



Industria y Comercio

SUPERINTENDENCIA

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO



No. 12-175742-00000-0000

Delegatura de Propiedad

Fecha: 2012-10-05 16:32:50 Dep. 2020 DIR.NUEVASCR
Tra. 11 PATENTEIYII Eve: 378 FASENACIONALI
Act. 411 PRESENTACION Folios: 240

División de Nuevas Creaciones

SOLICITUD

PATENTE DE INVENCION

21. EXPEDIENTE No. _____

54. TITULO **PIRIDINILPIRAZOLES BICÍCLICOS**

51. CLASIFICACION INTERNACIONAL _____

71. SOLICITANTE **BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH**

DOMICILIO **MONHEIM. ALEMANIA**

74. APODERADO **JAIME EDUARDO DELGADO VILLEGAS**

22. BOGOTA, D.C., _____



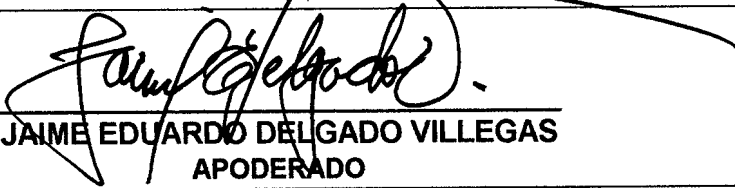
No. 12-175742- 00000-0000

Fecha: 2012-10-05 16:32:50 Dep. 2020 DIR.NUEVASCR
Tra. 11 PATENTEIYII Eve: 378 FASENACIONALI
Act. 411 PRESENTACION Folios: 240

ión

DIRECCIÓN DE NUEVAS CREACIONES
SOLICITUD FASE NACIONAL -PCT

1	TIPO DE SOLICITUD	☒ Patente de invención ☒ Capítulo I	☐ Patente de Modelo de Utilidad ☐ Capítulo II
2	DATOS SOLICITUD INTERNACIONAL PCT (86)		
Solicitud Internacional No.		PCT/EP2011/055153	Fecha 04/05/2011
Publicación Internacional No.		WO2011/124539 A1	Fecha 13/10/2011
3	TÍTULO DE LA INVENCION (200 caracteres o espacios máximos)		
PIRIDINILPIRAZOLES BICÍCLICOS			
4	CLASIFICACIÓN INTERNACIONAL (CIP)		
5	SOLICITANTE (S) ☐ Esta persona también es inventor. Para datos adicionales utilizar hoja de información complementaria		
APELLIDOS O RAZÓN SOCIAL		NOMBRE	IDENTIFICACIÓN TIPO
1 BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH.			[1]
6	DATOS DEL SOLICITANTE		
DIRECCIÓN Alfred-Nobel-Strasse 10, 40789		No. TELÉFONO	
CIUDAD MONHEIM		CORREO ELECTRÓNICO	
DEPARTAMENTO/ESTADO		NACIONALIDAD O ALEMANIA	
PAÍS DE RESIDENCIA ALEMANIA		LUGAR DE CONSTITUCIÓN	
7	INVENTOR (ES) Para datos adicionales utilizar hoja de información complementaria		
APELLIDOS		NOMBRES	NACIONALIDAD
1. MATTES,		Amos	DE
2. HELMKE,		Hendrik	DE
3. HILLEBRAND,		Stefan	DE
4. PERIS,		Gorka	ES
5. SUDAU,		Alexander	DE
6. RODEFELD,		Lars	DE
7. GAUGER,		Stefan	DE
DIRECCIÓN DE CORREO ELECTRÓNICO:			
8	DATOS INVENTOR (ES)		
PAÍS RESIDENCIA	DEPARTAMENTO/ESTADO	CIUDAD	DIRECCIÓN
1. ALEMANIA		Langenfeld	Alte Schulstr. 112 F 40674
2. ALEMANIA		Liederbach	Im Kohlruf 51 65835
3. ALEMANIA		Neuss	Lothringer Str. 22 41462
4. ALEMANIA		Köln	Christinastr. 39 50733
5. ALEMANIA		Leichlingen	Brucher Weg 5 A 42799
6. ALEMANIA		Leverkusen	Am Scherfenbrand 110a 51375
7. ALEMANIA		Leverkusen	Luisenstr. 21 51377
OTRO(S) SOLICITANTE(S) Y/O (OTRO(S)) INVENTOR(ES)			
☐ Los demás solicitantes y/o (demás) inventores se indican en una hoja a continuación.			
9	☐ REPRESENTANTE LEGAL ☒ APODERADO		
APELLIDOS		NOMBRES	IDENTIFICACIÓN
DELGADO VILLEGAS		JAIME EDUARDO	C.C. 19.270.955 T.P. 43.308 C.S.J.
DIRECCIÓN		No. TELÉFONO 2444096	
Avda. Carrera 24 No. 37 - 31 Of. 202			
CIUDAD		CORREO ELECTRÓNICO info@mdelaw.com	
BOGOTA D.C.			
PAÍS		No. RADICACIÓN DE PROTOCOLO DE PODER GENERAL	
COLOMBIA			

10	DECLARACIONES DE PRIORIDAD ☒ SI ☐ NO			
(33) PAÍS DE ORIGEN		CÓDIGO PAÍS	(31) NÚMERO	(32) FECHA (AAAA/MM/DD)
1. OFICINA EUROPEA DE PATENTES		EP	10159210.3	07/04/2010
2. ESTADOS UNIDOS DE AMERICA		US	61/321,704	07/04/2010
11	DECLARACIÓN SOBRE USO DE RECURSOS GENÉTICOS O BIOLÓGICOS			
<i>Declaro que el objeto de la presente solicitud de patente fue obtenido a partir de recursos genéticos o biológicos de los que cualquiera de los países miembros de la Comunidad Andina es país de origen.</i>				
☐ SI ☒ NO				
Nota: En caso afirmativo deberá anexar copia del contrato de acceso de recursos genéticos o productos derivados, o certificado o número de registro, expedido por la Autoridad competente.				
12	DECLARACIÓN SOBRE USO DE CONOCIMIENTOS TRADICIONALES			
<i>Declaro que el objeto de la presente solicitud de patente fue obtenido a partir de conocimientos tradicionales de comunidades indígenas, afroamericanas o locales de países miembros de la Comunidad Andina.</i>				
☐ SI ☒ NO				
Nota: En caso afirmativo deberá anexar la licencia o autorización de uso de conocimiento tradicional, o certificado, o número de registro expedido por la Autoridad competente.				
13	REDUCCIÓN DE TASAS			
<i>Declaro que carezco de medios económicos para presentar la solicitud de patente.</i>				
☐ SI ☒ NO				
Nota: En caso de ser persona natural y carecer de medios económicos, y por lo tanto, aplique la reducción de tasas a que se refiere la resolución vigente en tarifas, debe firmar la presente solicitud bajo la gravedad de juramento.				
Micro, pequeñas y medianas empresas ☐				
Universidades públicas o privadas ☐				
Entidades sin ánimo de lucro ☐				
Debe aportar los documentos que se indican en el numeral 17 de anexos				
14	AUTORIZACIÓN DE NOTIFICACIÓN EN LÍNEA ☐ SI ☒ NO			
Manifiesto que he leído y entendido perfectamente los términos y condiciones de uso de medios electrónicos para las notificaciones en línea a través de Internet de los actos administrativos proferidos por la Superintendencia de Industria y Comercio que deben ser notificados personalmente y, en consecuencia, autorizo el servicio de notificación a través de internet.				
15	COMPROBANTE DE PAGO O PAGO ELECTRÓNICO	N°	Fecha	
16	FIRMA DEL SOLICITANTE, DEL APODERADO O DEL REPRESENTANTE LEGAL			
Junto a cada firma, indicar el nombre del firmante y su calidad (si tal calidad no es obvia al leer el petitorio)				
 JAIME EDUARDO DELGADO VILLEGAS APODERADO				
17	ANEXOS			
Documentación Técnica		Documentación Jurídica		
Solicitud Internacional en castellano				
1. ☒ Descripción N° de folios: 229		9. ☒ Poderes, si fuera el caso.		
2. ☒ Reivindicaciones N° Reivindicaciones: 10		10. ☐ Documento que legalmente pruebe la cesión del inventor al solicitante o a su causante.		
3. ☐ Dibujos y/o figuras N° folios:		11. ☐ Copia del contrato de acceso de recursos genéticos o productos derivados, certificado o número de registro, si fuera el caso.		
4. ☒ Resumen.		12. ☐ Copia de la licencia o autorización de Conocimientos Tradicionales, certificado o número de registro, si fuera el caso.		
5. ☐ Certificado de depósito de material biológico si fuera el caso.		13. Reducción de tasas		
6. ☐ Listado de secuencias de nucleótidos y/o aminoácidos en forma digital si fuera el caso.		Micro, pequeñas o medianas empresas		
7. ☐ Arte final 12 x 12.		☐ Copia simple de la declaración de renta del año inmediatamente anterior, o en su defecto prueba documental idónea.		
8. ☐ Anexo formato digital.		☐ Documento de constancia de cumplimiento con lo establecido en la ley 905 de 2004.		
		Universidades públicas o privadas		
		☐ Copia acto de reconocimiento institucional emitido por el Ministerio de Educación		
		Entidades sin ánimo de lucro		
		☐ Copia de registro vigente en Cámara de comercio.		
		☐ Hoja de información complementaria.		
		☐ Otros, especificar		
		14. ☒ Comprobante de pago de la tasa de presentación de la solicitud.		
		15. ☐ Comprobante de pago por reivindicación de prioridad.		
		16. ☐ Comprobante de pago de la tasa por concepto de excedente de palabras en la publicación.		
		17. ☐ Comprobante de pago por reivindicación adicional a 10.		

1	(12) TIPO DE SOLICITUD		NUMERO DE RADICACIÓN		
☐ Patente de invención			FECHA DE PRESENTACIÓN		
☐ Patente de Modelo de Utilidad					
4	(71) SOLICITANTE (S)				
2. 3. 4.	APELLIDOS O RAZÓN SOCIAL		NOMBRE	IDENTIFICACIÓN	TIPO
5	DATOS DEL SOLICITANTE				
2. 3. 4.	PAÍS DE RESIDENCIA	DEPARTAMENTO/ESTADO	CIUDAD	DIRECCIÓN	
2. 3. 4.	TELÉFONO	FAX	E-MAIL	NACIONALIDAD	
6	(72) INVENTOR (ES)				
8. 9. 10. 11. 12.	APELLIDOS		NOMBRE	NACIONALIDAD	
BENTING, DAHMEN, MEISSNER, WACHENDORFF-NEUMANN, HADANO,		Jürgen Peter Ruth Ulrike Hiroyuki		DE DE DE DE DE JP	
7	DATOS INVENTOR (ES)				
8. 9. 10. 11. 12.	DIRECCIÓN		CIUDAD	DEPARTAMENTO/ESTADO	PAÍS RESIDENCIA
Amselstr. 7 42799 Altebrücker Str. 61 41470 Kuhlmannweg 35 51375 Oberer Markenweg 85 56566 3-2-18 Gion Shimotsuke-shi,		Leichlingen Neuss Leverkusen Neuwied Tochigi 329-0434			ALEMANIA ALEMANIA ALEMANIA ALEMANIA JAPON
9	(30) DECLARACIONES DE PRIORIDAD				
4. 5. 6. 7. 8. 9. 10.	PAÍS DE ORIGEN	CÓDIGO PAÍS	NÚMERO	FECHA (AAAA/MM/DD)	

From the INTERNATIONAL BUREAU

PCT

NOTIFICATION CONCERNING SUBMISSION,
OBTENTION OR TRANSMITTAL
OF PRIORITY DOCUMENT

(PCT Administrative Instructions, Section 411)

To:

BAYER CROPSCIENCE AG
Business Planning and Administration
Law and Patents, Patents and Licensing
Alfred-Nobel-Str. 50
Building 6100
40789 Monheim
ALLEMAGNE

Date of mailing (day/month/year) 05 May 2011 (05.05.2011)	
Applicant's or agent's file reference BCS093155-WO	IMPORTANT NOTIFICATION
International application No. PCT/EP2011/055153	International filing date (day/month/year) 04 April 2011 (04.04.2011)
International publication date (day/month/year) Not yet published	Priority date (day/month/year) 07 April 2010 (07.04.2010)
Applicant	BAYER CROPSCIENCE AG et al

The applicant is hereby notified of the date of receipt (or of obtaining by the International Bureau) of the priority document(s) relating to all earlier application(s) whose priority is claimed. Unless otherwise indicated by the letters "NR", in the right-hand column or by an asterisk appearing next to the date of receipt, **the priority document concerned was submitted or transmitted to or obtained by the International Bureau in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis)**. This Form replaces any previously issued notification concerning submission, transmittal or obtaining of priority documents.

<u>Priority date</u>	<u>Priority application No.</u>	<u>Country or regional Office or PCT receiving Office</u>	<u>Date of receipt of priority document</u>
07 April 2010 (07.04.2010)	10159210.3	EP	NR
07 April 2010 (07.04.2010)	61/321,704	US	21 April 2011 (21.04.2011)

The letters "NR" denote a priority document which, on the date of mailing of this Form, had not yet been received or obtained by the International Bureau in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis). Where the applicant has failed to either submit, request to prepare and transmit or obtain and transmit, or to request the International Bureau to obtain the priority document within the applicable time limit under that Rule, the attention of the applicant is directed to Rule 17.1(c) which provides that no designated Office may disregard the priority claim concerned before giving the applicant an opportunity, upon entry into the national phase, to furnish the priority document within a time limit which is reasonable under the circumstances.

An asterisk "*" next to a date of receipt, denotes a priority document submitted or transmitted to or obtained by the International Bureau but not in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis) (the priority document was received after the time limit prescribed in Rule 17.1(a); the request to prepare and transmit the priority document was submitted to the receiving Office after the applicable time limit under Rule 17.1(b) or the request to the receiving Office or the International Bureau to obtain the priority document was made after the applicable time limit under Rule 17.1(b-bis)). Even though the priority document was not furnished in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis), the International Bureau will nevertheless transmit a copy of the document to the designated Offices, for their consideration. In case such a copy is not accepted by the designated Office as the priority document, Rule 17.1(c) provides that no designated Office may disregard the priority claim concerned before giving the applicant an opportunity, upon entry into the national phase, to furnish the priority document within a time limit which is reasonable under the circumstances.

The International Bureau of WIPO 34, chemin des Colombettes 1211 Geneva 20, Switzerland	Authorized officer Agnes Wittmann-Regis e-mail pt06.pct@wipo.int Telephone No. +41 22 338 74 06
---	--

Facsimile No. +41 22 338 89 70

Form PCT/IB/304 (July 2010)

1/TM7DJ5XK0

From the INTERNATIONAL BUREAU

PCT

NOTIFICATION CONCERNING SUBMISSION,
OBTENTION OR TRANSMITTAL
OF PRIORITY DOCUMENT

(PCT Administrative Instructions, Section 411)

To:

BAYER CROPSCIENCE AG
Business Planning and Administration
Law and Patents, Patents and Licensing
Alfred-Nobel-Str. 50
Building 6100
40789 Monheim
ALLEMAGNE

Date of mailing (day/month/year) 12 May 2011 (12.05.2011)	
Applicant's or agent's file reference BCS093155-WO	IMPORTANT NOTIFICATION
International application No. PCT/EP2011/055153	International filing date (day/month/year) 04 April 2011 (04.04.2011)
International publication date (day/month/year) Not yet published	Priority date (day/month/year) 07 April 2010 (07.04.2010)
Applicant BAYER CROPSCIENCE AG et al	

The applicant is hereby notified of the date of receipt (or of obtaining by the International Bureau) of the priority document(s) relating to all earlier application(s) whose priority is claimed. Unless otherwise indicated by the letters "NR", in the right-hand column or by an asterisk appearing next to the date of receipt, the priority document concerned was submitted or transmitted to or obtained by the International Bureau in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis). This Form replaces any previously issued notification concerning submission, transmittal or obtaining of priority documents.

Priority date	Priority application No.	Country or regional Office or PCT receiving Office	Date of receipt of priority document
07 April 2010 (07.04.2010)	10159210.3	EP	09 May 2011 (09.05.2011)
07 April 2010 (07.04.2010)	61/321,704	US	21 April 2011 (21.04.2011)

The letters "NR" denote a priority document which, on the date of mailing of this Form, had not yet been received or obtained by the International Bureau in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis). Where the applicant has failed to either submit, request to prepare and transmit or obtain and transmit, or to request the International Bureau to obtain the priority document within the applicable time limit under that Rule, the attention of the applicant is directed to Rule 17.1(c) which provides that no designated Office may disregard the priority claim concerned before giving the applicant an opportunity, upon entry into the national phase, to furnish the priority document within a time limit which is reasonable under the circumstances.

An asterisk "*" next to a date of receipt, denotes a priority document submitted or transmitted to or obtained by the International Bureau but not in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis) (the priority document was received after the time limit prescribed in Rule 17.1(a); the request to prepare and transmit the priority document was submitted to the receiving Office after the applicable time limit under Rule 17.1(b) or the request to the receiving Office or the International Bureau to obtain the priority document was made after the applicable time limit under Rule 17.1(b-bis)). Even though the priority document was not furnished in compliance with Rule 17.1(a), (b) or (b-bis), the International Bureau will nevertheless transmit a copy of the document to the designated Offices, for their consideration. In case such a copy is not accepted by the designated Office as the priority document, Rule 17.1(c) provides that no designated Office may disregard the priority claim concerned before giving the applicant an opportunity, upon entry into the national phase, to furnish the priority document within a time limit which is reasonable under the circumstances.

The International Bureau of WIPO 34, chemin des Colombettes 1211 Geneva 20, Switzerland	Authorized officer Agnes Wittmann-Regis e-mail pt06.pct@wipo.int Telephone No. +41 22 338 74 06
Facsimile No. +41 22 338 89 70	

From the INTERNATIONAL BUREAU

PCTNOTIFICATION OF THE RECORDING
OF A CHANGE(PCT Rule 92bis.1 and
Administrative Instructions, Section 422)

To:

BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH
Alfred-Nobel-Str. 10
40789 Monheim
ALLEMAGNE

Date of mailing (day/month/year) 02 October 2012 (02.10.2012)	
Applicant's or agent's file reference BCS093155-WO	IMPORTANT NOTIFICATION
International application No. PCT/EP2011/055153	International filing date (day/month/year) 04 April 2011 (04.04.2011)

1. The following indications appeared on record concerning:			
☒ the applicant	☐ the inventor	☐ the agent	☐ the common representative
Name and Address BAYER CROPSCIENCE AG Alfred-Nobel-Str. 50 40789 Monheim Germany		State of Nationality DE	State of Residence DE
		Telephone No.	
		Facsimile No.	
		E-mail address	
2. The International Bureau hereby notifies the applicant that the following change has been recorded concerning:			
☒ the person	☐ the name	☐ the address	☐ the nationality ☐ the residence
Name and Address BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH Alfred-Nobel-Str. 10 40789 Monheim Germany		State of Nationality	State of Residence
		Telephone No. +49 6196 7703 205	
		Facsimile No. +49 2173 38 9696463	
		E-mail address ☐ Notifications by e-mail authorized	
3. Further observations, if necessary:			
4. A copy of this notification has been sent to:			
☒ the receiving Office	☐ the International Preliminary Examining Authority		
☐ the International Searching Authority	☒ the designated Offices concerned		
☐ the Authority(ies) specified for supplementary search	☐ the elected Offices concerned		
	☐ other:		
The International Bureau of WIPO 34, chemin des Colombettes 1211 Geneva 20, Switzerland		Authorized officer Wimmer Peter	
Facsimile No. +41 22 338 89 70		e-mail pt06.pct@wipo.int Telephone No. +41 22 338 74 06	

PIRIDINILPIRAZOLES BICÍCLICOS

La presente invención se refiere a nuevos piridinilpirazoles bicíclicos, a una pluralidad de procedimientos para su preparación y a su uso para el control de microorganismos no deseados en la protección de plantas y en la protección de materiales, y también para la reducción de micotoxinas en plantas y partes de plantas. La presente invención además se refiere a un procedimiento para el control de hongos fitopatógenos y para la reducción de micotoxinas en plantas y partes de plantas en la protección de plantas y, también, a composiciones para la protección de cultivos que comprenden piridinilpirazoles bicíclicos.

Ya se sabe que ciertos arilpirazoles tienen propiedades fungicidas (véase, por ejemplo, los documentos WO 2009/076440, WO 2003/049542 y WO 2001/03015). La actividad de las sustancias descritas en estas publicaciones es buena; no obstante, en algunos casos, es poco satisfactoria.

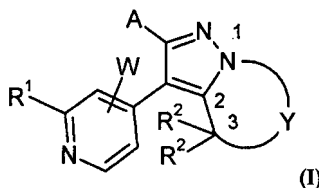
El documento WO 2002/094833 describe ciertos pirazoles sustituidos con heteroarilo adecuados para uso medicinal, aquí como inhibidores de la transducción de la señal del TGF-beta. En los documentos WO 1998/052937, WO 2002/094833, EP-A 1 553 096, WO 2004/029043, WO 1998/052940, WO 2000/031063, WO 1995/031451, WO 2002/057265 y WO 2000/039116 también se describen compuestos similares. No obstante, no se describe un efecto sobre los patógenos fúngicos.

En el documento WO 2007/105058 se describen ciertos pirazoles sustituidos con heteroarilo, que se pueden usar como moduladores o inhibidores de la enzima Raf humana. No obstante, no se describe un efecto sobre patógenos fúngicos.

Dado que los requisitos ecológicos y económicos de los modernos agentes de protección de plantas están creciendo de forma constante, por ejemplo en lo que respecta al espectro de actividad, la toxicidad, la selectividad, la tasa de aplicación, la formación de residuos y la facilidad de producción, y, además, puede haber problemas, por ejemplo, con resistencias, existe el deber constante de desarrollar nuevos agentes de protección de plantas, en particular fungicidas, que, al menos en algunos campos, posean ventajas en comparación con los conocidos.

Sorprendentemente, se ha encontrado ahora que los piridinilpirazoles bicíclicos de acuerdo con la invención alcanzan al menos algunos aspectos de los objetos mencionados y son adecuados como agentes de protección de plantas, en particular como fungicidas.

La invención se refiere a compuestos de la fórmula (I)



en la que los símbolos tienen los siguientes significados:

Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente, 1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros, cuyos miembros de anillo adicionales se seleccionan entre el grupo que consiste en $C(R^2)_2$, O, S, NR^3 , $C(R^2)=C(R^2)$, $C(R^2)=N$, $N=N$, $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $S(=O)_p(=NR^4)_q$ y $SiR^{5a}R^{5b}$;

R^2 representan en cada caso, independientemente entre sí, H, halógeno, ciano, hidroxilo, -CHO, -NHCHO, $-N_3$, $-N=C=O$, $-N=C=S$, -SH, $-C(=O)NH_2$, $-C(=O)NHCHN$, $-C(=O)OR^6$, $-C(=O)NHOR^{6a}$, alquilo C_1-C_5 ,

alquenilo C₂-C₅, alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆,
 cicloalquenilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, haloalcoxi C₁-C₅,
 cicloalcoxi C₃-C₆, alqueniloxi C₂-C₅, haloalqueniloxi C₃-C₅, alquiniloxi C₂-
 5 C₅, alquilcarbonilo C₂-C₅, alquilcarboniloxi C₂-C₅, haloalquilcarboniloxi
 C₂-C₅, alcoxicarbonilalcoxi C₃-C₅, alquiltio C₁-C₅, haloalquiltio C₁-C₅,
 cicloalquiltio C₃-C₆, alquil(tiocarbonilo) C₂-C₅, alquiltio(tiocarbonilo) C₂-C₅,
 alquilsulfinilo C₁-C₅, haloalquilsulfinilo C₁-C₅, cicloalquilsulfinilo C₃-C₆,
 alquilsulfonilo C₁-C₅, haloalquilsulfonilo C₁-C₅, cicloalquilsulfonilo C₃-C₆,
 trialquilsililo C₃-C₅, halotrialquilsililo C₃-C₅, alquilamino C₁-C₅,
 10 haloalquilamino C₂-C₅, cicloalquilamino C₃-C₆, dialquilamino C₂-C₅ o
 halodialquilamino C₃-C₅;
 R³ representa H, -CN, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -CHO, -NHCHO, -
 C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, hidroxilo, alquilo C₁-C₅, alquenilo C₂-C₅,
 alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, cicloalquenilo
 15 C₃-C₆, cicloalquilalquilo C₄-C₁₀, alquilcicloalquilo C₄-C₇,
 alquilcicloalquilalquilo C₅-C₇, haloalquilo C₂-C₅, alquilcarbonilo C₁-C₄,
 haloalquilcarbonilo C₁-C₄, cicloalquilcarbonilo C₃-C₇, alcoxicarbonilo C₁-C₆,
 haloalcoxicarbonilo C₁-C₄, cicloalcoxicarbonilo C₃-C₆, alcoxialquilcarbonilo
 C₂-C₆, alcoxialcoxicarbonilo C₂-C₆, (alquiltio)carbonilo C₁-C₆,
 20 alcoxi(tiocarbonilo) C₁-C₆, alquil(tiocarbonilo) C₁-C₆, alquiltio(tiocarbonilo)
 C₁-C₆, alquilaminocarbonilo C₁-C₆, cicloalquilaminocarbonilo C₃-C₆,
 dialquilaminocarbonilo C₂-C₆, alquilamino(tiocarbonilo) C₁-C₆,
 dialquilamino(tiocarbonilo) C₂-C₆, alcoxi(alquil)aminocarbonilo C₂-C₆, alcoxi
 C₁-C₅, haloalcoxi C₁-C₅, alquiltio C₁-C₅, haloalquiltio C₁-C₅, cicloalquiltio C₃-
 25 C₆, alquilaminosulfonilo C₁-C₅, trialquilsililo C₃-C₅ o halotrialquilsililo C₃-C₅;

- R^4 representa en cada caso H, ciano, amino, hidroxilo, alquilo C_1-C_6 , cicloalquilo C_3-C_6 , alquilcarbonilo C_1-C_4 , haloalquilcarbonilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_4 , fenilo o benzoilo;
- R^{5a}, R^{5b} independientemente entre sí representan alquilo C_1-C_4 ,
 5 alquenilo C_2-C_5 , alquinilo C_2-C_5 , cicloalquilo C_3-C_5 , halocicloalquilo C_3-C_6 , cicloalquilalquilo C_4-C_7 , alquilocicloalquilo C_4-C_7 , alquilocicloalquilalquilo C_5-C_7 , haloalquilo C_1-C_5 , alcoxi C_1-C_5 o haloalcoxi C_1-C_5 ;
- R^6 representa en cada caso H, alquilo C_1-C_6 , haloalquilo C_1-C_6 , cicloalquilo C_3-C_6 , cicloalquilalquilo C_4-C_7 , alquilocicloalquilo C_4-C_7 o bencilo;
- 10 R^{6a} representa en cada caso alquilo C_1-C_6 , haloalquilo C_1-C_6 , cicloalquilo C_3-C_6 , cicloalquilalquilo C_4-C_7 o alquilocicloalquilo C_4-C_7 ;
- A representa un anillo fenilo que puede estar opcionalmente mono o polisustituido con R^7 o representa un anillo tiofenilo que puede estar mono o polisustituido con R^8 ;
- 15 R^7 independientemente entre sí representan halógeno, alquilo C_1-C_6 , alquenilo C_2-C_6 , alquinilo C_2-C_6 , cicloalquilo C_3-C_6 , halocicloalquilo C_3-C_6 , alquilocicloalquilo C_4-C_7 , haloalquilo C_1-C_6 , haloalquenilo C_2-C_6 , ciano, nitro, alcoxi C_1-C_6 , haloalcoxi C_1-C_6 , alquiltio C_1-C_6 , alquilsulfinilo C_1-C_6 , alquilsulfonilo C_1-C_6 , haloalquiltio C_1-C_6 , haloalquilsulfinilo C_1-C_6 ,
 20 haloalquilsulfonilo C_1-C_6 , alquilamino C_1-C_6 , dialquilamino C_2-C_6 , alquilcarbonilo C_1-C_6 , alcoxycarbonilo C_1-C_6 , alquilaminocarbonilo C_1-C_6 , dialquilaminocarbonilo C_2-C_6 o trialquilsililo C_3-C_6 ;
- R^8 independientemente entre sí representan halógeno, ciano, alquilo C_1-C_3 , alcoxi C_1-C_3 , haloalquilo C_1-C_3 , haloalcoxi C_1-C_3 ;
- 25 R^1 representa H, halógeno, ciano, hidroxilo, alquilo C_1-C_4 , $CONR^{9a}R^{9b}$, $COOH$,

COOR¹², -NR^{9a}R^{9b}, -N(R^{9b})COR^{9a}, -N(R^{9b})CSR^{9a}, -N(R^{9b})COOR¹², -
N(R^{9b})SO₂R¹², -NR¹⁰-NR^{11a}R^{11b}, -S(O)_mR¹², -OR¹², -N=CR^{13a}R^{13b} o -
NR¹⁰N=CR^{14a}R^{14b},

R^{9a} y R^{11a} independientemente entre sí representan cada uno H, alquilo C₁-C₆,
5 alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆,
haloalquinilo C₂-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, alcoxialcoxialquilo C₃-C₆,
alcoxialquenilo C₃-C₆, alcoxialquinilo C₃-C₆, dialcoxialquilo C₃-C₆,
trialcoxialquilo C₄-C₁₀, haloalcoxialquilo C₂-C₆, alcoxihaloalquilo C₂-C₆,
haloalcoxihaloalquilo C₂-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, cianoalquilo C₁-C₁₀,
10 alquiltioalquilo C₂-C₆, alquilsulfinilalquilo C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₃-C₆,
haloalquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquilaminoalquilo C₅-C₁₀,
dialquilaminoalquilo C₄-C₁₀, halodialquilaminoalquilo C₄-C₁₀,
cicloalquil(alquil)aminoalquilo C₅-C₁₀ o -(CR^{15a}R^{15b})_mR¹⁶,

R^{9b} y R^{11b} independientemente entre sí representan cada uno H, alquilo C₁-C₆,
15 alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆,
haloalquinilo C₂-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, alcoxialcoxialquilo C₃-C₆,
alcoxialquenilo C₃-C₆, alcoxialquinilo C₃-C₆, dialcoxialquilo C₃-C₆,
trialcoxialquilo C₄-C₁₀, haloalcoxialquilo C₂-C₆, alcoxihaloalquilo C₂-C₆,
haloalcoxihaloalquilo C₂-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, cianoalquilo C₁-C₁₀,
20 alquiltioalquilo C₂-C₆, alquilsulfinilalquilo C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₃-C₆,
haloalquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquilaminoalquilo C₅-C₁₀,
dialquilaminoalquilo C₄-C₁₀, halodialquilaminoalquilo C₄-C₁₀,
cicloalquil(alquil)aminoalquilo C₅-C₁₀ o -(CR^{15a}R^{15b})_mR¹⁶,

o

25 R^{9a} y R^{9b} o R^{11a} y R^{11b}, en cada caso, junto con el átomo de nitrógeno o la unidad

(NCO) o la unidad (NCS) a la que están unidos, forman un anillo de 3 a 6 miembros que opcionalmente puede comprender adicionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en O, NR^3 , $\text{C}(=\text{O})$, $\text{C}(=\text{S})$, $\text{C}(=\text{NR}^4)$, $\text{SiR}^{5a}\text{R}^{5b}$ y $\text{S}(=\text{O})_p(\text{NR}^4)_q$ y que pueden estar opcionalmente sustituidos en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en halógeno, -CN, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_2$ y alcoxi $\text{C}_1\text{-C}_2$;

R^{12} representa en cada caso alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{10}$, alquenilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, alquinilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, haloalquilo $\text{C}_1\text{-C}_{10}$, haloalquenilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, haloalquinilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, alcoxialquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, alcoxialcoxialquilo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, alcoxialquenilo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, alcoxialquinilo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, dialcoxialquilo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, trialcoxialquilo $\text{C}_4\text{-C}_{10}$, haloalcoxialquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, alcoxihaloalquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, haloalcoxihaloalquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, hidroxialquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, cianoalquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, alquiltioalquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, alquilsulfinilalquilo $\text{C}_2\text{-C}_{10}$, alquilaminoalquilo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, haloalquilaminoalquilo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, cicloalquilaminoalquilo $\text{C}_5\text{-C}_{10}$, dialquilaminoalquilo $\text{C}_4\text{-C}_{10}$, halodialquilaminoalquilo $\text{C}_4\text{-C}_{10}$, cicloalquil(alquil) $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ -aminoalquilo o - $(\text{CR}^{15a}\text{R}^{15b})_m\text{R}^{16}$;

R^{15a} , R^{15b} independientemente entre sí representan H, halógeno, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_5$, haloalquilo $\text{C}_1\text{-C}_5$ o alcoxi $\text{C}_1\text{-C}_5$;

20 o

un par geminal de R^{15a} y R^{15b} junto con el átomo de carbono al que está unido forma $\text{C}(=\text{O})$ o un anillo cicloalquilo $\text{C}_3\text{-C}_6$ o un anillo halocicloalquilo $\text{C}_3\text{-C}_6$;

R^{16} representa fenilo, cicloalquilo $\text{C}_3\text{-C}_8$, cicloalquenilo $\text{C}_3\text{-C}_8$, un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros o naftalenilo o un sistema de anillos

- bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros; o un anillo heterocíclico no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} y S(=O)_p(=NR⁴)_q; en el que cada anillo o cada sistema de anillos puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con hasta 5 sustituyentes seleccionados independientemente los unos de los otros entre R¹⁷;
- 5 R¹⁷ en cada caso, independientemente entre sí, representan halógeno, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alquilocicloalquilo C₄-C₁₀, halocicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆, ciano, nitro, alcoxi C₁-C₆, cicloalcoxi C₃-C₈, halocicloalcoxi C₃-C₈, haloalcoxi C₁-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfinilo C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, haloalquiltio C₁-C₆, haloalquilsulfinilo C₁-C₆, haloalquilsulfonilo C₁-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₁-C₆, alquilcarbonilo C₁-C₆, alcoxycarbonilo C₁-C₆, alquilaminocarbonilo C₁-C₆, dialquilaminocarbonilo C₃-C₆, trialquilsililo C₃-C₆, fenilo, naftalenilo o un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros;
- 10 m representa 0, 1 ó 2;
- 15 R¹⁰ representa en cada caso H, alquilo C₁-C₅, alquenilo C₂-C₅, alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₅, haloalquenilo C₂-C₅, haloalquinilo C₂-C₅, alcoxialquilo C₂-C₅, alquilcarbonilo C₂-C₅ o alcoxi C₁-C₅;
- 20 R^{13a}, R^{13b} independientemente entre sí representan H, -CN, -C(=O)OR¹⁸, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₈, halocicloalquilo C₃-C₈, cicloalquenilo C₃-C₈, cicloalquilalquilo C₄-C₁₀, alquilocicloalquilo C₄-
- 25

C₁₀, alquilocicloalquilalquilo C₅-C₁₀, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆,
 alquilaminoalquilo C₂-C₆, haloalquilaminoalquilo C₂-C₆,
 cicloalquilaminoalquilo C₄-C₆, dialquilaminoalquilo C₃-C₆,
 halodialquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquil(alquil)aminoalquilo C₅-C₁₀, alcoxi
 5 C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, cicloalcoxi C₃-C₁₀, alquiltio C₁-C₁₀, haloalquiltio C₁-
 C₁₀, cicloalquiltio C₃-C₁₀, trialquilsililo C₃-C₁₀ o halotrialquilsililo C₃-C₁₀, o
 fenilo, o un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros, un sistema de
 anillos bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros, o un anillo
 heterocíclico no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene
 10 opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que
 consiste en NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} y S(=O)_p(=NR⁴)_q; en el
 que cada anillo o cada sistema de anillos puede estar opcionalmente
 sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 5 sustituyentes
 seleccionados entre el grupo que consiste en alquilo C₁-C₃, halógeno, -
 15 CN y alcoxi C₁-C₃;

o

R^{13a} y R^{13b}, junto con el átomo de carbono al que están unidos, forman un anillo
 de 3 a 6 miembros, en el que dicho anillo puede contener opcionalmente
 miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR³,
 20 C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} y S(=O)_p(=NR⁴)_q y puede estar
 opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4
 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en alquilo C₁-C₂,
 halógeno, -CN y alcoxi C₁-C₂;

R^{14a}, R^{14b}, independientemente entre sí, representan H, -CN, -C(=O)OR¹⁸,
 25 alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₈,

- halocicloalquilo C₃-C₈, cicloalquenilo C₃-C₈, cicloalquilalquilo C₄-C₁₀,
 alquilocicloalquilo C₄-C₁₀, alquilocicloalquilalquilo C₅-C₁₀, alquilamino C₁-C₆,
 dialquilamino C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₂-C₆, haloalquilaminoalquilo C₂-C₆,
 cicloalquilaminoalquilo C₄-C₆, dialquilaminoalquilo C₃-C₆,
 5 halodialquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquil(alquil)aminoalquilo C₅-C₁₀, alcoxi
 C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, cicloalcoxi C₃-C₁₀, alquiltio C₁-C₁₀, haloalquiltio C₁-
 C₁₀, cicloalquiltio C₃-C₁₀, trialquilsililo C₃-C₁₀ o halotrialquilsililo C₃-C₁₀; o
 fenilo, o un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros, un sistema de anillos
 bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros, o un anillo heterocíclico
 10 no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene opcionalmente miembros
 de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR³, C(=O), C(=S),
 C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} y S(=O)_p(=NR⁴)_q; en el que cada anillo cada sistema de
 anillos puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del
 anillo con 1 a 5 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en
 15 alquilo C₁-C₃, halógeno, -CN y alcoxi C₁-C₃;
- o
- R^{14a}, R^{14b}, junto con el átomo de carbono al que están unidos, forman un anillo de
 3 a 6 miembros, en el que dicho anillo puede contener opcionalmente
 componentes de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR³,
 20 C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} y S(=O)_p(=NR⁴)_q y puede estar
 opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4
 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en alquilo C₁-C₂,
 halógeno, -CN y alcoxi C₁-C₂;
- p, q , independientemente entre sí, representan 0, 1 ó 2, con la condición de
 25 que la suma de p y q sea 1 ó 2,

R^{18} representa alquilo C_1-C_6 , haloalquilo C_1-C_6 , cicloalquilo C_3-C_6 , cicloalquilalquilo C_4-C_7 o alquilocicloalquilo C_4-C_7 ;

W representa H

o

- 5 W representa halógeno, CN, haloalquilo C_1-C_4 , alquilo C_1-C_4 , alcoxi C_1-C_4 ; y sales agroquímicamente activas de los mismos.

Los compuestos de la fórmula (I) son muy adecuados para controlar microorganismos no deseados. En particular, tienen una actividad fungicida fuerte y se pueden usar en la protección de cultivos y en la protección de
10 materiales, y también para reducir micotoxinas en plantas y partes de plantas.

Los compuestos de la fórmula (I) pueden estar presentes tanto en forma pura, como en forma de mezclas de diversas formas isoméricas posibles, en particular de estereoisómeros, tales como E y Z, treo y eritro, y también isómeros ópticos, tales como isómeros R y S o atropisómeros, y, si fuera
15 adecuado, también de tautómeros. Lo que se reivindica son ambos isómeros E y Z, y también los treo y eritro, y también los isómeros ópticos, y cualquiera de las mezclas de esos isómeros, y también las posibles formas tautoméricas.

La fórmula (I) proporciona una definición general de los compuestos de acuerdo con la invención.

- 20 Se da preferencia a compuestos de la fórmula (I) en los que uno o más de los símbolos tienen uno de los siguientes significados:

Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros, cuyos miembros de anillo adicionales se seleccionan
25 entre el grupo que consiste en $C(R^2)_2$, O, S, SO_2 , NR^3 , $-C(R^2)=C(R^2)-$,

C(=O) y C(=S);

- 5 R^2 representa en cada caso, independientemente de los otros, H, halógeno, ciano, hidroxilo, -CHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, alquilo C₁-C₅, alquenilo C₂-C₅, alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, cicloalquenilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, haloalcoxi C₁-C₅, cicloalcoxi C₃-C₆, alqueniloxi C₂-C₅, haloalqueniloxi C₃-C₅, alquiniloxi C₂-C₅, alquilcarbonilo C₂-C₅, alquiltio C₁-C₅, C₁-C₅-haloalquiltio o C₃-C₆-cicloalquiltio;
- 10 R^3 representa H, -CN, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -CHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, alquilo C₁-C₅, haloalquilo C₂-C₅, alquilcarbonilo C₁-C₄, haloalquilcarbonilo C₁-C₄, cicloalquilcarbonilo C₃-C₆, alcoxicarbonilo C₁-C₄, haloalcoxicarbonilo C₁-C₄, cicloalcoxicarbonilo C₃-C₆, alcoxialquilcarbonilo C₃-C₆, alcoxialcoxicarbonilo C₃-C₆, (alquiltio)carbonilo C₁-C₄, alcoxí(tiocarbonilo) C₁-C₄, alquil(tiocarbonilo) C₁-C₄, alquiltio(tiocarbonilo) C₁-C₄, alquilaminocarbonilo C₁-C₄, cicloalquilaminocarbonilo C₃-C₆, dialquilaminocarbonilo C₂-C₆, alquilamino(tiocarbonilo) C₂-C₆, dialquilamino(tiocarbonil) C₂-C₆ o alcoxi(alquil)aminocarbonilo C₃-C₆;
- 15 R^6 representa en cada caso H o alquilo C₁-C₄;
- R^{6a} representa en cada caso alquilo C₁-C₄;
- 20 A representa un anillo fenilo que puede estar opcionalmente mono o polisustituido con R^7 o representa un anillo tiofenilo que puede estar mono o polisustituido con R^8 ;
- 25 R^7 independientemente entre sí, representan halógeno, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄, ciano, alcoxi C₁-C₄, haloalcoxi C₁-C₄, alquiltio C₁-C₄, alquilsulfinilo C₁-C₄, alquilsulfonilo C₁-C₄ o haloalquiltio C₁-C₄;

- R^8 independientemente entre sí, representan halógeno, ciano, alquilo C₁-C₃, alcoxi C₁-C₃, haloalquilo C₁-C₃;
- R^1 representa H, halógeno, alquilo C₁-C₃, ciano, $-NR^{9a}R^{9b}$, $-N(R^{9b})COR^{9a}$, $-N(R^{9b})CSR^{9a}$, $-N(R^{9b})COOR^{12}$, $-OR^{12}$, $-S(O)mR^{6a}$, $COOR^{12}$ o $-CONR^{9a}R^{9b}$;
- 5 R^{9a} representa en cada caso H, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆, haloalquinilo C₂-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, alcoxialcoxialquilo C₃-C₆, alcoxialquenilo C₃-C₆, alcoxialquinilo C₃-C₆, dialcoxialquilo C₃-C₆, haloalcoxialquilo C₂-C₆, alcoxihaloalquilo C₂-C₆, haloalcoxihaloalquilo C₂-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, cianoalquilo C₁-C₆, alquiltioalquilo C₂-C₆, alquilsulfinilalquilo C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₃-C₆, haloalquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquilaminoalquilo C₅-C₁₀, dialquilaminoalquilo C₄-C₁₀, halodialquilaminoalquilo C₄-C₁₀ o $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;
- 10 R^{9b} representa en cada caso H, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆ o $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;
- 15 o R^{9a}, R^{9b} , en cada caso, junto con el átomo de nitrógeno o la unidad de (NCO) o la de (NCS) a la que están unidos, forman un anillo de 3 a 6 miembros que opcionalmente puede comprender adicionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR^3 , C(=O), C(=S), O y que está opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en halógeno, -CN, alquilo C₁-C₂ y alcoxi C₁-C₂;
- 20 R^{12} representa en cada caso alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆, o $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;
- 25

R^{15a} , R^{15} independientemente entre sí, representan H, halógeno o alquilo C_1-C_4 ;

R^{16} representa fenilo, cicloalquilo C_3-C_8 , cicloalquenilo C_3-C_8 , un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros o naftalenilo, o un sistema de anillos bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros; o un anillo heterocíclico no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$; en el que cada anillo o cada sistema de anillos puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con hasta 3 sustituyentes seleccionados independientemente los unos de los otros entre R^{17} ;

R^{17} en cada caso, independientemente entre sí, representa halógeno, ciano, alquilo C_1-C_6 , alquenilo C_2-C_6 , alquinilo C_2-C_6 , cicloalquilo C_3-C_6 , haloalquilo C_1-C_6 , alcoxi C_1-C_6 ;

m representa 0, 1 ó 2,

W representa H

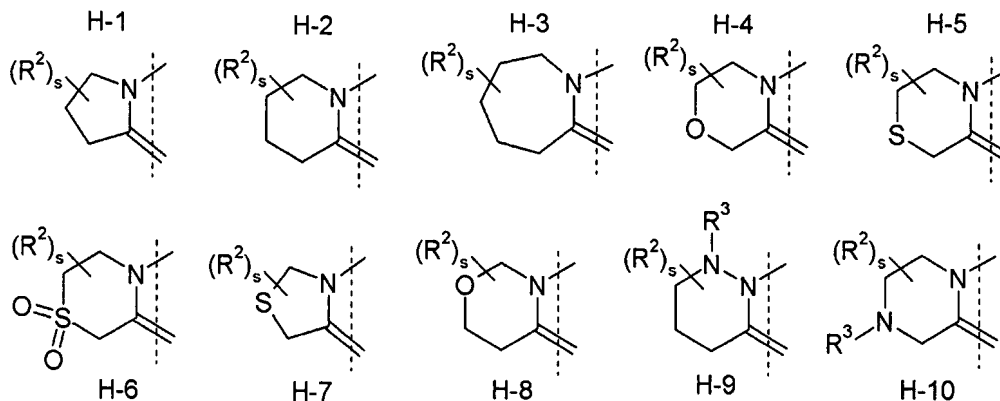
o

W representa flúor, cloro, CN, CF_3 , metilo, etilo, metoxi.

Se da preferencia particular a compuestos de la fórmula (I) en la que uno o más de los símbolos tienen uno de los siguientes significados:

Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente, "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros seleccionado entre el grupo que consiste en: H-1, H-2, H-3, H-4, H-5, H-6, H-7, H-8, H-9 y H-10 que se muestra en el Esquema 1, en el que s es un número de 0 a 4,

Esquema 1



R^2 en cada caso, independientemente entre sí, representa H, F, Cl, Br, I, ciano, hidroxilo, $-CHO$, $-C(=O)OR^6$, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, pentafluoroetilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, isopropoxi, trifluorometoxi, difluorometoxi o acetilo, propionilo, isobutirilo, 2,2-dimetilpropanoilo;

R^3 representa H, $-CHO$, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, acetilo, propionilo, isobutirilo, 2,2-dimetilpropanoilo, trifluoroacetilo, difluoroacetilo, $CH_3OC(O)$, $CH_3CH_2C(O)$, $(CH_3)_2CHC(O)$ o $CF_3OC(O)$, $CF_2HOC(O)$;

R^6 representa en cada caso H, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo;

A representa un anillo fenilo o tiofeno que está opcionalmente sustituido con radicales seleccionados entre el grupo que consiste en F, Cl, Br, I, ciano, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, pentafluoroetilo o metoxi, etoxi, n-propoxi, isopropoxi;

R^1 representa H, F, Cl, Br, I, CH_3 , $S(O)_mMe$, $-NR^{9a}R^{9b}$, $N(R^{9b})COR^{9a}$, $N(R^{9b})COOR^{12}$;

R^{9a} en cada caso, representa H, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo, terc-butilo, isobutilo, n-pentilo, n-hexilo, $-CH=CH_2$, -

$\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$, $-\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$, $-\text{C}\equiv\text{CH}$, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, pentafluoroetilo, metoximetilo, etoximetilo, metoxietilo, terc-butoximetilo, hidroximetilo, 1-hidroxietilo, 2-hidroxiopropan-2-ilo o $-(\text{CH}_2)_m\text{R}^{16}$;

- 5 R^{9b} representa en cada caso H, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo, terc-butilo, isobutilo, n-pentilo, n-hexilo, $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$, $-\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$, $-\text{C}\equiv\text{CH}$;

- $\text{R}^{9a}, \text{R}^{9b}$ en cada caso, junto con el nitrógeno al que están unidos forman un anillo de 5 ó 6 miembros que está opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 ó 2 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en F, Cl, Br, I, $-\text{CN}$ y metilo, etilo;

R^{12} representa metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo, terc-butilo, isobutilo, $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, $-\text{CH}=\text{CHCH}_3$, $\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$, $-\text{C}\equiv\text{CH}$, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo o $-(\text{CH}_2)_m\text{R}^{16}$;

- 15 R^{16} representa ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, ciclopentenilo, ciclohexenilo, fenilo o tienilo, pudiendo estar cada uno de los mismos sustituido con hasta 2 radicales seleccionados entre el grupo R^{17} ;

- R^{17} en cada caso, independientemente entre sí, representan F, Cl, Br, I, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo, terc-butilo, isobutilo, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, metoxi, etoxi o ciano;

m representa 0, 1 y 2,

W representa H

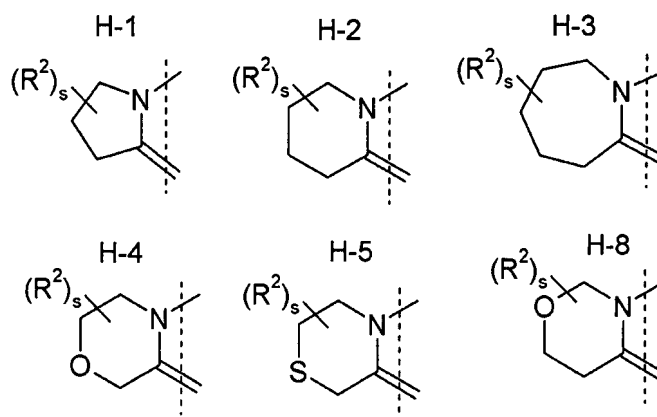
o

- 25 W representa flúor, cloro, CN, CF_3 , metilo, etilo.

