1,4);3,898(8,6);3,195(0,6);3,177(1,7);3,158(1,8);3,140(0,6);2,644(8,5);2,414(0,5);2,263(16,0);2,045(2,1);1,565(2,8);1,365(0,6);1,277(0,7);1,259(2,2);1,257(2,5);1,238(4,6);1,220(2,1);0,008(2,9);0,000(98,1);-0,009(2,8);-0,034(0,7)
Ejemplo 1-47: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,742(1,9);7,584(1,7);7,564(1,9);7,520(0,7);7,294(1,6);7,275(0,5);7,274(0,6);7,272(0,7);7,2704(0,9);7,2696(1,0);7,261(133,5);7,229(0,9);7,226(1,4);7,208(1,3);6,997(0,7);3,936(14,9);3,176(0,6);2,993(0,6);2,972(16,0);2,958(0,6);2,786(8,8);1,278(2,4);1,260(5,3);1,241(2,3);0,033(0,5);0,008(1,5);0,000(46,1);-0,009(1,3)
Ejemplo 1-16: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,572(0,8);7,519(2,2);7,505(1,1);7,485(1,2);7,310(0,8);7,260(387,2);7,242(0,6);7,233(1,6);7,227(1,2);7,211(1,6);6,996(2,2);3,899(8,7);3,860(0,6);3,047(0,7);3,029(2,4);3,010(2,4);2,991(0,8);2,760(9,1);2,249(16,0);2,045(1,7);1,604(1,0);1,281(3,5);1,273(0,7);1,262(7,6);1,243(3,5);0,008(4,4);0,000(141,8);-0,009(4,2);-0,150(0,5)
Ejemplo 1-48: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,755(1,9);7,596(1,4);7,576(1,7);7,325(1,3);7,305(1,1);7,262(79,4);3,976(13,4);3,350(0,5);3,331(1,9);3,313(1,9);3,295(0,6);3,135(16,0);2,799(8,9);1,342(2,3);1,323(5,6);1,305(2,4);0,008(0,9);0,000(36,4);-0,009(1,2)
Ejemplo 1-17: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,689(2,0);7,622(1,5);7,602(1,7);7,261(62,3);7,251(1,2);7,231(1,1);3,933(15,0);2,980(0,7);2,966(16,0);2,944(0,5);2,798(7,7);1,299(3,2);1,281(7,1);1,262(3,1);0,008(0,6);0,000(21,1);-0,009(0,6)
Ejemplo 1-18: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,652(1,3);7,631(3,1);7,359(1,3);7,339(1,1);7,263(20,6);3,950(13,2);3,210(0,7);3,192(2,2);3,173(2,2);3,155(0,8);3,144(16,0);2,817(8,8);1,363(2,9);1,344(6,7);1,326(2,9);0,000(7,0)
Ejemplo 1-1: ¹ H-RMN(400,0 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 10,892(1,0);7,874(2,3);7,455(0,8);7,436(0,9);7,294(1,1);7,274(1,0);3,741(15,4);3,366(0,9);3,349(0,7);3,315(502,6);3,265(2,7);3,201(0,7);2,674(1,6);2,670(2,3);2,665(1,7);2,628(8,8);2,561(8,8);2,523(7,2);2,518(10,9);2,510(145,2);2,505(311,6);2,501(430,0);2,496(297,5);2,491(132,2);2,451(2,3);2,446(1,8);2,332(1,9);2,328(2,5);2,323(1,8);2,235(16,0);0,008(4,8);0,000(154,7);-0,009(4,4)
Ejemplo 1-4: ¹ H-RMN(400,0 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 10,901(0,9);7,872(1,8);7,456(0,6);7,437(0,7);7,300(1,0);7,280(0,9);3,741(16,0);3,349(0,6);3,316(199,0);3,267(0,7);2,734(1,1);2,716(3,4);2,697(3,6);2,679(1,5);2,674(0,8);2,670(1,1);2,665(0,7);2,617(8,4);2,547(8,3);2,523(3,2);2,519(4,6);2,510(63,4);2,505(137,0);2,501(189,9);2,496(131,7);2,492(58,6);2,451(0,9);2,446(0,7);2,332(0,8);2,327(1,1);2,323(0,8);1,132(3,6);1,114(7,7);1,095(3,4);0,008(1,5);0,000(50,7);-0,009(1,5)