Se da preferencia muy particular a compuestos de la fórmula (I) en la que uno o más de los símbolos tienen uno de los siguientes significados:

- Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente, "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros seleccionado entre el grupo que consiste en: H-1, H-2, H-3, H-4, H-5 y H-8 que se muestra en el Esquema 2, en el que s es un número de 0 a 4;

Esquema 2



- 10 R^2 en cada caso, independientemente entre sí, representa H, flúor, cloro, ciano, CF_3 , metilo o metoxi;
- A representa un anillo fenilo o tiofeno que está opcionalmente sustituido con radicales seleccionados entre el grupo que consiste en F, Cl, ciano, CH_3 , CF_3 ;
- 15 R^1 representa H, flúor, cloro, $S(O)_mMe$, $NR^{9a}R^{9b}$, $N(R^{9b})COR^{9a}$, $N(R^{9b})COOR^{12}$;
- R^{9a} representa en cada caso H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, sec-butilo, terc-butilo, n-pentilo, n-hexilo, metoximetilo, etoximetilo, etoxietilo, metoxietilo, metoxipropilo,

- hidroximetilo, 1-hidroxietilo, 2-hidroxietilo, hidroxipropilo o $-(CH_2)_mR^{16}$;
- R^{9b} representa en cada caso H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, alilo o propargilo;
- R^{12} representa metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, t-butilo, alilo, propargilo
- 5 o $-(CH_2)_mR^{16}$;
- R^{16} representa ciclopropilo, ciclopentilo, ciclobutilo, ciclohexilo, tienilo o fenilo, pudiendo estar cada uno de los mismos sustituido con un radical seleccionado entre el grupo R^{17} ;
- m representa 0, 1 ó 2;
- 10 R^{17} representa metilo, etilo, flúor, cloro, CF_3 , OMe, ciano
- W representa H
- o
- W representa flúor, cloro, ciano

y sales agroquímicamente activas de los mismos como fungicidas.

- 15 Sin embargo, las definiciones e ilustraciones generales o preferidas de radicales mencionadas anteriormente también pueden combinarse con otras según se desee, es decir, se incluyen combinaciones entre los intervalos respectivos e intervalos preferidos. Estos se aplican a los productos finales, correspondientemente, a precursores e intermedios. Además, pueden no
- 20 aplicarse definiciones individuales.

Se da *preferencia* a compuestos de la fórmula (I) en la que todos los radicales tienen los significados preferidos mencionados anteriormente.

- Se da *preferencia particular* a compuestos de la fórmula (I) en la que todos los radicales tienen los significados particularmente preferidos
- 25 mencionados anteriormente.

Se da *preferencia muy particular* a compuestos de la fórmula (I) en la que todos los radicales tienen los significados muy particularmente preferidos mencionados anteriormente.

Adicionalmente, se da *preferencia muy particular* a compuestos de la
5 fórmula (I) en la que

R^1 representa hidrógeno,

en la que los otros sustituyentes tienen uno o más de los significados dados anteriormente, y las sales agroquímicamente aceptables de los mismos.

Adicionalmente, se da *preferencia muy particular* a compuestos de la
10 fórmula (I) en la que

R^1 representa $NR^{9a}R^{9b}$,

en la que los otros sustituyentes tienen uno o más de los significados mencionados anteriormente, y las sales agroquímicamente aceptables de los mismos.

Adicionalmente, se da *preferencia muy particular* a compuestos de la
15 fórmula (I), en la que

R^1 representa $N(R^{9b})COR^{9a}$,

en la que los otros sustituyentes tienen uno o más de los significados mencionados anteriormente, y las sales agroquímicamente aceptables de los
20 mismos.

Adicionalmente, se da *preferencia muy particular* a compuestos de la
fórmula (I) en la que

W representa hidrógeno,

en la que los otros sustituyentes tienen uno o más de los significados
25 mencionados anteriormente, y las sales agroquímicamente aceptables de los

mismos.

Adicionalmente, se da preferencia muy particular a compuestos de la fórmula (I) en la que

5 A representa un anillo fenilo o tiofeno que está opcionalmente sustituido con radicales seleccionados entre el grupo que consiste en F, Cl, ciano, CH₃, CF₃,

en la que los otros sustituyentes tienen uno o más de los significados mencionados anteriormente, y las sales agroquímicamente aceptables de los mismos.

10 Adicionalmente, se da preferencia muy particular a compuestos de la fórmula (I) en la que

Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros seleccionado entre el grupo que consiste en H-1, H-2, H-3, H-4, H-5 y H-8 (véanse anteriormente en el Esquema 2) en el que s
15 representa un número entero de 0 a 4 y los sustituyentes R² independientemente entre sí, representan H, flúor, cloro, ciano, CF₃, metilo o metoxi,

en la que los otros sustituyentes tienen uno o más de los significados mencionados anteriormente, y las sales agroquímicamente aceptables de los
20 mismos.

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

25 **halógeno:** flúor, cloro, bromo y yodo;

- alquilo:** radicales hidrocarburo saturados de cadena lineal o ramificada que tienen de 1 a 8 átomos de carbono, por ejemplo, alquilo C₁-C₆, tal como metilo, etilo, propilo, 1-metiletilo, butilo, 1-metilpropilo, 2-metilpropilo, 1,1-dimetiletilo, pentilo, 1-metilbutilo, 2-metilbutilo, 3-metilbutilo, 2,2-dimetilpropilo, 1-etilpropilo,
- 5 hexilo, 1,1-dimetilpropilo, 1,2-dimetilpropilo, 1-metilpentilo, 2-metilpentilo, 3-metilpentilo, 4-metilpentilo, 1,1-dimetilbutilo, 1,2-dimetilbutilo, 1,3-dimetilbutilo, 2,2-dimetilbutilo, 2,3-dimetilbutilo, 3,3-dimetilbutilo, 1-etilbutilo, 2-etilbutilo, 1,1,2-trimetilpropilo, 1,2,2-trimetilpropilo, 1-etil-1-metilpropilo y 1-etil-2-metilpropilo;
- 10 **haloalquilo:** grupos alquilo de cadena lineal o ramificada que tienen de 1 a 8 átomos de carbono (como se ha mencionado anteriormente), en los que, en estos grupos, algunos o todos de los átomos de hidrógeno pueden estar reemplazados por átomos de halógeno como se ha mencionado anteriormente, por ejemplo, haloalquilo C₁-C₃, tal como clorometilo, bromometilo, diclorometilo,
- 15 triclorometilo, fluorometilo, difluorometilo, trifluorometilo, clorofluorometilo, diclorofluorometilo, clorodifluorometilo, 1-cloroetilo, 1-bromoetilo, 1-fluoroetilo, 2-fluoroetilo, 2,2-difluoroetilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 2-cloro-2-fluoroetilo, 2-cloro-2,2-difluoroetilo, 2,2-dicloro-2-fluoroetilo, 2,2,2-tricloroetilo, pentafluoroetilo y 1,1,1-trifluoroprop-2-ilo;
- 20 **tioalquilo:** radicales alquiltio saturados de cadena lineal o ramificada que tienen de 1 a 6 átomos de carbono, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos) alquiltio C₁-C₆, tal como metiltio, etiltio, propiltio, 1-metiletiltio, butiltio, 1-metilpropiltio, 2-metilpropiltio, 1,1-dimetiletiltio, pentiltio, 1-metilbutiltio, 2-metilbutiltio, 3-metilbutiltio, 2,2-dimetilpropiltio, 1-etilpropiltio, hexiltio, 1,1-dimetilpropiltio, 1,2-dimetilpropiltio, 1-
- 25 metilpentiltio, 2-metilpentiltio, 3-metilpentiltio, 4-metilpentiltio, 1,1-dimetilbutiltio, 1,2-

dimetilbutiltio, 1,3-dimetilbutiltio, 2,2-dimetilbutiltio, 2,3-dimetilbutiltio, 3,3-dimetilbutiltio, 1-etilbutiltio, 2-etilbutiltio, 1,1,2-trimetilpropiltio, 1,2,2-trimetilpropiltio, 1-etil-1-metilpropiltio y 1-etil-2-metilpropiltio;

tiohaloalquilo: grupos alquiltio de cadena lineal o ramificada que tienen de 1 a 5 6 átomos de carbono (como se ha mencionado anteriormente), en los que, en estos grupos, algunos o todos de los átomos de hidrógeno pueden estar reemplazados por átomos de halógeno como se ha mencionado anteriormente, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos) haloalquiltio C_1-C_2 , tal como clorometiltio, bromometiltio, diclorometiltio, triclorometiltio, fluorometiltio, 10 difluorometiltio, trifluorometiltio, clorofluorometiltio, diclorofluorometiltio, clorodifluorometiltio, 1-cloroetiltio, 1-bromoetiltio, 1-fluoroetiltio, 2-fluoroetiltio, 2,2-difluoroetiltio, 2,2,2-trifluoroetiltio, 2-cloro-2-fluoroetiltio, 2-cloro-2,2-difluoroetiltio, 2,2-dicloro-2-fluoroetiltio, 2,2,2-tricloroetiltio, pentafluoroetiltio y 1,1,1-trifluoroprop-2-iltio;

15 **alquenilo:** radicales hidrocarburo insaturados de cadena lineal o ramificada que tienen de 2 a 8 átomos de carbono y un doble enlace en cualquier posición, por ejemplo, alquenilo C_2-C_6 , tal como etenilo, 1-propenilo, 2-propenilo, 1-metilenilo, 1-butenilo, 2-butenilo, 3-butenilo, 1-metil-1-propenilo, 2-metil-1-propenilo, 1-metil-2-propenilo, 2-metil-2-propenilo, 1-pentenilo, 2-pentenilo, 3- 20 pentenilo, 4-pentenilo, 1-metil-1-butenilo, 2-metil-1-butenilo, 3-metil-1-butenilo, 1-metil-2-butenilo, 2-metil-2-butenilo, 3-metil-2-butenilo, 1-metil-3-butenilo, 2-metil-3-butenilo, 3-metil-3-butenilo, 1,1-dimetil-2-propenilo, 1,2-dimetil-1-propenilo, 1,2-dimetil-2-propenilo, 1-etil-1-propenilo, 1-etil-2-propenilo, 1-hexenilo, 2-hexenilo, 3-hexenilo, 4-hexenilo, 5-hexenilo, 1-metil-1-pentenilo, 2- 25 metil-1-pentenilo, 3-metil-1-pentenilo, 4-metil-1-pentenilo, 1-metil-2-pentenilo, 2-

metil-2-pentenilo, 3-metil-2-pentenilo, 4-metil-2-pentenilo, 1-metil-3-pentenilo, 2-metil-3-pentenilo, 3-metil-3-pentenilo, 4-metil-3-pentenilo, 1-metil-4-pentenilo, 2-metil-4-pentenilo, 3-metil-4-pentenilo, 4-metil-4-pentenilo, 1,1-dimetil-2-butenilo, 1,1-dimetil-3-butenilo, 1,2-dimetil-1-butenilo, 1,2-dimetil-2-butenilo, 1,2-dimetil-3-butenilo, 1,3-dimetil-1-butenilo, 1,3-dimetil-2-butenilo, 1,3-dimetil-3-butenilo, 2,2-dimetil-3-butenilo, 2,3-dimetil-1-butenilo, 2,3-dimetil-2-butenilo, 2,3-dimetil-3-butenilo, 3,3-dimetil-1-butenilo, 3,3-dimetil-2-butenilo, 1-etil-1-butenilo, 1-etil-2-butenilo, 1-etil-3-butenilo, 2-etil-1-butenilo, 2-etil-2-butenilo, 2-etil-3-butenilo, 1,1,2-trimetil-2-propenilo, 1-etil-1-metil-2-propenilo, 1-etil-2-metil-1-propenilo y 1-etil-2-metil-2-propenilo;

alquinilo: grupos hidrocarburo de cadena lineal o ramificada que tienen de 2 a 8 átomos de carbono y un triple enlace en cualquier posición, por ejemplo, alquinilo C_2-C_6 , tal como etinilo, 1-propinilo, 2-propinilo, 1-butinilo, 2-butinilo, 3-butinilo, 1-metil-2-propinilo, 1-pentinilo, 2-pentinilo, 3-pentinilo, 4-pentinilo, 1-metil-2-butinilo, 1-metil-3-butinilo, 2-metil-3-butinilo, 3-metil-1-butinilo, 1,1-dimetil-2-propinilo, 1-etil-2-propinilo, 1-hexinilo, 2-hexinilo, 3-hexinilo, 4-hexinilo, 5-hexinilo, 1-metil-2-pentinilo, 1-metil-3-pentinilo, 1-metil-4-pentinilo, 2-metil-3-pentinilo, 2-metil-4-pentinilo, 3-metil-1-pentinilo, 3-metil-4-pentinilo, 4-metil-1-pentinilo, 4-metil-2-pentinilo, 1,1-dimetil-2-butinilo, 1,1-dimetil-3-butinilo, 1,2-dimetil-3-butinilo, 2,2-dimetil-3-butinilo, 3,3-dimetil-1-butinilo, 1-etil-2-butinilo, 1-etil-3-butinilo, 2-etil-3-butinilo y 1-etil-1-metil-2-propinilo;

cicloalquilo: grupos hidrocarburo monocíclicos saturados que tienen de 3 a 8 miembros de anillo de carbono, tal como ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo y ciclohexilo;

cicloalquenilo: grupos hidrocarburo monocíclicos no aromáticos que tienen de

3 a 8 miembros de anillo de carbono, teniendo al menos un doble enlace, tales como ciclopenten-1-ilo, ciclohexen-1-ilo, ciclohepta-1,3-dien-1-ilo;

alcoxicarbonilo: un grupo alcoxi que tiene de 1 a 6 átomos de carbono (como se ha mencionado anteriormente) que está unido al esqueleto mediante un

5 grupo carbonilo (-CO-);

halocicloalquilo: grupos hidrocarburo saturados monocíclicos que tienen de 3 a 8 miembros de anillo de carbono (como se ha mencionado anteriormente), en los que, en estos grupos, algunos o todos de los átomos de hidrógeno pueden estar reemplazados por átomos de halógeno como se ha mencionado

10 anteriormente, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos), 2-fluorociclopropilo, 2,2-difluorociclopropilo, 3,3-difluorociclobutilo, 2-fluorociclopentilo, 3-fluorociclopentilo;

heterociclico: un heterociclo saturado o parcialmente insaturado de tres a quince miembros, que contiene de uno a cuatro heteroátomos del grupo que

15 consiste en oxígeno, nitrógeno y azufre: heterociclo mono, bi o tricíclicos que contienen, además de miembros de anillo de carbono, de uno a tres átomos de nitrógeno y/o un átomo de oxígeno o azufre, o uno o dos átomos de oxígeno y/o azufre; si el anillo contiene una pluralidad de átomos de oxígeno, éstos no son directamente adyacentes; tales como, por ejemplo, (pero sin limitarse a los

20 mismos), oxiranilo, aziridinilo, 2-tetrahidrofuranoilo, 3-tetrahidrofuranoilo, 2-tetrahidrotienilo, 3-tetrahidrotienilo, 2-pirrolidinilo, 3-pirrolidinilo, 3-isoxazolidinilo, 4-isoxazolidinilo, 5-isoxazolidinilo, 3-isotiazolidinilo, 4-isotiazolidinilo, 5-isotiazolidinilo, 3-pirazolidinilo, 4-pirazolidinilo, 5-pirazolidinilo, 2-oxazolidinilo, 4-oxazolidinilo, 5-oxazolidinilo, 2-tiazolidinilo, 4-tiazolidinilo, 5-

25 tiazolidinilo, 2-imidazolidinilo, 4-imidazolidinilo, 1,2,4-oxadiazolidin-3-ilo, 1,2,4-

30

- oxadiazolidin-5-ilo, 1,2,4-tiadiazolidin-3-ilo, 1,2,4-tiadiazolidin-5-ilo, 1,2,4-triazolidin-3-ilo, 1,3,4-oxadiazolidin-2-ilo, 1,3,4-tiadiazolidin-2-ilo, 1,3,4-triazolidin-2-ilo, 2,3-dihidrofur-2-ilo, 2,3-dihidrofur-3-ilo, 2,4-dihidrofur-2-ilo, 2,4-dihidrofur-3-ilo, 2,3-dihidrotien-2-ilo, 2,3-dihidrotien-3-ilo, 2,4-dihidrotien-2-ilo,
- 5 2,4-dihidrotien-3-ilo, 2-pirrolin-2-ilo, 2-pirrolin-3-ilo, 3-pirrolin-2-ilo, 3-pirrolin-3-ilo, 2-isoxazolin-3-ilo, 3-isoxazolin-3-ilo, 4-isoxazolin-3-ilo, 2-isoxazolin-4-ilo, 3-isoxazolin-4-ilo, 4-isoxazolin-4-ilo, 2-isoxazolin-5-ilo, 3-isoxazolin-5-ilo, 4-isoxazolin-5-ilo, 2-isotiazolin-3-ilo, 3-isotiazolin-3-ilo, 4-isotiazolin-3-ilo, 2-isotiazolin-4-ilo, 3-isotiazolin-4-ilo, 4-isotiazolin-4-ilo, 2-isotiazolin-5-ilo, 3-isotiazolin-
- 10 5-ilo, 4-isotiazolin-5-ilo, 2,3-dihidropirazol-1-ilo, 2,3-dihidropirazol-2-ilo, 2,3-dihidropirazol-3-ilo, 2,3-dihidropirazol-4-ilo, 2,3-dihidropirazol-5-ilo, 3,4-dihidropirazol-1-ilo, 3,4-dihidropirazol-3-ilo, 3,4-dihidropirazol-4-ilo, 3,4-dihidropirazol-5-ilo, 4,5-dihidropirazol-1-ilo, 4,5-dihidropirazol-3-ilo, 4,5-dihidropirazol-4-ilo, 4,5-dihidropirazol-5-ilo, 2,3-dihidrooxazol-2-ilo, 2,3-
- 15 dihidrooxazol-3-ilo, 2,3-dihidrooxazol-4-ilo, 2,3-dihidrooxazol-5-ilo, 3,4-dihidrooxazol-2-ilo, 3,4-dihidrooxazol-3-ilo, 3,4-dihidrooxazol-4-ilo, 3,4-dihidrooxazol-5-ilo, 3,4-dihidrooxazol-2-ilo, 3,4-dihidrooxazol-3-ilo, 3,4-dihidrooxazol-4-ilo, 2-piperidinilo, 3-piperidinilo, 4-piperidinilo, 1,3-dioxan-5-ilo, 2-tetrahidropiranilo, 4-tetrahidropiranilo, 2-tetrahidrotienilo, 3-hexahidropiridazinilo, 4-
- 20 hexahidropiridazinilo, 2-hexahidropirimidinilo, 4-hexahidropirimidinilo, 5-hexahidropirimidinilo, 2-piperazinilo, 1,3,5-hexahidrotiazin-2-ilo y 1,2,4-hexahidrotiazin-3-ilo;

arilo: un sistema carbocíclico completamente saturado de 6 a 14 miembros, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos), fenilo, 1-naftilo, 2-naftilo, 2-

25 antrilo, 1-antrilo;

heteroarilo: un sistema de anillo totalmente insaturado de 5 ó 6 miembros que comprende de uno a cuatro heteroátomos del grupo que consiste en oxígeno, nitrógeno y azufre; si el anillo contiene una pluralidad de átomos de oxígeno, éstos no son directamente adyacentes;

- 5 **alcoxi:** un radical alcoxi de cadena lineal o ramificada, tal como, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos), metoxi, etoxi, n-propoxi, 1-metiletoxi, n-butoxi, 1-metilpropoxi, 2-metilpropoxi o 1,1-dimetiletoxi, en particular metoxi o etoxi;

alquiltio: representa alquiltio de cadena lineal o ramificada, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos), metiltio, etiltio, n- e isopropiltio, n-, i-, sec- y terc-butiltio, n-pentiltio y sus isómeros, tal como 1-, 2- y 3-metilbutiltio. Los grupos alquiltio pueden estar sustituidos con 1 a 3 átomos de halógeno (preferentemente cloro y/o flúor), por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos) di- y trifluorometiltio y difluoroclorometiltio.

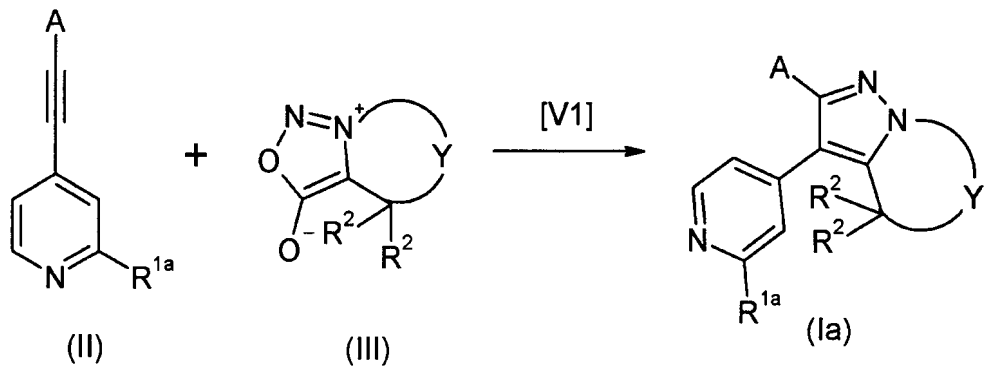
Haloalcoxi: representa un radical alcoxi de cadena lineal o ramificada en el que uno o más de los átomos de hidrógeno se han reemplazado por flúor, cloro o bromo, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos) -OCF₃, -OCHF₂.

Aciloxi: representa un radical aciloxi, saturado o insaturado, de cadena lineal o ramificada, o cíclico conectado mediante el átomo de oxígeno, por ejemplo, (pero sin limitarse a los mismos) acetiloxi, propioniloxi, isobutiriloxi.

20 Adicionalmente, la presente invención proporciona un procedimiento para preparar los piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I) de acuerdo con la invención, que comprende al menos una de las etapas (a) a (d) siguientes:

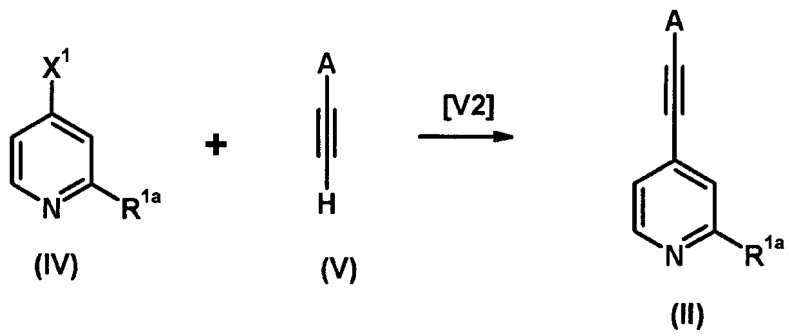
a) la reacción de piridinilalquinos de fórmula general (II) con biciclos de fórmula general (III) para dar pirazoles bicíclicos de fórmula general (Ia), si es adecuado
25 en presencia de un disolvente, de acuerdo con el esquema de reacción

siguiente (Esquema 3).



Esquema 3: R^{1a} = H, halógeno, S(O)_mMe, CN, alquilo C₁-C₄-

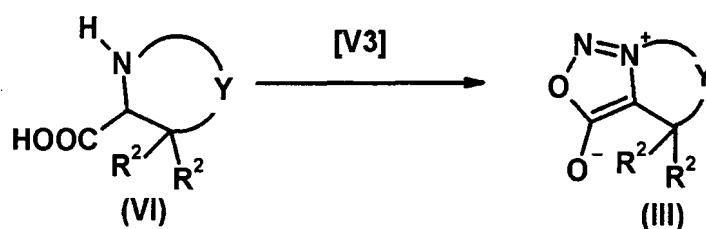
b) la reacción de 4-halopiridinas de fórmula general (IV) con (het)arilalquinos de
5 fórmula general (V) para dar piridinilalquinos de fórmula general (II), si es
adecuado, en presencia de un catalizador adecuado y en presencia de un
disolvente, de acuerdo con el esquema de reacción siguiente (Esquema 4):



Esquema 4: en el que X¹ = Cl, bromo, yodo R^{1a} = H, halógeno, S(O)_mMe,

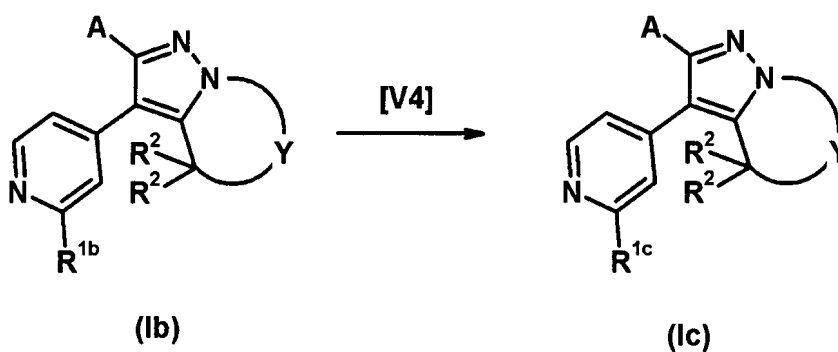
10 CN, alquil C₁-C₄

c) la reacción de aminoácidos de fórmula general (VI) para dar compuestos de
fórmula general (III) de acuerdo con el esquema de reacción siguiente
(Esquema 5):



Esquema 5

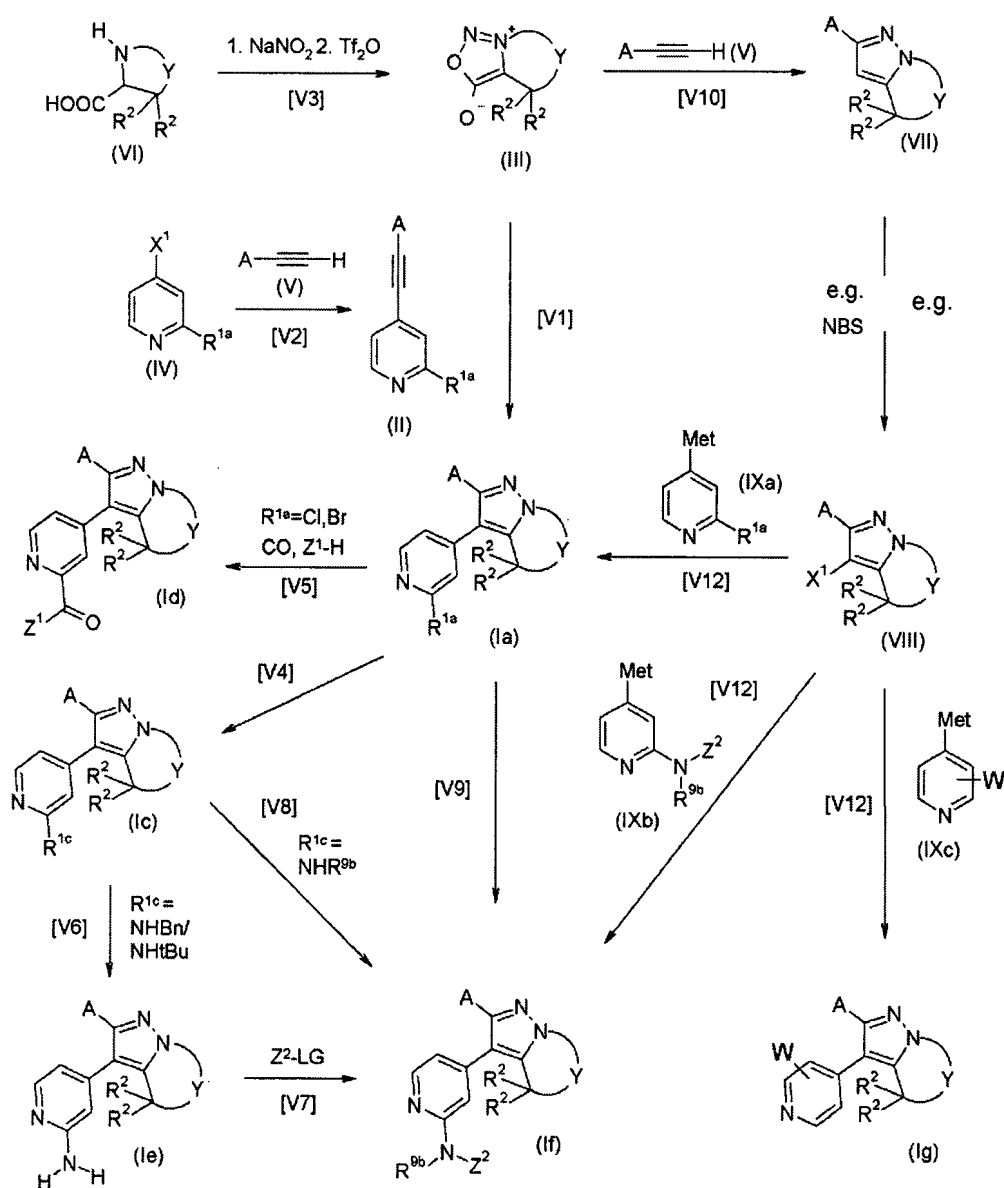
d) la reacción de compuestos de fórmula general (Ib) para dar compuestos de fórmula general (Ic), si es adecuado, en presencia de una base, si es adecuado, en presencia de un disolvente, de acuerdo con el esquema siguiente (Esquema 6):



Esquema 6: R^{1b} = halógeno, $S(O)_mMe$ R^{1c} = $NR^{9a}R^{9b}$, $NR^{10}-NR^{11a}R^{11b}$, CN , $N=CR^{13a}R^{13b}$, OR^{12} , SR^{12}

Los piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I) de acuerdo con la invención pueden prepararse por diversas rutas. Inicialmente, el siguiente texto da representaciones esquemáticas de posibles procedimientos. A menos que se indique otra cosa, los radicales mencionados tienen los significados dados anteriormente.

Una visión de conjunto general de las rutas sintéticas se da en el Esquema 7:



Esquema 7: X₁ representa cloro, bromo o yodo, Z¹ representa OR¹², NR^{9a}R^{9b}, Z² representa R^{9a}CO, R¹²COO o R¹²SO₂, LG representa halógeno, hidroxilo o OZ²; Met representa Sn(Bu)₃, B(OH)₂ o 4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-ilo, R^{1a} representa H, halógeno, S(O)_mMe, CN, alquilo C₁-C₄

Etapas de procedimiento [V1]:

La reacción de piridinilalquinos de fórmula general (II) con bicíclos de fórmula general (III), si es adecuado en presencia de un disolvente, da los pirazoles bicíclicos de la fórmula general (Ia).

Los disolventes adecuados para realizar la etapa de procedimiento de acuerdo con la invención son todos aquellos disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, benceno, tolueno, xileno o mesitileno).

La temperatura de reacción para realizar la Etapa de procedimiento [V1] de acuerdo con la invención está entre 80 °C y 250 °C, preferentemente entre 120 °C, y el punto de ebullición del disolvente usado. El tiempo de reacción para realizar la Etapa de procedimiento [V1] de acuerdo con la invención está, dependiendo de la escala de la reacción, entre 12 y 96 h, preferentemente entre 16 h y 24 h.

Etapas de procedimiento [V2]:

La reacción de 4-halopiridinas de fórmula general (IV) (X^1 = cloro, bromo, yodo) con (het)arilalquinos de fórmula general (V) proporciona, en una reacción de Sonogashira, piridinilalquinos de fórmula general (II). Pueden encontrarse catalizadores adecuados y condiciones de reacción para la reacción de Sonogashira en A. de Meijere/F. Diederich, (eds.) *Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions*, Wiley-VCh, Weinheim, 2004. Las 4-halopiridinas (IV) requeridas para este propósito están disponibles en el mercado o pueden obtenerse, por ejemplo, por procedimientos conocidos de la bibliografía, a partir de los N-óxidos correspondientes (*Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2009**, *19*, 2244-2248), 4-nitropiridinas (*Chem. Pharm. Bull.* **1990**, *38*, 2446-58) o 4-aminopiridinas (*J. Prak. Chem.*, **1959**, *9*, 164-72). Los (Het-)arilalquinos (V)

están disponibles en el mercado o pueden obtenerse a partir de los bromuros o yoduros de (het-)arilo correspondientes por reacción con, por ejemplo, trimetilsililacetileno mediante una reacción de Sonogashira como se describe, por ejemplo, en *Org. Lett.* **2003**, 42, 1842.

5 Etapa de procedimiento [V3]:

Pueden nitrarse aminoácidos de fórmula general (VI) con nitrito sódico en un medio de ácido acuoso diluido (por ejemplo, ácido clorhídrico o ácido acético) y después pueden hacerse reaccionar con un agente de deshidratación para dar compuestos de la fórmula general (III), como se describe, por ejemplo, en *Heterocycles* **1990**, 31, 481 o *J. Med. Chem.* **2006**, 49, 4623. Son agentes de deshidratación adecuados, ésteres clorofórmicos (por ejemplo, ClCOOMe) o anhídridos (por ejemplo, Tf₂O). Los aminoácidos cíclicos (VI) están disponibles en el mercado o pueden prepararse por procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Tetrahedron* **2006**, 62, 8687 o *J. Med. Chem.* **2006**, 49, 4623).

Etapa de procedimiento [V4]:

Una manera de preparar compuestos de la fórmula general (Ic, en la que $R^{1c} = NR^{9a}R^{9b}$, $NR^{10}-NR^{11a}R^{11b}$, CN, $N=CR^{13a}R^{13b}$, OR^{12} , SR^{12}) se describe mediante la Etapa de procedimiento [V4]. Para esta fin, los grupos salientes adecuados en (Ia), por ejemplo, $R^{1a} = \text{halógeno}$, SMe, SMe o SO₂Me están sustituidos con las aminas $HNR^{9a}R^{9b}$, hidrazinas $HNR^{10}-NR^{11a}R^{11b}$, iminas $HN=CR^{13a}R^{13b}$, alcoholes HOR^{10} o cianuro correspondientes, si es adecuado, en presencia de una base y, si es adecuado, en presencia de un disolvente.

Los disolventes que pueden usarse para realizar la Etapa de procedimiento [V4] de acuerdo con la invención del Esquema 7, son las aminas

HNR^{9a}R^{9b} o alcoholes OR¹⁰ por sí mismos, o todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales éteres cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahidrofurano, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo) y amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona), o la reacción
5 puede realizarse en mezclas de dos o más de estos disolventes. El disolvente preferido es dimetilformamida o acetonitrilo.

Son bases adecuadas, hidróxidos de metales alcalinos, hidruros de metales alcalinos, carbonatos de metales alcalinos, acetatos de metales
10 alcalinos, alcóxidos de metales alcalinos, y también aminas terciarias. Son base preferidas hidruro sódico, carbonato sódico, carbonato potásico y carbonato de cesio.

La temperatura de reacción para realizar la Etapa de procedimiento [V4] de acuerdo con la invención está entre 0 °C y 180 °C, preferentemente entre
15 temperatura ambiente y 100 °C. La reacción puede realizarse a presión atmosférica o a presión elevada. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 5 min y 24 h, preferentemente entre 30 min y 6 h.

Etapas de procedimiento [V5]:

Una vía de conversión de halopiridinas de fórmula general (Ia) (R^{1a} = Cl, Br) en los ésteres y amidas correspondientes se proporciona por la Etapa de
20 procedimiento [V5]. Las carbonilaciones catalizadas por Pd de (Ia) en presencia de alcoholes, proporcionan los ésteres correspondientes de la fórmula general (Id), en la que Z¹=OR¹², cf. *J. Med. Chem.* **2006**, *49*, 3563-3580, mientras que en presencia de aminas, se forman las amidas correspondientes (Id), en las
25 que Z¹=NR^{9a}R^{9b} es como se describe, por ejemplo, en *Chemistry Euro. J.* **2004**,

10, 746-757. El monóxido de carbono por sí mismo o carbonilos metálicos (por ejemplo, $\text{Mo}(\text{CO})_6$) pueden servir como fuente de CO.

Los disolventes que pueden usarse para realizar la Etapa de procedimiento [V5] de acuerdo con la invención del Esquema 7 son los
5 alcoholes o aminas por sí mismos, y además, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales como éteres cíclicos y acíclicos (por ejemplo, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), sulfóxidos (por ejemplo, DMSO) y amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona), o la reacción puede
10 realizarse en mezclas de dos o más de estos disolventes. Los disolventes preferidos son los alcoholes o aminas por sí mismos, y también dimetilformamida.

Son bases adecuadas para realizar la Etapa de procedimiento [V5] de acuerdo con la invención a partir del Esquema 7, carbonatos de metales
15 alcalinos (por ejemplo, carbonato potásico), amidinas cíclicas (por ejemplo, DBU) y aminas terciarias (por ejemplo, trietilamina).

Se prefieren para realizar la Etapa de procedimiento [V5] de acuerdo con la invención, catalizadores de paladio, en los que el paladio está presente con un número de oxidación (0) o (II), tales como, por ejemplo,
20 tetraquis(trifenilfosfina)paladio, dicloruro de bis(trifenilfosfina)paladio, dicloruro de bis(difenilfosfino)ferrocenopaladio y acetato de paladio (II). El catalizador puede comprender ligandos que contienen fósforo o pueden añadirse por separado ligandos que contienen fósforo a la mezcla de reacción. Son ligandos que contiene fósforo preferidos, tri-n-alkilfosfanos, triarilfosfanos,
25 dialquilarilfosfanos, alquildiarilfosfanos, en los que los tres sustituyentes en el

fósforo pueden ser iguales o diferentes, y en los que uno o más sustituyentes pueden conectar los grupos fósforo de una pluralidad de fosfanos, en los que un átomo metálico también puede ser parte de esta conexión. Se da preferencia particular a fosfanos, tales como trifenilfosfano, 1,4-bis(difenilfosfino)propano y 1,1'-bis(difenilfosfino)ferroceno.

La reacción para realizar la Etapa de procedimiento [V5] de acuerdo con la invención se realiza en un intervalo de temperatura de 25 ° a 150 °C, particular y preferentemente de 80 ° a 120 °C. La reacción puede realizarse a presión atmosférica o a presión elevada. El tiempo de reacción varía dependiendo de la escala de la reacción y la temperatura de reacción, pero está generalmente entre unos pocos minutos y 20 horas.

Etapa de procedimiento [V6]:

Una manera de preparar compuestos de la fórmula general (Ie) se describe mediante la Etapa de procedimiento [V6]. Pueden escindirse aminas lábiles a ácidos (por ejemplo, $R^{1c}=NHBn$ (cf. documento WO 2008/132434) o $NHtBu$ (cf. *Tetrahedron Lett.* **2005**, 46, 3883-3887)) en un medio ácido para dar (2-aminopiridin-4-il)pirazoles (Ie). Son ácidos adecuados para este propósito ácidos minerales (por ejemplo, H_2SO_4 , HCl), ácidos de Lewis (por ejemplo, BBr_3 , $AlCl_3$) o ácidos orgánicos (por ejemplo, F_3COOH , CF_3SO_3H). Son disolventes adecuados los ácidos en sí mismos o cualquiera de los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales como, hidrocarburos halogenados (por ejemplo, diclorometano) o hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno). La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo de reacción está, dependiendo de la escala de la reacción, entre 5 min y 24 h, preferentemente entre 30 min y 12 h.

Etapas de procedimiento [V7] y [V8]:

Mediante las etapas de procedimiento [V7] y [V8], partiendo de las aminas (Ie) e (Ic para R^{1c} = amina primaria), y usando cloruros de carbonilo o anhídridos carboxílicos, pueden obtenerse las amidas correspondientes (If, en las que $Z^2 = R^{9a}CO$), los carbamatos correspondientes (If, en los que $Z^2 = R^{12}COO$) pueden obtenerse usando ésteres clorofórmicos y las sulfonamidas correspondientes (If, en las que $Z^2 = R^{12}SO_2$) pueden obtenerse usando cloruros de sulfonilo o anhídridos sulfónicos. Los compuestos de fórmula general Z^2-LG están disponibles en el mercado o pueden prepararse usando procedimientos de síntesis orgánica conocidos de la bibliografía (R. C. Larock, *Comprehensive Organic Transformations*, 2ª edición, 1999, Wiley-VCH, página 1929 ff. y la bibliografía citada en el mismo).

Son disolventes adecuados para realizar las Etapas de procedimiento [V7] y [V8] de acuerdo con la invención, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales como, por ejemplo, éteres cíclicos y acíclicos (por ejemplo, tetrahidrofurano, dioxanos), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), hidrocarburos halogenados (por ejemplo, diclorometano), cetonas (por ejemplo, acetona), amidas (por ejemplo, dimetilformamida) y nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo), o la reacción puede realizarse en mezclas de dos o más de estos disolventes. Los disolventes preferidos son tetrahidrofurano, diclorometano y acetonitrilo.

Son neutralizantes de ácidos que pueden usarse para realizar las Etapas de procedimiento [V7] y [V8], bases adecuadas. Se da preferencia a aminas terciarias (por ejemplo, trietilamina, etildiisopropilamina), carbonatos de metal alcalino (por ejemplo, carbonato sódico) o hidróxidos de metal alcalino

(hidróxido sódico).

La reacción para realizar las Etapas de procedimiento [V7] y [V8] se realiza normalmente a temperaturas de 0 °C – 100 °C y preferentemente a temperatura ambiente, pero también puede realizarse hasta la temperatura de reflujo de la mezcla de reacción. El tiempo de reacción varía dependiendo de la escala de la reacción y la temperatura de reacción, pero está generalmente entre unos pocos minutos y 48 horas.

Como alternativa, también pueden sintetizarse carboxamidas y sulfonamidas de fórmula general (If) en la que $Z^2 = R^{9a}CO$, $R^{12}SO_2$, a partir de los ácidos correspondientes Z^2-OH , en presencia de un agente de acoplamiento, de manera análoga a los procedimientos descritos en la bibliografía (por ejemplo, *Tetrahedron* **2005**, 61, 10827-10852, y referencias citadas en ese documento).

Son agentes de acoplamiento adecuados para realizar las Etapas de procedimiento [V7] y [V8], por ejemplo, carbodiimidas (por ejemplo, N-(3-dimetilaminopropil)-N'-etilcarbodiimida, opcionalmente con 4-dimetilaminopiridina o 1-hidroxibenzotriazole), iones fosfonio (por ejemplo, hexafluorofosfato de bromotripirrolidinofosfonio) o iones uronio (por ejemplo, hexafluorofosfato de O-(7-azabenzotriazol-1-il)-N,N,N',N'-tetrametiluronio).

Si fuera adecuado, una base, tal como, por ejemplo, trietilamina o etildiisopropilamina, puede usarse en la reacción para realizar las Etapas de procedimiento [V7] y [V8]. Los disolventes que pueden usarse para realizar las Etapas de procedimiento [V7] y [V8] son todos disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, como se ha descrito para la reacción con cloruro de ácidos.

Etapas de procedimiento [V9]:

Como se describe, por ejemplo, en el documento DE-A 1 037 399, la introducción de un radical amida también puede realizarse directamente en catalizadores de Pd, partiendo de las 2-halopiridinas (Ia, en las que R^{1a} = cloro, bromo, yodo).

Etapas de procedimiento [V10]:

De manera análoga a las condiciones de reacción descritas en la Etapa de procedimiento [V1], también pueden hacerse reaccionar bicíclos de fórmula general (III) con (het)arilalquinos de fórmula general (V) para dar pirazoles bicíclicos de fórmula general (VII).

Etapas de procedimiento [V11]:

Pueden convertirse 4H-pirazoles de fórmula general (VII) con agentes de halogenación adecuados por procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2008, 18, 509-512) en los 4-halopirazoles correspondientes (X¹ = Cl, Br, I) de fórmula general (VIII). Son adecuados para su uso como agentes de halogenación, por ejemplo, cloro, bromo, yodo o N-halosuccinimidas elementales (NCS, NBS, NIS) o bien cloruro de sulfurilo y tribromuro de piridinio.

La halogenación para realizar la Etapa de procedimiento [V11] puede realizarse en presencia de un disolvente que es inerte en las condiciones de reacción. Se da preferencia a alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol), éteres cíclicos y acíclicos (por ejemplo, éter dietílico, tetrahidrofurano, dioxano), amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida), sulfóxidos (por ejemplo, dimetilsulfóxido), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, benceno, tolueno), hidrocarburos halogenados (por ejemplo, diclorometano, cloroformo) y

ácidos carboxílicos (por ejemplo, ácido acético).

La temperatura de reacción está entre 0 °C y el punto de ebullición del disolvente, preferentemente entre temperatura ambiente y 80 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 5 min y 24 h, preferentemente entre 30 min y 6 h.

Etapas de procedimiento [V12]:

Una manera adicional de sintetizar los piridinilpirazoles (Ia), (If) y (Ig) de acuerdo con la invención se proporciona por la Etapa de procedimiento [V12]. En una reacción de Suzuki (por ejemplo, de manera análoga a *Organic Lett.* **2005**, 7, 4753-4756), los 4-halopirazoles (VIII) obtenidos en la Etapa de procedimiento [V11] se hacen reaccionar con piridinas de fórmula general (IXa/b/c). Los ésteres y ácidos 4-piridinilborónicos (IXa/b/c, Met = B(OH)₂ o 4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-ilo) usados para la reacción de Suzuki están disponibles en el mercado o pueden prepararse a partir de las 4-bromopiridinas correspondientes por reacción catalizada por Pd con bispinacolatodiborano (por ejemplo, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2006**, 16, 1277-1281) o por metalación/boración (por ejemplo, *Synthesis*, **2003**, 469-483).

Son disolventes adecuados para la reacción de Suzuki, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales como alcoholes (por ejemplo, etanol, etilenglicol), éteres cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahidrofurano, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), cetonas (por ejemplo, acetona, etil metil cetona), nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo) y amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona) y agua, o la reacción puede realizarse en mezclas de dos o más de estos disolventes. Los disolventes preferidos son

dioxano y tetrahidrofurano.

Son bases adecuadas hidróxidos de metales alcalinos, carbonatos de metales alcalinos, bicarbonatos de metales alcalinos, acetatos de metales alcalinos, alcóxidos de metales alcalinos y también aminas terciarias. Son base
5 preferidas, carbonato de cesio, carbonato sódico, carbonato potásico y acetato potásico.

Se prefieren para realizar la Etapa de procedimiento [V12], catalizadores de paladio en los que el paladio está presente con un número de oxidación de (0) o (II), tales como, por ejemplo, tetraquis(trifenilfosfina)paladio, dicloruro de
10 bis(trifenilfosfina)paladio y dicloruro de bis(difenilfosfino)ferrocenopaladio, o también acetato de paladio (II) y cloruro de paladio (II).

El catalizador puede comprende ligandos que contienen fósforo, o pueden añadirse por separado ligandos que contienen fósforo a la mezcla de reacción. Son ligandos que contienen fósforo preferidos, tri-n-alquilfosfanos, triarilfosfanos, dialquilarilfosfanos, alquildiarilfosfanos y/o heteroarilfosfanos,
15 tales como tripiridilfosfano y trifurilfosfano, en los que los tres sustituyentes en el fósforo pueden ser iguales o diferentes y en los que uno o más sustituyentes puede conectar los grupos de fósforo de una pluralidad de fosfanos, en los que un átomo metálico también puede ser parte de esta conexión. Se da
20 preferencia particular a fosfanos, tales como trifenilfosfano, tri-terc-butilfosfano, triclohexilfosfano.

El acoplamiento de Suzuki se realiza en un intervalo de temperatura de 25 ° a 200 °C, particular y preferentemente de 80 ° a 150 °C. El tiempo de reacción varía dependiendo de la escala de la reacción y la temperatura de
25 reacción, pero está generalmente entre unos pocos minutos y 48 horas.

En un procedimiento de acoplamiento de C-C alternativo para la Etapa de procedimiento [V12], los 4-halopirazoles (VIII) también pueden hacerse reaccionar en una reacción de Stille (por ejemplo, de manera análoga a *Med. Chem. Lett.* 2006, 16, 3550) con piridinilestananos (IXa/b/c, Met = Sn(alquilo)₃) para dar los piridinilpirazoles (Ia), (If) o (Ig). La preparación de 4-piridinilestananos (IX) también se conoce de la bibliografía (por ejemplo, *J. Med. Chem.* 2003, 46, 284-302; *Tetrahedron* 2004, 60, 6113-6120). Para el acoplamiento de Stille, la elección de catalizador, si fuera adecuado una sal haluro inorgánica y orgánica, si fuera adecuado un ligando y un disolvente adecuado a temperaturas adecuadas, puede variar dependiendo del sustrato de alquilestaño usado.

Son disolventes adecuados para la reacción de acoplamiento de Stille, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales como éteres cíclicos y acíclicos (por ejemplo, dimetoximetano, tetrahidrofurano, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona) y sulfóxidos (por ejemplo, dimetilsulfóxido) o la reacción puede realizarse en mezclas de dos o más de estos disolventes.

Son sales haluro que se usan preferentemente, por ejemplo, haluros de cobre (por ejemplo, CuBr o CuI), haluros de cesio (por ejemplo, CsF) y haluros de tetraalquilamonio (por ejemplo, TBAF).

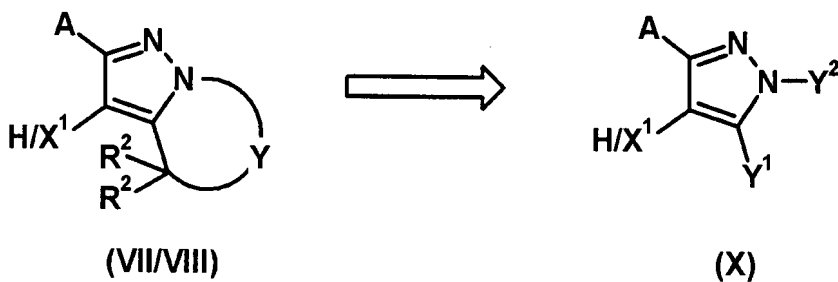
Se da preferencia a catalizadores de paladio, en los que el paladio está presente con un número de oxidación (0) o (II), tales como, por ejemplo, tetraquis(trifenilfosfina)paladio, dicloruro de bis(trifenilfosfina)paladio y dicloruro de bis(difenilfosfina)ferrocenopaladio, o también acetato de paladio (II) y cloruro

de paladio (II).

El catalizador puede comprender ligandos que contienen fósforo, o pueden añadirse por separado ligandos que contienen fósforo a la mezcla de reacción. Son ligandos que contienen fósforo preferidos, tri-n-alquilfosfanos, triarilfosfanos, dialquilarilfosfanos, alquildiarilfosfanos y/o heteroarilfosfanos, tales como tripiridilfosfano y trifurilfosfano, en los que los tres sustituyentes en el fósforo pueden ser iguales o diferentes y en los que uno o más sustituyentes pueden conectar los grupos fósforo de una pluralidad de fosfanos, en los que un átomo metálico también puede ser parte de esta conexión. Se da preferencia particular a fosfanos, tales como trifenilfosfano, tri-terc-butilfosfano, triclohexilfosfano.

El acoplamiento de Stille se realiza en un intervalo de temperatura de 25 ° - 200 °C, particular y preferentemente a 60 ° - 150 °C. El tiempo de reacción varía dependiendo de la escala de la reacción y la temperatura de reacción, pero está generalmente entre unos pocos minutos y 48 horas.

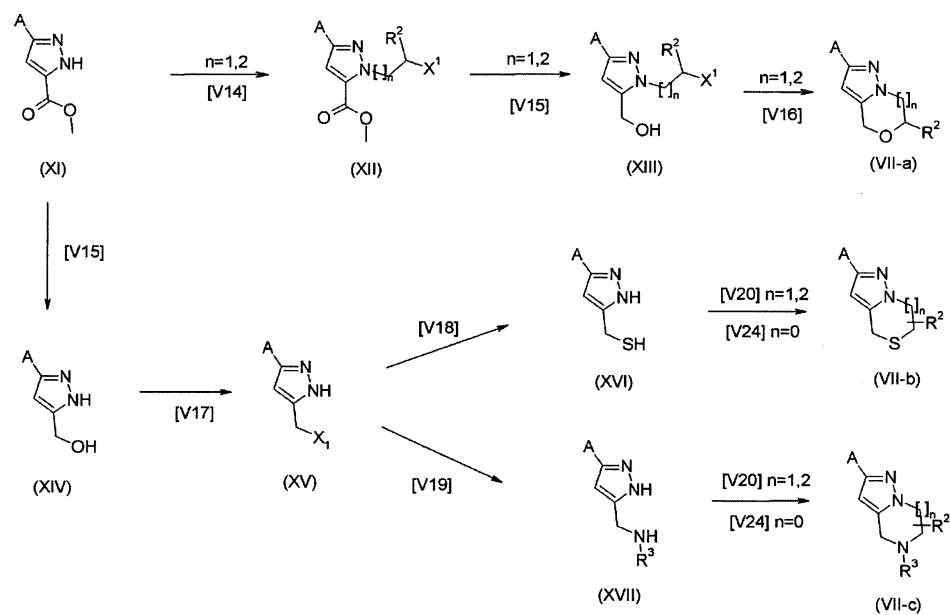
Como alternativa a los procedimientos descritos en el Esquema 7, los intermedios de pirazol bicíclicos (VII) y (VIII) también pueden prepararse de acuerdo con el siguiente esquema general a partir de los pirazoles monocíclicos (X) proporcionados con sustituyentes adecuados Y¹ e Y² (Esquema 8):



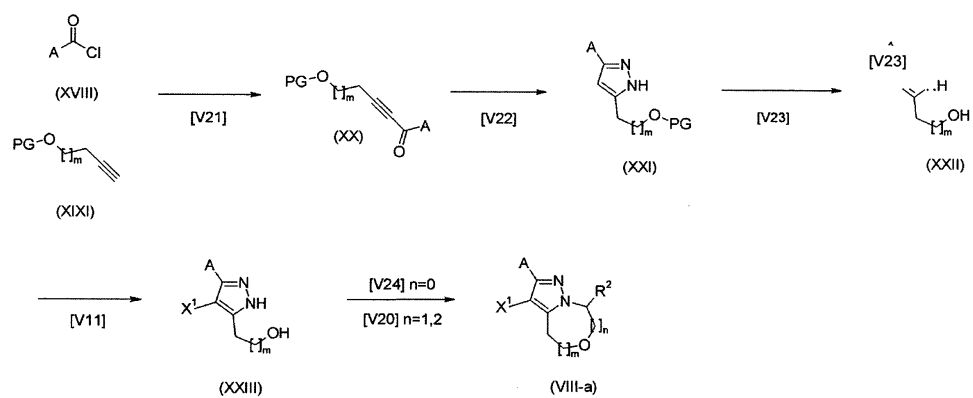
Esquema 8: X^1 representa cloro, bromo y yodo; Y^1 e Y^2 representan grupos funcionales adecuados que pueden convertirse en $-C(R^2)^2-Y-$.

Los siguientes procedimientos se muestran en el presente documento de una manera ejemplar para la retrosíntesis descrita en el Esquema 8

5 (Esquema 9 y Esquema 10):



Esquema 9: X^1 representa cloro, bromo y yodo; m and n independientemente entre sí, representan 0, 1, 2;



Esquema 10: X^1 representa cloro, bromo y yodo; m y n independientemente entre sí, representan 0, 1, 2; GP: grupo protector, por ejemplo, Bn o THP

Etapas de procedimiento [V14]:

Pueden convertirse ésteres de pirazol de fórmula general (XI) con haluros de bisalquilideno adecuados (por ejemplo, 1-bromo-2-cloroetano), si es adecuado, en presencia de una base y si es adecuado, en presencia de un disolvente, de acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Bioorg. Med. Chem.* 2008, 16, 10165-10171) en los ésteres de N-haloalquilpirazol correspondientes ($X^1 = \text{Cl, Br, I}$) de fórmula general (XII). Los ésteres de pirazol (XI) están disponibles en el mercado o pueden prepararse por procedimientos conocidos de la bibliografía, por ejemplo, Zhejiang Daxue Xuebao, Lixueban (2008), 35(6), 641-643, a partir de acetofenonas disponibles a bajo coste.

Son bases adecuadas hidróxidos de metales alcalinos, hidruros de metales alcalinos, carbonatos de metales alcalinos y también aminas terciarias. Son bases preferidas, hidruro sódico, carbonato sódico, carbonato potásico o carbonato de cesio. Son adecuados para su uso como disolventes, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales como éteres cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahidrofurano, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo), cetonas (por ejemplo, acetona) y amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona), o la reacción puede realizarse en mezclas de dos o más de estos disolventes. Los disolventes preferidos son dimetilformamida, acetona o acetonitrilo.

La temperatura de reacción está entre 0 °C y 180 °C, preferentemente entre temperatura ambiente y 100 °C.

Etapas de procedimiento [V15]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, documento WO 2007/018314), pueden convertirse ésteres de pirazol de fórmula general (XI) o (XII) con agentes de reducción adecuados, en los alcoholes correspondientes de fórmula general (XIII) o (XIV). Son agentes de
5 reducción adecuados para este propósito, alانات o boronatos (por ejemplo, LiAlH_4 , DIBAL-H, LiBH_4 , para $\text{R}^2 = \text{H}$) o compuestos de Grignard (por ejemplo, MeMgCl para $\text{R}^2 = \text{Me}$).

Son adecuados para su uso como disolventes, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tal como éteres
10 cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahydrofurano, dioxano) o hidrocarburos (por ejemplo, tolueno, hexano) o mezclas.

Etapas de procedimiento [V16]:

Pueden ciclarse hidroximetilpirazoles de fórmula general (XIII), si es adecuado, en presencia de una base y, si es adecuado, en presencia de un
15 disolvente para dar los pirazoles bicíclicos correspondientes de fórmula general (VIIa). Son bases adecuadas, hidróxidos de metales alcalinos, hidruros de metales alcalinos, carbonatos de metales alcalinos, acetatos de metales alcalinos, alcóxidos de metales alcalinos y también aminas terciarias. Son bases preferidas, hidruro sódico, carbonato sódico, carbonato potásico o
20 carbonato de cesio.

Son adecuados para su uso como disolventes, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tal como éteres cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahydrofurano, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo,
25 propionitrilo), cetonas (por ejemplo, acetona) y amidas (por ejemplo,

52

dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona), o la reacción puede realizarse en mezclas de dos o más de estos disolventes. Los disolventes preferidos son dimetilformamida, acetona o acetonitrilo.

La temperatura de reacción está entre 0 °C y 180 °C, preferentemente entre temperatura ambiente y 100 °C.

Etapas de procedimiento [V17]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2007, 17, 5199-5203), hidroximetilpirazoles de fórmula general (XIV) pueden convertirse con agentes de halogenación adecuados, en los halometilpirazoles correspondientes ($X^1 = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) de fórmula general (XV). Son adecuados para su uso como agentes de halogenación, por ejemplo, cloruro de tionilo, tribromuro de piridinio, Br_2/PPh_3 o I_2/PPh_3 . Si fuera adecuado, la halogenación puede realizarse en presencia de un disolvente que es inerte en las condiciones de reacción. Se da preferencia a éteres cíclicos y acíclicos (por ejemplo, éter dietílico, tetrahidrofurano, dimetoxietano), amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida), sulfóxidos (por ejemplo, dimetilsulfóxido), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), hidrocarburos halogenados (por ejemplo, diclorometano, cloroformo). La temperatura de reacción está entre 0 °C y el punto de ebullición del disolvente, preferentemente entre temperatura ambiente y 80 °C.

Etapas de procedimiento [V18]:

Pueden convertirse halometilpirazoles de fórmula general (XV) en los sulfanilmetilpirazoles correspondientes de fórmula general (XVI). Son adecuados para su uso como agentes de sulfurización, por ejemplo, sulfuro de hidrógeno, sulfuro sódico, tiourea o tioacetato potásico.

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol), agua, éteres cíclicos y acíclicos (por ejemplo, dioxano, dimetoxietano), amidas (por ejemplo, dimetilformamida, 5 dimetilacetamida), cetonas (por ejemplo, acetona) y nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo). Si es adecuado, pueden añadirse bases auxiliares, tales como, por ejemplo, carbonatos de metales alcalinos (carbonato sódico, carbonato potásico, bicarbonato sódico), hidróxidos de metal alcalino (por ejemplo, hidróxido sódico, hidróxido potásico), aminas aromáticas (por ejemplo, piridina) 10 o aminas terciarias (triethylamina, etildiisopropilamina) a la mezcla de reacción.

La temperatura de reacción está entre 0 °C y el punto de ebullición del disolvente, preferentemente entre temperatura ambiente y 80 °C.

Etapas de procedimiento [V19]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por 15 ejemplo, Journal of Medicinal Chemistry 2010, 53, 1473-1482), pueden convertirse halometilpirazoles de fórmula general (XV) con aminas adecuadas H_2NR^3 , en aminometilpirazoles de fórmula general (XVII).

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a 20 alcoholes (por ejemplo, metanol, etanol), agua, éteres cíclicos y acíclicos (por ejemplo, dioxano, tetrahydrofurano), amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida) y nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo). Si es adecuado, pueden añadirse bases auxiliares, tales como carbonatos de metales alcalinos (por ejemplo, carbonato sódico, carbonato potásico, bicarbonato sódico), aminas 25 aromáticas (por ejemplo, piridina) o aminas terciarias (triethylamina,

etildiisopropilamina), a la mezcla de reacción.

La temperatura de reacción está entre 0 °C y el punto de ebullición del disolvente, preferentemente entre temperatura ambiente y 80 °C.

Etapas de procedimiento [V20]:

- 5 Usando haluros de bisalquilideno adecuados (por ejemplo, 1,2-dibromoetano) o mesilatos y tosilatos de bisalquilideno (por ejemplo, dimesilato de etileno), pueden ciclarse 5-sulfanilmetil- o 5-aminometilpirazoles de las fórmulas generales (XVI) y (XVII) para dar los pirazoles bicíclicos (VIIb) y (VIIc). Son adecuados para su uso como disolventes, todos los disolventes habituales
- 10 que son inertes en las condiciones de reacción, tales como éteres cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahidrofurano, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo), cetonas (por ejemplo, acetona) y amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona), o la reacción puede realizarse en
- 15 mezclas de dos o más de estos disolventes. Los disolventes preferidos son dimetilformamida, acetona o acetonitrilo.

Si es adecuado, también es posible añadir bases adecuadas, tales como carbonatos de metales alcalinos o aminas terciarias, a la mezcla de reacción. Son bases preferidas, carbonato sódico o carbonato potásico y también

20 trietilamina. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 180 °C, preferentemente entre temperatura ambiente y 100 °C.

Etapas de procedimiento [V21]:

- Partiendo de cloruros de benzoílo disponibles en el mercado y alquinos terminales de las fórmulas generales (XVIII y XIX), de acuerdo con
- 25 procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, Organic Letters 2008,

10, 2629-2632), es posible preparar, en una reacción de Sonogashira de manera análoga a la Etapa de procedimiento [V2] o en condiciones básicas (por ejemplo, Organic Letters 2010, 12, 1952-1955), alquil aril cetonas de fórmula general (XX). Son bases adecuadas para este propósito, 5 preferentemente, butillitio y compuestos de Grignard. Son adecuados para su uso como disolventes, todos los disolventes habituales que son inertes en las condiciones de reacción, tales como éteres cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahidrofurano, éter dietílico), o hidrocarburos (por ejemplo, tolueno, hexano), o la reacción puede realizarse en mezclas de dos o más de 10 estos disolventes. La temperatura de reacción está entre -78 °C y el punto de ebullición del disolvente, preferentemente entre -70 °C y temperatura ambiente.

Etapa de procedimiento [V22]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, Tetrahedron Letters 1989, 30, 2049-52), pueden convertirse alquil aril cetonas de fórmula general (XX) con hidrazina, en los pirazoles correspondientes (XXI). Los disolventes preferidos para la reacción son 15 alcoholes, tales como metanol y etanol, agua y ácido acético, y también mezclas de los mismos. La temperatura de reacción está entre 0 °C y el punto de ebullición del disolvente, preferentemente entre temperatura ambiente y 80 20 °C.

Etapa de procedimiento [V23]:

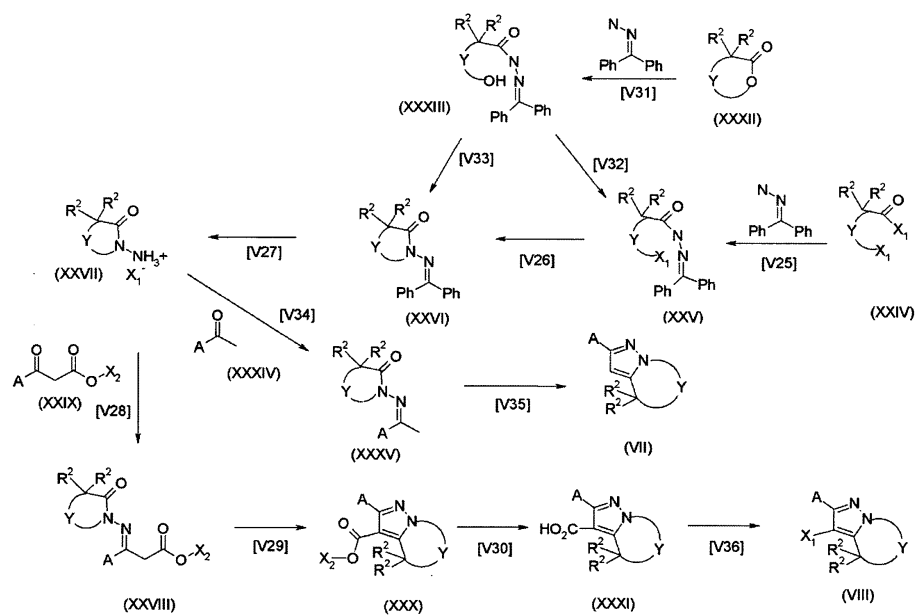
En la Etapa de procedimiento [V23], los pirazol alcoholes bloqueados con un grupo protector adecuado pueden convertirse por procedimientos conocidos de la bibliografía (cf. Greene/Wuts Protective Groups in Organic 25 Synthesis, Wiley, 1999 o Kocienski, Protecting Groups, Thieme, 2005) en los

alcoholes libres de pirazol. Por lo tanto, por ejemplo, un grupo protector de bencilo puede retirarse hidrogenolíticamente o usando FeCl_3 , un grupo protector de THP lábil a ácido puede retirarse usando ácido toluenosulfónico.

Etapas de procedimiento [V24]:

- 5 De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (cf. Synthesis 1979, 440-1), 5-sulfanilalquil-, 5-aminoalquil- y 5-hidroxialquilpirazoles de las fórmulas generales (XVI), (XVII) y (XIII) pueden ciclarse para dar los pirazoles bicíclicos de las fórmulas generales (VIIb), (VIIc) y (VIIIa). Para este fin, se usan aldehídos correspondientes (por ejemplo, 10 formaldehído, acetaldehído) o cetonas (por ejemplo, acetona) como reactivos. Si es adecuado, un ácido, tal como, por ejemplo, ácido p-toluenosulfónico, puede añadirse a la mezcla de reacción como catalizador. Son adecuados para su uso como disolventes, el reactivo (por ejemplo, acetona) en sí mismo, u otros disolventes cualesquiera que sean inertes en las condiciones de reacción, 15 tales como éteres cíclicos y acíclicos (dimetoximetano, tetrahidrofurano, dioxano), hidrocarburos aromáticos (por ejemplo, tolueno), nitrilos (por ejemplo, acetonitrilo, propionitrilo), amidas (por ejemplo, dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona). La temperatura de reacción está entre 0 °C y el punto de ebullición del disolvente, preferentemente entre temperatura 20 ambiente y 100 °C.

Una ruta de síntesis alternativa para dar los compuestos VII y VIII se encuentra en el Esquema 11:



Esquema 11: X^1 representa cloro, bromo y yodo, X^2 representa alquilo C_1 - C_4

Etapas de procedimiento [V25]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, *103*, 7743-7752), la reacción de compuestos de fórmula general (XXIV) con benzofenona hidrazona, si es adecuado, en presencia de un disolvente y una base, proporciona compuestos de fórmula general (XXV). Los compuestos (XXIV) requeridos para este propósito están disponibles en el mercado o pueden obtenerse, por ejemplo, por procedimientos conocidos de la bibliografía a partir de lactonas (*Synthesis* **2008**, *20*, 3229-3236).

10 Son adecuados para su uso como disolventes para realizar la Etapa de procedimiento [V25], todos los disolventes que sean inertes para las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a diclorometano. Son bases adecuadas, piridina y aminas terciarias. Se da preferencia a piridina. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo para realizar la reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 12 y 96 h, preferentemente entre 16 h y 24 h.

Etapas de procedimiento [V26]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, *103*, 7743-7752), la reacción de compuestos de fórmula general (XXV), si es adecuado, en presencia de un disolvente y una base, da compuestos de fórmula general (XXVI).

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a tetrahidrofurano. Son bases adecuadas, hidruros de metales alcalinos. Se da preferencia a hidruro sódico. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 50

sl

°C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 12 y 96 h, preferentemente entre 16 h y 24 h.

Etapas de procedimiento [V27]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, documento WO2007018818), la reacción de compuestos de fórmula general (XXVI), si es adecuado, en presencia de un disolvente y un ácido, da N-aminolactamas de fórmula general (XXVII).

Son disolventes adecuados para realizar la Etapa de procedimiento [V27], todos los disolventes que sean inertes para las condiciones de reacción, y también mezclas de los mismos. Se da preferencia a tetrahidrofurano. Son ácidos adecuados, ácidos inorgánicos y también ácidos orgánicos. Se da preferencia a ácido clorhídrico. La temperatura de reacción para realizar la Etapa de procedimiento [V27] está entre 0 °C y 50 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 5 min y 2 h, preferentemente 30 min.

Etapas de procedimiento [V28]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Tetrahedron* **2007**, 63, 11763-11770), la reacción de N-aminolactamas de fórmula general (XXVII) con cetoésteres (XXIX) da compuestos de fórmula general (XXIX). Los cetoésteres (XXVIII) requeridos para este propósito están disponibles en el mercado, o pueden obtenerse, por ejemplo, por procedimientos conocidos de la bibliografía (*Helv. Chim. Acta* **2010**, 93, 1261-1273).

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a

piridina. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 50 °C. El tiempo de reacción para realizar la Etapa de procedimiento [V28] es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 24 h y 72 h, preferentemente 48 h.

Etapa de procedimiento [V29]:

5 Como se describe, por ejemplo, en *Eur. J. Med. Chem* **1984**, 19, 215-218, puede ciclarse compuestos de fórmula general (XXIX) en condiciones básicas para dar ésteres de pirazol de fórmula general (XXX).

10 Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a dimetilformamida. Son bases adecuadas hidruros de metales alcalinos y carbonatos de metales alcalinos. Se da preferencia a carbonato de cesio. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 150 °C. La temperatura de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 2 h y 8 h, preferentemente entre 4 h y 6 h.

15 **Etapa de procedimiento [V30]:**

La hidrólisis de ésteres de pirazol de fórmula general (XXX) de acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Org. Lett.* **2005**, 7, 4753-4756) da ácidos pirazolcarboxílicos de fórmula general (XXXI).

20 Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción y mezclas de los mismos. Se da preferencia a metanol. Son bases adecuadas hidróxidos de metales alcalinos. Se da preferencia a hidróxido sódico. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 1 h y 8 h, preferentemente entre 3 h y 6 h.

25 **Etapa de procedimiento [V31]:**

La reacción de lactonas de fórmula general (XXXII) con benzofenona hidrazona en presencia de un ácido de Lewis da los compuestos de fórmula general (XXXIII).

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a diclorometano. Son ácidos de Lewis adecuados, derivados de trialquilaluminio. Se da preferencia a trimetilaluminio. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 1 h y 8 h, preferentemente entre 3 h y 6 h.

10 **Etapas de procedimiento [V32]:**

La reacción de alcoholes de fórmula general (XXXIII) con un agente de halogenación adecuado de acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, el artículo "Triphenylphosphine-Carbon Tetrabromide" en *Enciclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, Wiley, 1995) da compuestos de fórmula general (XXV).

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a diclorometano. Son agentes de halogenación adecuados, por ejemplo, combinaciones de trifenilfosfano/hidrocarburo halogenado, y compuestos de haloazufre (por ejemplo, cloruro de tionilo). Se da preferencia a la combinación trifenilfosfano/tetrabromuro de carbono. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 30 min y 8 h, preferentemente 1 h.

Etapas de procedimiento [V33]:

25 La reacción de compuestos de la fórmula general (XXXIII) con un ácido

halosulfónico y, si es adecuado, una base, da los compuestos de fórmula general (XXVI).

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a diclorometano y tetrahidrofurano. Son ácidos halosulfónicos adecuados, por ejemplo, cloruro de metilsulfonilo y cloruro de tolilsulfonilo. Se da preferencia a cloruro de metilsulfonilo. Son bases adecuadas, derivados de piridina e hidruros de metales alcalinos. Se da preferencia a piridina e hidruro sódico. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 6 h y 48 h, preferentemente entre 12 h y 24 h.

Etapas de procedimiento [V34]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Eur. J. Med. Chem* **2010**, *45*, 3384-3388), la reacción de N-aminolactamas de fórmula general (XXVII) con acetofenonas de fórmula general (XXXIV), si es adecuado en presencia de un disolvente, da los compuestos de fórmula general (XXXV). Las acetofenonas (XXXIV) requeridas para este propósito están disponibles en el mercado.

Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a etanol. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 6 h y 12 h, preferentemente 12 h.

Etapas de procedimiento [V35]:

De acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por

ejemplo, *Zeitschrift für Naturforschung-B* **2003**, 58, 678-685), la reacción de compuestos de fórmula general (XXXV) con anhídrido acético, si es adecuado en presencia de un disolvente, da pirazoles de fórmula general (VII).

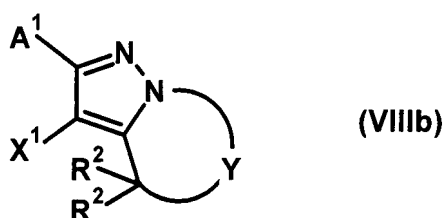
5 Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a anhídrido acético. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 150 °C. El tiempo de reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 2 h y 8 h, preferentemente entre 4 h y 6 h.

Etapas de procedimiento [V36]:

10 La reacción de ácidos pirazolcarboxílicos de fórmula general (XXXI) con una base y un agente de halogenación de acuerdo con procedimientos conocidos de la bibliografía (por ejemplo, *Org. Lett.* **2005**, 7, 4753-4756) da 5-halopirazoles de fórmula general (VIII).

15 Son disolventes adecuados, todos los disolventes que son inertes en las condiciones de reacción, y mezclas de los mismos. Se da preferencia a dimetilformamida. Son agentes de halogenación adecuados, reactivos de halosuccinimida. Se da preferencia a N-yodosuccinimida. Son bases adecuadas, carbonatos de metales alcalinos. Se da preferencia a bicarbonato sódico. La temperatura de reacción está entre 0 °C y 100 °C. El tiempo de
20 reacción es, dependiendo de la escala de la reacción, entre 1 h y 48 h, preferentemente 12 h.

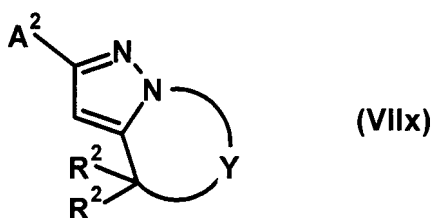
Son nuevos y también parte de la invención, compuestos de fórmula general (VIIIb)



en la que los símbolos tienen los siguientes significados:

- A¹ representa un anillo fenilo que puede estar opcionalmente mono- o polisustituido en la posición 3, 4 ó 5 con R⁷, o representa un anillo tiofenilo que puede estar mono o polisustituido con R⁸,
 - R², R⁷, R⁸ e Y tienen los significados generales, preferidos, particularmente preferidos o muy particularmente preferidos dados anteriormente y
 - X¹ representa cloro, bromo, yodo;
- con la condición de que se excluyan 3-bromo-5,6-dihidro-2-fenil-4H-pirrol[1,2-b]pirazol, 3-yodo-2-fenilpirazolo[1,5-c]pirimidin-7(6H)-tionea y 3-bromo-2-fenilpirazolo[1,5-c]pirimidin-7(6H)-tionea.

Son nuevos y también parte de la invención, compuestos de fórmula general (VIIx)



en la que los símbolos tienen los siguientes significados:

- A² representa un anillo tiofenilo, opcionalmente mono- o polisustituido o representa un anillo fenilo que está opcionalmente mono- o polisustituido en la posición 3-, 4- ó 5-, en el que los sustituyentes se seleccionan entre el grupo que consiste en F, Cl, Br, I, ciano, metilo, etilo, isopropilo,

n-propilo, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, pentafluoroetilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, isopropoxi;

- Y, junto con el átomo de nitrógeno adyacente, "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros seleccionado entre el grupo que consiste en H-2, H-3, H-4, H-5, H-6, H-7, H-8 y H-9 mostrado en el Esquema 1, en el que s es un número de 0 a 4;
- R^2 tiene los significados particularmente preferidos o muy particularmente preferidos dados anteriormente.

Además, la presente invención se refiere a una composición para protección de cultivo para el control de hongos no deseados y para la reducción de micotoxinas en plantas y partes de plantas en la que la composición comprende al menos uno de los derivados de piridinilpirazol bicíclicos de la fórmula (I). Preferentemente, son composiciones fungicidas que comprenden aditivos, disolventes, transportadores, tensioactivos o expansores agrícolamente aceptables.

Además, la invención se refiere a un procedimiento para controlar microorganismos no deseados y para reducir las micotoxinas en plantas y partes de plantas, que se caracteriza porque los derivados de piridinilpirazol bicíclicos de la fórmula (I) de acuerdo con la invención se aplican a los hongos fitopatógenos y/o su hábitat.

De acuerdo con la invención, un vehículo es una sustancia natural o sintética, orgánica o inorgánica con la que se mezclan los compuestos activos o se unen para mejorar su aplicabilidad, en particular para aplicar a plantas o a partes de plantas o semillas. El vehículo, que puede ser sólido o líquido, es generalmente

inerte y debe ser adecuado para usar en agricultura.

Vehículos sólidos o líquidos adecuados son: por ejemplo sales de amonio y minerales naturales molidos, tales como caolinas, arcillas, talco, creta, cuarzo atapulgita, montmorillonita o tierra de diatomeas, y materiales sintéticos molidos, tales como sílice finamente dividida, alúmina y silicatos naturales o sintéticos, resinas, ceras, fertilizantes sólidos, agua, alcoholes, especialmente butanol, disolventes orgánicos, aceites minerales y vegetales, así como sus derivados. También se pueden usar mezclas de dichos vehículos. Vehículos sólidos adecuados para gránulos son: por ejemplo, rocas naturales molidos y fraccionados, tales como calcita, mármol, piedra pómez, sepiolita, dolomita, y gránulos sintéticos de harinas inorgánicas u orgánicas y también gránulos de material orgánico, tal como serrín, cáscara de coco, mazorcas de maíz y tallos de tabaco.

Expansores o vehículos gaseosos licuados adecuados son líquidos que son gaseosos a temperatura ambiente y a presión atmosférica, por ejemplo propelentes de aerosoles, tales como hidrocarburos halogenados y, también, butano, propano, nitrógeno y dióxido de carbono.

En la formulación pueden usarse agentes de adherencia tales como carboximetilcelulosa y polímeros naturales y sintéticos en forma de polvos, gránulos y matrices, tales como goma arábica, alcohol de polivinilo, acetato de polivinilo o, si no, fosfolípidos naturales tales como cefalinas y lecitinas, y fosfolípidos sintéticos. Otros aditivos posibles son aceites minerales y vegetales.

Si el expansor que se usa es agua, también es posible usar, por ejemplo, disolventes orgánicos como codisolventes. Disolventes líquidos adecuados son, esencialmente: compuestos aromáticos, tales como xileno, tolueno o

alquilnaftalenos, compuestos aromáticos clorados o hidrocarburos alifáticos clorados, tales como clorobencenos, cloroetilenos o diclorometano, hidrocarburos alifáticos, tales como ciclohexano o parafinas, por ejemplo, fracciones de aceites minerales, alcoholes tales como butanol o glicol y sus éteres y ésteres, cetonas, 5 tales como acetona, metiletilcetona, metilisobutilcetona o ciclohexanona, disolventes fuertemente polares, tales como dimetilformamida y dimetilsulfóxido y también agua.

Las composiciones de acuerdo con la invención pueden comprender adicionalmente otros componentes, tales como, por ejemplo, tensioactivos. 10 Tensioactivos adecuados son agentes emulsionantes y/o formadores de espuma, dispersantes o humectantes que tienen propiedades iónicas o no iónicas, o mezclas de estos tensioactivos. Ejemplos de estos son sales de ácido poli acrílico, sales de ácido lignosulfónico, sales de ácido fenosulfónico o ácido naftalenosulfónico, policondensados de óxido de etileno con alcoholes grasos o 15 con ácidos grasos o con aminas grasas, fenoles sustituidos (preferentemente alquilfenoles o arilfenoles), sales de ésteres sulfosuccínicos, derivados de taurina (preferentemente alquiltauratos), ésteres fosfóricos de alcoholes o fenoles polioxietilados, ésteres grasos de polioles, y derivados de los compuestos que contienen sulfatos, sulfonatos y fosfatos; por ejemplo éteres de alquilarilpoliglicol, 20 alquilsulfonatos, alquilsulfatos, arilsulfonatos, hidrolisados proteicos, licores de residuos de lignosulfito y metilcelulosa. Se requiere la presencia de un tensioactivo si uno de los compuestos activos y/o uno de los vehículos inertes es insoluble en agua y cuando la aplicación tiene lugar en agua. La proporción de tensioactivos varía entre 5 y 40 por ciento en peso de la composición de acuerdo con la 25 invención.

Es posible usar colorantes tales como pigmentos inorgánicos, por ejemplo óxido de hierro, óxido de titanio y azul de Prusia, y colorantes orgánicos, tales como colorantes de alizarina, colorantes de azo y colorantes de ftalocianina metálicos, y oligonutrientes tales como sales de hierro, manganeso, boro, cobre, 5 cobalto, molibdeno y cinc.

Si fuera apropiado, pueden estar presentes otros componentes adicionales, por ejemplo coloides protectores, aglutinantes, adhesivos, espesantes, sustancias tixotrópicas, penetrantes, estabilizantes, agentes secuestrantes, formadores de 10 aditivo sólido o líquido de uso habitual para fines de formulación.

Las formulaciones, en general, comprenden entre el 0,05 y el 99 % en peso, el 0,01 y el 98 % en peso, preferentemente entre el 0,1 y el 95 % en peso, particularmente preferentemente entre el 0,5 y el 90 % del compuesto activo, muy particularmente preferentemente entre el 10 y el 70 % en peso.

15 Los compuestos activos o composiciones de acuerdo con la invención pueden usarse como tales o, dependiendo de sus propiedades físicas y/o químicas respectivas, en forma de sus formulaciones o formas de uso preparadas a partir de ellas, tales como aerosoles, cápsulas, suspensiones, concentrados de niebla fría, concentrados de niebla caliente, gránulos encapsulados, gránulos 20 finos, concentrados fluidizables para el tratamiento de semillas, soluciones listas para su uso, polvos espolvoreables, concentrados emulsionables, emulsiones de aceite en agua, emulsiones de agua en aceite, macrogránulos, microgránulos, polvos dispersables en aceite, concentrados fluidizables miscibles en aceite, líquidos miscibles en aceite, espumas, pastas, semillas recubiertas de pesticida, 25 concentrados de suspensiones, concentrados de suspoemulsión, concentrados

solubles, suspensiones, polvos humectables, polvos solubles, agentes de espolvoreo y gránulos, gránulos o comprimidos hidrosolubles, polvos hidrosolubles para el tratamiento de semillas, polvos humectables, productos naturales y sustancias sintéticas impregnadas con compuesto activo, y también, 5 microencapsulaciones en sustancias poliméricas y en materiales de recubrimiento para semillas y también formulaciones ULV de niebla caliente y de niebla fría.

Las formulaciones mencionadas se pueden preparar de un modo conocido per se, por ejemplo mezclando los compuestos activos con al menos un expansor, disolvente o diluyente, emulsionante, dispersante y/o aglutinante o fijante, agente 10 humectante, repelente de agua habituales, si es adecuado desecantes y estabilizantes de UV y, si es adecuado, tintes y pigmentos, antiespumantes, conservantes, espesantes secundarios, adhesivos, giberelinas y, también, adyuvantes de procesamiento adicionales.

Las composiciones de acuerdo con la invención no sólo incluyen 15 formulaciones que ya están listas para su uso y que pueden aplicarse con un aparato adecuado a la planta o la semilla, sino también concentrados comerciales que deben diluirse con agua antes de su uso.

Los compuestos activos de acuerdo con la invención pueden estar presentes como tales o en sus formulaciones (comerciales) y en las formas de 20 uso, preparadas a partir de estas formulaciones, como una mezcla con otros compuestos activos (conocidos), tales como insecticidas, atrayentes, esterilizantes, bactericidas, acaricidas, nematocidas, fungicidas, sustancias reguladoras del crecimiento, herbicidas, fertilizantes, protectores selectivos y/o semioquímicos.

25 El tratamiento de acuerdo con la invención de las plantas y partes de

plantas con las composiciones o compuestos activos se lleva a cabo directamente o mediante acción sobre las zonas que las rodean, hábitat o espacio de almacenamiento usando procedimientos de tratamiento habituales, mediante, por ejemplo, goteo, pulverización, atomización, irrigación, evaporación, espolvoreado, 5 niebla, transmisión, formación de espuma, pintado, diseminación, riego (empapamiento), irrigación por goteo y, en el caso de material de propagación, en particular en el caso de semillas, además en forma de polvo para un tratamiento seco de las semillas, una solución para tratamiento de semillas, un polvo hidrosoluble para tratamiento con suspensión espesa, mediante incrustación, 10 mediante recubrimiento con una o más capas etc. Se da preferencia a la aplicación por goteo, pulverización, atomización, irrigación, evaporación, espolvoreado, niebla, transmisión, formación de espuma, pintado, diseminación, riego (empapamiento) e irrigación por goteo. Además es posible aplicar los compuestos activos mediante el procedimiento de volumen ultrabajo o inyectar la 15 preparación del compuesto activo o el propio compuesto activo en el suelo.

La invención incluye además un procedimiento para tratar semillas.

Además, la invención se refiere a semillas tratadas de acuerdo con uno de los procedimientos descritos en el párrafo anterior. Las semillas de acuerdo con la invención se usan en procedimientos para la protección de semillas de hongos 20 indeseados. En estos procedimientos, se usan semillas tratadas con al menos un compuesto activo de la invención.

Los compuestos activos o composiciones de acuerdo con la invención son también adecuados para tratar semillas. Una gran parte del daño a las plantas de cultivo causado por organismos dañinos se desencadena por la infección de la 25 semilla durante su almacenamiento o después de la siembra, así como durante y

después de la germinación de la planta. Esta fase es particularmente crítica, ya que las raíces y los brotes de la planta en crecimiento son particularmente sensibles, e incluso el daño más pequeño puede desembocar en la muerte de la planta. En consecuencia, existe un gran interés en proteger la semilla y la planta

5 en germinación usando composiciones apropiadas.

El control de hongos fitopatógenos mediante el tratamiento de semillas de plantas se conoce desde hace mucho tiempo y es objeto de continuas mejoras. Sin embargo, el tratamiento de semillas conlleva una serie de problemas que no siempre pueden resolverse de un modo satisfactorio. Así, es deseable desarrollar

10 procedimientos para proteger la semilla y la planta en germinación que prescindan, o al menos reduzcan considerablemente, de la aplicación tradicional de agentes fitoprotectores después de la siembra o después de la emergencia de las plantas. Es deseable, además, optimizar la cantidad de compuesto activo a emplear de tal modo que se proporcione la protección óptima para la semilla y la

15 planta en germinación frente al ataque de hongos fitopatógenos, pero no se dañe la planta en sí con el compuesto activo que se emplea. En particular, los procedimientos para el tratamiento de semillas deben tener en cuenta las propiedades fungicidas intrínsecas de las plantas transgénicas para lograr una protección óptima de las semillas y de las plantas en germinación empleando un

20 mínimo de composiciones de protección de cultivos.

Por tanto, la presente invención también se refiere a un procedimiento para proteger semillas y plantas en germinación frente al ataque de hongos fitopatógenos tratando la semilla con una composición de acuerdo con la invención. La invención se refiere también al uso de las composiciones de acuerdo

25 con la invención para tratar semillas para proteger la semilla y la planta en

72

germinación frente a hongos fitopatógenos. Además, la invención se refiere a semillas tratadas con una composición de acuerdo con la invención para la protección frente a hongos fitopatógenos.

5 El control de hongos fitopatógenos que dañan las plantas en postemergencia se realiza principalmente tratando el suelo y las partes aéreas de las plantas con agentes fitoprotectores. Debido a la preocupación en relación con un posible impacto de los agentes fitoprotectores sobre el medio ambiente y la salud de seres humanos y animales, se están realizando esfuerzos para reducir la cantidad de sustancias activas que se aplican.

10 Una de las ventajas de la presente invención es que las propiedades sistémicas concretas de los compuestos activos y composiciones de acuerdo con la invención significan que el tratamiento de las semillas con estos compuestos activos y composiciones no sólo protege a la semilla en sí, sino también a las plantas resultantes tras la emergencia, de los hongos fitopatógenos. De este modo
15 puede evitarse el tratamiento inmediato de los cultivos en el momento de la siembra o poco después.

Se considera también una ventaja que los compuestos activos o las composiciones de acuerdo con la invención pueden usarse en particular también en semillas transgénicas en las que la planta que crece de estas semillas es capaz
20 de expresar una proteína que actúa contra plagas. Tratando dicha semilla con los compuestos activos o las composiciones de acuerdo con la invención, incluso mediante la expresión de, por ejemplo, proteínas insecticidas, se pueden controlar determinadas plagas. De modo sorprendente, puede observarse en este caso un efecto sinérgico que aumenta adicionalmente la eficacia de la protección frente al
25 ataque de plagas.

Las composiciones de acuerdo con la invención son adecuadas para proteger semillas de cualquier variedad de planta empleada en agricultura, en invernadero, en bosques o en horticultura y viticultura. En particular, esto toma la forma de semillas de cereales (tales como de trigo, cebada, centeno, triticale, mijo y avena), algodón, patatas, soja, arroz, patatas, girasol, judías, café, remolacha (por ejemplo remolacha azucarera y remolacha, forraje, colza, amapolas, aceitunas, coco, cacao, caña de azúcar, tabaco, hortalizas (tales como tomates, pepinos, cebollas y lechugas), césped y plantas ornamentales (véase también más adelante). El tratamiento de las semillas de cereales (tales como trigo, cebada, centeno, triticale y avena), maíz y arroz es de particular importancia.

Como también se describe más adelante, el tratamiento de semillas transgénicas con los compuestos activos o las composiciones de acuerdo con la invención es de particular importancia. Esto se refiere a semillas de plantas que contienen al menos un gen heterólogo que permite la expresión de un polipéptido o proteína que tiene propiedades insecticidas. El gen heterólogo en semillas transgénicas puede provenir, por ejemplo, de microorganismos de las especies *Bacillus*, *Rhizobium*, *Pseudomonas*, *Serratia*, *Trichoderma*, *Clavibacter*, *Glomus* o *Gliocladium*. Preferentemente, este gen heterólogo proviene de *Bacillus* sp., el producto génico que presenta actividad frente al taladrador del maíz europeo y/o al gusano de la raíz del maíz occidental. De modo particularmente preferente, el gen heterólogo proviene de *Bacillus thuringiensis*.

En el contexto de la presente invención, la composición de acuerdo con la invención se aplica a la semilla sola o en una formulación adecuada. Preferentemente, la semilla se trata en un estado en el que sea suficientemente estable para evitar daños durante el tratamiento. En general, la semilla se puede

tratar en cualquier punto temporal entre la recolección y la siembra. La semilla que se usa habitualmente se ha separado de la planta y se ha liberado de mazorcas, cáscaras, tallos, envoltorios, pelos o de la carne de los frutos. Así, es posible usar, por ejemplo, semillas que se han recolectado, limpiado y secado hasta un
5 contenido de humedad de menos de un 15 % en peso. De modo alternativo, es también posible usar semillas que se han tratado tras el secado, por ejemplo, con agua y después se han secado de nuevo.

Cuando se tratan semillas, debe tenerse cuidado, en general, de que la cantidad de la composición de acuerdo con la invención que se aplica a la semilla
10 y/o la cantidad de aditivos adicionales se elija de modo que la germinación de la semilla no se vea afectada de forma adversa, o de que no se dañe la planta resultante. Esto debe tenerse presente en particular en el caso de compuestos activos que puedan tener efectos fitotóxicos a determinadas tasas de aplicación.

Las composiciones de acuerdo con la invención pueden aplicarse
15 directamente, es decir, sin contener ningún otro componente y sin haberlas diluido. En general, es preferible aplicar las composiciones a las semillas en forma de una formulación adecuada. Los expertos en la técnica conocen formulaciones y procedimientos adecuados para el tratamiento de semillas, que se describen, por ejemplo, en los documentos siguientes: US 4.272.417 A, US 4.245.432 A, US
20 4.808.430 A, US 5.876.739 A, US 2003/0176428 A1, WO 2002/080675 A 1, WO 2002/028186 A2.

Los compuestos activos que se pueden usar de acuerdo con la invención se pueden convertir en las formulaciones para cubrir semillas habituales, tales como soluciones, emulsiones, suspensiones, polvos, espumas, pastas u otras
25 composiciones de recubrimiento para semillas, y también formulaciones ULV.

Estas formulaciones se preparan de un modo conocido mezclando los compuestos activos con aditivos habituales tales como, por ejemplo, expansores habituales y, también, disolventes o diluyentes, colorantes, agentes humectantes, dispersantes, emulsionantes, antiespumantes, conservantes, espesantes secundarios, adhesivos, giberelinas y, también, agua.

Colorantes que pueden estar presentes en las formulaciones para cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención son todos los colorantes habituales para tales fines. En este contexto no solo se pueden usar pigmentos, de poca solubilidad en agua, sino también tintes, que son solubles en agua. Ejemplos que se pueden mencionar incluyen los colorantes conocidos con los nombres rodamina B, C.I. Pigmento rojo 112 y Disolvente Rojo C.I. 1.

Agentes humectantes adecuados que pueden estar presentes en las formulaciones para cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención son todas las sustancias que estimulan la humidificación y que se usan de forma convencional para la formulación de compuestos agroquímicamente activos. Se da preferencia al uso de alquilnaftalenosulfonatos, tales como diisopropil- o diisobutilnaftalenosulfonatos.

Agentes dispersantes y/o emulsionantes adecuados que pueden estar presentes en las formulaciones para cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención son todos los dispersantes no iónicos, aniónicos y catiónicos usados convencionalmente para la formulación de compuestos agroquímicamente activos. Se da preferencia al uso de dispersantes no iónicos o aniónicos o a mezclas dispersantes no iónicos o aniónicos. Dispersantes no iónicos adecuados que se pueden mencionar son, en particular, polímeros de bloque de óxido de etileno/óxido de propileno, éteres de alquilfenolpoliglicol y

éteres de triestirilfenolpoliglicol, y sus derivados fosfatados o sulfatados. Dispersantes aniónicos adecuados son, en particular, lignosulfonatos, sales de ácido poliacrílico y condensados de arilsulfonato/formaldehído.

Antiespumantes que pueden estar presentes en las formulaciones para
5 cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención son todas las sustancias inhibidoras de la espuma que se usan de forma convencional para la formulación de compuestos agroquímicamente activos. Preferentemente se pueden usar antiespumantes de silicona y estearato de magnesio.

Conservantes que pueden estar presentes en las formulaciones para cubrir
10 semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención son todas las sustancias que se pueden usar para tales fines en composiciones agroquímicas. A modo de ejemplo se pueden mencionar diclorofeno y alcohol bencílico semiformal.

Espesantes secundarios que pueden estar presentes en las formulaciones para cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención son todas las
15 sustancias que se pueden usar para tales fines en composiciones agroquímicas. Se prefieren los derivados de celulosa, derivados de ácido acrílico, goma xantana, arcillas modificadas y sílice finamente dividida.

Adhesivos que pueden estar presentes en las formulaciones para cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención son todos los
20 aglutinantes adecuados que se pueden usar para tales fines en productos para cubrir semillas. Se pueden mencionar como preferidas polivinilpirrolidona, alcohol polivinílico y tilosa.

Giberelinas que pueden estar presentes en las formulaciones para cubrir semillas que se van a usar de acuerdo con la invención son, preferentemente, las
25 giberelinas A1, A3 (= ácido giberélico), A4 y A7; se da particular preferencia al uso

de ácido giberélico. Las giberelinas son conocidas (véase R. Wegler "Chemie der Pflanzenschutz- and Schädlingsbekämpfungsmittel" [Chemistry of Crop Protection Agents and Pesticides], Vol. 2, Springer Verlag, 1970, pp. 401-412).

5 Las formulaciones para cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención se pueden usar para el tratamiento de una amplia gama de semillas, incluidas las semillas de plantas transgénicas, directamente o habiéndose diluido previamente en agua. En este contexto, también se pueden producir efectos sinérgicos adecuados en cooperación con las sustancias formadas mediante expresión.

10 Todos los mezcladores que se pueden usar de forma convencional para la operación de cubrir semillas son adecuados para tratar las semillas con las formulaciones para cubrir semillas que se pueden usar de acuerdo con la invención o con las preparaciones preparadas a partir de ellas mediante la adición de agua. Específicamente se sigue un procedimiento durante la operación de
15 cubrir semillas en el que la semilla se introduce en un mezclador, se añade la cantidad específica deseada de formulaciones para cubrir semillas, como tales o tras haberlas diluido con agua previamente, y todo se mezcla hasta que la formulación se distribuye uniformemente sobre la semilla. Si es adecuado, a esto le sigue un proceso de secado.

20 Las composiciones o los compuestos activos de acuerdo con la invención tienen una fuerte actividad fungicida y se pueden usar para controlar los hongos indeseados en la protección de cosechas y en la protección de materiales.

Los derivados de piridinilpirazol bicíclicos de acuerdo con la invención se pueden usar en protección de cultivos, los fungicidas se pueden usar para
25 controlar plasmodioforomicetos, oomicetos, citridiomicetos, cigomicetos,

ascomicetos, basidiomicetos y deuteromicetos.

Las composiciones fungicidas de acuerdo con la invención pueden usarse para el control curativo o protector de hongos fitopatógenos. En consecuencia, la invención se refiere también a procedimientos curativos y protectores para
5 controlar hongos fitopatógenos usando los compuestos activos o composiciones de acuerdo con la invención, que se aplican a las semillas, plantas o partes de plantas, el fruto o el suelo en el que crecen estas plantas.

Las composiciones de acuerdo con la invención para controlar hongos fitopatógenos en protección de cosechas comprenden una cantidad eficaz, pero
10 no fitotóxica, de los compuestos activos de acuerdo con la invención. "Cantidad eficaz pero no citotóxica" significa una cantidad de la composición de acuerdo con la invención que es suficiente para controlar la enfermedad fúngica de la planta de un modo satisfactorio o para erradicar la enfermedad fúngica completamente y que, al mismo tiempo, no produce ningún síntoma significativo de fitotoxicidad. En
15 genera, esta tasa de aplicación puede variar dentro de unos límites relativamente amplios. Depende de una pluralidad de factores, por ejemplo del hongo que se va a controlar, la planta, las condiciones climáticas y los ingredientes de las composiciones de acuerdo con la invención.

El hecho de que los compuestos activos son bien tolerados por las plantas
20 a las concentraciones requeridas para controlar enfermedades de plantas permite que el tratamiento de las partes por encima de la tierra, de las reservas de propagación y de las semillas, y del suelo.

Todas las plantas y partes de plantas se pueden tratar de acuerdo con la invención. En el presente documento debe entenderse que plantas se refiere a
25 todas las plantas y poblaciones de plantas, tales como plantas silvestres deseadas

y no deseadas o plantas de cultivo (incluidas plantas de cultivo naturales). Las plantas de cultivo pueden ser plantas que pueden obtenerse mediante los procedimientos de cultivo y optimización convencionales o por procedimientos biotecnológicos y de ingeniería genética o mediante combinaciones de estos procedimientos, incluidas las plantas transgénicas e incluidas las variedades de plantas de cultivo que pueden estar o no protegidas por los derechos de propiedad varietal. Con partes de las plantas debe entenderse que significa todas las partes y órganos de las plantas por encima y debajo de la tierra, tales como brotes, hojas, flores y raíces, pudiendo mencionarse como ejemplos las hojas, espinas, tallos, troncos, flores, cuerpos frutales, frutos, semillas, raíces, tubérculos y rizomas. Las partes de las plantas también incluyen el material recolectado y el material de propagación vegetativa y por generación, por ejemplo plantones, tubérculos, rizomas, esquejes y semillas.

Los compuestos activos de la presente invención son adecuados para la protección de plantas y órganos de plantas, para incrementar los rendimientos de la recolección, para mejorar la calidad del cultivo cosechado, al tiempo que son bien tolerados por las plantas, que tienen una toxicidad favorable para las especies de sangre caliente y que son ecológicos para el ambiente. Preferentemente se pueden usar como agentes fitoprotectores. Son activos contra las especies normalmente sensibles y resistentes, t también contra todas o algunas etapas del desarrollo.