Ejemplo 1-5: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,561(1,6);7,542(1,8);7,520(1,0);7,496(3,7);7,261(166,9);7,168(1,8);7,149(1,6);6,997(1,0);3,879(16,0);3,622(1,0);3,594(0,5);3,286(1,1);3,267(1,2);3,253(1,4);3,235(1,4);2,983(1,3);2,964(1,4);2,950(1,2);2,931(1,1);2,666(7,4);2,630(9,6);2,316(0,8);2,307(0,6);2,264(1,2);2,050(2,3);2,044(1,2);1,576(0,7);1,350(5,7);1,331(12,0);1,312(5,6);1,259(1,0);0,008(1,8);0,000(57,3);-0,009(1,5)
Ejemplo 1-6: ¹ H-RMN(400,0 MHz, d ₆ -DMSO): δ= 11,102(0,9);7,891(1,0);7,686(0,7);7,423(0,9);3,766(16,0);3,382(18,4);3,343(4,4);3,168(0,5);2,684(18,8);2,506(98,0);2,501(124,5);2,497(91,6);2,329(1,3);2,257(0,6);2,209(0,7);1,224(2,9);1,205(5,6);1,187(2,8);0,000(9,9)
Ejemplo 1-2: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,565(1,2);7,546(1,3);7,420(2,6);7,262(46,6);7,176(1,3);7,156(1,2);3,874(13,5);2,888(16,0);2,669(9,1);2,656(8,6);0,008(0,5);0,000(15,9)
Ejemplo 1-3: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,623(0,7);7,604(0,7);7,566(1,4);7,519(1,4);7,299(1,1);7,279(1,4);7,277(1,2);7,274(1,2);7,260(250,6);6,996(1,4);3,897(7,3);3,123(16,0);2,835(9,0);2,785(8,4);2,044(0,6);1,576(0,8);0,008(3,0);0,000(88,4);-0,009(2,4)
Ejemplo 1-49: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,455(0,5);7,448(1,7);7,429(2,0);7,261(21,3);7,237(1,6);7,236(1,6);7,217(1,4);7,050(1,8);3,870(16,0);3,192(0,7);3,173(2,2);3,155(2,3);3,136(0,7);2,728(1,4);2,710(4,6);2,691(4,7);2,673(1,5);2,637(10,6);2,624(0,5);2,604(0,5);2,519(0,6);2,002(1,3);1,511(0,9);1,430(0,5);1,229(5,0);1,216(0,8);1,211(10,7);1,205(0,8);1,200(0,9);1,198(0,9);1,192(4,8);1,187(0,6);1,180(3,1);1,161(6,5);1,143(2,7);0,000(7,7)
Ejemplo 1-64: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,500(1,9);7,480(2,3);7,261(19,4);7,242(2,0);6,940(1,6);3,870(16,0);3,200(0,7);3,181(2,4);3,163(2,4);3,144(0,7);3,082(1,0);3,063(3,1);3,044(3,2);3,025(1,0);2,724(1,5);2,705(4,9);2,687(4,9);2,668(1,6);1,308(4,3);1,289(9,7);1,270(4,3);1,238(5,4);1,220(11,6);1,201(5,1);1,178(2,8);1,160(6,7);1,141(2,8);0,000(6,6)
Ejemplo 1-61: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,503(2,3);7,483(2,7);7,260(28,5);7,240(4,2);7,108(3,2);3,881(15,1);3,189(1,3);3,171(3,6);3,153(3,8);3,134(1,7);3,076(1,6);3,058(4,0);3,040(4,2);3,021(2,0);2,271(16,0);1,322(4,2);1,304(8,4);1,285(4,8);1,222(4,4);1,204(8,1);1,185(4,6);0,000(9,9)
Ejemplo 2-17: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,538(1,5);7,518(1,6);7,261(29,9);7,189(1,3);7,170(1,2);2,953(0,6);2