Las plantas siguientes pueden mencionarse como plantas que pueden tratarse de acuerdo con la invención: algodón, lino, vides, productos hortofrutícolas, tales como *Rosaceae sp.* (por ejemplo frutas pomáceas, tal como manzanas y peras, pero también frutas de carozo, tal como albaricoques, cerezas,

- almendras y melocotones y fruta roja como las fresas), *Ribesioideae sp.*, *Juglandaceae sp.*, *Betulaceae sp.*, *Anacardiaceae sp.*, *Fagaceae sp.*, *Moraceae sp.*, *Oleaceae sp.*, *Actinidaceae sp.*, *Lauraceae sp.*, *Musaceae sp.* (por ejemplo árboles y plantaciones de plátanos), *Rubiaceae sp.* (por ejemplo café), *Theaceae sp.*, *Sterculiaceae sp.*, *Rutaceae sp.* (por ejemplo limones, naranjas y pomelo),
- 5 *Solanaceae sp.* (por ejemplo tomates), *Liliaceae sp.*, *Asteraceae sp.* (por ejemplo lechuga), *Umbelliferae sp.*, *Cruciferae sp.*, *Chenopodiaceae sp.*, *Cucurbitaceae sp.* (por ejemplo pepinos), *Alliaceae sp.* (por ejemplo puerro, cebollas), *Papilionaceae sp.* (por ejemplo guisantes); plantas de cultivo de gran importancia, tales como
- 10 *Gramineae sp.* (por ejemplo maíz, césped, cereales tales como trigo, centeno, arroz, cebada, avena, mijo y triticale), *Poaceae sp.* (por ejemplo azúcar de caña), *Asteraceae sp.* (por ejemplo girasol), *Brassicaceae sp.* (por ejemplo repollo, col lombarda, brócoli, coliflor, coles de bruselas, pak choi, colirábano, rábanos de jardín y también colza, mostaza, rúcula y berro), *Fabaceae sp.* (por ejemplo alubias,
- 15 cacahuetes), *Papilionaceae sp.* (por ejemplo soja), *Solanaceae sp.* (por ejemplo patatas), *Chenopodiaceae sp.* (por ejemplo remolacha azucarera, remolacha forrajera, acelga suiza, remolacha roja), plantas útiles y plantas ornamentales en jardín y bosque, y, en cada caso, variedades modificadas genéticamente de estas plantas.
- 20 Como se ha mencionado ya anteriormente, es posible tratar todas las plantas y sus partes de acuerdo con la invención. En una realización preferente, se tratan especies de plantas silvestres y variedades de plantas de cultivo, o aquellas que se obtienen mediante procedimientos de reproducción biológicos convencionales, tales como entrecruzamiento o fusión con protoplastos, y también
- 25 sus partes. En una realización preferida adicional, se tratan plantas transgénicas y

plantas de cultivo obtenidas mediante procedimientos de ingeniería genética, si fuera apropiado combinados con procedimientos convencionales (organismos genéticamente modificados) y sus partes. Los términos "partes" o "partes de plantas" o "partes de la planta" se han explicado anteriormente. De modo particularmente preferente, las plantas de variedades de cultivo que estén en cada caso disponibles comercialmente o en uso se tratan de acuerdo con la invención. Las variedades de plantas tienen que entenderse como plantas que tienen propiedades nuevas ("rasgos") y que se han obtenido mediante cultivos convencionales a través de mutagénesis o mediante técnicas de ADN recombinante. Pueden ser cultivos, variedades, bio o genotipos.

El procedimiento de tratamiento de acuerdo con la invención se puede usar en el tratamiento de organismos genéticamente modificados (OGM), por ejemplo plantas o semillas. Plantas genéticamente modificadas (o plantas transgénicas) son plantas en las que un gen heterólogo se ha integrado de forma estable en el genoma. La expresión "gen heterólogo" significa esencialmente un gen que se proporciona o monta fuera de la planta y, cuando se introduce en el genoma nuclear, cloroplástico o mitocondrial, da la nueva planta transformada o propiedades mejoradas agronómicas o de otro tipo mediante la expresión de una proteína o polipéptido de interés o mediante regulación por disminución o silenciamiento de otro(s) gen(es) que están presentes en la planta (usando, por ejemplo, tecnología antisentido, tecnología de cosupresión o tecnología de ARNi [ARN de interferencia]). Un gen heterólogo que se localiza en el genoma también se denomina transgen. Un transgen que se define por su localización concreta en el genoma de la planta se denomina un acontecimiento de transformación o transgénico.

Dependiendo de las especies de plantas o de las plantas de cultivo, su localización y condiciones de crecimiento (tierra, clima, periodo de vegetación, dieta), el tratamiento de acuerdo con la invención puede provocar también efectos superaditivos ("sinérgicos"). Por tanto, son posibles, por ejemplo, los efectos

5 siguientes que superan los efectos que realmente cabe esperar: tasas de aplicación reducidas y/o una ampliación del espectro de actividad y/o un aumento de la actividad de los compuestos activos y composiciones que pueden usarse de acuerdo con la invención, mejor crecimiento de la planta, mayor tolerancia a temperaturas altas o bajas, mayor tolerancia a la sequía o al contenido en sales

10 del agua o la tierra, mayor rendimiento de floración, mayor facilidad de recolección, maduración acelerada, mayores rendimientos de la cosecha, frutos más grandes, mayor altura de la planta, color de hoja más verde, floración precoz, mejor calidad y/o un mayor valor nutricional de los productos recolectados, mejor estabilidad de almacenamiento y/o capacidad de procesamiento de los productos

15 recolectados, mayor concentración de azúcar dentro de los frutos, mejor estabilidad de almacenamiento y/o procesabilidad de los productos recolectados.

A ciertas tasas de aplicación, las combinaciones de compuesto activo de acuerdo con la invención también pueden tener un efecto de refuerzo en plantas. De acuerdo con esto, son adecuadas para movilizar el sistema de defensa de la

20 planta contra ataques de hongos fitopatógenos y/o microorganismos y/o virus no deseados. Esta puede ser, si es adecuado, una de las razones para la mayor actividad de las combinaciones de acuerdo con la invención, por ejemplo contra hongos. Se tiene que entender que sustancias de refuerzo de plantas (inductoras de resistencia) significa, en el presente contexto, también las sustancias o

25 combinaciones de sustancias que son capaces de estimular el sistema de defensa

de las plantas de un modo tal que, cuando se inocula después hongos fitopatógenos no deseados, las plantas tratadas muestran un grado considerable de resistencia a estos hongos fitopatógenos no deseados. Por tanto, las sustancias de acuerdo con la invención pueden usarse para proteger plantas
5 contra el ataque de los patógenos mencionados durante un periodo de tiempo determinado después del tratamiento. El periodo durante el que se proporciona protección se extiende, generalmente, de 1 a 10 días, preferentemente de 1 a 7 días, después del tratamiento de las plantas con los compuestos activos.

Las plantas y variedades de plantas que preferentemente se tratan de
10 acuerdo con la invención incluyen todas las plantas que tienen material genético que imparte rasgos útiles particularmente ventajosos a estas plantas (obtenidas mediante cultivo y/o medios biotecnológicos).

Las plantas y variedades de plantas que también se tratan preferentemente de acuerdo con la invención son resistentes contra uno o más factores de estrés
15 bióticos, es decir dichas plantas tienen una defensa mejor contra plagas animales y de microbios, tales como contra nematodos, insectos, ácaros, hongos fitopatógenos, bacterias, virus y/o viroides.

Las plantas y variedades de plantas que también pueden tratarse de acuerdo con la invención son las plantas que son resistentes a uno o más factores
20 de estrés abióticos. Las condiciones de estrés abióticas pueden incluir, por ejemplo, sequía, exposición a temperaturas frías, exposición a calor, estrés osmótico, inundaciones, incremento de la salinidad del suelo, incremento de la exposición a minerales, exposición a ozono, exposición a luz fuerte, disponibilidad limitada de los nutrientes de nitrógeno, limitada disponibilidad de nutrientes de
25 fósforo o evitación de sombras.

- Las plantas y variedades de plantas que también pueden tratarse de acuerdo con la invención son las plantas que se caracterizan por mayores características de rendimiento. El mayor rendimiento en dichas plantas puede ser el resultado de, por ejemplo, mejor fisiología, crecimiento y desarrollo de la planta,
- 5 tal como eficiencia del uso de agua, eficiencia de retención de agua, mejor uso de nitrógeno, mayor asimilación de carbono, mejor fotosíntesis, incremento de la eficiencia de germinación y maduración acelerada. El rendimiento puede además verse afectado por una arquitectura de la planta mejorada (bajo condiciones de estrés o de no estrés), incluyendo floración temprana, controles de la floración
- 10 para la producción de semillas híbridas, fortaleza de la plántula, tamaño de la planta, número y separación de los internodios, crecimiento de las raíces, tamaño de las semillas, tamaño de los frutos, tamaño de las vainas, número de vainas o espigas, número de semillas por vaina o espiga, peso de las semillas, relleno aumentado de las semillas, reducción de la dispersión de semillas, reducción de
- 15 roturas de las vainas, así como resistencia al encamado. Otros rasgos del rendimiento incluyen la composición de las semillas, tales como el contenido en hidratos de carbono, el contenido en proteínas, el contenido y la composición en aceite, El valor nutricional, la reducción de los compuestos antinutricionales, mejor procesabilidad y mejor estabilidad durante el almacenamiento.
- 20 Las plantas que se pueden tratar de acuerdo con la invención son plantas híbridas que ya expresan las características de heterosis, o efecto híbrido, que tiene como resultado, generalmente, mayores rendimiento, vigor, salud y resistencia frente a los factores de estrés bióticos o abióticos. Tales plantas se producen normalmente cruzando una línea parental endogámica estéril
- 25 masculina (progenitor femenino) con otra línea parental endogámica fértil

masculina (progenitor masculino). Las semillas híbridas se cosechan de forma típica de las plantas estériles masculinas y se venden a los reproductores. Las plantas estériles masculinas pueden producirse ocasionalmente (por ejemplo el maíz) mediante despenechado (es decir, eliminación mecánica de los órganos reproductores o de las flores masculinas), pero, de modo más típico, la esterilidad masculina es el resultado de determinantes genéticos en el genoma de las plantas. En este caso, y especialmente cuando se trate de las semillas del producto deseado que hay que cosechar a partir de las plantas híbridas, es útil, normalmente, asegurar que se restaura por completo la fertilidad masculina en las plantas híbridas, las cuales contienen determinantes genéticos responsables de la esterilidad masculina. Esto puede conseguirse asegurándose de que los progenitores masculinos posean los genes de restauración de la fertilidad apropiados que pueden restaurar la fertilidad masculina en plantas híbridas que contienen los determinantes genéticos responsables de la esterilidad masculina.

En el citoplasma pueden localizarse determinantes genéticos de esterilidad masculina. Ejemplos de esterilidad masculina citoplásmica (CMS) se describen por ejemplo en las especies de Brassica. Sin embargo, también pueden localizarse determinantes genéticos de esterilidad masculina en el genoma nuclear. También se pueden obtener plantas estériles masculinas con procedimientos de biotecnología vegetal, tales como ingeniería genética. En el documento WO 89/10396 se describe un modo particularmente útil de obtención de plantas estériles masculinas, en el que, por ejemplo, se expresa selectivamente una ribonucleasa como una barnasa en las células del tapete en los estambres. La fertilidad puede restaurarse por expresión en las células del tapete de un inhibidor de ribonucleasa tal como Barstar.

Las plantas o las variedades de cultivos de plantas (obtenidas por procedimientos de biotecnología de plantas tales como ingeniería genética) que se pueden tratar de acuerdo con la invención son plantas tolerantes a herbicidas, es decir plantas hechas tolerantes a uno o más herbicidas dados. Tales plantas
5 pueden obtenerse bien mediante transformación genética o mediante selección de plantas que contengan una mutación que confiera tal tolerancia a herbicidas.

Plantas tolerantes a herbicidas son por ejemplo plantas tolerantes al glifosato, es decir, plantas que se han hecho tolerantes al herbicida glifosato o a sales del mismo. Por ejemplo, las plantas tolerantes a glifosato pueden obtenerse
10 mediante la transformación de la planta con un gen que codifica la enzima 5-enolpiruvilshikimato-3-fosfato sintasa (EPSPS). Ejemplos de tales genes EPSPS son el gen *aroA* (mutante CT7) de la bacteria *Salmonella typhimurium*, el gen CP4 de la bacteria *Agrobacterium sp.*, los genes que codifican una EPSPS de la petunia, una EPSPS del tomate o una EPSPS de la eleusine. También puede ser
15 una EPSPS mutada. Las plantas tolerantes al glifosato también pueden obtenerse expresando un gen que codifica una enzima glifosato oxidorreductasa. Las plantas tolerantes al glifosato también pueden obtenerse expresando un gen que codifica una enzima glifosato acetiltransferasa. Las plantas tolerantes al glifosato pueden también obtenerse seleccionando plantas que contienen mutaciones naturales de
20 los genes mencionados anteriormente. Otras plantas resistentes a herbicidas son por ejemplo plantas, que se han hecho tolerantes a herbicidas que inhiben la enzima glutaminsintasa, tales como bialafos, fosfinotricina o glufosinato. Tales plantas pueden obtenerse expresando una enzima que desintoxique el herbicida o una enzima glutamina sintasa mutante que es resistente a la inhibición. Tal enzima
25 desintoxicante eficaz es, por ejemplo, una enzima que codifica la fosfinotricina

acetiltransferasa (tal como la proteína pat o la proteína bar de especies de, por ejemplo, estreptomicas). Se han descrito plantas que expresan una fosfinotricina acetiltransferasa exógena.

Otras plantas tolerantes a herbicidas son también las plantas que se han
5 hecho tolerantes a herbicidas que inhiben la enzima hidroxifenilpiruvato
dioxigenasa (HPPD). Las hidroxifenilpiruvato dioxigenasas son enzimas que
catalizan la reacción en la que el para-hidroxifenilpiruvato (HPP) se transforma en
homogentisato. Se pueden transformar plantas tolerantes a inhibidores de HPPD
con un gen que codifique una enzima HPPD resistente de origen natural o un gen
10 que codifique una enzima HPPD mutada. También puede obtenerse tolerancia
frente a inhibidores de HPPD transformando plantas con genes que codifican
ciertas enzimas que posibilitan la formación de homogentisato a pesar de la
inhibición de la enzima nativa de HPPD por medio del inhibidor HPPD. La
tolerancia de plantas a los inhibidores HPPD también puede mejorarse mediante
15 la transformación de plantas que adicionalmente a un gen que codifica una enzima
tolerante al HPPD, tienen un gen que codifica una enzima prefenato
dehidrogenasa.

Otras plantas resistentes a herbicidas son plantas que se han hecho
tolerantes a los inhibidores de la acetolactato sintasa (ALS). Los inhibidores de la
20 ALS conocidos incluyen, por ejemplo, sulfonilurea, imidazolinona,
triazolopirimidinas, pirimidinilo(tio)benzoatos y/o herbicidas de
sulfonilaminocarbonil-triazolinona. Se sabe que diferentes mutaciones en la
enzima ALS (también conocida como ácido acetohidroxi sintasa, AHAS) confieren
tolerancia a diversos herbicidas o grupos de herbicidas. En la publicación
25 internacional WO 1996/033270 se ha descrito la producción de plantas tolerantes

a la sulfonilurea y de plantas tolerantes a la imidazolinona. También se han descrito otras plantas tolerantes a la sulfonilurea y a la imidazolinona, por ejemplo en el documento WO 2007/024782.

5 Pueden obtenerse otras plantas tolerantes a imidazolinona y/o sulfonilurea mediante mutagénesis inducida, mediante selección en cultivos celulares en presencia del herbicida o mediante cultivo de mutación.

10 Las plantas o las variedades de cultivos de plantas (obtenidas por procedimientos de biotecnología de plantas tales como ingeniería genética) que pueden tratarse también de acuerdo con la invención son plantas transgénicas resistentes a insectos, es decir plantas hechas resistentes a ataque por ciertos insectos objetivo. Tales plantas pueden obtenerse mediante transformación genética o mediante selección de plantas que contienen una mutación que confiere tal resistencia a insectos.

15 En el presente contexto, el término "planta transgénica resistente a insectos" incluye cualquier planta que contiene al menos un transgén que comprende una secuencia codificante que codifique:

- 1) una proteína cristalina insecticida de *Bacillus thuringiensis* o una porción insecticida de la misma, tal como las proteínas cristalinas insecticidas que se enumeran en Internet en el sitio:
20 http://www.lifesci.sussex.ac.uk/Home/Neil_Crickmore/Bt/, o porciones insecticidas de las mismas, por ejemplo proteínas de las clases de proteínas Cry: Cry1Ab, Cry1Ac, Cry1F, Cry2Ab, Cry3Ae o bien Cry3Bb o porciones insecticidas de las mismas; o
- 2) una proteína cristalina de *Bacillus thuringiensis* o una porción de la misma
25 que tiene actividad insecticida en presencia de una segunda proteína cristalina

diferente de *Bacillus thuringiensis* o una porción de la misma, tal como la toxina binaria, que consta de las proteínas cristalinas Cy34 y Cy35; o

- 3) una proteína híbrida insecticida que comprende partes de dos proteínas cristalinas insecticidas diferentes de *Bacillus thuringiensis*, tal como un híbrido de las proteínas de 1) anterior o un híbrido de las proteínas de 2) anterior, por ejemplo la proteína Cry1A.105, producida del evento del maíz MON98034 (documento WO 2007/027777); o
- 4) una proteína de cualquiera de los puntos 1) a 3) anteriores, en la que algunos aminoácidos, en particular de 1 a 10, han sido reemplazados por otro aminoácido, para obtener una mayor actividad insecticida frente a una especie de insectos diana y/o para ampliar el espectro de especies de insectos diana afectadas y/o debido a las modificaciones inducidas en el ADN codificador durante la clonación o la transformación, tales como la proteína Cry3Bb1 en los eventos del maíz MON863 o MON88017 o la proteína Cry3A en el evento del maíz MIR 604;
- 5) una proteína insecticida secretada de *Bacillus thuringiensis* o *Bacillus cereus*, o una porción insecticida de la misma, tal como las proteínas insecticidas vegetativas (VIP), que se enumeran en: http://www.lifesci.sussex.ac.uk/Home/Neil_Crickmore/Bt/vip.html, por ejemplo proteínas de la clase de proteínas VIP3Aa; o
- 6) una proteína segregada por el *Bacillus thuringiensis* o el *Bacillus cereus*, que en presencia de una segunda proteína segregada por el *Bacillus thuringiensis* o el *B. cereus* tiene actividad insecticida, como la toxina binaria compuesta por las proteínas VIP1A y VIP2A;
- 7) una proteína híbrida insecticida, que comprende partes de diferentes

proteínas segregadas por el *Bacillus thuringiensis* o el *Bacillus cereus*, tales como un híbrido de la proteína de 1) anterior o en híbrido de la proteína de 2) anterior; o 8) una proteína de cualquiera de los puntos 1) a 3) anteriores, en la que algunos aminoácidos, en particular de 1 a 10, han sido reemplazados por otro aminoácido, para obtener una mayor actividad insecticida frente a una especie de insectos diana y/o para ampliar el espectro de especies de insectos diana afectados y/o debido a las modificaciones inducidas en el ADN codificador durante la clonación o la transformación (mientras todavía codifica una proteína insecticida), como la proteína VIP3Aa en el evento del algodón COT102.

10 Por supuesto, las plantas transgénicas resistentes a insectos, tal como se usa en el presente documento, también incluyen cualquier planta que comprende una combinación de genes que codifican las proteínas de algunas de las clases mencionadas anteriormente de 1 a 8. En una realización una planta resistente a insectos contiene más de un gen transgénico que codifica una proteína de acuerdo con cualquiera de las clases mencionadas anteriormente de 1 a 8, para 15 ampliar el espectro de especies de insectos diana afectados o para retrasar el desarrollo de una resistencia de los insectos frente a las plantas, usando diversas proteínas insecticidas para las mismas especies de insectos diana, que presentan sin embargo un modo de acción diferente, tal como la unión en diferentes sitios de 20 unión del receptor en el insecto.

Las plantas o las variedades de cultivos de plantas (obtenidas por procedimientos de biotecnología de plantas tales como ingeniería genética) que se pueden tratar también de acuerdo con la invención son tolerantes a tipos de estrés abiótico. Tales plantas pueden obtenerse bien mediante transformación genética o 25 mediante selección de plantas que contienen una mutación que confiere tal

resistencia al estrés. Plantas particularmente útiles con tolerancia a la tensión incluyen las siguientes:

- a. plantas que contienen un gen transgénico capaz de disminuir la expresión y/o la actividad del gen de la poli(ADP-ribosa) polimerasa (PARP) en las células vegetales o en las plantas.
 - b. plantas que contienen un gen transgénico que mejora la tolerancia al estrés, capaz de reducir la expresión y/o la actividad de genes de plantas o de células vegetales que codifican PARP;
 - c. plantas que contienen un gen transgénico que mejora la tolerancia al estrés que codifica una enzima funcional de plantas de la ruta de biosíntesis de salvamento de nicotinamida adenina dinucleótido, que incluye nicotinamidasas, nicotinato fosforribosiltransferasa, ácido nicotínico mononucleótido adeniltransferasa, nicotinamida adenina dinucleotidosintetasa o nicotinamida fosforribosiltransferasa.
- Plantas o variedades de plantas (que se han obtenido por procedimientos de biotecnología vegetal, como la ingeniería genética), que también se pueden tratar de acuerdo con la invención, presentan una cantidad, calidad y/o capacidad de almacenamiento del producto cosechado alterada y/o propiedades alteradas de ingredientes específicos del producto cosechado, tales como, por ejemplo:
- 1) plantas transgénicas, que sintetizan un almidón modificado, que está alterado con respecto a sus rasgos físicoquímicos, en particular el contenido en amilosa o la relación amilosa/amilopectina, el grado de ramificación, la longitud media de las cadenas, la distribución de las cadenas laterales, el comportamiento de la viscosidad, la resistencia del gel, el tamaño de grano de almidón y/o la morfología del almidón, en comparación con el almidón sintetizado en células de

plantas o en plantas de tipo silvestre, de tal manera que este almidón modificado es más adecuado para aplicaciones especiales.

- 2) Plantas transgénicas que sintetizan polímeros de hidratos de carbono distintos al almidón o polímeros de hidratos de carbono distintos al almidón con propiedades alteradas en comparación con plantas de tipo silvestre sin modificación genética. Ejemplos son plantas que producen polifruktosa, en particular de los tipos inulina y levano, plantas que producen 1,4-alfa-glucano, plantas que producen 1,4-alfa-glucano 1,6-alfa ramificado y plantas que producen alternano.

- 3) Plantas transgénicas que producen hialuronano.

Las plantas o variedades de plantas (obtenidas por procedimientos de biotecnología vegetal, tales como la ingeniería genética), que se pueden tratar también de acuerdo con la invención, son plantas, tales como plantas de algodón, con características de fibra alteradas. Tales plantas pueden obtenerse mediante transformación genética o mediante selección de plantas que contengan una mutación que confiera tales características de fibra alteradas e incluyen

- a) plantas, tales como plantas de algodón, que contienen una forma alterada de genes de celulosasintasa,
- b) plantas, tales como plantas de algodón, que contienen una forma alterada de los ácidos nucleicos homólogos rsw2 o rsw3;
- c) plantas, tales como plantas de algodón, con una expresión incrementada de sacarosa fosfatosintasa;
- d) plantas, tales como plantas de algodón, con una expresión incremento de sacarosa sintasa;

e) Plantas, tales como plantas de algodón, en las que el momento de control de paso de plasmodesmos en base a la célula de fibra está alterado, por ejemplo mediante regulación hacia abajo de 1,3-beta-glucanasa selectiva de fibras;

f) plantas, tales como plantas de algodón, que poseen fibras con reactividad alterada, por ejemplo mediante la expresión del gen de la N-Acetilglucosamina transferasa, que incluye genes de la quitina sintasa y nodC.

Las plantas o variedades de plantas (obtenidas por procedimientos de biotecnología vegetal, tales como la ingeniería genética), que se pueden tratar también de acuerdo con la invención, son plantas, tales como colza o plantas de Brassica relacionadas, con características modificadas de perfil de aceite. Tales plantas pueden obtenerse mediante transformación genética o mediante selección de plantas que contengan una mutación que confiera tales características de aceite alteradas e incluyen

- a) plantas, tales como plantas de colza, que producen aceite con un alto contenido en ácido oleico;
- b) plantas, tales como plantas de colza, que producen aceite con un bajo contenido en ácido linolénico;
- c) plantas, tales como plantas de colza, que producen aceite con un bajo nivel de ácidos grasos saturados.

Plantas transgénicas particularmente útiles que pueden tratarse de acuerdo con la invención son plantas que comprenden uno o más genes que codifican una o más toxinas y son las plantas transgénicas disponibles con los nombres comerciales siguientes: YIELD GARD® (por ejemplo, maíz, algodón, soja), KnockOut® (por ejemplo, maíz), BiteGard® (por ejemplo, maíz), BT-Xtra® (por ejemplo, maíz), StarLink® (por ejemplo, maíz), Bollgard® (algodón), Nucotn®

(algodón), Nucotn 33B® (algodón), NatureGard® (por ejemplo, maíz), Protecta® y NewLeaf® (patata). Ejemplos de plantas tolerantes a herbicida que pueden mencionarse son variedades de maíz, variedades de algodón y variedades de soja que están disponibles con los nombres comerciales siguientes: Roundup Ready® (tolerancia a glifosato, por ejemplo maíz, algodón, soja), Liberty Link® (tolerancia a fosfinotricina, por ejemplo colza), IMI® (tolerancia a imidazolinonas) y STS® (tolerancia a sulfonilureas, por ejemplo maíz). Las plantas resistentes a herbicidas (plantas reproducidas de forma convencional para la tolerancia a herbicida) que pueden mencionarse incluyen las variedades que se venden con el nombre Clearfield® (por ejemplo maíz).

Plantas transgénicas particularmente útiles que se pueden tratar según la invención son plantas que contienen eventos de transformación o una combinación de eventos de transformación, que se enumeran por ejemplo en las bases de datos de varias agencias reguladoras nacionales o regionales (véase por ejemplo <http://gmoinfo.jrc.it/gmp Browse.aspx> y <http://www.agbios.com/dbase.php>).

Además, en la protección de materiales, los compuestos activos o composiciones de acuerdo con la invención pueden emplearse para la protección de materiales industriales contra el ataque y la destrucción por parte de microorganismos no deseados, tales como, por ejemplo, hongos.

En el presente contexto, se entiende que materiales industriales significa materiales carentes de vida preparados para su uso en industria. Por ejemplo, entre los materiales industriales que pueden protegerse por medio de los compuestos activos de acuerdo con la invención contra la modificación o destrucción por parte de hongos pueden ser adhesivos, colas, papel y cartón,



textiles, alfombras, cuero, madera, pinturas y artículos plásticos, lubricantes refrigeradores y otros materiales susceptibles de ser infectados o destruidos por microorganismos. Pueden también mencionarse dentro de los materiales que pueden protegerse partes de plantas de producción, por ejemplo circuitos

5 de agua de refrigeración, sistemas de refrigeración y de calefacción y unidades de ventilación y de aire acondicionado que pueden verse afectadas adversamente por la proliferación de microorganismos. Materiales industriales que pueden mencionarse dentro del alcance de la presente invención son, preferentemente, adhesivos, colas, papeles y cartones, cuero, madera,

10 pinturas, lubricantes refrigeradores y fluidos intercambiadores de calor, particularmente preferentemente, madera. Las composiciones o compuestos activos de acuerdo con la invención pueden prevenir efectos negativos tales como pudrición, deterioro, decoloración, desteñido o la formación de moho. Además, los compuestos de acuerdo con la invención pueden usarse para

15 proteger objetos que están en contacto con agua marina o salobre, tales como cascos de barcos, tamices, redes, edificios, instalaciones de atraque y sistemas de señalización, de la formación de incrustación.

El procedimiento de acuerdo con la invención para combatir hongos no deseados puede emplearse también para proteger géneros de almacén. En el

20 presente documento, se entiende que géneros de almacén significa sustancias naturales de origen vegetal o animal o productos procesados a partir de los mismos de origen natural, para los que se desea una protección a largo plazo. Pueden protegerse géneros de almacén de origen vegetal, tales como, por ejemplo, plantas o partes de plantas, tales como tallos, hojas, tubérculos, semillas,

25 frutos, granos, recién cosechados o tras el procesamiento mediante (pre)secado,

humedecimiento, trituración, molienda, prensado o tueste. Los géneros de almacén incluyen también madera, no procesada, como madera para la construcción, barreras y postes eléctricos, y en forma de productos terminados, tales como muebles. Géneros de almacén de origen animal son, por ejemplo, 5 pellejos, cuero, pieles y pelo. Los compuestos activos de acuerdo con la invención pueden prevenir efectos negativos tales como pudrición, deterioro, decoloración, desteñido o la formación de moho.

Algunos patógenos de enfermedades fúngicas que pueden tratarse de acuerdo con la invención pueden mencionarse a modo de ejemplo, pero no 10 como limitación:

enfermedades provocadas por patógenos de mildiú pulverulento, tales como, por ejemplo, especies de *Blumeria*, tales como, por ejemplo, *Blumeria graminis*; especies de *Podosphaera*, tales como, por ejemplo, *Podosphaera leucotricha*; especies de *Sphaerotheca*, tales como, por ejemplo, *Sphaerotheca fuliginea*; especies de *Uncinula*, tales como, por ejemplo, *Uncinula necator*; 15

enfermedades provocadas por patógenos de la enfermedad de la roya, tales como, por ejemplo, especies de *Gymnosporangium*, tales como, por ejemplo, *Gymnosporangium sabinae*; especies de *Hemileia*, tales como, por ejemplo, *Hemileia vastatrix*; especies de *Phakopsora*, tales como, por ejemplo, 20 *Phakopsora pachyrhizi* y *Phakopsora meibomiaae*; especies de *Puccinia*, tales como, por ejemplo, *Puccinia recondita* o *Puccinia triticina*; especies de *Uromyces*, tales como, por ejemplo, *Uromyces appendiculatus*;

enfermedades causadas por patógenos del grupo de Oomicetos, tales como, por ejemplo, especies de *Bremia*, tales como, por ejemplo, *Bremia lactucae*; especies de *Peronospora*, tales como, por ejemplo, *Peronospora pisi* 25

- o *P. brassicae*; especies de *Phytophthora*, tales como, por ejemplo *Phytophthora infestans*; especies *Plasmopara*, tales como, por ejemplo *Plasmopara viticola*; especies de *Pseudoperonospora*, tales como, por ejemplo *Pseudoperonospora humuli* o *Pseudoperonospora cubensis*; especies de
- 5 *Pythium*, tales como, por ejemplo *Pythium ultimum*;

- enfermedades de la mancha de la hoja y enfermedades del marchitado de la hoja provocadas, por ejemplo, por especies de *Alternaria*, tales como, por ejemplo, *Alternaria solani*; especies de *Cercospora*, tales como, por ejemplo, *Cercospora beticola*; especies de *Cladosporium*, tales como, por ejemplo,
- 10 *Cladosporium cucumerinum*; especies de *Cochliobolus*, tales como, por ejemplo, *Cochliobolus sativus* (forma de conidios: *Drechslera*, syn: *Helminthosporium*); especies de *Colletotrichum*, tales como, por ejemplo, *Colletotrichum lindemuthianum*; especies de *Cycloconium*, tales como, por ejemplo, *Cycloconium oleaginum*; especies de *Diaporthe*, tales como, por
- 15 ejemplo, *Diaporthe citri*; especies de *Elsinoe*, tales como, por ejemplo, *Elsinoe fawcettii*; especies de *Gloeosporium*, tales como, por ejemplo, *Gloeosporium laeticolor*; especies de *Glomerella*, tales como, por ejemplo, *Glomerella cingulata*; especies de *Guignardia*, tales como, por ejemplo *Guignardia bidwelli*; especies de *Leptosphaeria*, tales como, por ejemplo, *Leptosphaeria maculans*;
- 20 especies de *Magnaporthe*, tales como, por ejemplo, *Magnaporthe grisea*; especies de *Microdochium*, tales como, por ejemplo, *Microdochium nivale*; especies de *Mycosphaerella*, tales como, por ejemplo, *Mycosphaerella graminicola* y *M. fijiensis*; especies de *Phaeosphaeria*, tales como, por ejemplo, *Phaeosphaeria nodorum*; especies de *Pyrenophora*, tales como, por ejemplo,
- 25 *Pyrenophora teres*; especies de *Ramularia*, tales como, por ejemplo, *Ramularia*

collo-cygni; especies de *Rhynchosporium*, tales como, por ejemplo, *Rhynchosporium secalis*; especies de *Septoria*, tales como, por ejemplo, *Septoria apii*; especies de *Typhula*, tales como, por ejemplo *Typhula incarnata*; especies de *Venturia*, tales como, por ejemplo *Venturia inaequalis*;

- 5 enfermedades de la raíz y el tallo, causadas, por ejemplo, por especies de *Corticium*, tales como, por ejemplo, *Corticium graminearum*; especies de *Fusarium*, tales como, por ejemplo, *Fusarium oxysporum*; especies de *Gaeumannomyces*, tales como, por ejemplo, *Gaeumannomyces graminis*; especies de *Rhizoctonia*, tales como, por ejemplo, *Rhizoctonia solani*; especies de
- 10 *Tapesia*, tales como, por ejemplo, *Tapesia acuformis*; especies de *Thielaviopsis*, tales como, por ejemplo, *Thielaviopsis basicola*;

- enfermedades de la espiga y la mazorca (incluidas las mazorcas de maíz) provocadas, por ejemplo, por especies de *Alternaria*, tales como, por ejemplo, *Alternaria* spp.; especies de *Aspergillus*, tales como, por ejemplo,
- 15 *Aspergillus flavus*; especies de *Cladosporium*, tales como, por ejemplo, *Cladosporium cladosporioides*; especies de *Claviceps*, tales como, por ejemplo, *Claviceps purpurea*; especies de *Fusarium*, tales como, por ejemplo, *Fusarium culmorum*; especies de *Gibberella*, tales como, por ejemplo, *Gibberella zeae*; especies de *Monographella*, tales como, por ejemplo, *Monographella nivalis*;
- 20 especies de *Septoria*, tales como, por ejemplo, *Septoria nodorum*;

- enfermedades provocadas por hongos del carbón, tales como, por ejemplo, especies de *Sphacelotheca*, tales como, por ejemplo, *Sphacelotheca reiliana*; especies de *Tilletia*, tales como, por ejemplo *Tilletia caries* o *T. controversa*; especies de *Urocystis*, tales como, por ejemplo *Urocystis occulta*;
- 25 especies de *Ustilago*, tales como, por ejemplo, *Ustilago nuda*,

enfermedades de las raíces de los frutos causadas por, por ejemplo, especies de *Aspergillus*, tales como, por ejemplo, *Aspergillus flavus*; especies de *Botrytis*, tales como, por ejemplo, *Botrytis cinerea*; especies de *Penicillium*, tales como, por ejemplo, *Penicillium expansum* y *P. purpurogenum*; especies de *Sclerotinia*, tales como, por ejemplo, *Sclerotinia sclerotiorum*;

Especies de *Verticillium*, tales como, por ejemplo, *Verticillium alboatrum*;

enfermedades de la podredumbre de la semilla y del suelo y enfermedades del marchitado, así como enfermedades de los plantones provocadas, por ejemplo, por especies de *Fusarium*, tales como, por ejemplo, *Fusarium culmorum*; especies de *Phytophthora*, tales como, por ejemplo, *Phytophthora cactorum*; especies de *Pythium*, tales como, por ejemplo, *Pythium ultimum*; especies de *Rhizoctonia*, tales como, por ejemplo, *Rhizoctonia solani*; especies de *Sclerotium*, tales como, por ejemplo, *Sclerotium rolfsii*;

enfermedades cancerosas, agallas y escoba de bruja provocadas, por ejemplo, por especies de *Nectria*, tales como, por ejemplo *Nectria galligena*;

enfermedades de marchitado, provocadas, por ejemplo, por especies de *Monilinia*, tales como, por ejemplo *Monilinia laxa*;

deformaciones de las hojas, las flores y los frutos causadas por, por ejemplo, especies de *Taphrina*, tales como, por ejemplo, *Taphrina deformans*;

enfermedades degenerativas de plantas leñosas causadas por, por ejemplo, especies de *Esca*, tales como, por ejemplo, *Phaemoniella clamydospora* y *Phaeoacremonium aleophilum* y *Fomitiporia mediterranea*;

enfermedades de flores y semillas provocadas, por ejemplo, por especies de *Botrytis*, tales como, por ejemplo, *Botrytis cinerea*;

enfermedades de tubérculos de plantas provocadas, por ejemplo, por especies de *Rhizoctonia*, tales como, por ejemplo, *Rhizoctonia solani*; especies de *Helminthosporium*, tales como, por ejemplo, *Helminthosporium solani*;

5 enfermedades provocadas por patógenos bacterianos, tales como, por ejemplo, especies de *Xanthomonas*, tales como, por ejemplo, *Xanthomonas campestris* pv. *oryzae*; especies de *Pseudomonas*, tales como, por ejemplo, *Pseudomonas syringae* pv. *lachrymans*; especies de *Erwinia*, tales como, por ejemplo, *Erwinia amylovora*.

Se da preferencia a combatir las enfermedades siguientes de la soja:

10 enfermedades fúngicas en hojas, tallos, vainas y semillas, provocadas, por ejemplo por mancha foliar por alternaria (*Alternaria* sp. *atrans tenuissima*), antracnosis (*Colletotrichum gloeosporoides dematium* var. *truncatum*), mancha marrón (*Septoria glycines*), mancha foliar y tizón por cercospora (*Cercospora kikuchii*), tizón foliar por choanephora (*Choanephora infundibulifera trisporea* (sin.)),
 15 (sin.)), mancha foliar por dactuliophora (*Dactuliophora glycines*), mildew veloso (*Peronospora manshurica*), tizón por drechslera (*Drechslera glycini*), mancha púrpura foliar (*Cercospora sojae*), mancha foliar por leptosphaerulina (*Leptosphaerulina trifolii*), mancha foliar por phyllosticta (*Phyllosticta sojaecola*), tizón del tallo y la vaina (*Phomopsis sojae*), mildiú pulverulento (*Microsphaera diffusa*),
 20 mancha foliar por pyrenochaeta (*Pyrenochaeta glycines*), tizón aéreo, foliar y radicular por rhizoctonia (*Rhizoctonia solani*), roya (*Phakopsora pachyrhizi*), sarna (*Sphaceloma glycines*), tizón foliar por stemphylium (*Stemphylium botryosum*), mancha anillada (*Corynespora cassicola*).

enfermedades fúngicas en raíces y la base del tallo, provocadas, por
 25 ejemplo, por podredumbre radicular negra (*Calonectria crotalariae*),

- podredumbre carbonosa (*Macrophomina phaseolina*), tizón o marchitado por fusarium, podredumbre radicular, y de las vainas y del cuello (*Fusarium oxysporum*, *Fusarium orthoceras*, *Fusarium semitectum*, *Fusarium equiseti*), podredumbre radicular por *mycoleptodiscus* (*Mycoleptodiscus terrestris*),
- 5 neocosmospora (*Neocosmopora vasinfecta*), tizón de la vaina y del tallo (*Diaporthe phaseolorum*), cancro del tallo (*Diaporthe phaseolorum* var. *caulivora*), podredumbre por *phyphthoftora* (*Phytophthora megasperma*), podredumbre marrón del tallo (*Phialophora gregata*), podredumbre por *pythium* (*Pythium aphanidermatum*, *Pythium irregulare*, *Pythium debaryanum*, *Pythium*
- 10 *myriotilum*, *Pythium ultimum*), podredumbre radicular por *rhizoctonia*, podredumbre blanda del tallo y caída de plántulas (*Rhizoctonia solani*), podredumbre blanda del tallo por *sclerotinia* (*Sclerotinia sclerotiorum*), tizón meridional por *sclerotinia* (*Sclerotinia rolfsii*), podredumbre radicular por *thielaviopsis* (*Thielaviopsis basicola*).
- 15 Organismos que pueden producir degradación o modificación de los materiales industriales y que se pueden mencionar son los hongos. Los compuestos activos de acuerdo con la invención actúan preferentemente contra hongos, en particular mohos, hongos que decoloran la madera, hongos que destruyen la madera (basidiomicetos). Pueden mencionarse como ejemplos
- 20 hongos de los géneros siguientes: *Alternaria*, tal como *Alternaria tenuis*; *Aspergillus*, tal como *Aspergillus niger*; *Chaetomium*, tal como *Chaetomium globosum*; *Coniophora*, tal como *Coniophora puetana*; *Lentinus*, tal como *Lentinus tigrinus*; *Penicillium*, tal como *Penicillium glaucum*; *Polyporus*, tal como *Polyporus versicolor*; *Aureobasidium*, tal como *Aureobasidium pullulans*; *Sclerophoma*, tal
- 25 como *Sclerophoma pityophila*; *Trichoderma*, tal como *Trichoderma viride*.

Además, los compuestos activos de acuerdo con la invención también tienen actividad antimicótica muy buena. Tienen un espectro de acción antimicótico muy amplio, en particular contra dermatofitos y levaduras, moho y hongos difásicos (por ejemplo contra especies de *Candida* tales como *Candida albicans*, *Candida glabrata*) y contra *Epidermophyton floccosum*, especies de *Aspergillus* tales como *Aspergillus niger* y *Aspergillus fumigatus*, especies de *Trichophyton* tales como *Trichophyton mentagrophytes*, especies de *Microsporon* tales como *Microsporon canis* y *audouinii*. La lista de estos hongos no limita, de ningún modo, el espectro micótico que se puede cubrir, sino que sólo es ilustrativa.

Cuando se usan los compuestos activos de acuerdo con la invención como fungicidas, las tasas de aplicación pueden variar dentro de un intervalo relativamente amplio, dependiendo del tipo de aplicación. La tasa de aplicación de los compuestos activos de acuerdo con la invención es

cuando se tratan partes de plantas, por ejemplo hojas: de 0,1 a 10 000 g/ha, preferentemente de 10 a 1 000 g/ha, de modo especialmente preferente de 50 a 300g/ha (cuando la aplicación se lleva a cabo por irrigación o rociado, puede incluso reducirse más la tasa de aplicación, sobre todo cuando se emplea un sustrato inerte como lana mineral o perlita);

cuando se tratan semillas: de 2 a 200 g por 100 kg de semillas, preferentemente de 3 a 150 g por 100 kg de semillas, de modo especialmente preferente de 2,5 a 25 g por 100 kg de semillas, de modo muy especialmente preferente de 2,5 a 12,5 g por 100 kg de semillas;

cuando se trata el suelo: entre 0,1 y 10.000 g/ha, preferentemente entre 1 y 5.000 g/ha.

Estas tasas de aplicación se mencionan sólo de un modo ejemplar y no limitante en el sentido de la invención.

Las composiciones o compuestos activos de acuerdo con la invención pueden usarse de este modo para proteger plantas durante un periodo de tiempo determinado después del tratamiento contra el ataque de los patógenos mencionados. El periodo de tiempo para el que se proporciona protección se extiende en general de 1 a 28 días, preferentemente de 1 a 14 días, de modo especialmente preferente de 1 a 10 días, de modo muy especialmente preferente de 1 a 7 días tras el tratamiento de la planta con los compuestos activos o hasta 200 días tras un tratamiento de semillas.

Además mediante el tratamiento de acuerdo con la invención se puede reducir el contenido en micotoxinas en el material cosechado y los alimentos y productos alimentarios preparados a partir del mismo. Cabe mencionar especialmente, aunque no exclusivamente, las micotoxinas siguientes: desoxinivalenol (DON), nivalenol, 15-Ac-DON, 3-Ac-DON, toxina T2 y HT2, fumonisina, zearalenona, moniliformina, fusarina, diacetoxiscirpenol (DAS), beauvericina, enniatina, fusaroproliferina, fusarenol, ocratoxina, patulina, alcaloides de ergotamina y aflatoxinas, producidas, por ejemplo, por los hongos siguientes: *Fusarium* spp., tales como *Fusarium acuminatum*, *F. avenaceum*, *F. crookwellense*, *F. culmorum*, *F. graminearum* (*Gibberella zeae*), *F. equiseti*, *F. fujikoro*i, *F. musarum*, *F. oxysporum*, *F. proliferatum*, *F. poae*, *F. pseudograminearum*, *F. sambucinum*, *F. scirpi*, *F. semitectum*, *F. solani*, *F. sporotrichoides*, *F. langsethiae*, *F. subglutinans*, *F. tricinctum*, *F. verticillioides* entre otros y, también, por *Aspergillus* spp., *Penicillium* spp., *Claviceps purpurea*, *Stachybotrys* spp. entre otros.

Las plantas enumeradas pueden tratarse de acuerdo con la invención de un modo particularmente ventajoso con los derivados de piridinilpirazol bicíclicos de la fórmula (I) o las composiciones de acuerdo con la invención. Los intervalos preferidos indicados en lo que antecede para las composiciones o compuestos activos también se aplican para el tratamiento de estas plantas. El tratamiento de plantas con los compuestos o composiciones indicados especialmente en el presente texto es particularmente destacado.

La preparación y el uso de los compuestos activos de la fórmula (I) de acuerdo con la invención se ilustran mediante los siguientes ejemplos. Sin embargo, la invención no se limita a estos ejemplos.

Ejemplo de Etapa de procedimiento [V1] de los Esquemas 3 y 7:

Ejemplo 2: 2-(4-Fluorofenil)-3-(piridin-4-il)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina

Una mezcla de 1,64 g (11,1 mmol) de 3-olato de 4,5,6,7-tetrahidro[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]piridin-8-io y 2,19 g (11,1 mmol) de 4-[[4-fluorofenil]etnil]piridina en 40 ml de mesitileno se agitó en una atmósfera de argón a 165 °C durante 16 h. Después de un periodo de refrigeración, la mezcla de reacción se concentró a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 888 mg (27 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 1,03; RMN de ¹H (CDCl₃-d₁): 8,52 (d, 2H), 7,38 (dd, 2H), 7,08 (d, 2H), 7,00 (dd, 2H), 4,25 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,12 (m, 2H), 1,92 (m, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V2] de los Esquemas 4 y 7:

4-[[4-(Trifluorometil)fenil]etnil]piridina (II-1)

En una atmósfera de argón, una mezcla de 1,20 g (6,17 mmol) de

clorhidrato de 4-bromopiridina, 1,57 g (9,26 mmol) de 1-etinil-4-(trifluorometil)benceno, 88 mg (0,46 mmol) de yoduro de cobre (I) y 251 mg (0,31 mmol) de Pd(dppf)Cl₂ en 10 ml de trietilamina se calentó a 90 °C durante 3 h. Después de concentración, la mezcla de reacción se recogió en 100 ml de acetato de etilo y se lavó con 2 x 100 ml de HCl 1 M. La fase acuosa se ajustó a pH 10 usando una solución acuosa de hidróxido sódico y se extrajo con 3 x 100 ml de cloroformo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con una solución acuosa saturada de NaCl, se secaron sobre Na₂SO₄ y se libraron del disolvente a presión reducida. Esto produjo 380 mg (24 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 2,86; RMN de ¹H (DMSO-d₆) δ: 8,66 (d, 2H), 7,84 (s, 4H), 7,58 (d, 2H)

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- **4-{{3-(Trifluorometil)fenil}etinil}piridina (II-2)**; logP(pH7): 3,50 con EM (IEN): 248,1 ([M+H]⁺).
- 15 • **4-{{4-(Metoxi)fenil}etinil}piridina (II-3)**; logP(pH7): 2,68; RMN de ¹H (DMSO-d₆) δ: 8,60 (d, 2H), 7,55 (d, 2H), 7,48 (d, 2H), 7,02 (d, 2H).
- **4-{{4-Fluorofenil}etinil}piridina (II-4)**; logP(pH7): 2,81; RMN de ¹H (DMSO-d₆) δ: 8,63 (d, 2H), 7,68 (dd, 2H), 7,52 (d, 2H), 7,32 (dd, 2H).
- **4-{{4-Clorofenil}etinil}piridina (II-5)**; logP(HCOOH): 2,43; con EM (IEN): 214,0/216,0 ([M+H]⁺).
- 20 • **2-Cloro-4-{{4-fluorofenil}etinil}piridina (II-6)**; logP(HCOOH): 3,80 con EM (IEN): 232,1/234,1 ([M+H]⁺).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V3] de los Esquemas 5 y 7:

3-Olato de 5,6,7,8-tetrahidro-4H-[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]azepin-9-io (III-1)

25 A 0 °C, una solución de 7,80 g (43,4 mmol) de ácido azepan-2-

carboxílico y 4,10 g (59,5 mmol) de nitrito sódico en 50 ml de agua se acidificó a pH 3 usando HCl (conc.) y después se agitó durante 1 h. Se añadieron 50 ml de acetato de etilo a la mezcla de reacción, la fase orgánica se separó y la fase acuosa se extrajo con 2 x 50 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas
5 combinadas se secaron sobre MgSO₄ y se libraron del disolvente a presión reducida. El ácido 1-nitrosoazepan-2-carboxílico obtenido (6,80 g, 67 %) se recogió en 15 ml de acetonitrilo sin purificación adicional, y se añadieron gota a gota a gota 12,4 g (59,2 mmol) de anhídrido trifluoroacético a 0 °C. Después de 2 h de agitación a temperatura ambiente, se añadieron 8,19 g (59,2 mmol) de
10 carbonato potásico, y se continuó agitando durante 20 min más. Se añadieron 40 ml de acetato de etilo y 20 ml de agua a la mezcla de reacción y la fase acuosa se extrajo con 3 x 40 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre MgSO₄ y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice
15 (ciclohexano/acetato de etilo) dio 5,50 g (90 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 0,6; RMN de ¹H (DMSO-d₆): 4,45 (m, 2H), 2,56 (m, 2H), 1,83 (m, 4H), 1,57 (m, 2H)

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- **3-Olato de 4,5,6,7-tetrahidro[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]piridin-8-io (III-2);**
20 logP(HCOOH): 0,59; RMN de ¹H (MeCN-d₃) δ: 4,22 (dd, 2H), 2,50 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,87 (m, 2H).
- **3-Olato de 5,6-dihidro-4H-pirrólo[1,2-c][1,2,3]oxadiazol-7-io (III-3);** RMN de ¹H (DMSO-d₆) δ: 4,47 (dd, 2H), 2,73 (m, 2H), 2,67 (m, 2H).
- **3-Olato de 5-terc-butoxi-5,6-dihidro-4H-pirrólo[1,2-c][1,2,3]oxadiazol-7-**
25 **io (III-4);** logP(HCOOH): 1,34; RMN de ¹H (DMSO-d₆) δ: 5,03 (m, 1H), 4,74

(dd, 1H), 4,27 (dd, 1H), 3,11 (dd, 1H), 1,18 (s, 9H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V4] del Esquema 7:

Ejemplo 70: 4-[2-(Fenil)-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol-3-il]-N-isopropilpiridin-2-amina (lc)

5 En un autoclave, una mezcla de 1,10 g (0,39 mmol) de 3-(2-fluoropiridin-4-il)-2-fenil-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol y 1,5 ml de isopropilamina se calentó a 140 °C. Después de 16 h, la mezcla de reacción se concentró a presión reducida. Después de la purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo), se obtuvieron 50 mg (35 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 1,21; RMN de ¹H (DMSO-d₆): 7,81 (d, 1H), 7,36 (m, 5H), 6,28 (s, 1H), 6,21 (m, 2H), 4,15 (dd, 2H), 3,84 (m, 1H), 2,98 (dd, 2H), 2,59 (m, 2H), 1,08 (d, 6H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V6] del Esquema 7:

Ejemplo 3: 4-[2-(4-Fluorofenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridin-3-il]piridin-2-amina (le)

15 Con refrigeración con hielo, se añadieron 10 ml de ácido sulfúrico conc. a 1,29 g (1,29 mmol) de N-bencil-4-[2-(4-fluorofenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridin-3-il]piridin-2-amina, y la mezcla se agitó a temperatura ambiente durante 1 h. La mezcla de reacción se agitó en hielo-agua, se ajustó a pH 10 usando NaOH conc. y se extrajo con 3 x 50 ml de diclorometano. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con agua, se secaron sobre MgSO₄ y se libraron del disolvente a presión reducida. Esto produjo 239 mg (35 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 1,21; RMN de ¹H (DMSO-d₆): 7,81 (d, 1H), 7,416 (dd, 2H), 7,15 (dd, 2H), 6,28 (s, 1H), 6,24 (d, 1H), 5,83 (s a, 2H), 4,15 (dd, 2H), 2,73 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,80 (m, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V7] del Esquema 7:

Ejemplo 26: {4-[2-(4-Fluorofenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridin-3-il]piridin-2-il}carbamato de metilo (If)

Se añadieron gota a gota 125 mg (1,29 mmol) de cloroformiato de metilo
5 a una solución de 200 mg (0,51 mmol) de 4-[2-(4-fluorofenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridin-3-il]piridin-2-amina y 167 mg (1,29 mmol) de diisopropiletilamina en 20 ml de THF. Después de 16 h, se añadieron 10 ml de agua y la mezcla de reacción se extrajo con 3 x 50 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con agua, se secaron sobre MgSO₄ y
10 se libraron del disolvente a presión reducida. El residuo se recogió de nuevo en 10 ml de una solución 6 N de amoníaco metanólico y se agitó durante 12 h. La mezcla de reacción se concentró y el residuo obtenido se purificó por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 167 mg (87 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 2,11; RMN
15 de ¹H (MeCN-d₃): 8,13 (s a, 1H), 8,10 (d, 1H), 7,76 (s, 1H), 7,42 (dd, 2H), 7,05 (dd, 2H), 6,76 (d, 1H), 4,16 (dd, 2H), 3,69 (s, 3H), 2,82 (dd, 2H), 2,09 (m, 2H), 1,88 (m, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V10] del Esquema 7:

2-(4-Fluorofenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VII-1)

20 Una mezcla de 2,44 g (16,5 mmol) de 4,5,6,7-tetrahidro[1,2,3]oxadiazolo[3,4-a]piridin-8-ilo y 2,15 g (16,5 mmol) de 4-fluorofenilacetileno en 80 ml de mesitileno se agitó en una atmósfera de argón a 165 °C durante 16 h. Después de un periodo de refrigeración, la mezcla de reacción se concentró a presión reducida. La purificación por cromatografía en
25 columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 888 mg (27 %)

del producto deseado; logP(HCOOH): 2,76; RMN de ^1H (MeCN- d_3): 7,76 (dd, 2H), 7,11 (dd, 2H), 6,29 (s, 1H), 4,09 (dd, 2H), 2,79 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,84 (m, 2H).