ES 2 674 660 T3

.934(0,8);2,911(13,2);2,897(0,8);2,656(6,6);2,479(16,0);1,226(2,7);1,207(5,8);1,189(2,6);0,000(11,8)
Ejemplo 2-50: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,494(1,4);7,475(1,6);7,260(39,5);7,121(1,2);7,101(1,1);3,389(0,7);3,370(0,7);3,356(0,8);3,337(0,8);2,881(0,7);2,862(0,8);2,848(0,7);2,829(0,7);2,628(5,6);2,486(16,0);1,559(1,7);1,408(2,8);1,390(5,9);1,371(2,6);1,197(1,8);1,178(4,1);1,159(1,7);0,000(15,2)
Ejemplo 2-62: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,544(1,6);7,524(1,8);7,261(23,1);7,246(1,7);7,226(1,5);3,482(0,7);3,164(0,6);3,146(0,9);3,128(0,9);3,116(0,8);3,097(0,7);2,967(15,3);2,480(16,0);1,295(3,0);1,276(6,5);1,257(2,9);1,209(2,1);1,191(4,8);1,172(2,0);0,000(8,9)
Ejemplo 2-65: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,546(1,5);7,526(1,7);7,261(36,6);7,244(1,5);7,224(1,3);3,485(0,6);3,417(0,7);3,398(0,8);3,384(0,8);3,365(0,8);2,906(0,7);2,887(0,7);2,873(0,6);2,854(0,6);2,489(16,0);1,430(2,9);1,411(6,2);1,392(2,8);1,285(3,0);1,266(6,5);1,247(2,9);1,221(2,0);1,202(4,5);1,184(1,9);0,000(13,9)
Ejemplo 2-5: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,505(1,3);7,486(1,5);7,261(36,7);7,111(1,1);7,091(1,0);3,216(0,7);3,197(0,7);3,183(0,8);3,164(0,8);2,911(0,8);2,892(0,9);2,878(0,7);2,859(0,7);2,525(4,9);2,502(5,8);2,491(0,5);2,483(16,0);1,572(1,1);1,328(3,1);1,309(6,7);1,291(3,0);0,000(14,3)
Ejemplo 2-18: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,972(0,8);7,620(1,1);7,607(1,1);7,353(2,0);7,340(1,8);7,261(50,0);3,174(1,2);3,162(3,7);3,145(17,5);3,137(1,3);2,821(12,3);2,505(9,9);1,560(20,7);1,336(4,0);1,324(8,2);1,311(3,9);0,000(18,6)
Ejemplo 2-51: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 8,136(1,7);7,573(2,0);7,560(2,1);7,290(4,3);7,277(4,2);7,262(50,0);3,482(0,6);3,302(1,7);3,291(4,3);3,279(4,3);3,267(1,6);3,211(2,6);3,199(7,8);3,187(7,8);3,174(2,6);2,746(27,6);2,507(22,0);1,573(25,6);1,381(7,6);1,369(15,0);1,357(7,2);1,319(7,3);1,307(15,0);1,294(7,0);0,000(17,9)
Ejemplo 2-63: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,950(2,4);7,616(2,2);7,603(2,3);7,365(4,2);7,352(3,8);7,262(50,0);3,344(1,7);3,332(4,6);3,320(4,6);3,308(1,6);
3,172(2,6);3,156(33,2);3,147(7,0);3,135(2,3);2,511(22,0);1,569(35,3);1,353(8,4);1,347(9,1);1,341(17,2);1,335(15,7);1,329(8,9);1,322(6,9);0,000(18,0)
Ejemplo 2-66: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,877(1,5);7,616(1,2);7,604(1,3);7,367(2,7);7,354(2,4);7,261(50,0);3,331(1,0);3,319(2,5);3,307(2,5);3,295(1,0);
3,227(1,6);3,215(4,8);3,202(4,8);3,190(1,6);3,157(1,4);3,145(4,1);3,133(4,1);3,120(1,4);2,513(12,8);1,559(33,8);1,394(4,7);1,382(9,1);1,369(4,5);1,352(8,2);1,339(16,5);1,327(8,1);0,000(18,3)
Ejemplo 2-6: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 8,264(1,0);7,574(1,4);7,561(1,5);7,284(2,8);7,270(3,4);7,262(50,0);3,190(1,6);3,178(4,9);3,165(4,9);3,153(1,6);2,781(15,7);2,714(17,1);2,503(12,3);2,006(0,6);1,572(5,5);1,362(5,0);1,349(9,9);1,337(4,7);0,000(17,3)
Ejemplo 3-17: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,543(2,0);7,523(2,3);7,2674(0,5);7,2666(0,6);7,266(0,7);7,260(62,7);7,199(1,7);7,179(1,6);2,939(0,8);2,913(16,0);2,891(0,9);2,666(8,3);1,608(1,5);1,226(3,2);1,207(6,9);1,188(3,2);0,008(0,7);0,000(24,1);-0,009(0,7)
Ejemplo 3-50: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 10,220(0,8);8,060(0,6);7,501(4,1);7,481(4,5);7,413(0,6);7,261(66,9);7,109(3,1);7,108(3,1);7,089(2,8);7,088(2,9);3,487(0,9);3,393(1,6);3,378(0,7);3,374(1,8);3,360(2,0);3,356(0,7);3,341(1,9);3,323(0,5);3,045(0,7);3,027(0,9);3,011(1,1);2,992(0,9);2,861(1,8);2,847(1,0);2,842(2,2);2,828(2,1);2,823(1,2);2,809(2,0);2,790(0,8);2,601(16,0);1,405(7,1);1,386(15,2);1,367(6,8);1,179(4,9);1,161(11,5);1,142(4,8);0,008(0,8);0,000(24,8);-0,009(0,7)
Ejemplo 3-62: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 8,065(0,6);7,548(1,7);7,528(2,0);7,414(0,7);7,262(23,0);7,250(1,8);7,230(1,5);3,483(2,7);3,141(0,6);3,124(1,1);3,120(1,1);3,105(1,3);3,101(1,0);3,087(0,7);2,973(16,0);1,293(3,1);1,275(6,9);1,256(3,1);1,205(2,2);1,187(5,1);1,168(2,2);0,000(8,7)
Ejemplo 3-65: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 9,683(0,5);7,546(5,3);7,526(6,0);7,521(0,7);7,262(63,2);7,230(4,2);7,210(3,9);3,480(1,9);3,431(0,6);3,412(2,2);3,398(0,9);3,393(2,4);3,379(2,6);3,375(0,9);3,360(2,5);3,342(0,7);3,103(0,7);3,085(1,3);3,067(2,1);3,050(2,2);2,933(0,5);2,899(0,9);2,879(2,0);2,865(0,7);2,860(2,0);2,846(1,8);2,841(0,8);2,827(1,7);2,808(0,5);1,577(1,8);1,425(8,6);1,407(17,9);1,388(8,1);1,271(7,5);1,253(16,0);1,234(7,3);1,185(4,4);1,166(9,4);1,148(4,2);0,008(0,7);0,000(23,0);-0,009(0,6)
Ejemplo 3-5: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 10,687(0,8);7,514(3,5);7,494(3,9);7,261(47,1);7,103(2,8);7,083(2,5);3,485(1,4);3,198(1,6);3,184(0,7);3,179(1,7);3,165(2,0);3,161(0,7);3,146(2,0);3,128(0,6);2,907(0,6);2,888(2,0);2,874(0,6);2,869(2,1);2,855(1,7);2,851(0,7);2,836(1,7);2,505(11,3);2,464(13,7);1,568(1,3);1,316(7,4);1,298(16,0);1,279(7,0);0,008(0,6);0,000(18,1);-0,009(0,5)
Ejemplo 3-18: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,840(0,8);7,617(1,0);7,604(1,0);7,366(1,5);7,353(1,4);7,261(50,0)