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- 5 • **2-(Fenil)-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-2);** logP(HCOOH): 2,19; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,75 (d, 2H), 7,38 (dd, 2H), 7,25 (dd, 1H), 6,43 (s, 1H), 4,09 (dd, 2H), 2,86 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).
- **2-(4-Fluorofenil)-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-3);** logP(HCOOH): 2,42; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,78 (dd, 2H), 7,19 (dd, 2H), 10 6,42 (s, 1H), 4,07 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).
- **2-(4-Fluorofenil)-5,6,7,8-tetrahidro-4H-pirazolo[1,5-a]azepina (VII-3);** logP(HCOOH): 3,27; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,74 (dd, 2H), 7,19 (dd, 2H), 6,45 (s, 1H), 4,24 (m, 2H), 2,76 (m, 2H), 1,79 (m, 2H), 1,68 (m, 2H), 1,58 (m, 2H).
- 15 • **2-(4-Clorofenil)-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-4);** logP(HCOOH): 2,86; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,76 (d, 2H), 7,42 (d, 2H), 6,46 (s, 1H), 4,09 (dd, 2H), 2,86 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).
- **2-(Fenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VII-5);** (logP(HCOOH): 2,57; RMN de ^1H (MeCN- d_3): 7,75 (dd, 2H), 7,36 (dd, 2H), 7,27 (dd, 1H), 20 6,33 (s, 1H), 4,10 (dd, 2H), 2,80 (dd, 2H), 2,05 (m, 2H), 1,84 (m, 2H).
- **2-[3-(Trifluorometil)fenil]-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-6);** logP(HCOOH): 3,25; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 8,05 (m, 2H), 7,62 (m, 2H), 6,60 (s, 1H), 4,12 (dd, 2H), 2,88 (dd, 2H), 2,56 (m, 2H).
- **2-[4-(Metoxi)fenil]-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-7);** 25 logP(HCOOH): 2,17; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,66 (d, 2H), 6,93 (d, 2H),

- 6,34 (s, 1H), 4,06 (dd, 2H), 3,76 (s, 3H), 2,84 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).
- **2-[4-Metilfenil]-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-8);** logP(HCOOH): 2,64; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,63 (d, 2H), 7,17 (d, 2H), 6,37 (s, 1H), 4,08 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H), 2,30 (s, 3H).
- 5 • **2-[4-(Trifluorometil)fenil]-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-9);** logP(HCOOH): 3,20; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,66 (d, 2H), 7,71 (d, 2H), 6,57 (s, 1H), 4,13 (dd, 2H), 2,89 (dd, 2H), 2,57 (m, 2H).
- **2-[3-Fluorofenil]-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-10);** logP(HCOOH): 2,46; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,60 (d, 1H), 7,52 (d, 1H), 7,42 (dd, 1H), 7,09 (dd, 1H), 6,51 (s, 1H), 4,10 (dd, 2H), 2,86 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).
- 10 • **2-(2-Tienil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VII-11);** logP(HCOOH): 2,42; RMN de ^1H (MeCN- d_3): 7,26 (m, 2H), 7,03 (dd, 1H), 6,23 (s, 1H), 4,06 (dd, 2H), 2,78 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,86 (m 2H).
- 15 • **2-(3-Tienil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VII-12);** logP(HCOOH): 2,25; RMN de ^1H (MeCN- d_3): 7,53 (s, 1H), 7,42 (m, 2H), 6,22 (s, 1H), 4,07 (dd, 2H), 2,78 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,86 (m 2H).
- **2-[3-Tienil]-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VII-13);** logP(HCOOH): 2,01; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,66 (d, 1H), 7,53 (m, 1H), 7,42 (d, 1H), 6,30 (s, 1H), 4,05 (dd, 2H), 2,84 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).
- 20

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V11] del Esquema 7:

2-(4-Fluorofenil)-3-yodo-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VIII-1)

- Una solución de 2,20 g (13,5 mmol) de monoclورو de yodo en 5 ml de diclorometano se añadió gota a gota a una solución de 2,66 g (12,3 mmol) de
- 25 2-(4-fluorofenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina en 50 ml de

diclorometano, y la mezcla se agitó durante 12 h. Se añadieron 100 ml de agua, y la mezcla de reacción se extrajo con 3 x 50 ml de diclorometano. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre MgSO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. Esto produjo 4,40 g (98 %) del producto deseado; $\log P(\text{HCOOH})$: 3,79; RMN de ^1H (MeCN-d_3): 7,82 (dd, 2H), 7,18 (dd, 2H), 4,11 (dd, 2H), 2,67 (dd, 2H), 2,06 (m, 2H), 1,94 (m, 2H).

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- **2-(4-Fluorofenil)-3-yodo-5,6,7,8-tetrahidro-4H-pirazolo[1,5-a]azepina (VIII-2);** $\log P(\text{HCOOH})$: 4,35, RMN de ^1H (DMSO-d_6): 7,77 (d, 2H), 7,28 (dd, 2H), 7,25 (dd, 1H), 4,33 (m, 2H), 2,84 (m, 2H), 1,82 (m, 2H), 1,72 (m, 2H), 1,61 (m, 2H).
- **2-[3-(Trifluorometil)fenil]-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-3);** $\log P(\text{HCOOH})$: 4,11, RMN de ^1H (DMSO-d_6): 8,10 (m, 2H), 7,72 (m, 2H), 4,24 (dd, 2H), 2,88 (dd, 2H), 2,56 (m, 2H).
- 15 • **2-(4-Clorofenil)-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-4);** $\log P(\text{HCOOH})$: 3,88, RMN de ^1H (DMSO-d_6): 7,80 (d, 2H), 7,50 (d, 2H), 4,21 (dd, 2H), 2,83 (dd, 2H), 2,58 (m, 2H).
- **2-(Fenil)-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-5);** $\log P(\text{HCOOH})$: 3,09, RMN de ^1H (DMSO-d_6): 7,77 (d, 2H), 7,45 (dd, 2H), 20 7,34 (dd, 1H), 4,21 (dd, 2H), 2,82 (dd, 2H), 2,58 (m, 2H).
- **2-(4-Fluorofenil)-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-6);** $\log P(\text{HCOOH})$: 3,30, RMN de ^1H (DMSO-d_6): 7,78 (dd, 2H), 7,28 (dd, 2H), 4,20 (dd, 2H), 2,85 (dd, 2H), 2,52 (m, 2H).
- **2-[4-Metilfenil]-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-7);** 25 $\log P(\text{HCOOH})$: 3,54, RMN de ^1H (DMSO-d_6): 7,64 (d, 2H), 7,23 (d, 2H),

- 4,20 (dd, 2H), 2,83 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H), 2,33 (s, 3H).
- **2-[3-Tienil]-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol (VIII-8);**
logP(HCOOH): 2,97, RMN de ^1H (DMSO-d6): 7,93 (d, 1H), 7,59 (dd, 1H), 7,53 (d, 1H), 4,19 (dd, 2H), 2,81 (dd, 2H), 2,55 (m, 2H).
- 5 • **2-[4-(Metoxi)fenil]-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol (VIII-9);**
logP(HCOOH): 3,01, RMN de ^1H (DMSO-d6): 7,68 (d, 2H), 6,99 (d, 2H), 4,19 (dd, 2H), 3,79 (s, 3H), 2,82 (dd, 2H), 2,54 (m, 2H).
- **2-[4-(Trifluorometil)fenil]-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol (VIII-10);** logP(HCOOH): 4,13, RMN de ^1H (DMSO-d6): 8,01 (d, 2H), 7,81 (d, 2H), 4,25 (dd, 2H), 2,88 (dd, 2H), 2,57 (m, 2H).
- 10 • **2-[3-Fluorofenil]-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol (VIII-11);**
logP(HCOOH): 3,32, RMN de ^1H (DMSO-d6): 7,65 (d, 1H), 7,52 (m, 2H), 7,20 (dd, 1H), 4,22 (dd, 2H), 2,81 (dd, 2H), 2,58 (m, 2H).
- **2-(Fenil)-3-yodo-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VIII-12);**
logP(HCOOH): 3,55; RMN de ^1H (MeCN-d3): 7,80 (d, 2H), 7,39 (m, 3H), 4,12 (dd, 2H), 2,68 (dd, 2H), 2,05 (m, 2H), 1,84 (m, 2H).
- 15 • **2-(2-Tienil)-3-yodo-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VIII-13);**
logP(HCOOH): 3,45, RMN de ^1H (MeCN-d3): 7,74 (d, 1H), 7,37 (d, 1H), 7,11 (dd, 1H), 4,09 (dd, 2H), 2,66 (dd, 2H), 2,02 (m, 2H), 1,86 (m, 2H).
- 20 • **2-(3-Tienil)-3-yodo-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina (VIII-14);**
logP(HCOOH): 3,40, RMN de ^1H (MeCN-d3): 7,95 (s, 1H), 7,57 (d, 1H), 7,44 (dd, 1H), 4,08 (dd, 2H), 2,66 (dd, 2H), 2,11 (m, 2H), 1,91 (m, 2H).
- **3-Yodo-2-fenil-6,7-dihidro-4H-pirazolo[5,1-c][1,4]oxazina (VIII-15);**
logP(HCOOH): 2,82, RMN de ^1H (DMSO-d6): 7,77 (d, 2H), 7,47 (dd, 2H), 7,39 (dd, 1H), 4,70 (s, 2H), 4,16 (m, 2H), 4,09 (m, 2H).
- 25

- **2-(4-Fluorofenil)-3-yodo-7,7-dimetil-4,5-dihidropirazolo[1,5-c][1,3]oxazina (VIII-16);** logP(HCOOH): 4,28, RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,81 (dd, 2H), 7,29 (dd, 2H), 4,09 (t, 2H), 2,76 (t, 2H), 1,68 (s, 6H).
- 5 • **3-Bromo-2-(4-fluorofenil)-6,7-dihidro-4H-pirazolo[5,1-c][1,4]oxazina (VIII-17);** Análogamente a 2 equiv. de NBS logP(HCOOH): 2,90, RMN de ^1H (MeCN- d_3): δ = 7,90-7,86 (m, 2H), 7,21-7,17 (m, 2H), 4,75 (s, 2H), 4,14-4,09 (m, 4H)
- **3-Bromo-2-fenil-6,7-dihidro-4H-pirazolo[5,1-c][1,4]tiazina (VIII-18);** análogamente a 2 equiv. de NBS logP(HCOOH): 3,42 con EM (IEN):
10 296/298 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V12] del Esquema 7:

Ejemplo 61: 3-(2-Fluoropiridin-4-il)-2-fenil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (Ia)

Una mezcla de 1,00 g (3,22 mmol) de 2-(fenil)-3-yodo-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol, 1,80 g (8,06 mmol) de 2-fluoro-4-(4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-il)piridina, 2,63 g (8,06 mmol) de Cs_2CO_3 y 526 mg (0,65 mmol) de $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ en 8 ml de THF se calentó en una atmósfera de argón a 60 °C durante 16 h. Se añadieron 20 ml de agua y la mezcla de reacción se extrajo con 3 x 50 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre MgSO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 507 mg (57 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 2,53; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 8,10 (d, 1H), 7,40 (m, 5H), 7,07 (d, 1H), 6,85 (s, 1H), 4,19 (dd, 2H), 3,11 (dd, 2H), 2,62 (m, 2H).

25 **Ejemplo 5: N-{4-[2-(4-Fluorofenil)-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridin-3-**

il]piridin-2-il}propanamida (If)

En una atmósfera de argón, se añadieron gota a gota 1,39 ml de una solución acuosa 2 M de Na_2CO_3 a una solución de 200 mg (0,55 mmol) de 2-(4-fluorofenil)-3-yodo-4,5,6,7-tetrahidropirazolo[1,5-a]piridina, 168 g (0,61 mmol) de N-[4-(4,4,5,5-tetrametil-1,3,2-dioxaborolan-2-il)piridin-2-il]propanamida en 2 ml de dioxano, y 32 mg (0,04 mmol) de $\text{Pd}(\text{PCy}_3)_2\text{Cl}_2$. En un reactor de microondas, la mezcla de reacción se calentó a 120 °C durante 15 min. Después de un periodo de refrigeración, se añadieron 50 ml de acetato de etilo, la mezcla de reacción se filtro a través de kieselguhr y el filtrado se extrajo con acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con agua, se secaron sobre MgSO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 159 mg (78 %) del producto deseado; $\log P(\text{HCOOH})$: 1,97; RMN de ^1H (MeCN-d_3): 8,54 (s a, 1H), 8,11 (d, 1H), 8,02 (s, 1H), 7,42 (dd, 2H), 7,04 (dd, 2H), 6,77 (d, 1H), 4,16 (dd, 2H), 2,81 (dd, 2H), 2,40 (c, 2H), 1,77 (m, 2H), 1,11 (t, 3H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V14] del Esquema 9:

1-(2-Cloroetil)-3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol-5-carboxilato de metilo (XI-1)

Se añadieron 4,15 g (30 mmol) de carbonato potásico a una solución de 2,20 g (10 mmol) de 3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol-5-carboxilato de metilo (descrito en Zhejiang Daxue Xuebao, Lixueban 2008, 35, 641-643) en 30 ml de acetona. Durante un periodo de 5 min, se añadieron 7,17 g (50 mmol) de 1-bromo-2-cloroetano a esta suspensión. Después, la mezcla de reacción se agitó a 70 °C durante 19 h. Después, los componentes insolubles se retiraron por filtración y el disolvente se concentró. El aceite en bruto obtenido se purificó por

cromatografía en columna sobre gel de sílice (fase móvil, ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 2,5 g (80 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 3,58; RMN de ^1H (MeCN- d_3): δ = 7,86-7,84 (m, 2H), 7,20 (s, 1H), 7,19-7,16 (m, 2H), 6,53 (s, 1H), 4,89 (t, 2H), 4,00 (t, 2H), 3,88 (s, 3H).

5 Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V15] del Esquema 9:

[1-(2-Cloroetil)-3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol-5-il]metanol (XIII-1)

En una atmósfera de argón y a 0 °C, se añadieron 4 ml de una solución de hidruro de litio y aluminio (1 M en éter dietílico, 4,00 mmol) a una solución de 1,1 g (4,00 mmol) de 1-(2-cloroetil)-3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol-5-carboxilato de metilo en 20 ml de tetrahidrofurano. Después, la mezcla se agitó a 0 °C durante 2 h. Después, a 0 °C, se añadieron cuidadosamente gota a gota 5 M de una solución acuosa de NaOH a la mezcla de reacción hasta que se detuvo el desprendimiento de hidrógeno. La suspensión formada se retiró por decantación y el disolvente se retiró. El producto en bruto obtenido se purificó por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 900 mg (86 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 1,84; RMN de ^1H (MeCN- d_3): δ = 7,81-7,77 (m, 2H), 7,16-7,12 (m, 2H), 6,53 (s, 1H), 4,64 (d, 2H), 4,45 (t, 2H), 4,00 (t, 2H).

El siguiente compuesto puede prepararse de manera análoga:

- 20 • **(3-Fenil-1H-pirazol-5-il)metanol (XIV-1)**; logP(HCOOH): 1,14; CL-EM: m/z = 175 [M+H] $^+$.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V16] del Esquema 9:

2-(4-Fluorofenil)-6,7-dihidro-4H-pirazolo[5,1-c][1,4]oxazina (VIIa-1)

En un matraz de fondo redondo de 100 ml, se disolvieron 780 mg (3,00 mmol) de [1-(2-cloroetil)-3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol-5-il]metanol en 20 ml de

N,N-dimetilformamida. Después, en una atmósfera de argón y a 0 °C, se añadieron 120 mg de hidruro sódico (3,00 mmol) en forma de una suspensión al 60 % en aceite. Después, la mezcla se agitó a 25 °C durante 18 h. Después, la mezcla de reacción se vertió cuidadosamente en agua y se extrajo
5 repetidamente con acetato de etilo. Después, las fases orgánicas combinadas se secaron sobre Na₂SO₄ y se concentraron. La purificación se realizó por cromatografía sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 480 mg (49 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 2,01; RMN de ¹H (MeCN-d₃): δ = 7,81-7,77 (m, 2H), 7,15-7,11 (m, 2H), 6,36 (s, 1H), 4,81 (s, 2H),
10 4,14-4,12 (m, 2H), 4,10-4,08 (m, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V17] del Esquema 9:

5-(Clorometil)-3-fenil-1H-pirazol (XV-1)

A 20 °C, se añadieron 6,1 ml de cloruro de tionilo y 10 gotas de dimetilformamida a una solución de 7,3 g (42,0 mmol) de (3-fenil-1H-pirazol-5-
15 il)metanol en 220 ml de diclorometano. Después, la mezcla se hirvió a reflujo durante 12 h. Después, el disolvente se retiró de la mezcla de reacción. El residuo se recogió en 100 ml de diclorometano, y a una solución saturada de bicarbonato sódico se le añadió la mezcla hasta que se estableció un pH de 6 a 7. Después, la mezcla se libró del disolvente a presión reducida y se secó. Esto
20 produjo 5,65 g del producto deseado que se hizo reaccionar adicionalmente sin purificación adicional; logP(HCOOH): 2,05 con EM (IEN): 193,1/195,1 ([M+H]⁺).

Ejemplo de Etapas de procedimiento [V18] y [V20] del Esquema 9:

2-Fenil-6,7-dihidro-4H-pirazolo[5,1-c][1,4]tiazina (VIIb-1)

Se añadieron 4,42 g (58 mmol) de tiourea a una solución de 5,59 g
25 (29 mmol) de 5-(clorometil)-3-fenil-1H-pirazol en 200 ml de etanol. La mezcla

se agitó a 20 °C durante 2 días. Después, la mayoría del disolvente se retiró de la mezcla y se añadieron 10-20 ml de diclorometano. Después de un poco de agitación, el precipitado se retiró por filtración con succión y se secó. Esto produjo 6,3 g de una mezcla de producto que se usó adicionalmente sin
5 purificación adicional. Se recogieron 4,19 g de esta mezcla de nuevo en 140 ml de *N,N*-dimetilformamida. Se añadieron 4,55 g de carbonato potásico seco y 4,74 ml de 1,2-dibromoetano a esta mezcla. Después, la mezcla se agitó a 60 °C durante 18 h. Después, la mezcla de reacción se agitó cuidadosamente en agua. Después, la fase acuosa se retiró por decantación, y se añadió acetato
10 de etilo al residuo oleoso. La fase orgánica se secó sobre Na₂SO₄ y se concentró. La purificación se realizó por cromatografía sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 620 mg del producto deseado; logP(HCOOH): 2,46; RMN de ¹H (ppm): δ (DMSO-d₆) = 3,20 (t, 2H), 3,94 (s, 2H), 4,32 (t, 2H), 6,54 (s, 1H), 7,31 (t, 1H), 7,40 (t, 2H), 7,65 (d, 2H).

15 Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V21] del Esquema 10:

5-(Benciloxi)-1-(4-fluorofenil)pent-2-in-1-ona (XX-1)

A -70 °C, se añadieron gota a gota 2,56 ml de una solución 1,6 M de butillitio a una solución de 505 mg (3,15 mmol) de but-3-in-1-il éter de bencilo en 10 ml de THF, y la mezcla se agitó durante 30 min. Se añadieron gota a
20 gota 500 mg (5,15 mmol) de cloruro de 4-fluorobenzoílo a esta solución, y se dejó que la temperatura se elevara a 0 °C. Después de 1 h, se añadieron 10 ml de una solución saturada de cloruro de amonio y la mezcla de reacción se extrajo con 3 x 50 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con agua, se secaron sobre MgSO₄ y se libraron del disolvente a
25 presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de

sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 430 mg (45 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 3,89; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 8,15 (dd, 2H), 7,34 (m, 7H), 4,57 (s, 2H), 3,70 (t, 2H), 2,90 (t, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V22] del Esquema 10:

5 **5-[2-(Benciloxi)etil]-3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol (XXI)**

A temperatura ambiente, se añadieron gota a gota 0,17 ml (3,54 mmol) de hidrato de hidrazina a una solución de 500 mg (1,77 mmol) de 5-(benciloxi)-1-(4-fluorofenil)pent-2-in-1-ona en 5 ml de etanol, y la mezcla se agitó a reflujo durante 2 h. Después de un periodo de refrigeración, la mezcla de reacción se concentró a presión reducida y el residuo se purificó por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 470 mg (87 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 3,09; RMN de ^1H (DMSO- d_6): 7,77 (dd, 2H), 7,34 (m, 8H), 6,49 (s, 1H), 4,51 (s, 2H), 3,70 (t, 2H), 2,89 (t, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V23] del Esquema 10:

15 **2-[3-(4-Fluorofenil)-1H-pirazol-5-il]etanol (XXII)**

Se cargaron inicialmente 39,4 g (242 mmol) de cloruro de hierro (III) en 200 ml de diclorometano. A temperatura ambiente, se añadió gota a gota una solución de 7,20 g (24,2 mmol) de 5-[2-(benciloxi)etil]-3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol en 90 ml de diclorometano. Después de 20 min, la mezcla de reacción se lavó con 2 x 100 ml de agua. Las fases acuosas combinadas se ajustaron a pH 5-6 usando bicarbonato sódico y se extrajeron con 2 x 100 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se lavaron con agua, se secaron sobre MgSO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 3,40 g (67 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 1,39; RMN de ^1H (DMSO-

d6): 7,79 (dd, 2H), 7,19 (dd, 2H), 6,47 (s, 1H), 4,79 (t, 1H), 3,65 (m, 2H), 2,76 (t, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V11] del Esquema 10:

2-[3-(4-Fluorofenil)-4-yodo-1H-pirazol-5-il]etanol (XXII)

- 5 Análogamente a la Etapa de procedimiento [11], puede hacer reaccionar 2-[3-(4-fluorofenil)-1H-pirazol-5-il]etanol con 1,1 equiv. de NIS en DMF. Con un rendimiento del 89 %, el producto deseado se obtuvo en forma de una mezcla de isómeros: logP(HCOOH): 1,99; RMN de ^1H (DMSO-d6): 13,29 y 13,19 (s, 1H) 7,78 y 7,69 (dd, 2H), 7,38 y 7,28 (dd, 2H), 4,92 y 4,72 (t, 1H), 3,62 (m, 2H),
10 2,79 y 2,73 (t, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V24] del Esquema 10:

2-(4-Fluorofenil)-3-yodo-4,5-dihidropirazolo[1,5-c][1,3]oxazina (VIIIa-1)

- Una mezcla de 200 mg (0,60 mmol) de 2-[3-(4-fluorofenil)-4-yodo-1H-pirazol-5-il]etanol, 36 mg (1,20 mmol) de paraformaldehído y 10 mg
15 (0,06 mmol) de ácido 4-toluenosulfónico en 1 ml de dioxano se calentó en un reactor de microondas a 130 °C durante 1 h. Después de un periodo de refrigeración, la mezcla de reacción se concentró a presión reducida y el residuo se purificó por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 120 mg (57 %) del producto
20 deseado; logP(HCOOH): 3,23; RMN de ^1H (DMSO-d6): 7,81 (dd, 2H), 7,31 (dd, 2H), 5,54 (s, 2H), 4,12 (dd, 2H), 2,80 (dd, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V25] del Esquema 11:

4-Cloro-N'-(difenilmetileno)pentano hidrazida (XXV-1)

- A 0 °C, una solución de 0,16 g (1,0 mmol) de cloruro de 4-
25 cloropentanoilo en 15 ml de diclorometano se añadió a una solución de 0,20 g

(1,0 mmol) de difenilmetanona hidrazona y 0,08 ml de piridina en 15 ml de diclorometano. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 16 h. Se añadió acetato de etilo/solución acuosa saturada de NH_4Cl a la mezcla de reacción, la fase orgánica se separó y la fase acuosa se extrajo con 3 x 100 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre Na_2SO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 0,32 g (100 %) del producto deseado; $\log P(\text{HCOOH})$: 3,76; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO-d_6) = 1,45 (d, 0,9 H), 1,52 (d, 2,1H), 1,81-2,12 (m, 1H), 2,30-2,42 (m, 1H), 2,88-3,00 (m, 2H), 4,13-4,20 (m, 0,3H), 4,28-4,34 (m, 0,7H), 7,26-7,61 (m, 10H), 9,19 (s, 1H); CL-EM: $m/z = 315 [\text{M}+\text{H}]^+$

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V26] del Esquema 11:

1-[(Difenilmetileno)amino]-5-metilpirrolidin-2-ona (XXVI-1)

A 0 °C, se añadieron poco a poco 2,7 g (68,0 mmol) de hidruro sódico a una solución de 33,0 g (68,0 mmol) de 4-bromo-N'-(difenilmetileno)pentano hidrazida en 200 ml de tetrahidrofurano. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 16 h y después se añadieron acetato de etilo/solución acuosa saturada de NH_4Cl . La fase orgánica se separó y la fase acuosa se extrajo con 3 x 250 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre Na_2SO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 17,8 g (89 %) del producto deseado; $\log P(\text{HCOOH})$: 2,73; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO-d_6) = 1,22 (d, 3 H), 2,05-2,15 (m, 4H), 3,86 (m, 1H), 7,24-7,26 (m, 2H), 7,40-7,43 (m, 4H), 7,48-7,53 (m, 4H); CL-EM: $m/z = 279 [\text{M}+\text{H}]^+$

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- **1-[(Difenilmetileno)amino]pirrolidin-2-ona (XXVI-2);** logP(HCOOH): 2,23;
RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,83 (m, 2H), 2,15 (t, 2H), 3,31 (t, 2H),
7,25-7,28 (m, 2H), 7,37-7,50 (m, 8H); CL-EM: m/z = 265 $[\text{M}+\text{H}]^+$
- 5 • **1-[(Difenilmetileno)amino]-3-metilpirrolidin-2-ona (XXVI-3);**
logP(HCOOH): 2,62; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 0,91 (d, 3 H), 1,36-
1,46 (m, 1H), 2,07-2,14 (m, 1H), 2,24-2,32 (m, 1H), 3,21-3,30 (m, 2H), 7,24-
7,29 (m, 2H), 7,40-7,51 (m, 8H); CL-EM: m/z = 279 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V27] del Esquema 11:

10 **Cloruro de 2-metil-5-oxopirrolidin-1-amino (XXVII-1)**

A temperatura ambiente, se añadieron 50 ml de ácido clorhídrico al 37 % de fuerza a una solución de 17,8 g (63,9 mmol) de 1-[(difenilmetileno)amino]-5-metilpirrolidin-2-ona en 100 ml de tetrahidrofurano y la mezcla se agitó durante 1 h. Después, se añadió acetato de etilo a la mezcla de reacción y la fase orgánica se separó. Repetidamente, se añadió etanol/tolueno (1:1) a la fase de ácido clorhídrico y la mezcla se concentró a presión reducida. El producto en bruto obtenido se hizo reaccionar adicionalmente sin purificación adicional.

15 RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,24 (d, 3 H), 1,60-1,65 (m, 1H), 2,20-2,42 (m, 3H), 3,88 (m, 1H).

20 Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- **Cloruro de 3-metil-2-oxopirrolidin-1-aminio (XXVII-2);** RMN de ^1H (ppm):
 δ (DMSO- d_6) = 1,08 (d, 3 H), 1,64-1,70 (m, 1H), 2,27-2,34 (m, 1H), 2,46-
2,51 (m, 1H), 3,48 (dd, 1H), 3,48 (dd, 1H).
- **Cloruro de 2-oxopirrolidin-1-aminio (XXVII-2);** RMN de ^1H (ppm): δ
25 (DMSO- d_6) = 1,97-2,07 (m, 2H), 2,22-2,36 (m, 2H), 3,59 (t, 2H).

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V28] del Esquema 11:

3-(4-Fluorofenil)-3-[(2-metil-5-oxopirrolidin-1-il)imino]propanoato de metilo (XXVIII-1)

Una mezcla de 7,50 g (38,2 mmol) de 3-(4-fluorofenil)-3-oxopropanoato de metilo y 11,5 g (76,5 mmol) de cloruro de 2-metil-5-oxopirrolidin-1-aminio en 50 ml de piridina se agitó a temperatura ambiente durante 72 h. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 10,4 g (93 %) del producto deseado en forma de una mezcla de isómeros; logP(HCOOH): 2,13 y 2,45; RMN de ¹H (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,16-1,19 (m, 3 H), 1,58-1,62 (m, 2H), 2,20-2,22 (m, 1H), 2,36-2,41 (m, 1H), 3,54 (s, 2,25H), 3,64 (s, 0,75H), 3,80 (d, 1H), 3,90 (d, 1H), 3,80 (c, 1H), 7,24 (t, 0,6H), 7,29 (t, 1,4H), 7,44-7,47 (m, 0,6H), 7,89-7,92 (m, 1,4H); CL-EM: m/z = 293 [M+H]⁺.

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- 15 • **3-(4-Fluorofenil)-3-[(2-metil-5-oxopirrolidin-1-il)imino]propanoato de metilo (XXVIII-2);** logP(HCOOH): 2,09 y 2,47; RMN de ¹H (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,12 (d, 3 H), 1,58-1,64 (m, 1H), 1,91-2,00 (m, 1H), 2,10-2,30 (m, 2H), 3,15 (td, 0,17H), 3,29 (td, 0,17H), 3,49 (td, 0,33H), 3,57 (s, 2H), 3,62 (td, 0,33H), 3,64 (s, 1H), 3,80 (d, 1H), 3,89 (d, 1H), 7,21-7,31 (m, 2H), 7,41-7,44 (m, 0,66H), 7,89-7,92 (m, 1,34H); CL-EM: m/z = 293 [M+H]⁺.
- 20 • **3-(2-Fluorofenil)-3-[(2-metil-5-oxopirrolidin-1-il)imino]propanoato de etilo (XXVIII-3);** logP(HCOOH): 2,34 y 2,74; RMN de ¹H (ppm): δ (DMSO-d₆) = 0,99-1,06 (m, 3 H), 1,15-1,24 (m, 3H), 1,58-1,64 (m, 1H), 1,81-2,45 (m, 3H), 3,64 (dd, 0,5H), 3,78-4,14 (m, 4,5H), 7,15-7,38 (m, 2H), 7,46-7,55 (m, 1H), 7,64-7,69 (m, 1H); CL-EM: m/z = 307 [M+H]⁺.
- 25

- **3-(2-Fluorofenil)-3-[(2-oxopirrolidin-1-il)imino]propanoato de etilo**

(XXVIII-4); logP(HCOOH): 1,97 y 2,39; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 0,99-1,22 (m, 3 H), 1,59-1,66 (m, 1H), 1,95-2,09 (m, 2H), 2,30-2,41 (m, 1H), 3,39-3,49 (m, 2H), 3,62-4,01 (m, 4H), 7,19-7,79 (m, 4H); CL-EM: m/z = 293 [M+H] $^+$.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V29] del Esquema 11:

2-(4-Fluorofenil)-6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-carboxilato de metilo (XXX-1)

Se añadieron 23,2 g (71,2 mmol) de carbonato de cesio a una solución de 10,4 g (35,6 mmol) de 3-(4-fluorofenil)-3-[(2-metil-5-oxopirrolidin-1-il)imino]propanoato de metilo en 100 ml de dimetilformamida. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 30 min y a 100 °C durante 4 h. Después, se añadió acetato de etilo/agua, la fase orgánica separó y la fase acuosa se extrajo con 3 x 100 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre Na_2SO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 6,6 g (64 %) del producto deseado; logP(HCOOH): 2,84; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,44 (d, 3 H), 2,14-2,17 (m, 1H), 2,76-2,78 (m, 1H), 2,98-3,08 (m, 2H), 3,68 (s, 3H), 4,46 (m, 1H), 7,21-7,24 (m, 2H), 7,73-7,76 (m, 2H); CL-EM: m/z = 275 [M+H] $^+$.

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- **2-(4-Fluorofenil)-4-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-**

carboxilato de metilo (XXX-2); logP(HCOOH): 2,71; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,34 (d, 3 H), 2,16-2,21 (m, 1H), 2,81-2,86 (m, 1H), 3,45-3,52 (m, 1H), 3,70 (s, 3H), 4,11-4,29 (m, 2H), 7,20-7,25 (m, 2H), 7,69-7,72 (m,

2H); CL-EM: $m/z = 275 [M+H]^+$.

- **2-(2-Fluorofenil)-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-carboxilato de metilo (XXX-3)**; logP(HCOOH): 2,49; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,12 (t, 3 H), 2,60 (quintuplete, 2H), 3,06 (ABc, 2H), 4,06 (c, 2H), 4,19 (ABc, 2H), 7,22-7,25 (m, 2H), 7,41-7,49 (m, 2H); CL-EM: $m/z = 275 [M+H]^+$.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V30] del Esquema 11:

Ácido 2-(4-Fluorofenil)-6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-carboxílico (XXXI-1)

Se añadieron 36,8 ml (73,6 mmol) de una solución acuosa 2 M de NaOH a una solución de 7,0 g (25,5 mmol) de 2-(4-fluorofenil)-6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-carboxilato de metilo en 50 ml de metanol y la mezcla se agitó durante 3 h. La mezcla de reacción se concentró a presión reducida, se añadió acetato de etilo/ácido clorhídrico 1 M, la fase orgánica se separó y la fase acuosa se extrajo con 3 x 100 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre Na_2SO_4 y se libraron del disolvente a presión reducida. El ácido 2-(4-fluorofenil)-6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-carboxílico obtenido (5,9 g) se hizo reaccionar adicionalmente sin purificación adicional.

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- **Ácido 2-(4-fluorofenil)-4-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-carboxílico (XXXI-2)**; logP(HCOOH): 1,84; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,33 (d, 3 H), 2,12-2,19 (m, 1H), 2,76-2,86 (m, 1H), 3,40-3,49 (m, 1H), 4,08-4,26 (m, 2H), 7,17-7,23 (m, 2H), 7,69-7,74 (m, 2H); CL-EM: $m/z = 261 [M+H]^+$.
- **Ácido 2-(2-fluorofenil)-6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-**

carboxílico (XXXI-3); logP(HCOOH): 1,64; m/z = 261 [M+H]⁺.

- **Ácido 2-(2-fluorofenil)-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol-3-carboxílico (XXXI-4);** logP(HCOOH): 1,35; RMN de ¹H (ppm): δ (DMSO-d₆) = 2,58 (quintuplete, 2H), 3,04 (ABc, 2H), 4,16 (ABc, 2H), 7,20-7,23 (m, 2H), 7,40-7,45 (m, 2H); CL-EM: m/z = 247 [M+H]⁺.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V31] del Esquema 11:

N'-(Difenilmetileno)-4-hidroxipentano hidrazida (XXXIII-1)

A temperatura ambiente, se añadieron gota a gota 6,0 ml (12,0 mmol) de una solución 2,0 M de trimetilaluminio en heptano a una solución de 0,78 g (4,0 mmol) de benzofenona hidrazona en 10 ml de diclorometano, y la mezcla se agitó durante 30 min. Después, una solución de 0,40 g (4,0 mmol) de γ-valerolactona en 5 ml de diclorometano se añadió gota a gota a la mezcla de reacción. La mezcla de reacción se agitó a reflujo durante 2 h. Se añadieron 0,12 g más (1,20 mmol) de γ-valerolactona y la mezcla de reacción se agitó a reflujo durante 1 h. Después de un periodo de refrigeración, se añadió diclorometano/agua a la mezcla de reacción. La fase orgánica se separó y la fase acuosa se extrajo con diclorometano. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre Na₂SO₄ y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 0,9 g (76 %) del producto deseado; (logP(HCOOH): 2,25); RMN de ¹H (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,01 (d, 1H), 1,10 (d, 2H), 1,45-1,72 (m, 2H), 2,16-2,26 (m, 1H), 2,75-2,86 (m, 1H), 3,51-3,57 (m, 0,3H), 3,65-3,71 (m, 0,7H), 4,43 (d, 0,3H), 4,52 (d, 0,7H), 7,25-7,62 (m, 10H), 8,99 (s, 1H); CL-EM: m/z = 297 [M+H]⁺

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

• **N'-(Difenilmetileno)-4-hidroxi-4-fenilbutano hidrazida (XXXIII-2);**

logP(HCOOH): 3,07; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- D_6) = 1,79-1,86 (m, 1H), 1,90-1,98 (m, 1H), 2,19-2,23 (m, 1H), 2,76-2,80 (m, 1H), 4,48-4,52 (m, 0,3H), 4,63-4,67 (m, 0,7H), 5,23 (d, 0,3H), 5,31 (d, 0,7H), 7,19-7,60 (m, 15H), 9,00 (s, 1H); CL-EM: m/z = 359 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

• **N'-(Difenilmetileno)-4-hidroxi-2-metilbutano hidrazida (XXXIII-3);**

logP(HCOOH): 2,24; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 0,98 (d, 1,5H), 1,14 (d, 1,5H), 1,39-1,46 (m, 0,5H), 1,49-1,57 (m, 0,5H), 1,65-1,71 (m, 0,5H), 1,85-1,91 (m, 0,5H), 2,50-2,54 (m, 1H), 3,29-3,39 (m, 1H), 3,41-3,51 (m, 1H), 4,41 (dd, 0,5H), 4,51 (dd, 0,5H), 7,27-7,63 (m, 10H), 8,94 (s, 1H); CL-EM: m/z = 297 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V32] del Esquema 11:

4-Bromo-N'-(difenilmetileno)-2-metilbutano hidrazida (XXV-2)

A 0 °C, se añadieron 8,1 g (24,3 mmol) de tetrabromuro de carbono a una solución de 6,0 g (20,2 mmol) de N'-(difenilmetileno)-4-hidroxi-2-metilbutano hidrazida y 6,3 g (24,3 mmol) de trifenilfosfano en 150 ml de diclorometano. La mezcla de reacción se agitó a 0 °C durante 1 h y después se concentró y se purificó por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo). Esto produjo 2,7 g (37 %) del producto deseado; (logP(HCOOH): 3,76); RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,12 (d, 3H), 1,79-1,86 (m, 1H), 2,33-2,38 (m, 1H), 2,62-2,67 (m, 1H), 4,10-4,14 (m, 1H), 4,25-4,29 (m, 1H), 7,29-7,65 (m, 10H); CL-EM: m/z = 359 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V33] del Esquema 11:

1-[(Difenilmetileno)amino]-5-metilpirrolidin-2-ona (XXVI-4)

A 0 °C, se añadieron gota a gota 0,25 ml (3,2 mmol) de cloruro de

metanosulfonilo a una solución de 0,64 g (2,2 mmol) de N'-(difenilmetileno)-4-hidroxipentano hidrazida, 0,19 ml (2,4 mmol) de piridina y 0,01 mg de *N,N*-dimetilaminopiridina en 5 ml de diclorometano. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 2 h y después se añadió acetato de etilo/agua.

- 5 La fase orgánica se separó y la fase acuosa se extrajo con 3 x 100 ml de acetato de etilo. Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre Na₂SO₄ y se libraron del disolvente a presión reducida. La purificación por cromatografía en columna sobre gel de sílice (ciclohexano/acetato de etilo) dio 0,38 g (44 % puro) de metanosulfonato de 5-[2-(difenilmetileno)hidrazino]-5-oxopentan-2-ilo;
- 10 (logP(HCOOH): 2,82 con CL-EM: m/z = 375 [M+H]⁺). El producto se recogió de nuevo en 2 ml de tetrahidrofurano y se añadieron 0,04 g (1,0 mmol) de hidruro sódico a 0 °C. Después de 16 h de agitación a temperatura ambiente, se añadió acetato de etilo/solución acuosa saturada de NH₄Cl, la fase orgánica se separó y la fase acuosa se extrajo con 3 x 100 ml de acetato de etilo. Las fases
- 15 orgánicas combinadas se secaron sobre Na₂SO₄ y se libraron del disolvente a presión reducida. Esto produjo 0,21 g (61 %) del producto deseado; (logP(HCOOH): 2,73); RMN de ¹H (ppm): δ (DMSO-d₆) = 1,22 (d, 3 H), 2,05-2,15 (m, 4H), 3,86 (sextete, 1H), 7,24-7,26 (m, 2H), 7,40-7,43 (m, 4H), 7,48-7,53 (m, 4H); CL-EM: m/z = 279 [M+H]⁺.

- 20 Ejemplo de la Etapa de procedimiento [V36] del Esquema 11:

2-(4-Fluorofenil)-3-yodo-6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol (VIII-19)

- Se añadieron 3,1 g (36,9 mmol) de NaHCO₃ y 2,8 g (12,3 mmol) de *N*-yodosuccinimida a una solución de 3,2 g (12,3 mmol) de ácido 2-(4-fluorofenil)-
- 25 6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolo[1,2-b]pirazol-3-carboxílico en 25 ml de

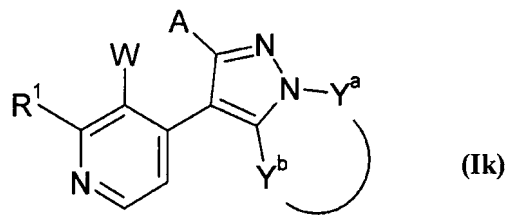
dimetilformamida. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 16 h, se añadió agua y el sólido precipitado se retiró por filtración y se secó. Esto produjo 3,30 g del producto deseado con una pureza del 77 % que se hicieron reaccionar adicionalmente sin purificación adicional:

5 (logP(HCOOH): 3,82); RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,42 (d, 3 H), 2,11-2,18 (m, 1H), 2,72-2,82 (m, 3H), 4,49 (m, 1H), 7,28 (dd, 2H), 7,79 (dd, 2H); CL-EM: m/z = 343 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Los siguientes compuestos pueden prepararse de manera análoga:

- 10 • **2-(4-Fluorofenil)-3-bromo-6-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-20)**; Análogamente a *N*-bromosuccinimida; logP(HCOOH): 3,77; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,43 (d, 3 H), 2,12-2,18 (m, 1H), 2,73-2,89 (m, 3H), 4,47 (m, 1H), 7,29 (dd, 2H), 7,82 (dd, 2H); CL-EM: m/z = 295 $[\text{M}+\text{H}]^+$
- 15 • **2-(4-Fluorofenil)-3-yodo-4-metil-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-21)**; logP(HCOOH): 3,67; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 1,40 (d, 3 H), 2,09-2,19 (m, 1H), 2,74-2,83 (m, 1H), 3,24-3,32 (m, 1H), 4,07-4,13 (m, 1H), 4,20-4,26 (m, 1H), 7,28 (dd, 2H), 7,77 (dd, 2H); CL-EM: m/z = 343 $[\text{M}+\text{H}]^+$.
- 20 • **3-Bromo-2-(2-fluorofenil)-5,6-dihidro-4H-pirrolol[1,2-b]pirazol (VIII-22)**; Análogamente a *N*-bromosuccinimida; logP(HCOOH): 2,81; RMN de ^1H (ppm): δ (DMSO- d_6) = 2,58 (quintuplete, 2H), 2,87 (ABc, 2H), 4,19 (ABc, 2H), 7,28-7,32 (m, 2H), 7,46-7,51 (m, 2H); CL-EM: m/z = 281 $[\text{M}+\text{H}]^+$.

Análogamente a los procedimientos descritos anteriormente, es posible preparar los compuestos de la fórmula general (Ik) enumerados en la Tabla 1 a continuación.



En la siguiente tabla, R¹ representa, por ejemplo, R^{1a}, NH-R^{1a} o NHCOR^{1a}.

Tabla 1

Ej.	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
1	R ^{1a}	cloro	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,26 ^[a]
2	R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,03 ^[a] , 2,43 ^[b]
3	NH-R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,21 ^[a] , 2,05 ^[b]
4	NH-R ^{1a}	bencilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,79 ^[a]
5	NH-CO-R ^{1a}	etil	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,97 ^[a] , 2,58 ^[b]
6	R ^{1a}	CH ₃	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,22 ^[a] , 2,67 ^[b]
7	R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,08 ^[b]
8	NH-CO-R ^{1a}	etil	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,77 ^[a] , 2,46 ^[b]
9	R ^{1a}	H	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,06 ^[a] , 2,32 ^[b]
10	R ^{1a}	H	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,96 ^[b]
11	R ^{1a}	H	H	4-clorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,46 ^[b]

Ej.	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
12	R ^{1a}	H	H	4-metoxifenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	0,72 ^[a]
13	R ^{1a}	flúor	H	4-clorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,12 ^[b]
14	NH-R ^{1a}	H	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,12 ^[a] , 1,89 ^[b]
15	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,66 ^[a] , 2,14 ^[b]
16	NH-CO-R ^{1a}	terc-butoxi	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,73 ^[a] , 3,04 ^[b]
17	R ^{1a}	H	H	4-(trifluorometil)fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,75 ^[b]
18	NH-CO-R ^{1a}	terc-butoxi	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,5 ^[a]
19	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,57 ^[a] , 2,03 ^[b]
20	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,04 ^[a] , 2,67 ^[b]
21	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	Fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,85 ^[a] , 2,52 ^[b]
22	NH-CO-R ^{1a}	metoximetilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,3 ^[a] , 2,54 ^[b]
23	NH-CO-R ^{1a}	metoximetilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,12 ^[a] , 2,39 ^[b]
24	NH-CO-R ^{1a}	(1S)-1-hidroxietilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,91 ^[a] , 2,14 ^[b]
25	NH-CO-R ^{1a}	(1S)-1-hidroxietilo	H	Fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,74 ^[a] , 2,01 ^[b]

Ej.	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
26	NH-CO-R ^{1a}	metoxi	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,11 ^[a] , 2,56 ^[b]
27	NH-CO-R ^{1a}	metoxi	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,92 ^[a] , 2,4 ^[b]
28	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,33 ^[a] , 2,87 ^[b]
29	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,13 ^[a] , 2,72 ^[b]
30	NH-CO-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,68 ^[a] , 3,18 ^[b]
31	NH-CO-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,47 ^[a] , 3,04 ^[b]
32	NH-CO-R ^{1a}	fenilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3 ^[a] , 3,34 ^[b]
33	NH-CO-R ^{1a}	fenilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,78 ^[a] , 3,2 ^[b]
34	NH-CO-R ^{1a}	bencilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,9 ^[a] , 3,26 ^[b]
35	NH-CO-R ^{1a}	bencilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,7 ^[a] , 3,12 ^[b]
36	NH-CO-R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,28 ^[a] , 2,12 ^[b]
37	NH-CO-R ^{1a}	H	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,87 ^[a] , 1,98 ^[b]

Ej.	R ^{1a}	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
38	R ^{1a}	[(dimetilamino) metilideno]amino	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,28 ^[a] , 2,28 ^[b]
39	R ^{1a}	[(dimetilamino) metilideno]amino	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,44 ^[a] , 2,47 ^[b]
40	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,64 ^[a]
41	R ^{1a}	H	H	4-metilfenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,34 ^[b]
42	R ^{1a}	H	H	3-(trifluorometil)fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,42 ^[a]
43	R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,4 ^[a]
44	R ^{1a}	H	H	3-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,12 ^[b]
45	R ^{1a}	flúor	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,69 ^[a]
46	R ^{1a}	H	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	0,72 ^[a]
47	NH-CO-R ^{1a}	tiofen-3-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,75 ^[a] , 3,24 ^[b]
48	NH-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-clorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,25 ^[b]
49	NH-CO-R ^{1a}	terc-butoxi	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,76 ^[a]
50	NH-CO-R ^{1a}	2-hidroxipropan-2-ilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2 ^[a] , 2,29 ^[b]
51	NH-CO-R ^{1a}	tiofen-3-ilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,49 ^[a] , 3,09 ^[b]
52	NH-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,4 ^[a]
53	NH-R ^{1a}	H	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	0,82 ^[a] , 1,8 ^[b]
54	R ^{1a}	flúor	H	3-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,66 ^[b]

Ej.	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
55	NH-CO-R ^{1a}	2-hidroxipropán-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,16 ^[a] , 2,41 ^[b]
56	NH-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	3-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,86 ^[b]
57	R ^{1a}	H	H	5-clorotiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ C(Cl ₂)CH(Cl)-	3,23 ^[a]
58	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,47 ^[a] , 1,92 ^[b]
59	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,73 ^[a] , 2,25 ^[b]
60	NH-CO-R ^{1a}	metoximetilo	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,06 ^[a] , 2,27 ^[b]
61	R ^{1a}	flúor	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,53 ^[b]
62	R ^{1a}	H	H	tiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,05 ^[a] , 2,2 ^[b]
63	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,03 ^[a] , 2,6 ^[b]
64	NH-CO-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,37 ^[a] , 2,91 ^[b]
65	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,87 ^[a] , 2,44 ^[b]
66	NH-CO-R ^{1a}	(1R)-1-hidroxietilo	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,73 ^[a] , 1,95 ^[b]
67	NH-CO-R ^{1a}	metoxi	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,92 ^[a] , 2,32 ^[b]

Ej.	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
68	NH-CO-R ^{1a}	2-hidroxipropan-2-ilo	H	tiofen-3-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,89 ^[a] , 2,16 ^[b]
69	NH-R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,8 ^[b]
70	NH-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,69 ^[b]
71	NH-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,18 ^[b]
72	NH-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,06 ^[b]
73	NH-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	3-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,54 ^[a]
74	R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	1,13 ^[a]
75	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	tiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,89 ^[a] , 2,35 ^[b]
76	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	4-fluorofenilo	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	1,92 ^[a]
77	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	2,3 ^[a]
78	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	4-fluorofenilo	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	2,07 ^[a]
79	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilmetilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,97 ^[a]
80	R ^{1a}	H	H	5-clorotiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(Cl)-	2,21 ^[a]
81	NH-R ^{1a}	H	H	tiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,04 ^[a] , 1,89 ^[b]
82	NH-CO-R ^{1a}	metoximetilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,92 ^[a]
83	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,81 ^[a]
84	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,67 ^[a]
85	R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(OCH ₃)-	1,23 ^[a] , 2,27 ^[b]
86	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,44 ^[a]

Ej.	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a -Y ^b -	log P
87	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	tiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,54 ^[a] , 2 ^[b]
88	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	tiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,12 ^[a] , 2,7 ^[b]
89	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	tiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	1,9 ^[a] , 2,51 ^[b]
90	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,17 ^[a]
91	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,21 ^[a]
92	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	2 ^[a]
93	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	1,8 ^[a]
94	NH-CO-R ^{1a}	metoximetilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,14 ^[a]
95	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	1,87 ^[a]
96	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,44 ^[a]
97	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,91 ^[a]
98	NH-CO-R ^{1a}	bencilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,52 ^[a]
99	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	2,2 ^[a]
100	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	1,57 ^[a]
101	NH-CO-R ^{1a}	2-metilciclopropilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,83 ^[a]
102	NH-CO-R ^{1a}	ciclobutilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,93 ^[a]
103	NH-R ^{1a}	H	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	0,99 ^[a]
104	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	1,71 ^[a]
105	NH-CO-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	4-fluorofenilo	-C(CH ₃) ₂ OCH ₂ CH ₂ -	3,26 ^[a]
106	NH-CO-R ^{1a}	CH ₃	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	1,6 ^[a]

Ej.	R ¹	R ^{1a}	W	A	-Y ^a .Y ^b -	log P
107	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	1,97 ^[a]
108	NH-CO-R ^{1a}	2-metilciclopropilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,19 ^[a]
109	NH-CO-R ^{1a}	ciclobutilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,26 ^[a]
110	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)-	2,02 ^[a]
111	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH(CH ₃)-	2,34 ^[a]
112	NH-CO-R ^{1a}	2-metilpropilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ OCH ₂ CH ₂ -	2,51 ^[a]
113	NH-CO-R ^{1a}	ciclopropilmetilo	H	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ OCH ₂ -	2,22 ^[a]
114	R ^{1a}	H	H	5-clorotiofen-2-ilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH(OCH ₃)-	1,59 ^[a] , 2,88 ^[b]
115	NH-CO-R ^{1a}	etilo	H	fenilo	-CH ₂ CH ₂ SCH ₂ -	1,98 ^[a]
116	NH-CO-R ^{1a}	propan-2-ilo	H	4-fluorofenilo	-CH(CH ₃)OCH ₂ CH ₂ -	2,59 ^[a]
117	R ^{1a}	H	F	4-fluorofenilo	-CH(CH ₃)CH ₂ CH ₂ -	2,66 ^[a]
118	R ^{1a}	H	F	4-fluorofenilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	3,08 ^[a]

La determinación de los valores de logP se realizó de acuerdo con Directiva 79/831, Anexo V.A8 de EEC por HPLC (Cromatografía Líquida de Alto Rendimiento) en columnas de fase inversa (C 18), usando los siguientes

5 procedimientos:

[a] La determinación de CL-EM en el intervalo ácido se realizó a pH 2,7 usando ácido fórmico acuoso al 0,1 % y acetonitrilo (contenía ácido fórmico al 0,1 %) como fases móviles; gradiente lineal de acetonitrilo al 10 % a acetonitrilo al 95 %

10 [b] La determinación de CL-EM en el intervalo neutro se realizó a pH 7,8 usando una solución acuosa 0,001 molar de bicarbonato de amonio y acetonitrilo como

fases móviles; gradiente lineal de acetonitrilo al 10 % a acetonitrilo al 95 %.

[c] La determinación se realizó en el intervalo ácido a pH 2,3 usando ácido fosfórico acuoso al 0,1 % y acetonitrilo como fases móviles; gradiente lineal de acetonitrilo al 10 % a acetonitrilo al 95 %.

5 La calibración se realizó usando alcan-2-onas no ramificadas (que tenían de 3 a 16 átomos de carbono) con valores de logP conocidos (determinación de los valores de logP mediante los tiempos de retención usando interpolación lineal entre dos alcanonas sucesivas).

Los valores de lambda maX se determinaron en los máximos de las señales cromatográficas usando el espectro UV de 200 nm a 400 nm.

10 Las RMN de ¹H de los ejemplos seleccionados se enumeran en forma de listas de picos de RMN de ¹H. Para cada pico de señal, se proporcionan en primer lugar el valor de δ en ppm y después, separado por un espacio, la intensidad de señal. Los pares de números de valor δ/intensidad de señal de 15 picos de señales diferentes se enumeran separados por punto y coma.

Por consiguiente, la lista de picos de un ejemplo toma la forma:

δ₁ intensidad₁;δ₂ intensidad₂;.....;δ_i intensidad_i;.....; δ_n intensidad_n

El disolvente en el que se registró el espectro de RMN se proporciona entre corchetes después del número del ejemplo y antes de la lista de picos.

Ejemplo N° 2 [CD ₃ CN]	11,99	0,40;8,47	12,97;8,47	7,86;8,46	7,66;8,45	
	13,47;8,22	0,39;7,67	0,81;7,66	1,21;7,66	0,75;7,65	1,49;7,64
	1,55;7,64	1,17;7,62	0,61;7,62	1,58;7,61	1,85;7,61	1,01;7,60
	0,94;7,59	0,87;7,59	0,98;7,58	0,43;7,54	1,08;7,54	0,85;7,53
	1,20;7,52	1,57;7,51	1,43;7,49	0,70;7,41	0,73;7,41	7,03;7,40
	2,74;7,39	7,75;7,38	8,88;7,38	2,97;7,37	8,40;7,36	1,09;7,36
	0,52;7,12	15,59;7,12	9,55;7,11	9,27;7,11	15,62;7,08	

0,87;7,07	8,56;7,07	2,55;7,06	2,53;7,05	16,00;7,04	2,83;7,03	2,53;7,03
7,69;7,02	0,70;5,73	0,39;5,45	0,48;4,18	5,93;4,16	10,77;4,15	6,32;3,55
0,40;3,27	0,46;3,14	0,37;2,83	5,42;2,81	10,85;2,79	6,16;2,76	0,40;2,62
0,44;2,18	0,54;2,15	551,68;2,13	4,84;2,12	1,12;2,11	1,33;2,11	2,84;2,10
2,13;2,09	3,50;2,08	3,26;2,08	5,42;2,07	3,21;2,06	4,10;2,05	1,23;2,05
2,24;2,00	0,44;1,98	3,51;1,96	557,98;1,96	13,95;1,95	92,46;1,95	172,38;1,94
247,36;1,93	168,83;1,93	85,79;1,90	0,61;1,89	2,35;1,89	1,48;1,88	5,48;1,87
2,91;1,86	4,97;1,86	2,75;1,85	4,23;1,84	1,23;1,83	1,44;1,79	3,22;1,78
0,53;1,77	1,31;1,77	1,53;1,76	0,96;1,76	0,59;1,38	0,40;1,27	0,68;1,20
0,78;1,14	12,44;1,11	1,17;1,10	0,55;0,97	0,41;0,00	6,71;-0,56	0,38;-0,91
0,38						
Ejemplo N° 3 [CD₃CN]						
7,87	7,80;7,86	6,71;7,78	1,44;7,77	1,50;7,76		
1,16;7,75	1,04;7,44	9,44;7,44	4,07;7,43	9,65;7,43	8,10;7,42	2,95;7,42
7,08;7,13	1,74;7,11	2,77;7,10	1,52;7,07	9,74;7,06	3,13;7,06	4,53;7,05
16,00;7,05	2,20;7,04	2,43;7,04	6,56;6,37	7,59;6,36	7,23;6,36	6,66;6,35
6,10;6,32	10,23;6,32	10,42;6,30	1,41;4,82	5,76;4,16	8,39;4,15	14,05;4,14
7,58;4,10	1,14;4,09	2,01;4,08	1,12;4,07	0,54;4,05	0,56;3,68	0,43;3,60
2,65;3,53	0,62;3,52	0,49;2,81	1,58;2,80	2,56;2,79	8,07;2,78	14,32;2,77
7,81;2,28	2,05;2,19	1484,50;2,08	2,72;2,07	5,29;2,07	4,98;2,06	8,04;2,06
5,25;2,05	6,72;2,05	4,22;2,04	3,86;2,03	1,81;2,02	1,52;1,97	5,85;1,97
111,79;1,96	16,95;1,95	18,95;1,95	136,97;1,95	254,23;1,94	364,32;1,94	
249,63;1,93	135,01;1,87	3,21;1,87	2,52;1,86	7,43;1,86	5,06;1,85	8,47;1,85
5,29;1,84	7,14;1,84	3,12;1,83	4,76;1,83	3,15;1,82	2,23;1,45	5,08;1,27
4,10;1,22	1,13;1,20	2,13;1,20	2,53;1,19	1,09;1,13	7,78;1,11	0,95;0,91
1,33;0,88	0,75;0,00	3,34				
Ejemplo N° 5 [CD₃CN]						
8,56	0,33;8,53	1,20;8,12	3,16;8,12	3,17;8,11		

3,14;8,11	3,19;8,02	3,46;7,44	0,52;7,43	3,23;7,43	1,41;7,42	3,61;7,41
3,85;7,40	1,60;7,40	3,57;7,07	0,61;7,07	3,81;7,06	1,27;7,05	1,73;7,04
6,89;7,04	1,51;7,03	1,20;7,02	3,20;6,78	3,10;6,78	3,06;6,77	2,97;6,77
2,94;5,45	3,87;4,18	3,04;4,16	5,56;4,14	3,17;4,07	0,41;4,05	0,45;3,60
0,62;2,83	2,87;2,82	5,71;2,80	3,12;2,58	0,32;2,47	0,39;2,42	2,28;2,40
7,10;2,38	7,25;2,36	2,60;2,32	0,39;2,30	0,47;2,16	3440;79;2,13	13,90;2,12
7,86;2,11	7,71;2,11	7,72;2,10	6,49;2,09	5,91;2,09	4,54;2,08	5,30;2,07
3,92;2,07	4,12;2,05	2,75;1,96	348,62;1,96	48,76;1,95	229,54;1,95	
416,81;1,94	574,60;1,93	393,69;1,93	202,54;1,90	4,69;1,88	4,85;1,88	
3,70;1,87	4,13;1,86	3,41;1,84	1,76;1,79	2,58;1,78	1,98;1,77	2,97;1,77
3,77;1,76	2,92;1,76	1,71;1,73	0,70;1,71	0,63;1,70	0,58;1,65	0,50;1,62
0,44;1,60	0,41;1,59	0,44;1,58	0,48;1,55	0,42;1,50	0,39;1,46	0,34;1,44
0,38;1,41	0,35;1,40	0,34;1,39	0,38;1,33	0,34;1,33	0,33;1,27	1,81;1,25
0,38;1,23	0,40;1,22	0,85;1,20	1,36;1,19	0,75;1,14	1,26;1,13	7,97;1,11
16,00;1,09	7,52;0,91	1,43;0,90	0,33;0,15	1,39;0,05	0,43;0,01	17,04;0,00
336,21;-0,01	14,03;-0,15	1,41				
Ejemplo N° 6 [CD 3CN]						
8,34	1,99;8,33	2,00;7,40	2,57;7,40	0,94;7,39		
2,72;7,39	2,84;7,38	1,00;7,38	2,70;7,06	2,91;7,06	0,85;7,05	0,93;7,05
5,48;7,04	0,92;7,04	0,83;7,03	2,62;7,01	2,33;6,91	1,32;6,90	1,27;6,90
1,29;6,90	1,23;5,45	1,02;4,17	2,21;4,16	3,92;4,15	2,28;2,81	2,08;2,80
4,07;2,79	2,26;2,42	16,00;2,16	311,44;2,09	0,67;2,09	0,47;2,08	1,29;2,08
1,40;2,07	2,04;2,07	1,13;2,06	1,50;2,06	0,96;2,05	1,58;2,05	0,73;2,04
0,36;1,97	0,69;1,97	86,82;1,96	2,30;1,95	3,09;1,95	63,52;1,95	122,98;1,94
177,45;1,94	117,58;1,93	60,40;1,93	1,80;1,92	0,85;1,88	0,77;1,87	0,45;1,87
1,85;1,86	1,06;1,86	1,70;1,85	1,03;1,85	0,96;1,85	1,64;1,84	0,43;1,84

0,61;1,84	0,43;1,83	0,71;1,83	1,04;1,82	0,71;1,82	0,36;1,27	0,37;1,13	2,93;0,91	0,69;0,01	0,95;0,00	35,06;-0,01	1,01
Ejemplo N° 7 [DMSO-D ₆] 8,45 14,21;8,45 9,47;8,44 9,73;8,44 14,23;7,95 1,10;7,44 1,27;7,43 7,47;7,42 3,71;7,41 8,66;7,41 9,90;7,40 4,10;7,39 8,79;7,39 1,33;7,24 1,58;7,24 9,24;7,23 3,34;7,22 4,25;7,21 15,98;7,21 3,93;7,20 3,19;7,19 7,37;7,18 1,16;7,15 16,00;7,14 10,41;7,14 10,38;7,13 15,31;4,19 6,64;4,17 10,29;4,15 6,85;4,10 0,38;3,91 0,56;3,48 0,35;3,47 0,35;3,32 762,33;3,08 6,00;3,06 9,64;3,04 6,98;2,89 8,51;2,73 6,85;2,68 0,65;2,67 0,83;2,67 0,74;2,66 0,58;2,65 2,17;2,63 5,71;2,61 7,80;2,59 4,97;2,58 1,94;2,56 0,69;2,54 1,36;2,51 39,75;2,51 71,47;2,50 91,33;2,50 64,50;2,49 32,07;2,33 0,46;2,33 0,60;2,32 0,50;2,07 1,53;1,99 1,14;1,19 0,33;1,18 0,65;1,16 1,37;1,07 3,83;0,01 0,66;0,00 11,20;-0,01 0,56											
Ejemplo N° 8 [CD ₃ CN] 8,53 1,12;8,11 3,09;8,11 3,15;8,10 3,15;8,10 3,18;8,03 3,46;7,42 2,54;7,41 1,89;7,41 1,96;7,41 3,74;7,40 2,68;7,40 3,90;7,39 4,04;7,33 0,32;7,33 0,34;7,31 2,13;7,31 5,95;7,30 3,89;7,30 6,48;7,29 6,44;7,28 0,74;6,78 3,01;6,77 2,95;6,77 2,96;6,76 2,81;5,45 0,50;4,18 3,17;4,17 5,71;4,15 3,27;2,83 3,01;2,82 5,88;2,80 3,25;2,42 2,29;2,40 7,11;2,38 7,35;2,36 2,55;2,15 675,49;2,12 3,68;2,11 3,82;2,11 3,64;2,10 3,87;2,09 2,99;2,08 3,90;2,08 2,67;2,07 2,97;2,06 1,44;2,05 1,66;2,03 0,64;1,97 4,46;1,96 34,85;1,96 16,18;1,95 78,40;1,95 145,50;1,94 202,52;1,93 139,85;1,93 71,95;1,90 2,62;1,90 2,01;1,89 3,55;1,88 2,55;1,87 3,23;1,87 2,22;1,86 2,62;1,84 1,11;1,81 0,33;1,79 0,43;1,78 0,62;1,77 1,02;1,77 1,30;1,76 0,96;1,76 0,59;1,27 0,63;1,22 0,44;1,20 0,80;1,19 0,44;1,14 0,77;1,13 7,90;1,11 1,86;1,11 16,00;1,10 1,03;1,09 7,46;0,91 0,59;0,01 4,13;0,00 79,89;-0,01 3,62											

Ejemplo N° 9 [CD ₃ CN]	8,46	12,86;8,46	7,80;8,45	7,80;8,45	13,17;7,39	0,50;7,39	0,79;7,39	5,54;7,38	5,31;7,38	4,64;7,38	5,42;7,38	6,38;7,37	4,19;7,37	8,36;7,36	1,28;7,32	2,03;7,32	5,24;7,32	16,00;7,31	7,73;7,31	14,42;7,31	7,23;7,30	13,01;7,30	2,39;7,30	0,96;7,12	15,56;7,12	9,27;7,11	9,12;7,11	15,39;5,45	0,33;4,18	6,91;4,17	12,35;4,16	7,20;4,05	0,33;2,83	6,58;2,82	12,77;2,81	7,06;2,17	1619,57;2,10	2,17;2,10	1,46;2,09	4,14;2,09	3,59;2,08	6,62;2,08	5,09;2,07	4,82;2,07	1,47;2,06	2,53;2,06	1,93;2,05	2,74;2,05	1,86;2,04	0,98;1,97	2,98;1,97	279,75;1,96	6,42;1,95	8,89;1,95	167,54;1,95	322,73;1,94	461,38;1,94	316,75;1,93	161,66;1,93	5,13;1,92	2,45;1,89	2,50;1,88	1,49;1,88	6,01;1,87	3,41;1,87	5,52;1,86	3,27;1,86	5,30;1,85	1,40;1,85	2,11;1,85	2,01;1,84	1,01;1,83	1,90;1,83	2,76;1,82	1,89;1,82	0,96;1,28	0,43;1,27	1,33;1,22	0,44;1,20	0,85;1,20	1,84;1,19	0,43;1,13	2,71;1,13	0,55;1,11	1,07;1,10	0,56;0,91	3,98;0,89	0,34;0,88	0,34;0,00	3,57
Ejemplo N° 10 [DMSO-D ₆]	8,44	5,14;8,43	3,87;8,42	4,95;8,13	1,10;7,39	4,34;7,38	16,00;7,37	3,75;7,36	3,33;7,35	1,23;7,35	1,19;7,15	6,72;7,14	4,32;7,14	4,38;7,13	6,19;6,49	5,26;5,75	0,40;4,20	3,14;4,18	4,79;4,16	3,14;4,02	0,35;3,71	0,42;3,69	0,44;3,67	0,43;3,65	0,41;3,62	0,47;3,60	0,47;3,56	0,53;3,53	0,59;3,51	0,72;3,49	0,78;3,48	0,80;3,47	0,90;3,31	912,25;3,08	2,62;3,07	4,22;3,05	3,01;2,69	0,46;2,67	1,30;2,67	1,62;2,67	1,29;2,65	1,31;2,63	2,95;2,62	3,96;2,60	2,80;2,58	1,47;2,54	6,96;2,51	88,21;2,50	153,79;2,50	192,19;2,50	132,85;2,33	0,89;2,33	1,19;2,32	0,89;2,30	0,89;2,07	1,54;1,24	0,76;0,00	20,61																																
Ejemplo N° 11 [DMSO-D ₆]	8,47	10,09;8,46	6,48;8,46	6,68;8,45	10,02;7,45	5,95;7,45	2,75;7,44	4,42;7,43	16,00;7,43	3,64;7,41	4,20;7,41	15,79;7,40																																																																														

3,94;7,39 2,73;7,39 5,59;7,16 10,84;7,16 6,93;7,15 6,97;7,15 10,30;4,20 4,19;4,18 6,43;4,16 4,24;4,06 0,59;4,04 1,68;4,02 1,69;4,00 0,58;3,90 0,40;3,31 291,79;3,28 4,09;3,07 3,76;3,06 6,02;3,04 4,32;2,67 0,50;2,67 0,63;2,66 0,53;2,66 0,41;2,65 1,38;2,63 3,57;2,61 4,91;2,59 3,09;2,58 1,21;2,54 1,07;2,51 32,86;2,51 58,60;2,50 74,75;2,50 52,07;2,49 25,07;2,33 0,37;2,33 0,47;2,32 0,34;2,07 0,67;1,99 7,32;1,47 0,42;1,31 0,45;1,19 2,10;1,18 4,13;1,16 2,08;1,07 2,72;0,01 0,60;0,00 10,19;-0,01 0,41
Ejemplo N° 12 [DMSO-D ₆] 8,73 0,63;8,73 0,44;8,72 0,45;8,72 0,67;8,44 3,45;8,43 2,24;8,42 2,28;8,42 3,53;7,83 0,76;7,83 0,50;7,82 0,49;7,82 0,73;7,32 0,50;7,31 3,47;7,31 1,27;7,30 1,39;7,29 3,92;7,28 0,52;7,15 3,71;7,15 2,38;7,14 2,37;7,14 3,56;6,96 0,58;6,95 3,90;6,95 1,36;6,93 1,29;6,93 3,42;6,92 0,47;4,17 1,42;4,15 2,23;4,14 1,48;3,78 16,00;3,31 295,82;3,07 1,33;3,05 2,10;3,03 1,54;2,67 0,40;2,67 0,52;2,66 0,40;2,64 0,49;2,62 1,27;2,60 1,75;2,58 1,16;2,57 0,54;2,54 1,05;2,51 29,97;2,50 54,32;2,50 69,80;2,50 49,02;2,49 24,18;2,33 0,40;2,33 0,49;2,32 0,37;2,07 0,44;1,99 0,83;1,17 0,46;0,00 3,60
Ejemplo N° 13 [DMSO-D ₆] 8,13 0,67;8,12 0,68;7,47 0,74;7,47 0,34;7,46 0,52;7,45 1,81;7,45 0,41;7,43 0,45;7,42 1,82;7,42 0,50;7,41 0,35;7,40 0,73;7,08 0,40;7,07 0,32;7,07 0,39;6,89 0,87;4,21 0,50;4,19 0,78;4,17 0,51;3,91 2,62;3,32 17,61;3,11 0,45;3,09 0,74;3,08 0,52;2,64 0,43;2,62 0,59;2,60 0,37;2,51 1,32;2,51 2,34;2,50 2,98;2,50 2,11;1,99 0,80;1,18 0,44;1,07 16,00
Ejemplo N° 14 [CD ₃ CN] 7,78 0,55;7,77 0,57;7,44 0,48;7,43 0,37;7,43 0,65;7,42 0,80;7,41 0,74;7,40 0,38;7,34 0,33;7,33 0,91;7,33 0,96;7,32 1,37;7,31 1,18;6,44 0,86;6,42 0,63;6,42 0,46;6,40 0,55;6,40 0,46;4,18

0,60;4,16	1,06;4,15	0,62;3,77	0,88;3,67	1,75;2,82	0,57;2,80	1,10;2,79	
0,62;2,35	1,03;2,17	15,08;2,11	1,47;2,11	1,47;2,10	1,17;2,09	1,08;2,08	
0,95;2,08	1,09;2,07	0,80;2,06	0,84;2,05	0,53;1,96	18,43;1,96	4,21;1,95	
20,77;1,95	37,93;1,94	52,45;1,93	36,36;1,93	18,80;1,90	0,50;1,89	0,40;1,88	
0,69;1,88	0,51;1,87	0,63;1,86	0,45;1,85	0,53;1,77	0,37;1,20	1,20;1,14	
16,00;0,01	0,40;0,00	7,38;-0,01	0,33				
Ejemplo N° 15 [CD ₃ CN] 8,64 1,88;8,13 7,15;8,13 6,86;8,12 7,11;8,12							
7,02;7,99	3,30;7,97	0,38;7,43	0,74;7,42	7,82;7,42	2,89;7,41	8,21;7,41	
8,52;7,40	3,04;7,40	8,16;7,39	0,86;7,07	0,87;7,06	8,62;7,06	2,57;7,05	
2,79;7,05	16,00;7,04	2,85;7,03	2,47;7,03	7,75;7,03	0,78;6,80	6,93;6,80	
6,87;6,79	6,72;6,79	6,75;5,45	1,03;4,17	6,62;4,16	11,98;4,15	6,87;4,08	
0,41;4,07	1,17;4,05	1,19;4,04	0,40;3,55	0,33;3,54	0,35;3,53	0,35;3,53	
0,34;2,82	6,30;2,81	12,42;2,80	6,75;2,54	0,36;2,20	3758,35;2,10	2,22;2,09	
67,52;2,08	4,51;2,08	6,46;2,07	3,66;2,07	4,64;2,06	2,54;2,06	3,55;2,05	
3,65;2,05	2,41;2,05	1,23;1,98	0,64;1,97	6,08;1,97	102,59;1,96	15,98;1,95	
19,90;1,95	220,52;1,95	409,99;1,94	602,47;1,94	409,64;1,93	205,63;1,93		
6,76;1,93	3,04;1,89	2,11;1,88	1,35;1,87	5,38;1,87	3,28;1,86	5,16;1,86	
3,13;1,86	4,74;1,85	1,26;1,84	1,73;1,84	1,28;1,83	2,32;1,83	3,36;1,82	
2,31;1,82	1,21;1,27	1,52;1,22	1,53;1,20	3,03;1,19	1,51;1,13	1,41;1,11	
2,77;1,10	1,45;0,91	2,34;0,00	5,81				
Ejemplo N° 16 [CD ₃ CN] 8,09 0,54;8,09 0,59;7,72 0,69;7,43 0,64;7,42							
0,73;7,41	0,79;7,41	0,35;7,40	0,76;7,06	0,69;7,05	1,37;7,03	0,70;6,75	
0,50;6,74	0,53;6,74	0,54;6,74	0,56;4,17	0,66;4,16	1,21;4,15	0,69;2,82	
0,68;2,81	1,17;2,80	0,63;2,25	0,43;2,24	0,60;2,21	281,02;2,09	0,60;2,08	
0,67;2,08	0,44;2,07	0,51;2,05	0,35;1,97	3,93;1,96	1,61;1,96	2,05;1,95	

19,68;1,95 36,83;1,94 52,56;1,94 34,71;1,93 17,69;1,88 0,55;1,88 0,40;1,87 0,58;1,86 0,48;1,83 0,32;1,45 16,00;1,31 0,38;1,27 1,83;0,93 0,34;0,88 0,37
Ejemplo N° 17 [DMSO-D₆] 8,49 7,10;8,49 4,64;8,48 4,71;8,47 7,19;7,83 0,32;7,75 4,48;7,73 6,06;7,63 5,84;7,61 4,30;7,19 7,71;7,18 5,00;7,18 4,93;7,17 7,46;5,75 0,36;4,23 2,98;4,21 4,57;4,19 3,07;4,06 1,23;4,04 3,65;4,02 3,68;4,00 1,25;3,78 0,61;3,31 319,54;3,29 2,38;3,08 2,68;3,06 4,34;3,05 3,16;2,67 0,37;2,67 0,54;2,66 1,06;2,64 2,53;2,63 3,49;2,61 2,21;2,59 0,83;2,54 0,88;2,52 1,90;2,51 21,87;2,51 39,93;2,50 51,66;2,50 36,22;2,49 17,70;2,33 0,36;1,99 16,00;1,91 1,60;1,19 4,47;1,18 8,89;1,16 4,40;1,07 1,32;0,00 0,54
Ejemplo N° 18 [DMSO-D₆] 9,57 1,03;8,09 0,83;8,08 0,89;7,69 1,06;7,43 0,76;7,43 0,38;7,42 0,90;7,41 0,98;7,40 0,44;7,40 0,86;7,22 0,91;7,21 0,34;7,19 1,56;7,18 0,34;7,17 0,74;6,74 0,72;6,73 0,69;6,72 0,70;6,72 0,67;4,19 0,60;4,17 0,93;4,15 0,61;3,30 299,11;3,28 3,24;3,05 0,53;3,03 0,86;3,01 0,59;2,67 0,38;2,67 0,50;2,66 0,42;2,66 0,38;2,64 0,58;2,62 0,75;2,60 0,55;2,59 0,33;2,54 1,28;2,51 26,66;2,50 47,67;2,50 60,62;2,50 41,83;2,49 20,06;2,33 0,38;2,07 1,33;1,47 1,00;1,42 16,00;1,31 0,45;1,21 0,44;1,20 0,45;1,18 1,06;1,16 1,02;0,00 3,28
Ejemplo N° 19 [CD₃CN] 8,63 1,93;8,12 7,24;8,12 7,35;8,11 7,63;8,11 7,35;8,00 3,39;7,42 0,50;7,41 0,52;7,41 2,30;7,41 6,15;7,41 3,47;7,40 3,65;7,40 8,80;7,40 5,33;7,40 8,74;7,39 9,03;7,39 0,97;7,39 0,95;7,39 1,00;7,38 0,52;7,32 0,44;7,32 0,37;7,31 1,39;7,31 3,34;7,31 2,63;7,30 11,84;7,30 9,56;7,30 6,66;7,30 14,41;7,29 16,00;7,29 1,52;6,79 6,84;6,79 6,87;6,78 7,01;6,78 6,88;4,18 6,83;4,17 12,43;4,16 7,13;4,08 0,97;4,06 2,83;4,05 2,84;4,04 0,95;2,82 6,50;2,81 12,83;2,80 7,00;2,29 0,40;2,28

0,49;2,27	0,45;2,26	0,47;2,21	1,58;2,19	3,13;2,16	5,28;2,11	2,10;2,10
2,67;2,09	2,30;2,08	69,67;2,08	8,12;2,07	4,29;2,07	5,19;2,06	1,89;2,06
2,63;2,06	1,23;2,05	1,23;2,05	0,90;2,04	0,60;2,01	0,43;1,99	0,44;1,99
0,40;1,98	0,35;1,98	0,68;1,97	12,82;1,97	8,69;1,96	8,56;1,96	4,73;1,95
5,10;1,95	52,78;1,95	101,61;1,94	147,51;1,94	96,93;1,93	48,66;1,92	
0,88;1,89	2,29;1,88	1,51;1,88	5,68;1,87	3,50;1,87	5,52;1,86	3,36;1,86
4,94;1,85	1,40;1,85	1,80;1,83	0,40;1,83	0,65;1,83	0,94;1,82	0,68;1,82
0,38;1,27	1,25;1,22	3,81;1,20	7,66;1,19	3,62;1,16	0,44;1,15	0,51;1,13
1,08;1,11	0,56;1,10	0,36;1,10	0,34;1,06	0,50;0,92	0,32;0,88	0,36;0,01
1,35;0,00	47,40;-0,01	1,39				
Ejemplo Nº 20 [CD ₃ CN]						
8,86	2,00;8,13	6,39;8,13	6,65;8,12	6,76;8,12		
6,49;8,00	5,69;7,43	0,71;7,42	7,59;7,42	2,70;7,41	7,94;7,41	8,15;7,40
2,80;7,40	7,87;7,39	0,80;7,06	0,87;7,05	8,49;7,05	2,45;7,04	2,65;7,04
16,00;7,04	2,63;7,03	2,38;7,02	7,62;7,02	0,74;6,77	6,95;6,77	6,87;6,77
6,64;6,76	6,59;5,45	1,47;4,16	5,76;4,15	10,28;4,14	5,91;2,80	5,43;2,79
10,67;2,78	5,81;2,16	685,93;2,09	1,70;2,09	1,24;2,08	3,34;2,08	3,58;2,08
3,08;2,07	5,24;2,06	3,12;2,06	4,74;2,06	2,59;2,05	3,17;2,05	2,05;2,05
2,21;2,04	1,00;1,97	2,65;1,97	353,50;1,96	13,17;1,95	15,55;1,95	169,29;1,95
311,80;1,94	474,83;1,94	324,65;1,93	157,51;1,93	4,26;1,92	1,93;1,92	
0,44;1,88	1,84;1,87	1,18;1,87	4,60;1,86	2,85;1,86	4,35;1,85	2,83;1,85
3,48;1,85	4,10;1,84	1,10;1,84	1,49;1,84	1,32;1,83	1,87;1,83	2,56;1,82
1,81;1,82	0,95;1,80	0,92;1,79	1,94;1,78	2,07;1,78	3,38;1,77	1,37;1,77
2,17;1,76	2,12;1,76	1,05;1,45	0,33;1,28	0,42;1,27	1,43;1,13	1,16;1,11
2,38;1,10	1,20;0,91	1,52;0,88	0,36;0,88	2,12;0,87	5,56;0,86	8,14;0,86
5,13;0,86	4,88;0,86	7,78;0,85	3,11;0,85	1,58;0,84	4,26;0,83	7,98;0,83

4,80;0,82 3,83;0,82 8,93;0,82 4,13;0,81 1,41;0,81 1,57;0,01 1,27;0,00 46,54;- 0,01 1,28
Ejemplo N° 21 [CD 3CN] 8,87 2,15;8,12 6,63;8,12 6,93;8,11 6,97;8,11 6,79;8,01 6,02;7,41 0,53;7,41 0,60;7,41 2,20;7,40 5,95;7,40 3,38;7,40 3,53;7,40 8,34;7,40 5,18;7,39 8,48;7,39 8,64;7,39 0,96;7,38 1,02;7,38 0,49;7,32 0,46;7,32 0,41;7,31 1,52;7,31 3,04;7,31 2,73;7,30 10,96;7,30 9,17;7,30 6,52;7,30 13,60;7,29 16,00;7,28 1,55;6,77 6,75;6,77 6,72;6,76 6,84;6,76 6,62;5,45 2,85;4,17 6,19;4,16 11,15;4,15 6,46;3,54 0,41;3,53 0,41;2,81 5,81;2,80 11,47;2,79 6,30;2,17 121,73;2,09 2,36;2,09 1,92;2,08 4,14;2,08 3,88;2,08 3,85;2,07 6,16;2,07 3,86;2,06 4,57;2,06 2,02;2,06 1,84;2,06 2,37;2,05 2,49;2,05 2,80;2,05 1,73;2,04 0,95;1,97 3,34;1,97 257,13;1,96 11,13;1,95 15,26;1,95 129,36;1,95 246,94;1,94 355,17;1,94 233,11;1,93 114,36;1,93 4,21;1,92 2,10;1,88 2,11;1,88 1,49;1,87 5,18;1,87 3,30;1,86 4,96;1,86 3,17;1,85 5,85;1,85 1,34;1,84 1,70;1,84 0,95;1,83 1,50;1,83 2,13;1,82 1,49;1,82 0,80;1,80 1,09;1,79 2,23;1,78 2,36;1,78 3,76;1,77 1,70;1,77 2,45;1,76 2,37;1,75 1,22;1,51 0,57;1,50 1,09;1,49 1,16;1,49 0,68;1,49 1,86;1,48 0,73;1,48 1,19;1,47 1,17;1,47 0,61;1,27 1,12;1,22 0,47;1,20 0,90;1,19 0,45;1,13 0,60;1,13 1,11;1,11 2,15;1,10 1,04;0,91 1,01;0,88 0,34;0,87 2,22;0,87 6,00;0,86 8,75;0,86 5,69;0,86 5,37;0,85 8,51;0,85 3,90;0,84 1,78;0,84 1,22;0,84 1,23;0,84 4,36;0,83 8,44;0,83 5,12;0,82 4,24;0,82 9,09;0,81 4,27;0,81 1,54;0,80 1,65;0,75 0,81;0,74 0,85;0,74 2,83;0,74 4,26;0,73 2,38;0,73 2,14;0,73 3,86;0,72 1,08;0,72 1,51;0,71 0,64;0,71 0,84;0,70 1,65;0,70 4,33;0,69 2,37;0,69 1,80;0,69 1,23;0,68 4,04;0,68 2,05;0,68 1,01;0,67 0,82;0,01 0,72;0,00 21,79;- 0,01 0,67

Ejemplo N° 22 [CD 3CN] 8,73 0,33;8,17 1,22;8,16 1,30;8,16 1,32;8,16									
1,32;8,02	1,10;8,02	1,12;7,43	1,48;7,42	0,51;7,42	1,57;7,42	0,60;7,41			
0,60;7,41	1,56;7,41	0,52;7,40	1,52;7,06	1,55;7,06	0,46;7,05	0,50;7,05			
3,02;7,04	0,49;7,04	0,46;7,03	1,50;6,85	1,40;6,85	1,36;6,84	1,30;6,84			
1,35;5,45	4,31;4,17	1,04;4,16	1,88;4,15	1,09;3,97	7,87;3,45	16,00;2,84			
0,99;2,82	1,95;2,81	1,07;2,17	25,36;2,09	0,59;2,08	0,54;2,08	0,95;2,07			
0,55;2,07	0,69;2,06	0,36;1,97	1,99;1,96	0,47;1,95	0,57;1,95	6,22;1,95			
11,65;1,94	18,33;1,94	12,52;1,93	5,86;1,89	0,33;1,88	0,85;1,87	0,52;1,87			
0,79;1,86	0,50;1,86	0,75;0,00	0,88						
Ejemplo N° 23 [CD 3CN] 8,72 0,43;8,15 1,44;8,15 1,40;8,15 1,45;8,14									
1,45;8,03	1,48;7,41	1,13;7,41	0,66;7,41	0,68;7,41	1,69;7,40	1,06;7,40			
1,65;7,40	1,70;7,31	0,62;7,31	2,30;7,31	1,84;7,31	1,28;7,30	2,79;7,30			
3,09;6,84	1,33;6,84	1,34;6,84	1,32;6,83	1,31;4,18	1,34;4,17	2,44;4,16			
1,40;3,97	8,57;3,45	16,00;3,36	0,42;2,84	1,27;2,83	2,53;2,82	1,37;2,16			
56,22;2,10	0,38;2,09	0,79;2,09	0,71;2,08	1,27;2,08	0,75;2,07	0,93;2,06			
0,45;1,97	0,63;1,97	10,22;1,96	1,18;1,95	1,42;1,95	14,78;1,95	28,14;1,94			
41,34;1,94	27,46;1,93	13,53;1,89	0,43;1,88	1,10;1,88	0,68;1,87	1,07;1,87			
0,65;1,86	0,97;1,85	0,35;0,00	3,68						
Ejemplo N° 24 [CD 3CN] 9,00 0,94;8,16 3,12;8,16 3,14;8,15 3,18;8,15									
3,20;8,04	2,84;7,43	0,37;7,43	3,55;7,43	1,35;7,42	3,77;7,41	3,86;7,41			
1,38;7,41	3,68;7,40	0,40;7,07	0,40;7,06	3,90;7,06	1,15;7,05	1,26;7,05			
7,37;7,05	1,26;7,04	1,12;7,03	3,56;7,03	0,36;6,83	3,22;6,83	3,18;6,82			
3,13;6,82	3,14;4,25	0,42;4,24	1,26;4,23	1,29;4,22	0,44;4,17	2,68;4,16			
4,74;4,15	2,84;4,06	0,61;4,05	0,63;4,05	0,63;4,00	0,39;3,78	1,62;3,49			
1,12;3,36	2,74;2,84	2,14;2,83	4,25;2,82	2,45;2,17	153,67;2,10	0,87;2,10			

0,63;2,09	1,70;2,09	1,70;2,08	2,87;2,08	1,66;2,07	1,97;2,07	0,66;2,06	
1,06;2,06	0,71;2,05	0,93;2,05	0,66;2,04	0,34;1,97	2,84;1,97	0,47;1,97	
53,39;1,96	4,42;1,95	4,98;1,95	56,63;1,95	105,31;1,94	154,76;1,94		
105,89;1,93	52,70;1,93	1,80;1,92	0,82;1,92	0,35;1,89	0,90;1,89	0,60;1,88	
2,23;1,88	1,39;1,87	2,22;1,87	1,38;1,86	1,73;1,86	0,61;1,85	0,89;1,84	
0,37;1,83	0,64;1,83	0,92;1,82	0,63;1,82	0,34;1,37	16,00;1,36	15,93;1,27	
0,47;1,22	0,86;1,20	1,58;1,19	0,80;1,13	0,53;1,11	1,07;1,10	0,55;0,91	
0,55;0,01	0,36;0,00	14,03;-0,01	0,42				
Ejemplo N° 25 [CD ₃ CN] 9,00 1,02;8,15 2,86;8,14 2,91;8,06 3,11;7,42							
0,97;7,41	2,70;7,41	1,61;7,41	1,66;7,41	3,85;7,41	2,52;7,40	4,01;7,40	
4,04;7,39	0,54;7,32	0,65;7,32	1,39;7,31	1,22;7,31	5,11;7,31	4,58;7,31	
3,15;7,30	6,65;7,30	7,97;7,29	0,81;6,82	3,13;6,82	3,20;6,82	3,16;6,81	
3,14;5,45	1,47;4,25	0,42;4,24	1,27;4,23	1,29;4,22	0,45;4,18	2,92;4,17	
5,19;4,16	3,06;4,00	0,54;2,84	2,47;2,83	4,88;2,82	2,77;2,16	349,12;2,11	
0,94;2,10	0,72;2,10	1,86;2,09	1,75;2,09	3,12;2,08	1,80;2,08	2,52;2,07	
0,75;2,07	1,05;2,06	0,48;2,06	0,75;2,05	1,10;2,05	0,76;2,04	0,39;1,97	
1,32;1,97	135,15;1,96	5,99;1,95	6,98;1,95	67,53;1,95	129,20;1,94		
187,18;1,94	124,02;1,93	62,30;1,92	1,31;1,90	1,06;1,89	0,73;1,89	2,51;1,88	
1,57;1,88	2,50;1,87	1,53;1,87	1,97;1,85	0,68;1,85	0,91;1,84	0,43;1,83	
0,75;1,83	1,09;1,82	0,78;1,82	0,41;1,37	15,89;1,36	16,00;1,27	0,40;1,13	
0,47;1,11	0,90;1,10	0,43;0,91	0,61;0,01	0,56;0,00	17,88;-0,01	0,57	
Ejemplo N° 26 [CD ₃ CN] 8,13 0,49;8,11 1,39;8,11 1,42;8,10 1,39;8,10							
1,37;7,76	1,50;7,43	1,49;7,43	0,59;7,42	1,60;7,42	1,66;7,41	0,60;7,41	
1,58;7,07	1,71;7,06	0,56;7,05	0,55;7,05	3,17;7,05	0,59;7,04	0,46;7,04	
1,51;6,77	1,33;6,77	1,33;6,76	1,34;6,76	1,33;5,45	0,72;4,17	1,26;4,16	

2,30;4,15	1,32;3,69	16,00;2,83	1,22;2,82	2,38;2,81	1,28;2,16	220,97;2,10
0,39;2,09	0,76;2,09	0,71;2,08	1,21;2,08	0,72;2,07	0,88;2,06	0,49;2,06
0,41;2,05	0,59;2,05	0,40;1,97	0,39;1,97	12,90;1,96	2,70;1,95	3,15;1,95
36,26;1,95	69,14;1,94	99,80;1,94	65,90;1,93	33,48;1,93	1,12;1,92	0,51;1,89
0,43;1,88	1,06;1,88	0,68;1,87	1,03;1,87	0,64;1,86	0,93;1,85	0,38;1,83
0,40;1,83	0,59;1,82	0,40;1,27	0,37;1,13	0,33;1,11	0,62;0,00	8,16
Ejemplo N° 27 [CD ₃ CN] 8,10 1,34;8,09 1,28;8,09 1,34;8,09 1,32;8,06						
0,39;7,78	1,16;7,77	1,33;7,77	1,32;7,42	1,30;7,41	0,75;7,41	0,73;7,41
1,36;7,41	1,00;7,40	1,68;7,40	1,69;7,32	0,45;7,32	0,77;7,32	0,66;7,31
1,97;7,31	1,93;7,31	1,30;7,30	2,71;7,30	3,57;7,30	0,40;6,76	1,32;6,76
1,30;6,75	1,33;6,75	1,31;5,45	0,51;4,18	1,20;4,17	2,12;4,16	1,24;3,77
0,32;3,72	0,68;3,68	16,00;3,68	0,42;3,55	0,77;2,83	1,16;2,82	2,19;2,81
1,22;2,19	0,59;2,16	494,63;2,13	0,37;2,11	0,43;2,10	0,32;2,10	0,75;2,09
0,71;2,09	1,19;2,08	0,71;2,08	2,88;2,07	0,34;2,07	0,44;2,06	0,64;2,06
1,10;2,05	1,56;2,05	1,11;2,04	0,55;1,97	2,91;1,97	395,06;1,96	8,76;1,95
9,24;1,95	102,32;1,95	189,07;1,94	284,13;1,94	194,04;1,93	96,18;1,93	
3,13;1,92	1,46;1,92	0,61;1,92	0,40;1,92	0,35;1,89	0,51;1,89	0,39;1,88
1,07;1,88	0,71;1,87	1,04;1,87	0,69;1,86	0,95;1,86	0,34;1,85	0,41;1,85
2,24;1,84	0,40;1,84	0,62;1,83	1,13;1,83	1,60;1,82	1,12;1,82	0,60;1,29
0,34;1,27	1,09;1,13	0,73;1,11	1,45;1,10	0,74;0,91	1,06;0,01	0,68;0,00
27,09;-	0,01	0,83				
Ejemplo N° 28 [CD ₃ CN] 8,53 0,63;8,13 1,51;8,12 1,58;8,11 1,62;8,11						
1,70;8,04	1,90;7,43	1,65;7,43	0,78;7,42	1,88;7,41	2,03;7,40	0,86;7,40
1,89;7,07	1,88;7,06	0,69;7,05	0,85;7,04	3,43;7,04	0,81;7,03	0,66;7,02
1,63;6,78	1,47;6,77	1,51;6,77	1,48;6,76	1,43;4,17	1,63;4,16	2,91;4,14

1,65;2,83	1,54;2,82	3,05;2,80	1,72;2,66	0,38;2,64	0,96;2,63	1,31;2,61
1,01;2,59	0,42;2,15	400,60;2,12	1,80;2,11	1,81;2,11	1,68;2,10	1,58;2,09
1,71;2,09	1,53;2,08	2,02;2,07	1,43;2,07	1,54;2,06	0,76;2,05	0,86;2,03
0,35;1,97	2,43;1,96	24,07;1,96	7,56;1,95	38,73;1,95	71,16;1,94	98,81;1,93
68,31;1,93	35,30;1,90	1,33;1,90	1,06;1,89	1,84;1,88	1,36;1,87	1,73;1,86
1,22;1,86	1,37;1,84	0,60;1,78	0,34;1,77	0,52;1,77	0,68;1,76	0,49;1,45
1,04;1,27	0,65;1,20	0,45;1,15	16,00;1,13	15,73;1,11	0,60;1,07	1,04;1,05
1,01;0,01	2,02;0,00	37,39;-0,01	1,74			
Ejemplo N° 29 [CD ₃ CN] 8,53 0,63;8,11 1,70;8,10 1,67;8,10 1,70;8,05						
2,05;7,42	1,35;7,41	1,00;7,41	1,06;7,41	2,01;7,40	1,44;7,40	2,05;7,39
2,11;7,39	0,47;7,31	1,12;7,31	3,10;7,30	2,08;7,30	3,46;7,29	3,34;7,28
0,41;6,77	1,55;6,77	1,54;6,76	1,54;6,75	1,47;4,18	1,72;4,17	3,08;4,15
1,75;2,84	1,66;2,82	3,20;2,80	1,76;2,66	0,43;2,64	1,02;2,63	1,37;2,61
1,07;2,59	0,46;2,15	356,74;2,12	1,56;2,11	1,60;2,11	1,60;2,11	1,61;2,10
1,93;2,09	1,50;2,09	1,99;2,08	1,34;2,07	1,54;2,06	0,70;2,06	0,85;1,97
2,60;1,96	18,27;1,96	7,76;1,95	37,89;1,95	68,94;1,94	95,23;1,93	65,84;1,93
33,89;1,91	1,17;1,90	0,86;1,89	1,71;1,88	1,20;1,88	1,57;1,87	1,04;1,86
1,23;1,85	0,46;1,85	0,46;1,77	0,39;1,77	0,54;1,76	0,39;1,27	0,37;1,21
1,01;1,19	0,93;1,15	16,00;1,13	15,71;1,12	1,88;1,11	0,55;1,11	0,95;0,01
2,16;0,00	36,54;-0,01	1,73				
Ejemplo N° 30 [CD ₃ CN] 8,54 0,65;8,13 1,64;8,12 1,66;8,01 1,64;7,43						
1,85;7,42	1,94;7,41	2,01;7,40	1,02;7,39	1,86;7,06	1,85;7,04	3,52;7,02
1,57;6,80	1,34;6,80	1,59;6,79	1,44;6,79	1,11;6,04	0,33;6,03	0,38;6,02
0,35;6,01	0,35;5,99	0,40;5,52	0,37;5,48	0,40;4,17	1,85;4,16	3,14;4,14
1,63;4,07	0,65;4,05	0,57;3,57	0,38;3,55	0,61;3,54	0,75;3,54	0,66;3,52

0,60;3,50	0,33;3,27	0,33;2,96	0,48;2,84	1,86;2,82	3,29;2,81	1,88;2,71	
0,36;2,66	0,35;2,61	0,37;2,57	0,36;2,49	0,59;2,46	1,44;2,39	0,87;2,37	
0,88;2,35	0,93;2,34	1,04;2,32	1,12;2,30	1,25;2,28	1,49;2,24	5,60;2,22	
7,93;2,15	3170,97;2,12	12,27;2,11	11,19;2,11	10,36;2,10	7,82;2,09	6,11;2,09	
4,76;2,08	4,49;2,07	3,79;2,05	2,81;2,00	8,49;1,99	11,64;1,99	10,01;1,96	
131,70;1,96	60,56;1,95	308,30;1,95	561,87;1,94	776,89;1,93	536,23;1,93		
275,81;1,89	3,51;1,88	2,84;1,87	2,84;1,86	2,03;1,80	0,73;1,79	1,05;1,78	
1,92;1,77	3,39;1,77	4,67;1,76	3,38;1,76	1,63;1,65	0,33;1,45	1,22;1,44	
0,42;1,27	2,35;1,22	0,70;1,20	1,46;1,19	0,66;1,13	1,58;1,11	2,80;1,10	
1,35;1,07	5,03;1,05	4,94;0,96	15,92;0,94	16,00;0,93	15,83;0,92	7,02;0,92	
6,89;0,91	15,68;0,89	0,92;0,15	1,21;0,01	15,64;0,00	294,13;-0,01	14,71;-0,15	
1,27							
Ejemplo N° 31 [CD ₃ CN] 8,54 0,64;8,12 1,65;8,10 1,68;8,03 1,86;7,41							
1,29;7,41	0,98;7,41	1,02;7,41	1,94;7,40	1,45;7,40	2,10;7,39	2,11;7,30	
2,92;7,30	2,65;7,30	2,07;7,29	3,54;7,29	3,52;6,79	1,51;6,79	1,53;6,78	
1,50;6,77	1,47;4,18	1,68;4,17	3,05;4,15	1,72;2,84	1,62;2,82	3,12;2,81	
1,70;2,24	3,77;2,23	5,35;2,15	417,05;2,11	2,57;2,11	2,84;2,10	2,55;2,09	
2,32;2,09	2,60;2,07	2,30;2,05	1,29;2,04	0,53;2,02	0,48;1,97	2,43;1,96	
8,32;1,96	8,85;1,95	47,32;1,95	86,75;1,94	120,02;1,93	82,95;1,93	42,90;1,90	
1,60;1,89	2,01;1,88	1,48;1,87	1,82;1,87	1,30;1,86	1,44;1,84	0,67;1,78	
0,42;1,77	0,63;1,77	0,82;1,76	0,61;1,76	0,36;1,27	0,46;1,20	0,55;1,11	
0,47;1,00	0,76;0,99	0,81;0,96	16,00;0,95	3,04;0,94	15,57;0,93	1,49;0,91	
0,52;0,01	2,62;0,00	45,26;-0,01	2,08				
Ejemplo N° 32 [CD ₃ CN] 9,03 3,06;8,21 7,74;8,20 7,84;8,18 9,33;7,94							
8,49;7,94	10,32;7,93	2,84;7,93	11,48;7,93	9,55;7,83	1,14;7,83	8,01;7,82	