ES 2 674 660 T3

,179(0,8);3,167(2,5);3,150(12,5);3,142(0,9);2,825(9,0);1,554(37,4);1,341(2,8);1,328(5,7);1,316(2,7);0,000(18,6)
Ejemplo 3-51: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,999(1,0);7,565(1,7);7,552(1,8);7,302(3,1);7,289(2,9);7,262(50,0);3,484(0,3);3,288(2,5);3,277(2,5);3,216(1,9);
3,204(5,6);3,192(5,6);3,179(1,8);2,751(19,3);1,562(30,0);1,389(5,5);1,376(10,9);1,364(5,2);1,312(5,2);1,299(10,7);1,287(5,0);0,000(18,1)
Ejemplo 3-63: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ=7,773(1,7);7,609(1,4);7,596(1,5);7,380(2,5);7,366(2,2);7,261(50,0);3,346(0,9);3,335(2,2);3,323(2,2);3,311(0,8);3,180(1,4);3,164(18,5);3,155(3,8);3,143(1,2);1,558(41,5);1,361(4,2);1,348(9,0);1,344(5,4);1,336(5,7);1,331(8,5);1,319(3,7);0,000(17,8)
Ejemplo 3-66: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ=7,862(1,8);7,605(2,3);7,592(2,4);7,371(4,8);7,358(4,2);7,262(50,0);3,479(0,4);3,302(3,4);3,290(3,3);3,229(2,6);3,217(7,6);3,205(7,6);3,192(2,5);3,152(2,1);3,139(6,1);3,127(6,1);3,115(2,1);1,570(23,4);1,398(7,5);1,386(14,7);1,373(7,1);1,349(7,8);1,337(15,8);1,324(13,6);1,311(15,0);1,299(7,0);0,000(17,8)
Ejemplo 3-6: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ=8,504(0,8);7,568(3,1);7,555(3,3);7,274(5,3);7,262(50,0);3,481(1,8);3,168(2,8);3,155(8,5);3,143(8,5);3,130(2,8);2,774(0,4);2,748(28,9);2,669(27,3);1,577(13,0);1,350(8,9);1,337(17,7);1,325(8,4);0,000(16,5)
Ejemplo 4-31: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,514(0,5);7,269(1,6);7,261(38,4);7,249(1,1);3,976(0,6);3,959(0,9);3,942(0,7);2,775(10,2);2,536(11,9);2,246(16,0);1,573(0,7);1,263(12,7);1,246(12,5);0,000(13,8)
Ejemplo 4-32: ¹ H-RMN(400,0 MHz, CDCl ₃): δ= 7,518(12,6);7,259(2398,2);6,995(13,8);2,969(16,0);2,799(8,9);2,554(7,6);1,532(171,0);1,332(8,3);1,315(7,8);1,257(9,7);1,240(7,5);0,146(3,9);0,008(29,4);0,000(898,0);-0,149(4,5)
Ejemplo 4-50: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,261(50,0);7,138(1,2);7,125(1,1);3,400(0,5);3,388(0,5);3,378(0,6);3,366(0,5);2,932(0,4);2,920(0,8);2,907(0,8);
2,898(0,7);2,885(0,6);2,687(4,0);2,549(4,7);1,571(3,9);1,421(2,0);1,408(3,9);1,396(1,9);
Ejemplo 4-62: ¹ H-RMN(600,1MHz, CDCl ₃): δ= 7,261(50,0);7,245(1,0);3,282(0,3);3,269(0,3);3,090(0,4);3,078(0,5);3,066(0,4);3,054(0,4);2,987(8,2);2,546(4,7);
1,567(4,1);1,314(2,2);1,301(4,5);1,289(2,2);1,261(1,8);1,249(3,8);1,236(1,8);0,000(19,3);-0,006(0,7)
Ejemplo 4-65: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,574(0,8);7,262(50,0);7,239(2,1);7,226(1,9);3,428(0,4);3,416(1,2);3,404(1,4);3,394(1,5);3,382(1,3);3,369(0,4);
3,206(0,8);3,042(0,9);3,030(1,1);3,018(1,1);3,007(0,9);2,931(0,5);2,919(1,5);2,906(1,6);2,897(1,4);2,884(1,3);2,871(0,4);2,539(15,4);1,596(2,3);1,431(4,7);1,419(9,2);1,406(4,4);1,287(5,3);1,275(10,6);1,262(5,1);1,241(4,3);1,229(8,8);1,216(4,1);0,000(19,0)
Ejemplo 4-5: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,261(50,0);2,615(0,6);2,553(0,5);1,549(17,6);1,361(0,4);1,349(0,8);1,336(0,4);0,000(19,1)
Ejemplo 4-51: ¹ H-RMN(600, MHz, CDCl ₃): δ= 7,261(50,0);3,205(0,6);3,193(0,6);2,769(2,1);2,548(0,9);1,558(19,2);1,381(0,6);1,368(1,1);1,356(0,6);1,302(0,6);0,000(16,4)
Ejemplo 4-63: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,613(0,5);7,601(0,5);7,324(0,7);7,311(0,7);7,261(50,0);3,344(1,1);3,332(1,1);3,177(0,8);3,165(2,5);3,157(8,1);
3,140(0,7);2,536(5,1);1,571(7,4);1,351(2,2);1,339(4,2);1,327(2,2);1,301(2,0);0,000(16,3)
Ejemplo 4-66: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,610(1,9); 7,597(2,0); 7,320(2,3); 7,307(2,1); 7,287(0,4); 7,262(50,0); 3,483(0,8); 3,324(1,2); 3,313(3,1); 3,301(3,1); 3,289(1,2); 3,229(1,7); 3,217(4,8); 3,204(4,8); 3,192(1,6); 3,156(1,6); 3,144(4,6); 3,131(4,6); 3,119(1,5); 2,522(14,7); 1,592(4,2); 1,387(5,5); 1,375(10,7); 1,362(5,3); 1,347(5,4); 1,335(10,6); 1,322(5,2); 1,299(3,3); 1,287(5,8); 1,276(3,1); 0,000(16,2)
Ejemplo 4-6: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ=7,261(50,0);3,206(0,8);3,193(0,8);2,809(2,9);2,762(2,8);2,543(1,6);1,560(15,3);1,376(0,8);1,363(1,5);1,351(0,7); 0,000(16,1)
Ejemplo 1-50: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ= 7,562(1,3);7,549(1,4);7,392(1,9);7,262(50,0);7,195(1,7);7,182(1,6);3,879(12,1);3,382(0,8);3,370(0,9);3,361(0,9);3,348(0,9);3,166(0,4);2,970(0,4);2,944(0,5);2,931(1,0);2,918(1,0);2,909(0,9);2,896(0,8);2,740(6,0);1,587(4,9);1,407(3,4);1,394(6,9);1,382(3,3);1,249(2,9);1,237(6,1);1,224(2,8);0,000(14,3)
Ejemplo 1-65: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ=7,601(1,2);7,588(1,3);7,302(2,2);7,290(2,7);7,262(50,0);3,899(11,6);3,328(0,9);3,316(2,7);3,304(2,7);3,292(0,9);3,205(1,3);3,192(3,9);3,180(3,9);3,168(1,3);2,792(12,8);