10,18;7,82	2,89;7,81	11,51;7,81	9,74;7,62	1,27;7,62	2,47;7,62	1,54;7,61
1,72;7,61	6,32;7,59	2,50;7,59	4,51;7,59	2,56;7,56	1,25;7,56	2,48;7,55
1,51;7,55	1,71;7,54	6,27;7,54	2,37;7,53	9,89;7,53	8,22;7,53	3,32;7,52
12,14;7,51	2,13;7,51	5,56;7,48	8,32;7,47	3,78;7,46	13,24;7,46	3,71;7,45
10,30;7,45	9,09;7,44	3,17;7,44	8,17;7,43	0,92;7,08	0,86;7,08	8,35;7,08
2,69;7,07	2,92;7,06	16,00;7,06	3,21;7,05	2,49;7,05	7,88;7,04	0,98;6,87
6,69;6,86	6,94;6,86	6,62;6,86	6,82;6,74	0,50;5,98	0,45;4,19	6,53;4,18
11,96;4,17	6,82;4,08	0,72;4,06	2,14;4,05	2,13;4,04	0,71;3,61	0,36;3,54
0,44;3,53	0,44;2,88	6,17;2,87	12,30;2,86	6,61;2,17	354,13;2,12	3,04;2,11
2,50;2,11	4,76;2,10	4,39;2,10	6,77;2,09	4,24;2,09	5,06;2,08	1,99;2,08
2,60;2,06	1,38;2,06	2,22;2,05	3,14;2,05	2,17;2,04	1,24;1,97	9,88;1,97
12,68;1,96	14,29;1,95	15,61;1,95	183,09;1,95	345,53;1,94	504,89;1,94	
352,39;1,93	178,21;1,92	2,73;1,91	2,30;1,91	1,62;1,90	5,34;1,90	3,49;1,89
5,41;1,89	3,41;1,88	4,67;1,87	1,70;1,84	1,05;1,83	1,97;1,83	2,89;1,82
1,96;1,82	1,01;1,45	2,51;1,44	0,42;1,27	1,82;1,22	2,61;1,20	5,23;1,19
2,51;1,13	0,35;1,13	1,99;1,11	3,88;1,10	1,90;0,91	1,88;0,88	0,33;0,10
0,60;0,01	4,27;0,00	149,10;-0,01	5,07;-0,10	0,60		
Ejemplo N° 33 [CD 3CN]						
9,03	2,43;8,74	0,34;8,19	16,00;8,19	7,83;8,19		
6,92;8,02	0,41;8,01	0,96;8,00	0,71;8,00	0,64;7,94	8,46;7,93	2,60;7,93
9,41;7,93	7,71;7,83	4,74;7,82	5,99;7,82	1,85;7,81	6,90;7,81	5,69;7,62
1,32;7,62	2,14;7,61	1,33;7,60	5,26;7,60	1,96;7,59	2,31;7,59	3,80;7,59
2,12;7,57	0,36;7,56	0,86;7,55	1,68;7,55	1,32;7,55	1,11;7,54	3,72;7,54
1,57;7,53	8,21;7,53	4,41;7,52	9,79;7,51	1,87;7,51	4,48;7,50	0,77;7,49
0,55;7,48	0,92;7,48	1,21;7,48	4,93;7,47	2,29;7,46	6,93;7,45	1,53;7,45
3,60;7,45	3,15;7,45	2,13;7,45	6,32;7,44	4,79;7,44	3,57;7,44	3,59;7,44

3,41;7,43	8,45;7,43	7,43;7,42	0,96;7,42	0,35;7,34	1,02;7,33	0,80;7,33	
2,39;7,33	2,06;7,32	7,53;7,32	4,97;7,32	5,02;7,31	12,81;7,31	13,01;7,31	
2,75;7,30	1,48;7,29	0,44;7,29	0,42;6,86	5,49;6,86	4,25;6,85	4,34;6,85	
5,58;4,20	5,27;4,19	9,71;4,18	5,53;4,06	0,65;4,05	0,63;3,54	0,81;3,53	
0,81;2,89	5,00;2,88	9,93;2,87	5,40;2,17	62,37;2,12	3,51;2,12	2,94;2,11	
4,68;2,11	4,26;2,10	6,14;2,10	4,02;2,09	4,61;2,09	2,06;2,08	2,39;2,06	
1,00;2,06	1,49;2,05	1,92;2,05	1,41;2,04	0,86;1,97	3,10;1,97	7,03;1,96	
7,15;1,95	9,61;1,95	97,58;1,95	187,06;1,94	266,43;1,94	180,73;1,93		
95,01;1,92	2,43;1,91	1,80;1,91	4,72;1,90	3,22;1,89	4,75;1,89	3,08;1,89	
4,00;1,88	1,56;1,83	0,65;1,83	1,14;1,83	1,65;1,82	1,18;1,82	0,65;1,27	
0,65;1,22	0,82;1,20	1,62;1,19	0,82;1,13	1,63;1,11	3,31;1,10	1,67;0,91	
1,01;0,01	2,68;0,00	80,69;-0,01	3,13				
Ejemplo N° 34 [CD ₃ CN]							
8,69	1,30;8,17	0,45;8,16	0,47;8,15	0,48;8,15			
0,47;8,12	3,61;8,12	3,71;8,11	3,65;8,11	3,76;7,98	3,81;7,48	0,41;7,47	
0,51;7,46	0,66;7,45	0,64;7,42	0,61;7,41	4,11;7,41	1,96;7,40	4,66;7,40	
3,21;7,39	2,80;7,39	5,25;7,38	2,22;7,38	5,01;7,37	2,16;7,37	1,89;7,37	
1,06;7,36	2,20;7,35	4,50;7,35	4,42;7,34	1,60;7,33	11,56;7,33	11,26;7,33	
9,87;7,32	1,61;7,32	1,78;7,31	3,19;7,30	1,82;7,30	1,64;7,29	1,43;7,28	
2,98;7,28	2,70;7,27	1,21;7,27	1,48;7,26	0,68;7,25	0,32;7,06	0,65;7,05	
4,63;7,05	1,95;7,04	0,67;7,03	1,84;7,03	8,62;7,02	2,52;7,01	1,51;7,01	
4,20;7,00	0,92;7,00	0,60;6,83	0,47;6,83	0,48;6,82	0,48;6,82	0,48;6,79	
3,70;6,79	3,70;6,78	3,61;6,77	3,58;5,45	2,16;5,16	0,51;4,16	3,88;4,14	
6,94;4,13	3,95;3,70	16,00;3,61	3,16;2,81	3,48;2,79	6,94;2,78	3,76;2,29	
0,35;2,27	0,47;2,16	45,32;2,11	2,47;2,11	2,20;2,10	1,79;2,09	1,57;2,09	
2,03;2,08	1,79;2,07	2,94;2,07	2,82;2,06	4,09;2,05	2,72;2,04	3,13;2,04	

1,35;2,03	1,66;1,99	0,51;1,97	1,52;1,97	2,82;1,96	74,42;1,96	5,26;1,95	30,94;1,95	58,82;1,94	84,49;1,93	58,28;1,93	29,86;1,88	1,56;1,87	1,23;1,86	3,34;1,85	2,36;1,85	3,27;1,84	2,21;1,83	2,67;1,82	1,00;1,82	1,06;1,79	0,60;1,78	0,37;1,77	0,50;1,77	0,63;1,76	0,57;1,45	0,87;1,28	0,44;1,27	1,35;1,22	0,43;1,20	0,73;1,19	0,40;1,14	0,33;0,91	0,48;0,01	1,02;0,00	26,47;-	0,01	1,01																																																																																																																	
Ejemplo N° 35 [CD ₃ CN]																					8,84	0,42;8,66	1,38;8,46	0,84;8,36	0,79;8,34	0,73;8,15	0,57;8,14	0,56;8,11	3,83;8,10	3,74;8,10	3,70;7,99	3,95;7,81	0,42;7,57	0,32;7,54	0,37;7,52	0,39;7,50	0,50;7,48	1,10;7,46	1,16;7,43	0,77;7,40	3,91;7,39	4,30;7,39	4,34;7,38	4,93;7,38	5,93;7,38	4,56;7,37	6,73;7,37	6,83;7,36	4,22;7,36	5,13;7,35	6,55;7,35	6,07;7,34	12,99;7,33	12,57;7,32	3,25;7,31	7,48;7,30	4,40;7,30	6,31;7,30	11,28;7,29	8,22;7,29	12,07;7,28	14,06;7,28	14,65;7,27	5,41;7,25	1,54;7,22	0,83;7,21	1,27;7,20	1,00;7,19	1,02;7,17	0,67;7,16	0,86;7,15	0,77;7,14	1,19;7,12	0,87;7,11	0,62;7,09	0,59;7,09	0,65;7,07	0,59;7,06	0,40;7,02	0,70;7,00	0,50;6,83	0,60;6,82	0,52;6,81	0,58;6,81	0,65;6,78	3,48;6,78	3,43;6,77	3,36;6,77	3,46;5,45	3,76;5,41	0,41;5,16	0,41;4,41	0,49;4,20	0,39;4,19	0,42;4,17	4,24;4,15	7,40;4,14	4,79;4,12	0,58;4,11	0,41;4,08	0,44;4,07	0,67;4,05	0,84;3,80	0,36;3,78	0,40;3,76	3,63;3,70	16,00;3,62	1,09;3,61	2,52;3,60	14,42;3,53	0,40;3,52	0,35;3,52	0,41;3,50	0,37;3,49	0,40;3,48	0,35;3,35	0,76;2,81	3,72;2,80	7,21;2,78	3,82;2,47	0,43;2,47	0,57;2,46	0,44;2,36	0,47;2,34	0,79;2,33	0,72;2,31	0,64;2,30	0,86;2,29	0,93;2,28	1,02;2,15	1291,20;2,11	14,42;2,11	13,14;2,10	10,32;2,09	8,15;2,08	6,61;2,07	5,87;2,07	6,83;2,06	4,98;2,05	5,34;2,04	3,33;2,01	2,18;1,97	10,97;1,96	534,49;1,96	47,42;1,95	285,56;1,95	539,00;1,94	772,69;1,93	533,69;1,93	274,84;1,88

4,03;1,87	5,27;1,86	4,07;1,85	4,82;1,85	3,54;1,84	3,89;1,82	2,12;1,80
1,32;1,79	4,02;1,78	2,61;1,77	4,01;1,77	5,27;1,76	4,18;1,76	2,29;1,75
1,25;1,73	1,07;1,72	1,11;1,69	1,12;1,66	0,84;1,62	0,60;1,61	0,62;1,60
0,68;1,59	0,65;1,57	0,62;1,55	0,74;1,53	0,77;1,51	0,74;1,50	0,81;1,49
0,70;1,48	0,69;1,46	0,50;1,44	0,64;1,43	0,51;1,41	0,57;1,41	0,60;1,39
1,11;1,38	0,61;1,36	0,71;1,34	1,17;1,32	0,94;1,31	0,93;1,29	2,24;1,27
7,40;1,24	1,06;1,24	0,91;1,23	1,11;1,22	1,56;1,22	1,01;1,20	2,69;1,19
1,34;1,18	0,67;1,17	0,70;1,16	0,56;1,15	0,53;1,14	1,30;1,12	0,54;1,10
0,57;1,09	0,47;1,08	0,79;1,06	0,81;1,04	0,48;1,00	0,34;1,00	0,32;0,99
0,38;0,97	0,53;0,95	0,54;0,93	0,44;0,91	3,89;0,89	0,87;0,88	1,31;0,86
0,75;0,84	0,52;0,82	0,39;0,82	0,33;0,79	0,32;0,57	0,32;0,15	1,03;0,01
9,80;0,00	232,46;-0,01	9,70;-0,05	0,33;-0,06	0,33;-0,15	1,01	
Ejemplo N° 36 [CD 3CN]						
19,94	0,65;9,24	1,88;9,22	1,96;8,68	1,19;8,46		
1,03;8,32	3,19;8,16	2,28;8,15	2,62;8,14	2,64;8,13	3,02;8,12	1,13;7,98
3,50;7,43	9,12;7,42	9,99;7,41	10,29;7,40	9,29;7,09	2,01;7,07	4,09;7,06
4,23;7,05	4,33;7,04	3,59;7,04	2,02;6,85	5,66;6,84	5,65;6,80	0,77;6,79
0,75;6,67	3,50;6,38	0,58;4,17	8,76;4,16	16,00;4,15	9,11;4,13	0,68;4,13
0,66;4,06	1,22;4,05	1,40;4,04	0,63;3,55	0,62;3,53	0,60;3,52	0,52;2,83
7,78;2,82	15,96;2,81	9,19;2,80	0,96;2,78	0,63;2,74	0,71;2,47	0,58;2,15
1619,61;2,10	3,30;2,09	6,91;2,09	12,26;2,08	10,47;2,08	6,56;2,07	7,89;2,07
3,38;2,06	6,46;2,06	6,45;2,05	8,27;2,05	5,80;2,04	3,05;1,97	7,23;1,97
84,42;1,96	46,87;1,95	58,29;1,95	539,35;1,95	972,69;1,94	1413,07;1,94	
974,09;1,93	494,81;1,92	6,87;1,89	3,43;1,89	2,52;1,88	8,56;1,88	5,52;1,87
8,87;1,87	5,57;1,86	7,71;1,85	2,81;1,85	3,39;1,83	3,27;1,83	5,72;1,83
8,02;1,82	5,44;1,82	2,80;1,27	3,78;1,22	1,70;1,20	3,25;1,19	1,65;1,13

1,55;1,11	3,17;1,10	1,61;0,88	0,77;0,87	0,67;0,10	1,64;0,01	12,44;0,00	406,61;-0,01	12,14;-0,10	1,66
Ejemplo N° 37 [CD ₃ CN] 9,22 1,12;9,20 1,14;8,70 0,82;8,54 2,28;8,48									
0,72;8,32	1,93;8,13	3,54;8,11	2,20;8,09	1,91;8,07	0,47;8,05	0,51;7,99	2,00;7,84	0,53;7,60	0,75;7,58
0,82;7,44	2,13;7,43	1,98;7,42	2,99;7,42	8,16;7,41	5,64;7,41	5,88;7,41	10,34;7,40	7,94;7,40	10,61;7,40
8,08;7,39	11,23;7,39	2,55;7,38	1,90;7,31	8,44;7,14	0,75;7,12	0,74;7,08	2,41;7,08	1,00;7,07	1,65;7,06
4,42;7,05	1,31;7,04	1,81;7,04	2,28;7,02	0,60;6,85	5,39;6,84	5,68;6,83	5,47;6,83	5,25;6,79	2,24;6,78
1,75;6,77	1,48;6,76	1,18;6,69	2,22;6,68	0,97;6,67	0,88;5,45	10,12;4,19	8,35;4,17	16,00;4,16	6,70;4,16
10,13;4,15	3,31;3,68	0,88;3,29	1,63;3,17	7,82;3,06	7,96;2,96	8,28;2,89	0,74;2,84	7,25;2,82	14,80;2,81
8,89;2,80	2,28;2,77	0,72;2,67	0,55;2,47	0,40;2,46	0,32;2,32	3,06;2,16	501,04;2,11	9,58;2,11	9,73;2,10
11,02;2,09	9,42;2,08	12,19;2,08	9,37;2,07	9,56;2,06	5,49;2,05	5,26;2,02	1,40;1,96	90,22;1,96	17,48;1,95
147,07;1,95	278,25;1,94	400,28;1,93	276,42;1,93	142,35;1,90	5,44;1,90	4,39;1,89	9,51;1,88	7,12;1,87	9,50;1,87
7,02;1,86	8,19;1,84	3,43;1,79	1,13;1,78	1,40;1,77	2,09;1,77	2,80;1,76	2,03;1,76	1,33;1,72	0,56;1,62
0,39;1,60	0,60;1,56	0,43;1,49	0,45;1,49	0,37;1,39	0,40;1,34	0,52;1,27	4,21;1,22	0,52;1,20	0,79;1,19
0,46;1,16	0,41;1,14	1,01;1,06	1,12;1,04	2,04;1,02	1,06;0,91	2,16;0,90	0,48;0,89	0,45;0,88	0,67;0,86
0,45;0,15	0,50;0,01	5,19;0,00	127,20;-0,01	4,91;-0,02	0,64;-0,15	0,52	Ejemplo N° 38 [CD ₃ CN] 8,43 5,82;8,43 4,66;8,09 3,36;8,09 3,45;8,09		
3,00;8,09	2,73;8,08	3,45;8,08	3,42;8,07	2,89;8,07	2,57;7,86	0,53;7,85	0,56;7,45	0,50;7,44	3,29;7,43
2,06;7,42	4,25;7,42	3,09;7,42	4,02;7,42						

5,23;7,41	4,19;7,40	5,47;7,39	3,65;7,39	0,61;7,33	0,43;7,33	0,45;7,31
1,56;7,31	4,38;7,30	4,18;7,30	2,88;7,29	6,18;7,29	5,81;7,28	0,64;7,07
0,56;7,06	3,68;7,06	1,20;7,05	1,48;7,04	6,62;7,04	1,30;7,02	1,13;7,02
3,05;7,01	0,33;6,67	2,18;6,66	2,39;6,65	4,25;6,65	4,85;6,64	2,38;6,64
2,95;6,62	3,88;6,62	4,25;6,61	3,66;6,61	3,23;6,61	3,23;6,61	3,31;6,60
2,87;6,36	0,48;6,36	0,54;6,35	0,45;6,35	0,55;6,33	0,78;5,45	2,73;4,78
0,38;4,18	2,76;4,17	4,19;4,16	5,20;4,15	6,54;4,15	3,47;4,14	3,50;4,07
0,51;4,05	0,54;3,06	16,00;3,05	14,00;2,97	13,85;2,97	11,10;2,96	1,38;2,89
0,35;2,84	0,36;2,81	2,43;2,81	3,59;2,80	5,03;2,79	5,97;2,78	3,16;2,77
3,43;2,76	0,73;2,16	496,75;2,13	3,97;2,12	2,23;2,11	2,30;2,11	2,49;2,10
2,59;2,10	2,28;2,09	2,34;2,08	3,59;2,07	4,48;2,06	3,86;2,04	1,81;2,04
1,54;1,99	0,78;1,97	5,39;1,96	104,98;1,96	9,99;1,95	72,03;1,95	135,24;1,94
193,59;1,93	132,82;1,93	67,88;1,89	1,67;1,89	2,27;1,88	3,21;1,87	4,48;1,85
4,09;1,85	3,03;1,84	2,96;1,83	1,25;1,83	1,08;1,79	0,75;1,78	0,56;1,77
0,90;1,77	1,23;1,76	0,89;1,76	0,52;1,27	1,10;1,22	0,72;1,20	1,38;1,19
0,73;0,91	1,02;0,01	2,42;0,00	61,98;-0,01	2,38		
Ejemplo N° 39 [CD 3CN]						
8,43	5,24;8,09	3,23;8,09	3,08;8,08	3,22;8,08		
3,19;7,77	0,33;7,76	0,35;7,44	0,38;7,43	3,36;7,43	1,23;7,42	3,69;7,42
1,57;7,42	1,56;7,42	3,76;7,41	1,32;7,41	3,55;7,40	0,41;7,13	0,35;7,11
0,65;7,10	0,34;7,06	0,45;7,06	3,80;7,06	1,15;7,05	1,26;7,04	6,98;7,04
1,20;7,03	1,12;7,03	3,43;7,02	0,35;6,65	2,80;6,64	3,20;6,64	2,77;6,63
3,12;6,61	3,28;6,61	3,80;6,60	3,33;6,60	2,96;6,30	0,48;4,16	2,66;4,15
4,67;4,14	2,67;4,09	0,44;3,06	16,00;2,97	15,08;2,96	0,39;2,80	2,45;2,79
4,77;2,78	2,61;2,17	1355,00;2,14	0,68;2,09	0,83;2,08	0,66;2,08	1,57;2,07
1,42;2,07	2,38;2,06	2,22;2,06	3,39;2,05	3,14;2,05	2,28;2,04	1,13;1,97

13,95;1,96 12,79;1,95 15,39;1,95 165,58;1,95 329,59;1,94 489,99;1,94 325,35;1,93 155,14;1,93 4,91;1,92 2,32;1,88 1,00;1,87 0,70;1,87 2,23;1,86 1,48;1,86 2,07;1,85 1,53;1,85 1,99;1,84 0,74;1,84 1,68;1,83 1,96;1,83 2,79;1,82 1,99;1,82 1,02;1,44 5,93;1,27 1,08;1,11 0,55;0,91 1,77;0,01 1,11;0,00 43,04;-0,01 1,34
Ejemplo N° 40 [DMSO-D ₆] 10,36 4,02;8,15 4,48;8,13 4,63;8,09 4,10;7,46 0,33;7,46 3,35;7,45 1,36;7,44 3,80;7,43 4,54;7,43 1,68;7,42 4,10;7,41 0,53;7,24 0,47;7,24 4,14;7,23 1,29;7,22 1,46;7,21 7,43;7,21 1,47;7,20 1,15;7,19 3,52;7,18 0,34;6,76 3,13;6,76 3,12;6,75 3,10;6,74 3,15;4,20 2,51;4,18 4,06;4,16 2,62;3,36 405,89;3,34 0,50;3,06 2,19;3,04 3,78;3,02 2,66;2,67 0,72;2,65 2,08;2,63 2,82;2,61 1,78;2,59 0,58;2,52 17,00;2,52 23,32;2,51 16,38;2,40 1,88;2,39 6,33;2,37 6,52;2,35 2,11;2,00 0,40;1,10 0,39;1,07 7,47;1,05 16,00;1,03 7,16
Ejemplo N° 41 [DMSO-D ₆] 8,44 5,92;8,43 3,68;8,43 3,83;8,42 6,02;7,28 4,34;7,27 2,33;7,26 6,88;7,19 5,40;7,17 3,72;7,15 6,23;7,15 3,84;7,14 3,89;7,14 5,91;4,18 2,47;4,16 3,77;4,14 2,52;4,10 0,66;4,06 0,64;4,04 1,87;4,02 1,90;4,00 0,65;3,31 284,17;3,07 2,21;3,06 3,49;3,04 2,58;2,89 0,82;2,73 0,65;2,67 0,36;2,67 0,46;2,67 0,34;2,64 0,79;2,62 2,05;2,61 2,87;2,59 1,80;2,57 0,72;2,54 0,64;2,51 24,14;2,50 45,26;2,50 59,28;2,50 40,96;2,49 19,54;2,33 16,00;1,99 8,22;1,91 0,81;1,19 2,27;1,17 4,49;1,16 2,23;1,07 0,48;0,92 0,40;0,01 0,62;0,00 13,23;-0,01 0,53
Ejemplo N° 42 [DMSO-D ₆] 8,73 10,76;8,73 7,01;8,72 7,15;8,72 11,09;8,48 14,87;8,48 9,20;8,47 9,36;8,47 15,18;8,43 0,36;8,42 0,35;7,83 12,62;7,83 8,14;7,82 7,99;7,82 12,12;7,72 3,32;7,70 12,43;7,67 2,99;7,65 6,03;7,63 4,72;7,61 4,80;7,59 1,74;7,56 0,33;7,26 0,45;7,18 16,00;7,18 9,84;7,17

9,90;7,17	15,59;7,15	0,51;7,15	0,33;7,13	0,42;4,22	5,88;4,21	8,79;4,19	
6,03;4,16	0,35;4,10	0,74;4,04	0,45;4,02	0,46;3,91	0,50;3,61	0,33;3,60	
0,34;3,59	0,37;3,56	0,39;3,54	0,47;3,53	0,47;3,51	0,57;3,48	0,62;3,47	
0,70;3,31	2137,05;3,29	34,04;3,08	5,11;3,07	8,13;3,05	6,08;2,89	0,32;2,73	
0,39;2,68	0,95;2,67	1,72;2,67	2,34;2,67	2,74;2,64	4,95;2,63	6,91;2,61	
4,43;2,59	1,89;2,54	3,03;2,52	8,68;2,51	111,92;2,51	208,40;2,50	272,43;2,50	
187,67;2,49	89,14;2,34	0,67;2,33	1,40;2,33	2,48;2,18	0,46;2,07	1,06;1,99	
1,30;1,91	1,87;1,24	0,78;1,19	0,39;1,18	0,79;1,16	0,49;1,07	2,34;0,89	
0,33;0,00	1,84						
Ejemplo N° 43 [DMSO-D ₆]							
8,55	3,50;8,54	2,14;8,54	2,20;8,53	3,62;7,95			
1,92;7,32	1,62;7,31	0,73;7,30	1,85;7,30	2,22;7,29	0,85;7,28	2,01;7,15	
2,10;7,14	0,72;7,13	0,95;7,13	4,57;7,12	4,66;7,12	2,89;7,11	2,49;7,11	
4,14;7,10	1,97;4,35	1,40;4,34	1,24;4,33	1,32;3,33	69,85;2,89	16,00;2,73	
13,14;2,73	12,88;2,72	1,37;2,70	1,46;2,51	4,08;2,51	7,74;2,50	10,22;2,50	
7,17;2,49	3,53;1,91	2,30;1,85	1,02;1,84	0,96;1,77	0,92;1,76	1,09;1,65	
0,89;1,63	1,10						
Ejemplo N° 44 [DMSO-D ₆]							
8,73	2,30;8,73	1,57;8,72	1,56;8,72	2,40;8,47			
11,10;8,47	7,35;8,46	7,60;8,46	11,41;8,44	0,39;8,33	0,70;8,31	0,73;7,95	
0,47;7,91	0,45;7,83	2,92;7,83	1,97;7,82	1,85;7,82	2,75;7,60	0,35;7,59	
0,34;7,58	0,34;7,56	0,33;7,55	0,40;7,54	0,40;7,53	0,42;7,53	0,43;7,51	
0,37;7,49	0,40;7,47	0,36;7,44	1,68;7,43	2,92;7,42	3,90;7,41	4,18;7,39	
2,91;7,38	1,26;7,36	0,53;7,35	0,99;7,33	0,52;7,32	0,43;7,31	0,42;7,25	
0,38;7,24	0,48;7,21	6,27;7,21	7,51;7,19	10,12;7,18	6,82;7,18	15,23;7,17	
9,62;7,16	10,33;7,16	16,00;7,15	2,33;7,14	1,12;7,12	0,61;7,12	0,85;4,22	
0,38;4,21	5,27;4,19	8,07;4,17	5,51;4,10	1,27;4,04	0,44;4,02	0,49;4,00	

0,33;3,91	2,04;3,62	0,32;3,58	0,38;3,58	0,38;3,57	0,41;3,56	0,47;3,54
0,55;3,52	0,62;3,51	0,74;3,44	1,00;3,32	2064,37;3,22	0,68;3,15	0,35;3,07
4,82;3,06	7,57;3,04	5,62;2,89	2,26;2,73	1,91;2,67	1,46;2,67	1,20;2,66
0,89;2,65	1,78;2,63	4,63;2,62	6,32;2,60	4,05;2,58	1,71;2,56	0,76;2,54
1,97;2,51	82,20;2,51	153,58;2,50	201,23;2,50	140,41;2,49	68,02;2,33	
0,90;2,33	1,28;2,32	0,88;2,28	0,42;2,07	0,72;1,99	1,57;1,91	14,77;1,66
0,51;1,61	0,45;1,40	5,58;1,37	0,36;1,30	0,41;1,28	0,34;1,26	0,37;1,24
1,07;1,19	0,65;1,18	1,13;1,16	5,74;1,12	0,42;1,09	0,77;1,07	15,92;1,06
0,96;1,04	0,62;0,91	0,32;0,89	0,42;0,85	0,42;0,83	0,37;0,01	0,36;0,00
6,83						
Ejemplo N° 45 [DMSO-D ₆]						
8,12	0,72;8,10	0,72;7,45	0,62;7,43	0,71;7,42		
0,80;7,42	0,32;7,41	0,71;7,26	0,77;7,24	0,32;7,24	1,31;7,22	0,58;7,07
0,42;7,06	0,33;7,06	0,32;7,05	0,40;6,85	0,92;4,20	0,54;4,18	0,82;4,17
0,54;3,32	27,82;3,12	0,48;3,10	0,77;3,08	0,56;2,64	0,45;2,62	0,62;2,60
0,39;2,51	2,57;2,51	4,72;2,50	6,09;2,50	4,24;2,49	2,06;1,99	0,58;1,18
0,33;1,16	0,93;1,07	16,00;0,00	0,34			
Ejemplo N° 46 [DMSO-D ₆]						
8,48	4,80;8,47	3,50;8,46	3,35;8,46	4,96;7,83		
0,35;7,82	0,35;7,58	2,60;7,57	3,11;7,57	2,95;7,56	3,23;7,55	0,43;7,47
2,82;7,47	3,29;7,46	2,90;7,46	2,71;7,45	0,41;7,22	6,37;7,21	4,15;7,21
4,08;7,20	6,43;7,16	0,33;7,12	3,22;7,12	3,27;7,11	3,16;7,10	3,15;7,07
0,34;4,19	0,38;4,17	2,83;4,15	4,15;4,14	2,89;4,10	0,51;4,06	1,24;4,04
3,65;4,02	3,67;4,00	1,27;3,31	237,31;3,06	2,38;3,04	3,72;3,02	2,85;2,67
0,41;2,66	0,33;2,65	0,36;2,64	1,07;2,62	2,39;2,60	3,18;2,58	2,01;2,57
0,84;2,54	0,51;2,51	16,14;2,50	30,00;2,50	39,24;2,50	27,23;2,49	13,12;1,99
16,00;1,91	5,55;1,24	0,51;1,19	4,51;1,17	8,85;1,16	4,44;1,07	0,50;0,06
0,61;0,01	0,39;0,00	7,70				

Ejemplo N° 47 [CD ₃ CN]							
8,89	2,33;8,86	0,35;8,20	5,77;8,19	9,08;8,18			
6,36;8,18	6,14;8,18	5,51;8,14	7,12;8,06	0,35;7,58	4,64;7,58	4,85;7,57	
6,50;7,57	6,22;7,50	5,90;7,49	5,94;7,49	4,73;7,48	4,25;7,47	1,28;7,46	
6,10;7,46	2,97;7,45	6,65;7,44	6,96;7,43	2,86;7,43	6,45;7,42	1,11;7,40	
0,39;7,30	0,33;7,08	6,81;7,07	2,15;7,06	2,74;7,06	12,48;7,05	2,65;7,04	
2,15;7,03	5,97;7,03	0,82;6,85	5,42;6,85	5,42;6,84	5,34;6,84	5,28;5,45	
16,00;4,19	5,51;4,17	9,99;4,16	5,76;4,09	0,35;4,07	1,06;4,05	1,10;4,03	
0,36;3,61	0,33;2,88	5,15;2,86	10,23;2,85	5,40;2,47	0,38;2,46	0,36;2,40	
0,38;2,35	0,42;2,28	0,60;2,27	0,68;2,25	0,83;2,15	1423,35;2,11	8,07;2,11	
8,55;2,10	7,55;2,09	8,22;2,09	5,22;2,08	5,66;2,06	3,05;2,04	1,40;2,03	
1,38;2,00	2,03;1,97	11,74;1,96	113,50;1,96	35,82;1,95	189,71;1,95		
349,30;1,94	485,27;1,93	334,49;1,93	171,63;1,90	7,16;1,90	5,07;1,89		
5,99;1,87	4,65;1,86	1,99;1,82	0,69;1,79	0,92;1,78	1,43;1,77	2,41;1,77	
2,96;1,76	2,33;1,76	1,31;1,72	0,66;1,69	0,94;1,67	0,68;1,65	0,63;1,62	
0,57;1,59	0,41;1,57	0,35;1,55	0,33;1,51	0,41;1,50	1,20;1,49	0,67;1,47	
0,35;1,45	0,73;1,45	0,39;1,44	0,42;1,42	0,35;1,40	0,34;1,39	0,32;1,36	
0,32;1,35	0,34;1,34	0,40;1,32	0,33;1,32	1,24;1,27	2,73;1,23	0,42;1,22	
1,69;1,20	3,29;1,19	1,80;1,17	0,58;1,13	0,48;1,11	0,63;1,10	0,46;1,07	
0,37;1,03	0,36;1,02	0,35;0,98	0,47;0,95	0,49;0,91	1,72;0,88	0,60;0,86	
0,57;0,00	29,99						
Ejemplo N° 48 [DMSO-D ₆]							
7,85	2,31;7,83	2,30;7,44	0,61;7,42	16,00;7,41			
0,46;7,40	0,41;7,40	0,42;6,27	2,89;6,23	1,95;6,22	1,68;6,21	2,13;6,21	
2,14;6,21	1,50;6,19	1,33;4,17	1,59;4,15	2,49;4,13	1,60;4,04	0,56;4,02	
0,55;3,89	0,54;3,87	0,84;3,86	0,81;3,84	0,52;3,57	0,37;3,41	0,33;3,39	
0,47;3,38	0,63;3,31	414,21;3,29	3,89;2,99	5,49;2,98	2,28;2,96	1,59;2,67	

0,37;2,63	0,53;2,61	1,35;2,59	1,82;2,57	1,22;2,55	0,58;2,54	0,53;2,51	
20,36;2,50	37,33;2,50	48,05;2,50	33,38;2,49	16,08;2,07	0,51;1,99	2,34;1,24	
0,36;1,19	0,72;1,17	1,41;1,16	0,79;1,10	15,32;1,08	15,16;1,04	0,40;1,01	
0,60;0,99	0,55;0,00	2,20					
Ejemplo N° 50 [CD ₃ CN]							
9,19	0,34;8,14	1,01;8,13	1,01;8,07	1,21;7,41			
0,71;7,41	0,47;7,41	1,01;7,40	1,11;7,40	1,05;7,32	0,37;7,32	0,37;7,31	
1,42;7,30	2,07;7,30	2,07;6,81	0,79;6,80	0,79;6,80	0,78;6,80	0,77;4,18	
0,91;4,17	1,68;4,16	0,96;4,02	0,46;2,84	0,86;2,83	1,73;2,82	0,94;2,21	
0,34;2,21	0,36;2,19	434,90;2,16	0,56;2,10	0,58;2,09	0,52;2,09	1,02;2,08	
0,56;2,08	1,60;2,07	0,33;2,06	0,43;2,05	0,63;2,05	0,43;1,97	1,35;1,97	
168,54;1,96	5,33;1,95	5,13;1,95	41,91;1,95	76,84;1,94	112,13;1,94		
75,93;1,93	38,25;1,93	0,78;1,90	0,36;1,89	0,81;1,88	0,53;1,88	0,85;1,87	
0,52;1,87	0,72;1,85	0,99;1,83	0,46;1,83	0,67;1,82	0,46;1,41	16,00;1,27	
0,48;0,00	5,09						
Ejemplo N° 51 [CD ₃ CN]							
8,91	2,39;8,19	12,95;8,19	8,38;8,18	7,52;8,18			
9,08;8,18	7,33;8,16	6,98;8,15	7,62;8,15	7,95;7,58	6,53;7,58	6,42;7,57	
8,01;7,57	7,72;7,50	7,61;7,49	7,68;7,49	6,31;7,49	6,13;7,47	0,34;7,46	
0,33;7,44	1,08;7,44	7,16;7,43	4,64;7,43	4,96;7,43	2,36;7,43	9,55;7,42	
8,66;7,42	0,90;7,41	0,36;7,34	1,01;7,33	0,69;7,33	2,74;7,32	1,71;7,32	
8,28;7,32	6,68;7,31	15,75;7,31	16,00;7,30	2,36;7,30	2,28;7,30	1,39;7,29	
0,41;7,29	0,37;6,85	6,79;6,84	6,68;6,84	6,81;6,83	6,76;5,45	0,63;4,19	
5,98;4,18	10,88;4,17	6,24;4,06	0,69;4,05	0,72;3,27	0,53;2,88	5,68;2,87	
11,22;2,86	6,08;2,19	573,93;2,12	2,37;2,11	1,86;2,11	3,96;2,10	3,63;2,10	
5,91;2,09	3,61;2,09	4,37;2,08	1,60;2,08	5,98;2,06	1,13;2,06	1,91;2,05	
2,65;2,05	1,83;2,04	1,02;1,99	0,35;1,97	7,01;1,97	691,81;1,96	14,81;1,95	

15,36;1,95	162,44;1,95	294,97;1,94	434,82;1,94	299,80;1,93	150,79;1,93		
4,41;1,93	2,05;1,91	2,19;1,91	1,50;1,90	5,02;1,90	3,20;1,89	4,84;1,89	
3,04;1,88	4,39;1,88	1,30;1,87	1,63;1,85	3,96;1,84	0,96;1,83	1,78;1,83	
2,54;1,82	1,74;1,82	0,93;1,38	0,72;1,34	0,34;1,28	0,72;1,27	2,14;1,22	
1,05;1,20	1,81;1,19	0,98;1,11	0,48;0,91	1,94;0,88	0,47;0,00	7,31	
Ejemplo N° 52 [DMSO-D ₆] 7,83 2,30;7,82 2,30;7,45 2,09;7,45 0,96;7,44							
2,42;7,43	2,61;7,42	1,06;7,42	2,30;7,22	0,43;7,21	2,47;7,21	0,87;7,19	
1,08;7,19	4,29;7,18	1,00;7,17	0,78;7,17	1,98;6,26	2,96;6,22	2,03;6,21	
1,78;6,20	2,00;6,20	1,79;6,18	1,36;6,16	1,36;4,16	1,59;4,14	2,51;4,13	
1,61;3,88	0,54;3,86	0,83;3,84	0,82;3,83	0,54;3,31	221,49;3,29	1,63;3,00	
1,39;2,98	2,33;2,96	1,66;2,63	0,51;2,61	1,36;2,59	1,83;2,57	1,18;2,55	
0,48;2,51	9,30;2,50	17,10;2,50	22,16;2,50	15,45;2,49	7,50;2,08	11,04;1,99	
1,28;1,19	0,41;1,18	0,74;1,16	0,39;1,10	16,00;1,08	15,81;1,01	0,43;0,99	
0,41;0,00	1,00						
Ejemplo N° 53 [DMSO-D ₆] 7,86 8,61;7,85 8,75;7,66 0,52;7,66 0,52;7,66							
0,61;7,65	0,54;7,54	0,61;7,53	0,52;7,53	0,75;7,52	0,74;7,50	8,18;7,49	
9,36;7,48	8,86;7,48	9,40;7,42	0,67;7,42	0,63;7,41	0,58;7,41	0,61;7,36	
8,91;7,35	9,69;7,35	8,61;7,35	7,93;7,14	10,18;7,13	9,95;7,12	9,72;7,12	
9,31;6,33	16,00;6,33	13,52;6,32	6,73;6,31	9,35;6,31	7,01;6,30	1,55;5,88	
0,56;5,84	13,46;4,17	0,38;4,12	7,18;4,11	13,20;4,09	7,17;4,06	0,97;4,05	
1,37;4,04	0,78;4,03	0,88;4,02	0,61;4,02	0,34;4,01	0,39;4,00	0,42;3,99	
0,37;3,96	0,34;3,93	0,41;3,92	0,41;3,91	0,40;3,90	0,47;3,88	0,42;3,87	
0,41;3,86	0,38;3,82	0,45;3,82	0,51;3,81	0,49;3,80	0,45;3,78	0,48;3,75	
0,59;3,69	0,67;3,68	0,63;3,63	0,81;3,61	0,89;3,59	0,96;3,57	3,27;3,55	
1,27;3,51	1,52;3,33	3424,42;3,20	0,61;3,19	0,55;3,18	0,67;3,16	0,36;2,77	

0,66;2,75	1,03;2,74	0,84;2,71	6,56;2,69	13,04;2,68	7,88;2,61	0,48;2,61	
0,51;2,54	2,77;2,51	94,24;2,51	172,97;2,50	224,40;2,50	156,69;2,49		
76,49;2,44	0,38;2,33	1,07;2,33	1,44;2,32	1,04;2,09	0,40;2,07	3,85;2,06	
0,39;2,04	1,93;2,02	4,58;2,01	5,21;2,01	6,80;2,00	5,50;1,99	5,59;1,99	
4,48;1,98	2,41;1,96	0,60;1,91	0,51;1,81	6,10;1,80	5,44;1,80	6,62;1,78	
5,12;1,40	0,32;1,24	0,47;1,19	0,47;1,18	0,79;1,16	0,52;0,00	3,11	
Ejemplo N° 54 [DMSO-D ₆]							
8,13	8,66;8,12	8,74;8,10	0,33;7,92	0,41;7,90			
0,41;7,75	0,34;7,47	2,03;7,45	4,39;7,43	4,74;7,43	3,40;7,41	2,68;7,40	
0,68;7,36	0,35;7,26	0,41;7,24	1,76;7,24	2,49;7,23	3,23;7,22	16,00;7,21	
14,95;7,20	7,22;7,19	10,48;7,19	5,28;7,12	0,63;7,10	4,07;7,09	5,29;7,09	
4,31;7,08	4,10;7,08	4,89;7,07	3,60;6,89	11,11;6,39	0,42;6,39	0,46;4,21	
6,84;4,20	10,38;4,18	6,91;3,90	0,73;3,51	0,37;3,46	0,40;3,44	0,39;3,43	
0,51;3,42	0,53;3,30	747,94;3,28	10,29;3,17	0,35;3,12	6,19;3,10	9,77;3,08	
7,05;2,91	0,42;2,67	1,55;2,66	1,55;2,66	2,44;2,64	5,91;2,62	8,16;2,60	
5,39;2,58	2,32;2,51	81,79;2,50	146,04;2,50	185,15;2,50	128,60;2,33		
0,97;2,33	1,28;2,29	0,38;2,27	0,34;2,07	1,84;1,99	0,44;1,40	1,95;1,35	
0,33;1,30	1,39;1,26	0,42;1,24	1,25;1,16	0,97;1,07	4,07;0,00	32,19;-0,01	1,43
Ejemplo N° 55 [CD ₃ CN]							
9,18	0,36;8,16	0,92;8,15	0,94;8,06	1,15;7,44			
0,99;7,43	0,45;7,42	1,08;7,41	1,07;7,41	0,47;7,40	0,97;7,07	1,12;7,05	
1,92;7,03	0,35;7,02	0,89;6,82	0,87;6,82	0,79;6,81	0,83;6,80	0,81;4,18	
0,90;4,16	1,62;4,15	0,89;3,95	2,02;2,84	0,91;2,83	1,69;2,81	0,91;2,47	
0,33;2,16	856,19;2,13	4,46;2,12	1,58;2,11	1,73;2,11	1,82;2,10	1,68;2,09	
1,31;2,08	1,44;2,08	1,12;2,07	1,19;2,05	0,84;2,04	0,69;1,96	389,96;1,95	
62,01;1,95	106,27;1,94	145,13;1,93	99,91;1,93	51,45;1,89	1,30;1,88		
0,96;1,88	1,09;1,86	0,82;1,79	2,20;1,78	0,40;1,77	0,59;1,77	0,86;1,76	

0,60;1,76 0,34;1,41 16,00;1,27 0,40;0,91 0,75;0,01 0,69;0,00 15,01;-0,01 0,74							
Ejemplo N° 56 [DMSO-D ₆] 7,86 2,18;7,85 2,22;7,42 0,61;7,41 0,73;7,40							
1,20;7,39	1,23;7,39	0,86;7,38	0,78;7,25	1,11;7,25	1,66;7,25	1,28;7,24	
1,01;7,24	1,46;7,24	1,10;7,20	0,76;7,19	0,79;7,19	0,98;7,19	0,84;7,18	
0,73;7,18	0,82;7,17	0,97;7,17	0,92;7,17	0,79;7,17	0,69;7,16	0,46;7,16	
0,44;7,15	1,12;7,15	0,80;7,14	0,54;7,14	0,55;7,14	0,40;7,13	0,38;6,28	
2,62;6,26	1,27;6,25	1,32;6,24	1,91;6,23	1,72;6,23	1,86;6,23	1,74;4,17	
1,54;4,16	2,37;4,15	1,59;4,03	0,41;4,02	0,41;3,88	0,36;3,87	0,57;3,86	
0,58;3,85	0,37;3,35	80,05;3,33	1,48;2,99	1,35;2,98	2,08;2,96	1,57;2,62	
0,62;2,60	1,27;2,59	1,73;2,58	1,05;2,57	0,37;2,51	5,24;2,51	11,62;2,50	
16,15;2,50	11,61;2,50	5,26;2,08	0,46;1,99	1,79;1,19	0,53;1,17	1,01;1,16	
0,50;1,10	16,00;1,09	15,96;1,01	0,72;1,00	0,72;0,00	6,89		
Ejemplo N° 57 [CD ₃ CN] 8,70 7,26;8,70 4,26;8,69 4,42;8,68 7,66;8,67							
0,53;8,65	0,38;8,63	0,56;8,62	0,39;8,59	1,12;8,58	0,71;8,57	0,83;8,57	
1,19;7,57	0,54;7,55	0,66;7,50	8,38;7,49	4,92;7,49	4,96;7,48	8,26;7,42	
1,10;7,42	0,64;7,41	1,01;7,40	0,43;7,39	0,58;7,37	0,41;7,26	0,63;7,25	
0,58;6,80	6,76;6,79	7,20;6,78	0,73;6,77	1,57;6,76	1,09;6,48	6,83;6,47	
6,42;6,45	0,32;6,44	0,33;6,44	0,33;6,43	0,35;6,39	0,99;6,38	0,99;5,48	
5,89;5,00	2,53;4,99	2,68;4,97	2,81;4,97	2,65;4,68	0,43;4,68	0,51;4,67	
0,43;4,67	0,36;4,51	0,78;4,50	1,76;4,49	0,99;4,48	1,61;4,47	3,31;4,45	
1,63;4,42	1,76;4,40	1,90;4,39	2,38;4,38	2,51;4,37	1,06;4,36	1,13;4,35	
1,01;4,34	0,93;4,33	0,64;4,32	0,68;4,31	0,50;4,30	0,46;4,29	0,35;4,27	
0,62;4,25	0,35;4,12	0,52;4,10	1,47;4,08	1,56;4,06	0,56;3,58	0,33;3,57	
0,41;3,55	0,39;3,46	0,40;3,44	0,41;3,18	0,62;3,16	0,59;3,13	0,43;3,12	
0,48;2,88	0,58;2,88	0,66;2,87	1,17;2,86	1,13;2,86	0,61;2,85	1,18;2,84	

0,94;2,83	1,75;2,83	1,72;2,82	0,84;2,81	0,75;2,77	0,95;2,75	0,96;2,75	
1,09;2,73	1,53;2,72	0,94;2,72	0,64;2,71	1,35;2,69	0,64;2,69	0,62;2,67	
0,45;2,63	16,00;2,42	0,34;2,39	0,37;2,36	0,36;2,35	0,65;2,34	0,60;2,33	
0,49;2,32	0,75;2,30	1,06;2,25	144,20;2,24	210,43;2,16	1,66;2,15	0,72;2,14	
0,91;2,14	1,06;2,13	0,75;2,12	0,55;2,01	2,16;2,00	8,74;1,99	191,01;1,99	
6,63;1,98	40,96;1,98	75,96;1,97	108,11;1,96	73,24;1,96	37,20;1,83	0,41;1,82	
1,25;1,81	0,44;1,80	0,62;1,80	0,77;1,79	0,54;1,79	0,33;1,30	1,21;1,28	
0,49;1,25	2,02;1,23	3,66;1,21	2,02;1,19	0,34;1,00	1,36;0,98	2,76;0,97	
1,40;0,96	1,39;0,94	2,94;0,92	1,34;0,03	0,38			
Ejemplo N° 58 [CD ₃ CN] 8,64 2,38;8,18 9,09;8,17 9,01;8,04 4,38;7,36							
6,82;7,35	8,54;7,35	7,26;7,34	9,17;7,31	8,37;7,31	8,80;7,30	7,04;7,30	
6,78;7,18	8,82;7,18	8,56;7,17	8,20;7,17	7,67;6,90	8,19;6,89	8,10;6,89	
8,21;6,89	7,98;5,45	0,99;4,15	8,52;4,14	15,37;4,13	8,72;2,78	8,12;2,77	
16,00;2,76	8,68;2,21	0,60;2,20	0,48;2,19	1,42;2,16	872,77;2,14	1,02;2,10	
76,19;2,09	2,51;2,08	1,78;2,08	5,50;2,07	4,41;2,07	7,95;2,06	5,30;2,06	
7,22;2,05	3,46;2,05	2,48;2,05	2,83;1,99	0,42;1,97	2,84;1,97	264,26;1,96	
15,21;1,95	17,71;1,95	146,93;1,95	270,28;1,94	396,53;1,94	268,16;1,93		
133,53;1,92	0,44;1,92	0,39;1,91	0,38;1,87	2,67;1,87	1,70;1,86	6,86;1,86	
4,14;1,85	7,01;1,85	3,94;1,84	6,02;1,84	1,64;1,83	2,87;1,83	2,29;1,82	
1,52;1,82	0,81;1,27	0,69;0,01	0,95;0,00	31,85;-0,01	0,87		
Ejemplo N° 59 [CD ₃ CN] 8,57 1,21;8,17 3,52;8,16 3,62;8,07 3,46;7,36							
2,32;7,35	2,95;7,35	2,69;7,34	3,13;7,31	3,03;7,31	3,45;7,30	2,75;7,30	
2,66;7,18	3,18;7,18	3,36;7,17	2,94;7,17	3,01;6,89	2,95;6,88	3,11;6,88	
2,90;6,87	3,04;5,45	3,47;4,15	3,33;4,14	6,15;4,13	3,44;4,08	0,99;4,06	
3,02;4,05	3,07;4,04	1,02;2,79	3,18;2,78	6,32;2,77	3,41;2,42	2,26;2,41	