ES 2 674 660 T3

2,007(1,2);1,583(4,3);1,369(3,9);1,357(7,8);1,345(3,7);1,308(3,5);1,296(7,4);1,284(3,4);0,000(14,1)
Ejemplo 1-51: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ=7,608(0,5);7,595(0,5);7,460(0,6);7,284(0,7);7,261(50,0);3,889(4,6);3,403(0,3);3,390(0,4);3,381(0,4);3,368(0,4);
3,040(0,3);2,928(0,4);2,915(0,4);2,906(0,4);2,893(0,3);1,570(5,9);1,424(1,4);1,411(2,8);1,399(1,3);1,328(1,3);1,316(2,6);1,303(1,3);1,274(1,2);1,262(2,5);1,250(1,2); 0,000(14,4)
Ejemplo 1-66: ¹ H-RMN(600,1 MHz, CDCl ₃): δ=7,645(0,3);7,632(0,3);7,361(0,5);7,348(0,4);7,261(50,0);3,908(2,4);3,330(0,7);3,318(0,7);3,218(0,3);3,206(1,0);
3,194(1,0);3,181(0,4);3,160(0,8);3,148(0,8);1,563(9,8);1,384(1,0);1,372(2,2);1,366(1,2);1,359(1,2);1,354(2,1);1,341(1,8);1,329(2,0);1,316(0,9);0,000(14,2)

Compuestos de fórmula (II):

Ejemplo 5-1: ¹ H-RMN (400,0 MHz, d ₆ -DMSO):
δ= 7,628 (1,4); 7,608 (1,6); 7,241 (1,2); 7,221 (1,0); 3,319 (2,4); 2,733 (8,7); 2,544 (7,6); 2,512 (2,2); 2,507 (4,7); 2,503 (6,6); 2,498 (4,6); 2,494 (2,1); 2,205 (16,0); 0,000 (1,8)
Ejemplo 5-3: ¹ H-RMN (400,0 MHz, d ₆ -DMSO):
δ= 7,744 (2,7); 7,724 (2,9); 7,353 (2,1); 7,333 (1,9); 3,332 (1,8); 3,317 (6,7); 3,270 (24,2); 2,784 (0,8); 2,720 (16,0); 2,666 (14,2); 2,523 (1,1); 2,519 (1,7); 2,510 (20,4); 2,506 (43,2); 2,501 (59,1); 2,496 (41,3); 2,492 (18,6); 1,908 (0,5); 1,111 (1,8); 0,000 (2,5)
Ejemplo 5-16: ¹ H-RMN (400,0 MHz, d ₆ -DMSO):
δ= 7,659 (1,6); 7,639 (1,7); 7,238 (1,4); 7,218 (1,2); 3,312 (32,9); 3,290 (1,0); 2,962 (0,7); 2,944 (2,2); 2,925 (2,3); 2,906 (0,7); 2,739 (9,8); 2,523 (1,3); 2,519 (1,8); 2,510 (24,1); 2,505 (51,8); 2,501 (72,2); 2,496 (50,6); 2,492 (22,9); 2,214 (16,0); 1,197 (3,1); 1,178 (7,2); 1,159 (3,1); 0,000 (14,7)
Ejemplo 5-31: ¹ H-RMN (400,0 MHz, d ₆ -DMSO):
δ= 7,695(1,5);7,675(1,6);7,297(1,3);7,277(1,2);3,883(0,5);3,866(0,7);3,849(0,6);3,819(1,0);3,312(8,0);2,750(9,2);2,731(0,6);2,524(0,6);2,519(0,8);2,510(11,4);2,506(24,7);2,501(34,3);2,496(23,9);2,492(10,7);2,214(1,4);2,209(16,0);1,210(10,4);1,192(10,3);0,000(1,8)
Ejemplo 5-46: ¹ H-RMN (400,0 MHz, d ₆ -DMSO):
δ= 12,849 (0,6); 7,607 (1,7); 7,587 (1,9); 7,255 (1,4); 7,254 (1,3); 7,236 (1,2); 7,234 (1,2); 3,316 (16,1); 3,251 (0,5); 3,232 (1,7); 3,214 (1,7); 3,196 (0,5); 2,561 (8,2); 2,524 (0,5); 2,519 (0,8); 2,510 (11,1); 2,506 (24,1); 2,501 (33,6); 2,497 (23,6); 2,492 (10,6); 2,230 (16,0); 1,155 (2,2); 1,137 (5,4); 1,119 (2,1); 0,000 (5,0)

B. Ejemplos de formulación

- 5 a) Se obtiene un agente espolvoreable mezclando 10 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o de sus sales y 90 partes en peso de talco como material inerte y triturando en un molino de impacto.
- b) Se obtiene un polvo humectable fácilmente dispersable en agua mezclando 25 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o de sus sales, 64 partes en peso de cuarzo que contiene caolín como material inerte, 10 partes en peso de lignosulfonato de potasio y 1 parte en peso de oleilmetiltaurinato de sodio como humectantes y dispersantes y moliendo en un molino de clavijas.
- 10 c) Se obtiene un concentrado de dispersión fácilmente dispersable en agua mezclando 20 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o de sus sales con 6 partes en peso de alquilfenolpoliglicoléter (@Triton X 207), 3 partes en peso de isotridecanolpoliglicoléter (8 EO) y 71 partes en peso de aceite mineral parafínico (intervalo de ebullición, por ejemplo, aproximadamente de 255 a 277 °C) y moliendo en un molino de bolas de fricción hasta obtener una finura inferior a 5 micrómetros.
- 15 d) Se obtiene un concentrado emulsionable a partir de 15 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o de sus sales, 75 partes en peso de ciclohexanona como disolvente y 10 partes en peso de nonilfenol oxetilado como emulsionante.

e) Se obtiene un granulado dispersable en agua mezclando

- 5 75 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales,
 10 partes en peso de lignosulfonato de calcio,
 5 partes en peso de laurilsulfato de sodio,
 3 partes en peso de poli(alcohol vinílico) y
 7 partes en peso de caolín

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

f) Se obtiene también un granulado dispersable en agua homogeneizando y moliendo previamente

- 10 25 partes en peso de un compuesto de fórmula (I) y/o sus sales,
 5 partes en peso de 2,2'-dinaftilmetano-6,6'-disulfonato de sodio,
 2 partes en peso de oleilmetiltaurinato de sodio,
 1 parte en peso de poli(alcohol vinílico),
 17 partes en peso de carbonato de calcio y
 15 50 partes en peso de agua

en un molino coloidal, moliendo a continuación en un molino de perlas y pulverizando y secando la suspensión obtenida de este modo en una torre de pulverización usando una boquilla unitaria.

C. Ejemplos biológicos

Las abreviaturas usadas en el presente documento significan:

AMARE	<i>Amaranthus retroflexus</i>	PHBPU	<i>Pharbitis purpureum</i>
SETVI	<i>Setaria viridis</i>		

20 Acción herbicida contra plantas dañinas en la pre-emergencia

Se siembran semillas de plantas dañinas y plantas de cultivo mono- y dicotiledóneas respectivamente en macetas de fibra de madera en tierra arcillosa arenosa y se cubren con tierra. A continuación, los compuestos de acuerdo con la invención formulados en forma de polvos humectables (WP) o como concentrados de emulsión (EC) se aplican como suspensión o emulsión acuosa con una cantidad de aplicación de agua calculada de 600 a 800 l/ha convertidos añadiendo el 0,2 % de humectante sobre la superficie de la tierra de recubrimiento. Tras el tratamiento se sitúan las macetas en un invernadero y se mantienen en buenas condiciones de crecimiento para las plantas de ensayo. Después de un tiempo de ensayo de 3 semanas se realiza la evaluación visual de los daños en las plantas de ensayo en comparación con los controles no tratados (actividad herbicida en porcentaje (%): 100 % de actividad = las plantas han muerto, 0 % de actividad = como en las plantas control). A este respecto muestran por ejemplo los compuestos n.º 1-065, 1-066, 2-006, 2-017, 2-018, 2-051, 2-063, 2-065, 2-066, 3-017, 3-018, 3-051, 3-062, 3-063, 3-065, 3-066, 4-006, 4-031, 4-032, 4-051 así como 4-066 con una cantidad de aplicación de 320 g/ha en cada caso una acción al menos del 80 % contra *Abutilon theophrasti*, *Amaranthus retroflexus* y *Matricaria inodora*.

Acción herbicida contra plantas dañinas en la post-emergencia

35 Se siembran semillas de plantas dañinas y plantas de cultivo mono- y dicotiledóneas respectivamente en macetas de fibra de madera en tierra arcillosa arenosa, se cubren con tierra y se trasladan a un invernadero con buenas condiciones de crecimiento. De 2 a 3 semanas después de la siembra se tratan las plantas de ensayo en el estadio de una hoja. Los compuestos de acuerdo con la invención formulados en forma de polvos humectables (WP) o como concentrados de emulsión (EC) se pulverizan entonces como suspensión o emulsión acuosa con una cantidad de aplicación de agua calculada de 600 a 800 l/ha convertidos añadiendo un 0,2 % de humectante sobre las partes verdes de las plantas. Tras un período de espera de aproximadamente 3 semanas de las plantas de ensayo en el invernadero en condiciones óptimas de crecimiento, se valora visualmente la acción de los preparados en comparación con los controles no tratados (actividad herbicida en porcentaje (%): 100 % de actividad = las plantas han muerto, 0 % de actividad = como en las plantas de control). Los ensayos muestran que los compuestos de acuerdo con la invención sometidos a prueba presentan contra plantas dañinas importantes no sólo una buena acción herbicida, sino incluso más alta que los compuestos conocidos por el estado de la técnica estructuralmente muy similares. Los datos de estos ensayos están expuestos en las siguientes tablas.

Tabla A

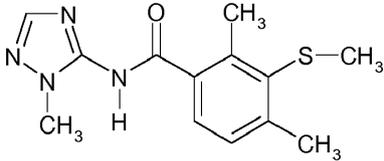
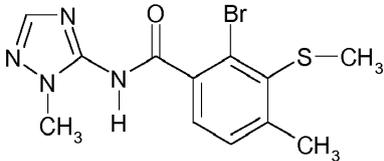
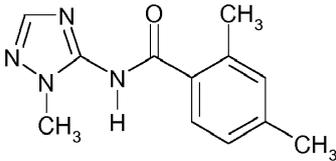
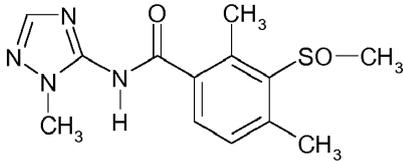
Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra AMARE
	80	90%
compuesto n.º 1-1 de acuerdo con la invención		
	80	70%
compuesto conocido por el documento WO 2012/028579 A1		
	80	0%
compuesto conocido por el documento WO 2012/028579 A1		

Tabla B

Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra AMARE
	80	90%
compuesto n.º 1-2 de acuerdo con la invención		

(continuación)

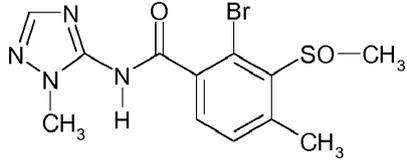
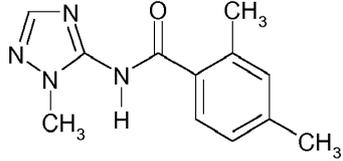
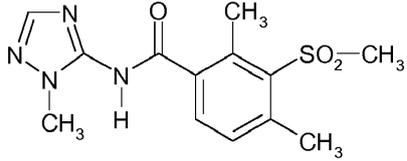
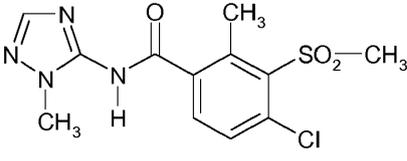
Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra AMARE
	80	70%
compuesto conocido por el documento WO 2012/028579 A1		
	80	0%
compuesto conocido por el documento WO 2012/028579 A1		

Tabla C

Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra AMARE
	80	90%
compuesto n.º 1-3 de acuerdo con la invención		
	80	60%
compuesto n.º 1-121 conocido por el documento WO 2012/028579 A1		

(continuación)

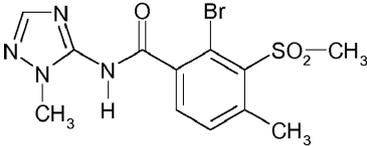
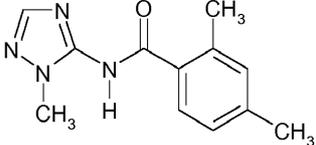
Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra AMARE
	80	60%
compuesto conocido por el documento WO 2012/028579 A1		
	80	0%
compuesto conocido por el documento WO 2012/028579 A1		

Tabla D

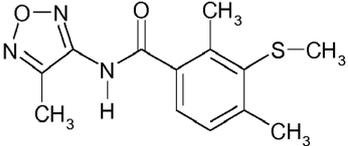
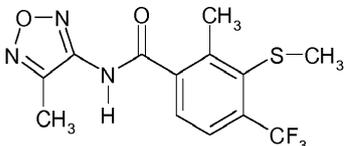
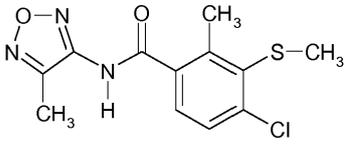
Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra SETVI
	80	40%
compuesto n.º 2-1 de acuerdo con la invención		
	80	0%
compuesto n.º 1-051 conocido por el documento WO 2011/035874 A1		
	80	0%
compuesto n.º 1-096 conocido por el documento WO 2011/035874 A1		

Tabla E

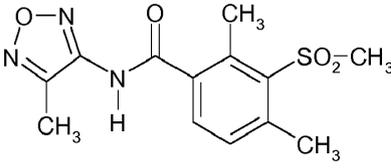
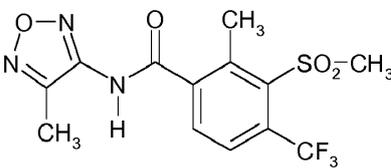
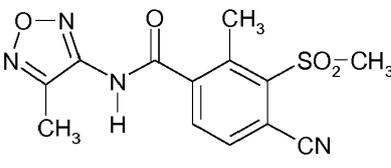
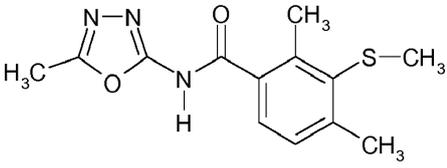
Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra SETVI
	80	80%
compuesto n.º 2-3 de acuerdo con la invención		
	80	40%
compuesto n.º 1-054 conocido por el documento WO 2011/035874 A1		
	80	0%
compuesto conocido por el documento WO 2011/035874 A1		

Tabla F

Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra PHBPU
	20	60%
compuesto n.º 4-1 de acuerdo con la invención		

(continuación)

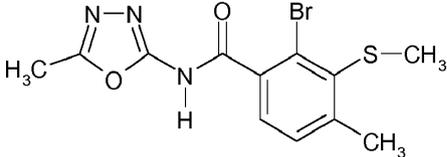
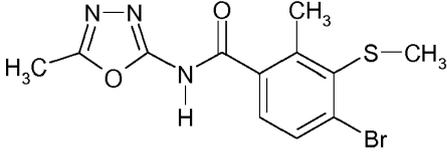
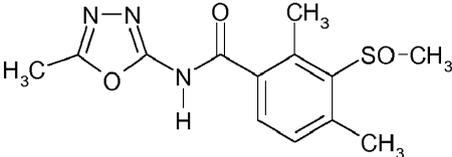
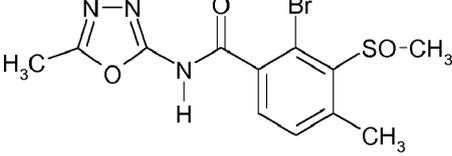
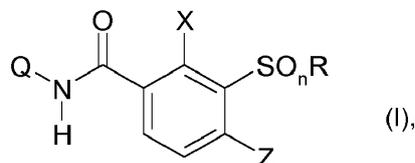
Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra PHBPU
	20	0%
compuesto conocido por el documento WO 2012/126932 A1		
	20	10%
compuesto n.º 2-130 conocido por el documento WO 2012/126932 A1		

Tabla G

Compuesto	Dosificación [g/ha]	Acción contra PHBPU
	20	60%
compuesto n.º 4-2 de acuerdo con la invención		
	20	40%
compuesto conocido por el documento WO 2012/126932 A1		

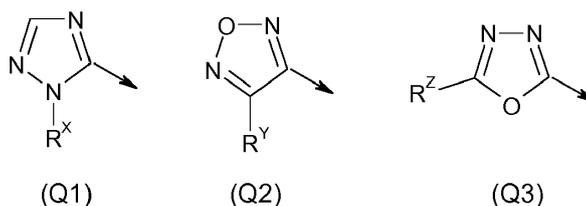
REIVINDICACIONES

1. Amidas de ácido benzoico de fórmula (I) o sus sales



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

5 Q significa un resto Q1, Q2 o Q3,



X significa alquilo (C₁-C₆) o cicloalquilo (C₃-C₆),

Z significa alquilo (C₁-C₆),

10 R significa alquilo (C₁-C₆), cicloalquilo (C₃-C₆), cicloalquil-(C₃-C₆)-alquilo (C₁-C₆), alquil-(C₁-C₆)-O-alquilo (C₁-C₆),

R^x significa metilo, etilo, n-propilo, prop-2-en-1-ilo, metoxietilo, etoxietilo o metoxietoxietilo,

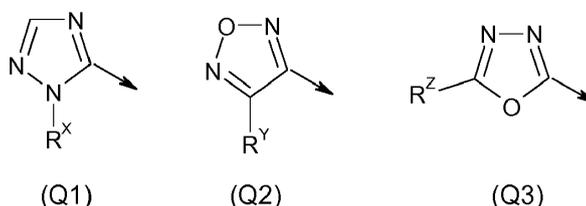
R^y significa metilo, etilo, n-propilo, cloro o amino,

R^z significa metilo, etilo, n-propilo o metoximetilo,

n significa 0, 1 o 2.

2. Amidas de ácido benzoico según la reivindicación 1, en las que

15 Q significa un resto Q1, Q2 o Q3,



X significa metilo, etilo o ciclopropilo,

Z significa metilo, etilo, n-propilo o isopropilo,

20 R significa metilo, etilo, ciclopropilo, ciclopropilmetilo o metoxietilo,

R^x significa metilo, etilo, n-propilo, prop-2-en-1-ilo, metoxietilo, etoxietilo o metoxietoxietilo,

R^y significa metilo, etilo, n-propilo, cloro o amino,

R^z significa metilo, etilo, n-propilo o metoximetilo,

n significa 0, 1 o 2.

25 3. Agentes herbicidas, **caracterizados por** un contenido de acción herbicida de al menos un compuesto de fórmula (I) de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 o 2.

4. Agentes herbicidas según la reivindicación 3 en mezcla con coadyuvantes de formulación.

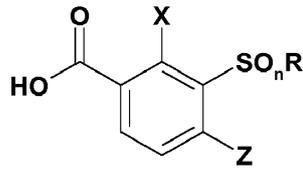
5. Procedimiento para la lucha contra plantas indeseadas, **caracterizado porque** se aplica una cantidad eficaz al menos de un compuesto de fórmula (I) de acuerdo con las reivindicaciones 1 o 2 o de un agente herbicida de acuerdo con las reivindicaciones 3 o 4 sobre las plantas o sobre el lugar del crecimiento de plantas indeseado.

30 6. Uso de compuestos de fórmula (I) de acuerdo con las reivindicaciones 1 o 2 o de un agente herbicida de acuerdo con las reivindicaciones 3 o 4 para la lucha contra plantas indeseadas.

7. Uso de acuerdo con la reivindicación 6, **caracterizado porque** los compuestos de fórmula (I) se usan para la lucha contra plantas indeseadas en cultivos de plantas útiles.

8. Uso de acuerdo con la reivindicación 7, **caracterizado porque** las plantas útiles son plantas útiles transgénicas.

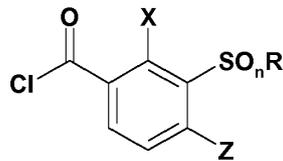
9. Ácidos benzoicos de fórmula (II),



(II)

en la que X, R, Z y n son tal como se han definido en las reivindicaciones 1 o 2, estando excluido el compuesto ácido 2,4-dimetil-3-metilsulfonilbenzoico.

5 10. Cloruros de ácido benzoico de fórmula (III)



(III)

en la que X, R, Z y n son tal como se han definido en las reivindicaciones 1 o 2.