6,99;2,40	7,18;2,39	2,42;2,16	57,06;2,09	1,30;2,08	5,07;2,07	3,51;2,06
2,13;2,06	2,86;2,05	1,64;2,05	1,49;2,04	0,56;1,99	0,67;1,98	0,63;1,97
19,43;1,97	586,60;1,96	10,34;1,96	8,32;1,95	9,95;1,95	65,34;1,95	
118,42;1,94	170,03;1,94	118,14;1,93	60,29;1,88	1,04;1,87	0,72;1,87	
2,74;1,86	1,77;1,86	2,85;1,85	4,62;1,85	2,57;1,84	0,88;1,83	0,70;1,83
1,00;1,82	0,68;1,82	0,34;1,27	0,36;1,22	3,56;1,20	7,06;1,19	3,52;1,13
7,88;1,12	16,00;1,11	7,61;0,01	0,42;0,00	13,95;-0,01	0,45	
Ejemplo N° 60 [CD ₃ CN] 8,75 0,39;8,21 1,41;8,21 1,42;8,21 1,39;8,21						
1,46;8,08	1,43;7,36	1,16;7,36	1,43;7,35	1,37;7,35	1,65;7,31	1,36;7,31
1,50;7,31	1,29;7,31	1,25;7,18	1,54;7,18	1,49;7,17	1,37;7,17	1,33;6,95
1,37;6,95	1,37;6,94	1,33;6,94	1,34;5,45	0,77;4,15	1,26;4,14	2,29;4,13
1,34;4,08	0,55;4,06	1,68;4,05	1,67;4,04	0,57;3,98	8,38;3,46	16,00;2,80
1,20;2,79	2,38;2,78	1,30;2,17	14,59;2,09	0,45;2,08	0,35;2,08	0,83;2,07
0,75;2,07	1,25;2,06	0,79;2,06	1,02;2,06	0,51;2,05	0,45;2,05	0,53;2,05
0,53;1,97	7,67;1,97	16,34;1,96	2,15;1,95	2,09;1,95	19,24;1,95	34,64;1,94
51,63;1,94	35,91;1,93	18,25;1,92	0,38;1,88	0,42;1,87	1,05;1,86	0,67;1,86
1,03;1,85	0,68;1,85	0,97;1,84	0,33;1,84	0,39;1,83	0,34;1,22	2,21;1,20
4,18;1,19	2,18;0,00	3,45				
Ejemplo N° 61 [DMSO-D ₆] 8,10 4,76;8,10 4,86;7,43 0,48;7,42 0,85;7,42						
0,49;7,42	0,91;7,41	2,11;7,41	2,38;7,41	3,51;7,40	15,14;7,40	16,00;7,39
3,43;7,39	2,45;7,38	2,55;7,38	0,42;7,38	0,38;7,37	0,60;7,07	1,64;7,07
2,34;7,07	1,70;7,07	1,69;7,06	2,25;7,06	1,58;6,85	5,37;4,20	3,12;4,19
4,71;4,18	3,22;3,38	0,58;3,38	0,77;3,38	0,56;3,37	1,26;3,35	992,34;3,33
3,42;3,32	0,41;3,12	2,81;3,11	4,11;3,10	3,22;2,64	0,92;2,63	2,39;2,62
3,93;2,61	1,27;2,61	2,17;2,59	0,79;2,54	0,38;2,52	1,03;2,52	1,29;2,52

1,27;2,51 40,31;2,51 89,93;2,50 125,16;2,50 90,10;2,50 40,68;2,39 0,56;2,39 0,74;2,38 0,53;2,08 0,90;1,99 0,69;1,17 0,38;0,00 5,87
Ejemplo N° 62 [CD ₃ CN] 8,54 13,69;8,54 7,82;8,53 8,02;8,53 13,64;7,31 6,31;7,31 6,26;7,30 6,64;7,30 6,44;7,26 16,00;7,26 9,18;7,25 9,20;7,25 15,58;6,95 6,21;6,94 7,63;6,94 5,84;6,93 7,53;6,89 7,27;6,89 7,53;6,89 6,07;6,89 5,75;5,45 2,59;4,15 6,33;4,14 11,20;4,13 6,60;2,75 6,07;2,74 11,71;2,73 6,51;2,20 0,49;2,19 0,68;2,19 0,60;2,17 523,59;2,16 0,50;2,08 1,91;2,08 1,37;2,07 3,62;2,07 3,10;2,06 5,83;2,06 3,58;2,05 5,08;2,05 1,37;2,04 2,30;1,97 0,32;1,97 28,74;1,96 5,43;1,95 6,64;1,95 58,15;1,95 105,93;1,94 157,71;1,94 107,34;1,93 52,87;1,93 1,19;1,92 0,46;1,86 2,22;1,86 1,22;1,85 5,44;1,85 2,99;1,84 4,53;1,84 4,86;1,84 2,86;1,83 4,94;1,83 1,28;1,83 1,13;1,83 1,27;1,82 1,81;1,82 0,35;1,27 0,42;1,13 0,59;0,00 5,72
Ejemplo N° 63 [CD ₃ CN] 8,58 0,51;8,18 1,70;8,17 1,56;8,17 1,71;8,08 1,75;7,36 1,22;7,35 1,55;7,35 1,37;7,35 1,66;7,31 1,61;7,31 1,70;7,30 1,39;7,30 1,27;7,18 1,68;7,18 1,60;7,17 1,55;7,17 1,50;6,89 1,47;6,88 1,39;6,88 1,44;6,87 1,39;5,45 0,44;4,15 1,52;4,14 2,78;4,13 1,60;3,61 0,56;2,79 1,41;2,78 2,80;2,77 1,52;2,66 0,32;2,65 0,84;2,64 1,14;2,63 0,87;2,62 0,35;2,18 415,81;2,09 0,42;2,09 0,43;2,09 0,32;2,08 0,91;2,08 0,82;2,08 0,79;2,07 1,41;2,07 0,83;2,06 1,19;2,06 0,60;2,05 0,70;2,05 0,53;1,97 0,53;1,97 60,62;1,96 3,38;1,95 3,70;1,95 32,80;1,95 60,37;1,94 88,12;1,94 59,46;1,93 30,14;1,93 0,49;1,88 0,47;1,87 1,20;1,86 0,76;1,86 1,20;1,85 0,74;1,85 1,08;1,84 0,39;1,83 0,36;1,83 0,51;1,82 0,35;1,27 0,49;1,15 16,00;1,14 15,84;0,97 0,53;0,95 0,51;0,00 5,59
Ejemplo N° 64 [CD ₃ CN] 8,58 0,47;8,18 1,49;8,18 1,55;8,17 1,50;8,17

1,65;8,08	1,29;7,35	1,32;7,35	1,75;7,35	1,48;7,34	1,87;7,31	1,71;7,31
1,85;7,30	1,47;7,30	1,47;7,18	1,66;7,18	1,65;7,17	1,52;7,17	1,51;6,90
1,52;6,89	1,52;6,89	1,50;6,88	1,53;4,15	1,33;4,14	2,44;4,13	1,44;3,27
0,36;2,79	1,29;2,78	2,52;2,77	1,39;2,25	3,64;2,24	4,55;2,16	187,11;2,13
0,83;2,11	0,87;2,10	0,88;2,09	0,86;2,09	0,78;2,08	1,18;2,08	1,28;2,07
0,83;2,07	1,37;2,06	0,88;2,06	1,30;2,06	1,17;2,05	1,39;2,05	1,12;2,04
0,53;1,97	1,48;1,97	125,29;1,96	8,47;1,95	8,35;1,95	77,11;1,95	141,39;1,94
210,88;1,94	144,04;1,93	71,86;1,93	2,18;1,92	0,89;1,88	0,44;1,87	1,10;1,86
0,71;1,86	1,05;1,85	1,13;1,85	1,03;1,84	0,40;1,84	0,41;1,84	0,55;1,83
0,90;1,83	1,21;1,82	0,83;1,82	0,43;1,48	0,34;1,44	0,33;1,27	0,65;1,22
0,35;1,20	0,41;0,97	16,00;0,95	15,50;0,94	0,61;0,93	0,57;0,01	1,30;0,00
44,51;-0,01	1,22					
Ejemplo N° 65 [CD 3CN]						
8,88	2,87;8,18	9,34;8,18	9,71;8,17	9,31;8,17		
9,80;8,04	8,90;7,35	8,26;7,35	9,82;7,34	8,90;7,34	10,57;7,30	9,48;7,30
10,16;7,29	8,16;7,29	7,89;7,18	10,24;7,17	10,03;7,17	9,49;7,17	9,10;6,88
9,46;6,88	9,25;6,87	9,12;6,87	9,28;5,45	11,62;4,14	8,65;4,13	15,38;4,12
8,87;4,06	0,38;4,05	0,36;3,28	1,09;3,27	1,01;2,89	1,16;2,77	1,60;2,77
8,04;2,76	16,00;2,75	8,74;2,20	0,51;2,19	1,79;2,18	1,59;2,18	3,31;2,16
2864,50;2,15	3,12;2,14	1,52;2,14	1,10;2,13	0,90;2,12	0,38;2,08	2,30;2,08
1,74;2,07	4,95;2,07	4,48;2,06	9,35;2,06	6,41;2,05	8,65;2,05	4,98;2,04
2,78;2,04	2,75;1,98	0,34;1,97	2,80;1,97	167,69;1,96	23,95;1,95	28,58;1,95
315,03;1,95	583,14;1,94	830,07;1,94	575,58;1,93	291,99;1,93	9,01;1,92	
4,13;1,92	1,05;1,91	0,67;1,91	0,52;1,87	2,78;1,86	1,82;1,86	6,98;1,85
4,46;1,85	6,61;1,84	4,17;1,84	6,37;1,83	4,78;1,83	6,13;1,82	3,54;1,82
1,79;1,81	1,32;1,80	2,76;1,80	2,97;1,79	1,75;1,79	5,06;1,78	3,17;1,78

2,92;1,77	1,47;1,27	1,88;1,22	0,46;1,20	0,85;1,19	0,59;0,89	2,33;0,89
1,94;0,88	8,28;0,88	12,08;0,87	7,33;0,87	6,18;0,87	11,16;0,86	4,31;0,85
1,64;0,85	2,10;0,84	4,76;0,84	11,77;0,83	6,52;0,83	5,42;0,83	12,12;0,82
6,09;0,82	2,49;0,81	2,31;0,10	1,08;0,01	8,35;0,00	298,98;-0,01	9,20;-0,10
1,12						
Ejemplo N° 66 [CD 3CN]						
9,02	0,50;8,21	1,75;8,21	1,81;8,20	1,85;8,20		
1,77;8,09	1,58;7,36	1,83;7,36	2,23;7,35	1,86;7,35	2,53;7,31	2,04;7,31
2,30;7,31	1,87;7,31	1,70;7,18	2,27;7,18	2,32;7,18	2,16;7,17	2,09;6,94
2,04;6,93	1,96;6,93	1,94;6,93	1,96;5,45	16,00;4,26	0,49;4,25	0,56;4,25
0,51;4,24	0,51;4,15	1,60;4,14	2,78;4,13	1,68;4,06	0,58;4,05	0,57;4,01
0,58;4,00	0,56;2,80	1,39;2,79	2,75;2,78	1,56;2,19	0,45;2,18	0,47;2,18
0,72;2,16	404,88;2,14	0,40;2,09	0,46;2,09	0,36;2,08	0,94;2,08	1,11;2,07
1,54;2,07	0,96;2,06	1,13;2,06	1,10;2,05	1,53;2,05	0,81;2,04	0,42;1,97
2,83;1,97	39,03;1,96	0,53;1,96	4,80;1,95	5,85;1,95	65,22;1,95	118,44;1,94
182,94;1,94	127,17;1,93	61,91;1,93	1,84;1,92	0,80;1,88	0,55;1,88	0,35;1,87
1,35;1,87	0,81;1,86	1,27;1,86	0,77;1,85	1,34;1,84	0,34;1,84	0,41;1,84
0,45;1,83	0,76;1,83	1,01;1,82	0,72;1,82	0,39;1,39	9,59;1,37	9,73;1,27
0,44;1,22	0,91;1,20	1,64;1,19	0,84;1,11	0,63;0,01	1,73;0,00	66,64;-0,01
1,82						
Ejemplo N° 67 [CD 3CN]						
8,16	1,25;8,16	1,28;8,15	1,33;8,15	1,26;8,12		
0,43;7,82	1,39;7,36	1,12;7,36	1,38;7,35	1,27;7,35	1,53;7,31	1,34;7,31
1,40;7,31	1,20;7,31	1,14;7,19	1,41;7,18	1,40;7,18	1,30;7,18	1,28;6,87
1,31;6,87	1,29;6,86	1,28;6,86	1,27;5,45	2,80;4,15	1,16;4,14	2,10;4,13
1,22;4,06	0,49;4,05	0,49;3,70	16,00;2,79	1,12;2,78	2,19;2,77	1,21;2,16
399,73;2,15	0,76;2,14	0,32;2,09	0,33;2,08	0,67;2,08	0,77;2,07	1,08;2,07
0,67;2,06	0,84;2,06	0,85;2,05	1,14;2,05	0,62;2,04	0,35;1,97	2,44;1,97

33,49;1,96 3,95;1,95 4,93;1,95 52,98;1,95 96,11;1,94 144,50;1,94 99,18;1,93 49,40;1,93 1,38;1,92 0,61;1,88 0,40;1,87 0,98;1,86 0,61;1,86 0,93;1,85 0,58;1,85 0,86;1,84 0,36;1,84 0,35;1,83 0,61;1,83 0,82;1,82 0,58;1,22 0,64;1,20 1,26;1,19 0,62;1,11 0,51;0,01 1,41;0,00 49,91;-0,01 1,40
Ejemplo N° 68 [CD ₃ CN] 9,20 0,37;8,21 0,99;8,20 1,02;8,10 1,30;7,36 0,69;7,36 0,82;7,35 0,75;7,35 0,85;7,31 0,87;7,31 0,95;7,30 0,80;7,30 0,76;7,18 0,91;7,18 0,92;7,17 0,84;7,17 0,86;6,93 0,83;6,92 0,87;6,92 0,81;6,91 0,85;4,15 0,93;4,14 1,71;4,13 0,97;3,93 0,80;2,80 0,86;2,79 1,74;2,78 0,97;2,16 367,05;2,08 0,61;2,08 0,53;2,07 0,92;2,07 0,57;2,06 0,71;2,06 0,58;2,06 0,77;2,05 1,08;2,05 0,65;1,97 12,84;1,96 6,06;1,95 8,11;1,95 62,38;1,95 113,23;1,94 163,35;1,94 112,62;1,93 58,71;1,87 0,77;1,87 0,51;1,86 0,80;1,85 0,66;1,83 0,37;1,83 0,65;1,83 0,95;1,82 0,63;1,82 0,36;1,42 16,00;1,27 0,32;1,11 0,62;0,01 1,19;0,00 33,11;-0,01 1,31
Ejemplo N° 69 [DMSO-D ₆] 7,82 0,47;7,80 0,44;7,49 0,39;7,47 0,45;7,47 0,50;7,45 0,44;7,29 0,47;7,27 0,34;7,27 0,84;7,24 0,73;6,73 0,49;6,72 0,50;6,57 0,33;6,55 0,33;4,22 0,34;4,20 0,50;4,18 0,37;4,07 0,35;3,93 4,17;3,09 0,40;2,51 5,19;2,51 10,41;2,50 13,89;2,50 10,12;2,50 5,02;1,30 6,27;1,16 2,70;1,07 16,00;0,00 0,54
Ejemplo N° 70 [DMSO-D ₆] 8,10 0,52;8,10 0,52;7,82 2,25;7,81 2,31;7,42 1,96;7,42 2,86;7,42 0,85;7,41 1,82;7,41 3,98;7,41 3,27;7,40 2,21;7,40 1,84;7,40 0,66;7,39 0,36;7,37 1,11;7,37 1,87;7,36 0,63;7,35 3,83;7,35 1,68;7,34 0,99;7,34 2,06;7,34 0,34;7,33 0,88;7,32 1,67;7,32 0,89;7,32 0,56;7,31 1,81;7,31 0,37;7,30 0,54;6,85 0,58;6,28 2,55;6,28 2,60;6,21 1,35;6,21 2,25;6,21 1,97;6,20 3,14;6,20 2,40;4,20 0,34;4,19 0,52;4,18 0,37;4,16 1,52;4,15 2,36;4,14 1,57;4,05 0,33;4,03 1,02;4,02 1,02;4,01

0,34;3,85	0,35;3,84	0,55;3,83	0,56;3,82	0,35;3,35	117,16;3,33	1,19;3,11
0,45;3,10	0,35;2,99	1,35;2,98	2,04;2,97	1,56;2,62	0,75;2,61	0,35;2,60
1,31;2,59	1,72;2,58	1,04;2,57	0,36;2,51	8,24;2,51	18,33;2,50	25,54;2,50
18,54;2,50	8,47;1,99	4,60;1,19	1,27;1,17	2,51;1,16	1,32;1,09	16,00;1,08
15,90;1,06	0,33;1,01	0,95;0,99	0,95;0,00	9,01		
Ejemplo N° 71 [DMSO-D ₆]						
7,83	1,95;7,82	2,02;7,45	1,91;7,44	0,78;7,43		
2,20;7,43	2,45;7,42	0,91;7,41	2,23;7,22	2,37;7,21	0,75;7,20	0,82;7,19
4,23;7,19	0,89;7,18	0,68;7,17	2,00;6,44	0,61;6,43	1,27;6,41	0,63;6,25
2,65;6,25	2,67;6,25	1,32;6,24	1,87;6,23	1,40;4,16	1,37;4,15	2,19;4,13
1,43;4,04	0,48;4,02	0,48;3,35	24,21;3,35	25,51;3,34	49,43;3,31	1,33;3,00
1,20;2,99	2,03;2,97	1,49;2,94	1,39;2,92	2,43;2,91	1,78;2,89	0,36;2,63
0,45;2,61	1,13;2,59	1,54;2,57	0,97;2,55	0,32;2,51	6,42;2,51	13,24;2,50
17,92;2,50	13,08;2,49	6,27;1,99	2,16;1,75	0,35;1,74	0,69;1,72	0,88;1,70
0,73;1,69	0,40;1,24	0,59;1,19	0,61;1,17	1,19;1,16	0,59;0,99	0,39;0,98
0,37;0,85	16,00;0,83	15,38;0,82	2,16;0,81	0,47;0,81	0,63;0,81	1,69;0,00
5,51						
Ejemplo N° 72 [DMSO-D ₆]						
8,02	0,59;7,81	1,82;7,80	1,87;7,43	1,31;7,42		
1,62;7,42	0,65;7,40	2,85;7,40	2,69;7,37	0,84;7,37	1,05;7,36	0,52;7,35
2,78;7,35	1,13;7,33	2,72;7,33	2,04;7,32	1,03;7,32	0,59;7,31	0,98;6,42
0,53;6,41	1,10;6,39	0,56;6,29	2,10;6,24	1,50;6,24	1,34;6,23	1,48;6,23
1,35;4,17	1,22;4,15	1,94;4,13	1,27;4,06	0,88;4,04	2,69;4,02	2,72;4,00
0,91;3,35	35,16;3,34	65,44;3,32	1,52;3,01	1,08;2,99	1,81;2,97	1,31;2,94
1,23;2,92	2,13;2,91	1,69;2,90	1,81;2,89	0,75;2,82	0,42;2,80	0,50;2,79
0,37;2,63	0,37;2,61	1,03;2,59	1,39;2,58	0,86;2,52	0,33;2,51	7,77;2,51
15,73;2,50	21,07;2,50	15,30;2,49	7,23;1,99	12,05;1,76	0,32;1,74	0,63;1,72
0,81;1,71	0,70;1,69	0,52;1,67	0,44;1,65	0,33;1,40	0,52;1,24	1,00;1,22

0,42;1,19	3,46;1,18	1,18;1,17	6,92;1,16	3,35;1,05	0,42;1,03	0,42;0,99
0,72;0,98	0,63;0,87	0,69;0,85	16,00;0,83	15,89;0,82	3,66;0,81	0,72;0,81
1,07;0,81	2,83;0,00	1,75				
Ejemplo N° 73 [DMSO-D ₆] 7,85 2,33;7,85 2,30;7,84 2,36;7,84 2,38;7,42						
0,66;7,41	0,87;7,40	1,28;7,39	1,28;7,39	0,89;7,38	0,77;7,26	1,21;7,25
1,73;7,25	1,38;7,24	1,08;7,24	1,49;7,24	1,16;7,19	0,68;7,19	1,03;7,18
0,90;7,17	1,34;7,17	1,21;7,17	1,44;7,17	1,19;7,16	1,26;7,16	0,98;7,15
0,78;7,15	0,60;7,14	0,60;7,14	0,42;7,14	0,38;6,49	0,69;6,48	1,44;6,47
0,71;6,29	2,07;6,27	1,79;6,27	1,49;6,26	1,74;6,26	1,52;4,17	1,58;4,16
2,46;4,15	1,69;4,05	0,32;4,03	0,97;4,02	0,99;4,01	0,32;3,37	166,66;3,35
0,70;2,99	1,43;2,98	2,18;2,97	1,67;2,95	1,08;2,94	1,81;2,93	1,12;2,62
0,54;2,61	1,28;2,59	1,84;2,58	1,13;2,57	0,40;2,51	4,37;2,51	9,64;2,51
13,51;2,50	9,63;2,50	4,35;1,99	4,49;1,75	0,32;1,74	0,65;1,73	0,83;1,72
0,68;1,71	0,35;1,24	0,42;1,19	1,32;1,17	2,61;1,16	1,23;0,85	16,00;0,85
3,05;0,84	15,75;0,84	2,67;0,82	0,39;0,82	1,46;0,81	1,40;0,00	3,26
Ejemplo N° 74 [DMSO-D ₆] 8,45 5,48;8,44 5,69;7,44 0,44;7,43 4,66;7,43						
1,82;7,42	5,17;7,41	6,28;7,40	2,07;7,40	5,73;7,39	0,66;7,25	0,64;7,24
5,99;7,23	1,71;7,22	1,89;7,22	10,60;7,21	1,92;7,20	1,58;7,19	4,90;7,19
0,48;7,15	6,49;7,15	4,39;7,14	4,32;7,14	6,40;5,76	1,18;4,49	1,07;4,48
2,04;4,46	2,07;4,44	1,11;3,93	1,99;3,34	110,22;3,31	0,83;3,13	0,58;3,12
0,69;3,11	0,71;3,10	0,80;3,09	1,24;3,08	1,41;3,07	1,34;3,06	1,27;3,02
1,14;3,01	1,49;3,00	1,73;2,99	1,94;2,97	0,70;2,96	0,86;2,95	0,78;2,84
0,64;2,83	0,63;2,83	0,77;2,82	0,84;2,81	1,32;2,80	1,09;2,79	1,26;2,78
0,87;2,77	0,64;2,76	0,49;2,51	14,76;2,50	20,10;2,24	0,60;2,22	1,23;2,21
0,78;2,20	1,16;2,20	1,26;2,19	1,31;2,18	1,06;2,17	0,83;2,17	1,02;2,15

0,50;1,99 0,41;1,49 16,00;1,47 15,92;1,16 0,38;1,07 11,85;0,00 4,14
Ejemplo N° 75 [CD ₃CN] 8,21 0,50;8,21 0,51;8,20 0,50;8,20 0,51;8,10 0,43;7,30 0,50;7,30 0,54;7,29 0,52;7,29 0,55;6,96 0,54;6,96 0,59;6,96 0,44;6,96 0,45;6,95 0,61;6,95 0,85;6,95 0,87;6,94 0,74;6,94 0,41;6,93 0,66;6,93 0,42;5,45 7,73;4,14 0,46;4,13 0,83;4,12 0,49;2,76 0,44;2,75 0,86;2,74 0,47;2,43 0,36;2,42 1,14;2,40 1,17;2,39 0,38;2,17 123,39;2,06 0,44;2,06 0,43;2,05 0,34;2,05 0,52;2,05 0,35;1,97 0,72;1,97 14,22;1,96 2,29;1,95 2,60;1,95 24,64;1,95 46,24;1,94 66,64;1,94 44,02;1,93 22,38;1,93 0,57;1,86 0,38;1,85 0,36;1,84 0,35;1,83 0,42;1,20 0,39;1,20 0,40;1,13 16,00;1,12 2,98;1,11 1,38;0,00 2,77
Ejemplo N° 76 [DMSO-D₆] 10,36 0,59;8,14 0,61;8,14 0,66;8,13 0,62;8,12 0,70;8,09 0,59;7,45 0,57;7,44 0,64;7,43 0,73;7,42 0,66;7,23 0,70;7,21 1,25;7,18 0,59;6,76 0,54;6,75 0,53;6,74 0,53;6,74 0,55;3,94 2,56;3,35 55,42;2,51 4,65;2,51 6,42;2,51 4,32;2,38 1,01;2,36 1,04;2,34 0,34;2,00 0,58;1,49 1,72;1,48 1,72;1,18 0,33;1,08 16,00;1,06 1,28;1,04 2,83;1,02 1,21
Ejemplo N° 77 [DMSO-D₆] 10,39 0,32;8,13 0,37;8,12 0,73;7,43 0,35;7,20 0,55;5,76 1,66;3,96 2,81;3,35 11,07;2,51 1,15;2,51 2,51;2,50 3,45;2,50 2,49;2,50 1,13;1,48 0,85;1,47 0,85;1,12 0,36;1,11 0,35;1,07 16,00;1,06 2,11;0,00 0,42
Ejemplo N° 78 [DMSO-D₆] 10,72 0,46;8,14 0,47;8,12 0,49;8,07 0,51;7,44 0,41;7,43 0,47;7,42 0,53;7,41 0,48;7,22 0,50;7,20 0,88;7,17 0,41;6,74 0,37;6,73 0,36;6,73 0,37;6,72 0,37;3,93 0,93;3,34 6,37;3,34 9,96;3,34 8,90;2,51 1,52;2,51 2,89;2,50 3,94;2,50 2,73;2,50 1,34;1,48 1,28;1,46 1,27;1,07 16,00;0,79 1,33;0,77 1,24;0,00 0,67
Ejemplo N° 79 [DMSO-D₆] 10,23 0,80;8,05 0,76;8,05 0,74;8,04 0,79;8,04

0,77;7,87	0,54;7,26	0,65;7,25	0,74;7,24	0,76;7,23	0,69;7,04	0,73;7,03
1,35;7,01	0,64;6,64	0,63;6,64	0,61;6,64	0,62;6,63	0,63;3,93	0,49;3,93
1,05;3,92	0,51;3,19	16,00;2,76	0,50;2,75	0,99;2,74	0,47;2,35	3,21;2,35
7,13;2,35	9,90;2,35	7,10;2,34	3,17;2,10	1,14;2,09	1,16;1,58	8,13;0,30
0,75;0,30	0,77;0,29	0,35;0,29	0,35;0,29	0,73;0,28	0,75;0,01	0,78;0,01
0,81;0,00	0,75;0,00	0,81;-0,16	0,69			
Ejemplo N° 80 [CD 3CN] 10,78 0,46;10,24 0,42;8,66 7,23;8,64 7,23;8,56						
0,78;8,55	0,99;8,54	0,50;8,52	0,46;8,50	1,12;8,49	1,22;8,48	1,11;8,47
1,13;8,45	1,49;8,44	1,80;7,83	0,85;7,82	1,53;7,80	0,94;7,44	8,66;7,44
5,44;7,43	5,20;7,43	8,55;7,34	1,02;7,33	1,03;7,13	0,76;7,12	0,93;7,11
1,25;7,09	1,38;7,05	0,50;7,03	1,50;7,02	1,32;6,96	1,37;6,84	6,20;6,83
6,98;6,82	1,04;6,81	0,92;6,66	6,81;6,65	6,68;6,64	1,44;6,63	0,68;6,61
0,86;6,60	0,70;6,58	0,97;6,57	0,72;6,37	0,48;6,22	0,54;5,56	0,75;5,48
0,44;5,39	2,05;5,38	4,01;5,37	2,06;5,34	0,58;5,31	0,67;4,47	0,45;4,42
1,75;4,40	2,12;4,39	2,45;4,38	2,41;4,37	1,98;4,36	0,48;4,13	0,61;4,12
1,91;4,10	1,76;4,10	1,00;4,08	2,19;4,07	2,00;4,05	1,55;4,04	1,16;2,75
0,56;2,72	0,95;2,68	0,49;2,59	0,55;2,58	0,55;2,56	0,94;2,55	1,28;2,54
1,18;2,53	1,34;2,51	1,45;2,49	1,26;2,48	1,06;2,46	0,69;2,44	0,57;2,40
0,78;2,40	0,84;2,38	0,98;2,37	1,19;2,35	1,95;2,34	1,99;2,31	4,71;2,30
7,50;2,29	7,23;2,26	949,77;2,25	2035,07;2,18	2,50;2,16	3,88;2,15	1,77;2,14
2,57;2,14	2,95;2,13	2,32;2,11	0,47;2,09	0,46;2,03	0,54;1,99	450,00;1,98
121,96;1,98	222,61;1,97	311,09;1,96	209,77;1,96	105,49;1,82	2,57;1,81	
0,73;1,80	1,11;1,80	1,74;1,79	1,19;1,79	0,83;1,34	0,55;1,30	3,25;1,26
0,43;1,25	0,68;1,23	1,24;1,22	0,44;1,22	0,70;1,16	16,00;0,98	0,44;0,94
0,70;0,91	0,53;0,87	0,51				

Ejemplo N° 81 [DMSO-D ₆]	7,89	3,88;7,88	4,32;7,43	0,33;7,42	3,60;7,42	4,28;7,41	3,93;7,40	4,52;6,98	3,00;6,97	4,31;6,97	3,09;6,96	4,57;6,94	4,63;6,94	5,58;6,93	3,14;6,93	3,25;6,60	0,32;6,39	0,37;6,38	4,47;6,37	16,00;5,99	0,36;5,91	0,49;5,88	7,99;5,85	0,41;5,75	0,38;5,53	0,34;4,12	3,02;4,10	5,56;4,09	3,00;4,04	0,81;4,02	0,77;4,00	0,37;3,34	1573,87;3,28	0,75;3,26	0,44;3,23	0,34;2,68	3,14;2,67	6,30;2,65	2,91;2,54	0,46;2,52	1,95;2,51	157,17;2,50	217,14;2,50	157,72;2,44	0,33;2,33	1,30;2,07	1,41;2,01	2,29;2,00	2,89;1,99	5,53;1,82	1,08;1,80	2,52;1,79	2,74;1,77	2,02;1,58	0,71;1,40	0,36;1,19	0,88;1,17	1,69;1,16	0,88;0,89	0,36;0,00	7,16
Ejemplo N° 82 [DMSO-D ₆]	9,95	1,49;8,23	1,63;8,22	1,70;7,95	1,50;7,42	1,19;7,40	1,36;7,40	1,64;7,39	0,60;7,38	1,45;7,20	1,50;7,18	2,71;7,16	1,26;6,87	1,20;6,87	1,22;6,86	1,20;6,86	1,23;4,09	0,94;4,08	2,08;4,06	1,32;4,03	5,64;3,37	1,07;3,34	65,63;3,34	63,22;3,33	84,69;3,33	101,81;2,93	0,98;2,91	1,98;2,90	0,92;2,52	0,45;2,51	31,47;2,50	42,95;2,50	30,28;1,73	16,00;1,40	4,84;1,07	1,52;0,00	1,73																								
Ejemplo N° 83 [DMSO-D ₆]	10,41	1,81;8,20	1,62;8,19	1,66;8,02	2,10;7,42	1,21;7,40	1,39;7,40	1,75;7,38	1,52;7,20	1,48;7,18	2,68;7,15	1,26;6,78	1,11;6,77	1,28;6,76	1,11;6,76	1,29;4,09	0,99;4,08	2,18;4,07	1,07;3,32	81,59;2,92	1,07;2,90	2,13;2,89	1,02;2,75	0,64;2,73	0,86;2,71	0,65;2,51	22,25;2,50	30,78;2,50	24,82;2,07	0,35;1,73	16,00;1,09	0,36;1,07	9,66;1,05	9,53;0,00	5,33																										
Ejemplo N° 84 [DMSO-D ₆]	10,78	1,74;8,21	1,64;8,20	1,70;7,98	1,96;7,41	1,28;7,40	0,55;7,40	1,55;7,39	1,63;7,37	1,46;7,20	1,58;7,17	2,75;7,15	1,24;6,79	1,29;6,78	1,13;6,77	1,25;6,77	1,11;5,76	0,71;4,08	0,95;4,07	2,10;4,05	0,99;3,32	51,77;2,90	0,99;2,88	2,00;2,87	0,94;2,52	0,35;2,51																																			

23,23;2,50 29,15;2,50 20,09;2,00 0,49;1,99 0,75;1,97 0,49;1,72 16,00;1,40 2,00;0,79 2,23;0,78 2,32;0,77 4,47;0,00 5,87
Ejemplo N° 85 [CD ₃ CN] 18,32 0,43;17,36 0,42;12,09 0,40;9,25 0,43;8,50 3,39;8,49 2,77;8,49 3,49;8,47 0,53;8,45 0,59;7,40 1,90;7,39 2,19;7,38 2,41;7,37 1,97;7,23 3,83;7,22 2,82;7,22 2,77;7,21 3,70;7,15 0,43;7,12 0,71;7,11 0,69;7,08 2,43;7,05 3,86;7,03 2,00;5,45 1,04;4,38 1,72;4,34 0,70;4,30 0,73;4,18 0,41;4,17 0,45;4,07 0,67;4,05 0,62;4,03 0,84;4,03 0,95;4,01 0,51;3,99 0,59;3,81 0,41;3,45 0,41;3,28 0,52;3,24 16,00;2,81 0,57;2,60 3,11;2,47 0,43;2,41 0,41;2,39 0,42;2,29 1,62;2,27 2,00;2,25 2,03;2,18 1032,82;2,12 0,98;2,11 1,48;2,11 1,68;2,10 1,14;2,08 0,49;2,06 0,46;2,05 0,49;1,96 24,10;1,95 101,96;1,95 188,93;1,94 255,59;1,93 181,67;1,93 92,41;1,88 0,44;1,86 0,49;1,86 0,42;1,79 0,62;1,78 1,09;1,77 1,92;1,76 1,72;1,72 0,76;1,69 0,69;1,69 0,57;1,66 0,41;1,57 0,41;1,56 0,51;1,55 0,50;1,54 0,60;1,51 0,50;1,41 0,47;1,37 0,50;1,36 0,78;1,34 0,87;1,27 12,86;1,21 0,80;1,18 0,53;1,16 0,50;1,14 0,78;1,11 0,46;1,09 0,51;1,08 0,40;0,93 0,41;0,92 0,73;0,90 1,27;0,88 1,91;0,86 1,56;0,82 0,51;0,81 0,51;0,00 3,40
Ejemplo N° 86 [DMSO-D ₆] 10,41 1,53;8,20 1,66;8,19 1,69;8,00 1,58;7,42 1,29;7,40 1,40;7,39 1,72;7,39 0,62;7,38 1,46;7,20 1,71;7,18 2,86;7,15 1,37;6,79 1,12;6,79 1,32;6,78 1,24;6,78 1,22;5,76 0,61;4,09 1,02;4,08 1,99;4,06 1,04;4,04 1,21;4,02 1,19;4,00 0,38;3,93 0,53;3,38 0,38;3,36 0,74;3,33 1004,40;3,30 3,22;3,28 0,49;3,27 0,42;2,91 0,90;2,90 1,81;2,88 0,90;2,68 1,17;2,67 1,62;2,67 1,21;2,54 0,84;2,52 2,75;2,52 3,94;2,51 95,26;2,51 187,51;2,50 261,60;2,50 181,42;2,49 89,34;2,39 0,76;2,38 2,58;2,36 2,50;2,34 1,29;2,33 1,34;2,33 1,70;2,32 1,15;2,07 2,93;1,99

70

5,51;1,73	16,00;1,71	0,52;1,40	0,44;1,19	1,42;1,17	3,01;1,16	1,33;1,07	2,92;1,05	3,01;1,03	6,50;1,01	2,68;0,86	4,57;0,00	5,61
Ejemplo N° 87 [CD ₃ CN] 8,67 2,40;8,21 9,20;8,21 9,26;8,21 9,38;8,20												
9,13;8,08	4,62;7,30	8,59;7,30	9,02;7,29	8,95;7,29	9,32;7,29	0,48;7,28	0,35;7,28	0,35;6,97	9,37;6,97	9,17;6,96	9,32;6,96	9,34;6,96
6,59;6,95	7,46;6,95	12,63;6,95	11,85;6,94	12,62;6,93	6,71;6,93	11,57;6,93	6,58;6,43	0,40;5,45	4,58;4,14	8,54;4,13	15,44;4,12	8,96;4,11
0,39;2,75	8,14;2,74	16,00;2,73	8,72;2,72	0,46;2,71	0,59;2,21	0,48;2,20	0,38;2,19	0,67;2,16	598,75;2,14	1,14;2,13	0,63;2,13	0,42;2,11
79,56;2,08	2,44;2,08	1,88;2,07	5,10;2,07	4,65;2,06	8,52;2,06	3,96;2,06	5,02;2,05	5,54;2,05	6,21;2,04	2,64;2,04	2,94;2,00	0,40;1,97
1,57;1,97	17,47;1,96	11,11;1,95	15,22;1,95	144,24;1,95	260,73;1,94	388,20;1,94	269,48;1,93	134,42;1,93	4,26;1,93	2,06;1,92	0,65;1,86	2,84;1,86
1,84;1,85	7,15;1,85	4,38;1,84	6,97;1,84	4,29;1,83	6,51;1,83	3,64;1,82	3,80;1,82	1,08;1,28	0,59;1,27	2,87;1,22	0,42;1,20	0,74;1,19
0,40;0,88	0,55;0,87	0,34;0,01	1,64;0,00	50,02;-0,01	1,37							
Ejemplo N° 88 [CD ₃ CN] 8,59 0,45;8,21 1,46;8,21 1,54;8,20 1,52;8,20												
1,53;8,11	1,54;8,11	1,55;7,30	1,40;7,30	1,54;7,30	1,57;7,29	1,58;6,97	1,58;6,96	1,56;6,96	1,60;6,96	2,05;6,95	1,34;6,95	2,26;6,95
2,07;6,94	2,25;6,94	1,09;6,93	2,03;6,93	1,11;5,45	12,41;4,14	1,33;4,13	2,39;4,12	1,37;3,28	1,31;3,27	1,31;2,76	1,26;2,75	2,48;2,74
1,35;2,66	0,78;2,65	1,07;2,63	0,81;2,62	0,32;2,17	110,60;2,08	0,40;2,07	0,80;2,07	0,74;2,07	1,25;2,06	0,69;2,06	0,79;2,06	1,06;2,06
0,99;2,05	1,21;2,05	0,81;2,04	0,71;1,97	0,43;1,97	7,43;1,96	3,90;1,95	5,42;1,95	49,59;1,95	95,69;1,94	142,35;1,94	95,75;1,93	46,25;1,93
1,58;1,93	0,81;1,92	0,39;1,87	0,49;1,87	0,32;1,86	1,11;1,86	0,69;1,85	1,05;1,85	0,65;1,84	0,97;1,84	0,52;1,83		

0,71;1,83	0,87;1,82	0,58;1,44	10,41;1,27	1,05;1,16	16,00;1,15	0,63;1,14	15,64;1,11	0,41;0,01	0,64;0,00	19,73;-0,01	0,54	
Ejemplo N° 89 [CD ₃ CN]												
8,91	3,39;8,22	9,14;8,22	9,10;8,21	9,33;8,21	9,05;8,08	10,05;7,30	8,23;7,29	8,04;7,29	8,42;7,29	8,46;6,96	8,77;6,96	
8,85;6,95	9,07;6,95	12,85;6,95	7,54;6,94	12,50;6,94	11,34;6,94	12,05;6,93	6,06;6,93	10,26;6,92	5,85;5,45	14,46;4,13	8,67;4,12	
15,55;4,11	8,69;2,74	8,22;2,73	16,00;2,72	8,58;2,30	0,35;2,17	733,24;2,14	1,75;2,12	0,52;2,07	2,55;2,07	2,23;2,06	5,54;2,06	
5,23;2,05	8,79;2,05	6,31;2,05	6,79;2,04	2,15;2,03	2,85;1,97	48,89;1,96	14,99;1,95	20,59;1,95	148,87;1,95	268,38;1,94	374,42;1,94	
263,39;1,93	136,32;1,93	2,36;1,92	1,21;1,92	1,06;1,91	0,88;1,91	0,69;1,90	0,46;1,89	0,46;1,88	0,36;1,86	2,88;1,85	2,17;1,85	
7,14;1,84	4,76;1,84	7,57;1,83	5,88;1,83	8,22;1,82	3,28;1,82	2,04;1,82	2,67;1,81	2,79;1,80	2,99;1,80	2,08;1,79	5,00;1,79	
3,14;1,78	2,80;1,77	1,41;1,44	1,74;1,28	0,80;1,27	4,07;1,16	0,35;1,14	0,33;1,06	1,45;1,05	1,34;0,89	2,75;0,89	2,48;0,88	
7,97;0,88	12,18;0,88	8,02;0,88	6,93;0,87	10,69;0,87	4,10;0,87	4,76;0,86	1,63;0,85	2,17;0,85	4,92;0,84	10,80;0,84	6,31;0,83	
5,69;0,83	11,40;0,82	5,69;0,82	2,53;0,82	2,22;0,01	1,88;0,00	46,53;-0,01	1,45					
Ejemplo N° 90 [DMSO-D ₆]												
10,49	1,22;8,21	1,56;8,21	1,61;7,96	0,72;7,41	1,30;7,40	0,59;7,40	1,54;7,39	1,50;7,39	0,70;7,38	1,34;7,20	1,47;7,19	
0,51;7,18	2,64;7,17	0,54;7,17	1,23;6,82	1,23;6,82	1,13;6,81	1,21;6,81	1,10;5,77	4,47;4,08	1,10;4,07	2,25;4,06	1,10;4,03	
0,47;4,02	0,47;3,39	0,37;3,35	38,82;3,33	0,66;2,90	1,09;2,89	2,14;2,88	1,03;2,51	12,38;2,50	16,01;2,50	11,43;2,09	0,94;2,05	
7,29;1,99	2,01;1,76	0,40;1,73	16,00;1,48	0,32;1,19	0,55;1,17	1,08;1,16	0,54;0,00	5,33				

Ejemplo N° 91 [DMSO-D ₆]	10,46	2,46;8,21	2,38;8,21	2,35;8,20	2,49;8,20	2,44;8,05	2,44;7,42	2,02;7,41	0,89;7,41	2,31;7,40	2,39;7,40	1,02;7,39
	2,19;7,20	2,30;7,20	0,79;7,19	0,99;7,19	4,25;7,18	0,97;7,18	0,78;7,17	2,03;6,78	1,96;6,78	1,90;6,78	1,93;6,77	1,92;5,61
	7,16;4,13	1,64;4,12	3,53;4,11	1,69;4,05	0,66;4,03	1,98;4,02	2,01;4,01	0,67;3,39	0,73;3,35	19,15;3,33	0,55;2,98	1,50;2,97
	2,97;2,96	1,43;2,76	0,33;2,75	0,82;2,74	1,11;2,72	0,83;2,71	0,33;2,52	0,33;2,52	0,35;2,51	8,34;2,51	17,69;2,50	24,06;2,50
	17,58;2,50	8,24;1,99	8,76;1,91	0,81;1,40	0,47;1,19	2,41;1,17	4,69;1,16	2,38;1,12	1,45;1,11	1,44;1,06	16,00;1,05	15,89;0,00
	6,78											
Ejemplo N° 92 [CD ₃ CN]	8,56	1,50;8,38	0,47;8,37	0,48;8,13	2,13;8,12	2,14;7,95	2,64;7,46	1,92;7,46	0,87;7,46	2,19;7,45	2,17;7,44	0,97;7,44
	1,94;7,38	0,38;7,38	0,35;7,38	0,37;7,37	0,33;7,09	2,05;7,09	0,71;7,08	3,83;7,07	0,87;7,06	1,82;6,75	1,72;6,75	1,62;6,74
	1,71;6,74	1,55;4,88	8,24;4,21	1,04;4,20	2,67;4,19	2,73;4,17	2,85;4,16	2,88;4,15	1,12;2,65	0,39;2,64	1,01;2,63	1,35;2,61
	1,02;2,60	0,41;2,16	55,53;1,97	0,92;1,97	2,31;1,96	1,61;1,95	14,67;1,95	25,87;1,94	36,51;1,94	25,07;1,93	12,62;1,20	3,58;1,19
	3,51;1,14	16,00;1,13	15,75;0,00	1,38								
Ejemplo N° 93 [CD ₃ CN]	8,90	1,86;8,56	0,37;8,17	4,01;8,15	4,09;7,94	5,40;7,92	0,48;7,89	0,48;7,49	3,82;7,49	1,74;7,48	4,32;7,47	4,68;7,46
	2,09;7,46	4,31;7,25	0,33;7,22	0,68;7,20	0,37;7,12	4,26;7,10	7,95;7,07	3,80;6,78	3,58;6,78	3,49;6,77	3,53;6,76	3,47;4,88
	16,00;4,78	1,63;4,23	1,66;4,22	4,51;4,21	6,00;4,19	6,12;4,18	4,37;4,17	5,30;4,16	2,29;4,15	0,93;4,14	0,54;4,12	0,79;4,10
	2,19;4,08	2,21;4,06	0,77;2,50	0,52;2,48	0,53;2,31	0,33;2,27	0,33;2,25	0,52;2,19	929,12;2,15	0,91;2,14	1,08;2,14	1,41;2,13
	0,86;2,00	10,09;1,99	10,55;1,98	80,75;1,98	150,71;1,97							

207,03;1,96 142,18;1,96 72,27;1,84 0,56;1,82 1,27;1,82 1,45;1,80 2,81;1,80 1,80;1,79 2,21;1,78 1,52;1,77 0,69;1,47 2,07;1,37 0,36;1,30 1,25;1,25 2,61;1,23 5,20;1,22 2,74;1,20 1,07;1,18 0,53;1,17 0,67;0,94 0,53;0,92 0,75;0,91 2,85;0,90 5,74;0,90 4,91;0,89 4,64;0,88 3,17;0,87 5,35;0,86 2,66;0,86 3,23;0,85 4,72;0,84 2,34;0,83 0,76
Ejemplo N° 94 [DMSO-D ₆] 9,97 4,26;8,24 4,07;8,23 4,20;7,98 3,81;7,43 0,37;7,42 3,59;7,42 1,48;7,41 4,07;7,40 4,53;7,39 1,69;7,39 4,24;7,38 0,55;7,21 0,53;7,21 4,35;7,20 1,36;7,19 1,49;7,18 7,75;7,18 1,52;7,17 1,17;7,16 3,53;7,15 0,39;6,89 3,28;6,88 3,23;6,87 3,22;6,87 3,24;5,61 12,18;4,13 2,51;4,12 5,71;4,10 2,63;4,03 16,00;3,34 42,63;3,32 250,73;3,30 0,69;3,00 2,35;2,98 4,86;2,97 2,24;2,67 0,59;2,67 0,43;2,52 1,00;2,51 33,04;2,51 62,61;2,50 85,72;2,50 59,64;2,49 29,53;2,33 0,37;2,33 0,53;2,32 0,35;2,07 1,55;1,99 0,34;1,91 0,44;1,87 0,56;1,07 0,36;0,96 0,64;0,01 0,40;0,00 13,78;-0,01 0,38
Ejemplo N° 95 [DMSO-D ₆] 10,42 2,84;8,21 2,90;8,21 2,86;8,20 3,02;8,20 3,01;8,03 2,86;7,42 2,54;7,42 1,00;7,41 2,90;7,40 3,25;7,39 1,16;7,39 2,96;7,38 0,36;7,20 3,14;7,20 0,93;7,19 1,01;7,18 5,61;7,18 1,06;7,16 0,86;7,16 2,56;6,81 2,42;6,80 2,38;6,79 2,39;6,79 2,43;5,61 8,42;4,13 1,69;4,11 3,95;4,10 1,79;4,06 0,78;4,04 2,39;4,02 2,41;4,00 0,80;3,93 2,78;3,33 126,38;2,98 1,62;2,97 3,35;2,95 1,51;2,52 0,40;2,51 9,40;2,51 18,18;2,50 25,24;2,50 17,35;2,49 8,54;2,40 1,35;2,38 4,63;2,36 4,76;2,34 1,49;2,07 0,63;1,99 10,81;1,91 0,45;1,19 3,00;1,17 6,01;1,16 2,94;1,07 16,00;1,05 5,63;1,03 12,51;1,01 5,45;0,00 0,89
Ejemplo N° 96 [DMSO-D ₆] 10,48 2,56;8,24 2,60;8,24 2,54;8,23 2,68;8,23 2,65;7,95 1,94;7,34 2,22;7,33 0,88;7,33 2,49;7,32 2,64;7,32 1,03;7,31

2,43;7,14	2,52;7,14	0,78;7,13	0,94;7,13	4,65;7,13	0,90;7,12	0,76;7,11
2,18;6,76	2,19;6,76	2,12;6,75	2,17;6,75	2,16;4,35	1,64;4,34	1,45;4,33
1,65;3,96	1,90;3,36	141,41;3,34	0,62;2,73	1,46;2,73	1,32;2,72	1,51;2,52
0,33;2,51	9,66;2,51	21,18;2,50	29,04;2,50	20,95;2,50	9,52;2,40	1,22;2,39
0,37;2,38	3,83;2,37	3,84;2,36	1,23;1,99	0,53;1,84	1,22;1,83	1,06;1,75
1,19;1,63	0,91;1,62	1,12;1,40	6,79;1,07	16,00;1,04	5,31;1,03	11,30;1,02
5,23						
Ejemplo N° 97 [DMSO-D ₆]	10,47	2,11;8,24	2,00;8,23	2,04;8,23	1,90;7,96	
2,00;7,34	1,66;7,34	0,74;7,33	1,90;7,33	1,94;7,32	0,81;7,32	1,74;7,14
1,96;7,14	0,67;7,13	0,81;7,13	3,50;7,13	0,75;7,12	0,62;7,11	1,64;6,76
1,62;6,76	1,55;6,75	1,58;6,75	1,56;4,35	1,33;4,34	1,18;4,33	1,28;3,96
2,28;3,38	0,37;3,35	68,69;3,33	0,53;2,76	0,36;2,75	0,87;2,74	1,90;2,73
1,66;2,72	1,32;2,71	0,48;2,53	0,48;2,52	0,57;2,52	0,64;2,51	6,76;2,51
14,02;2,50	18,81;2,50	13,44;2,50	6,20;1,84	1,02;1,83	0,89;1,75	0,99;1,62
0,93;1,40	3,72;1,09	0,35;1,07	16,00;1,07	14,01;1,05	12,94;0,00	1,82
Ejemplo N° 98 [DMSO-D ₆]	10,78	2,37;8,26	2,53;8,26	2,44;8,25	2,62;8,25	
2,55;7,92	1,83;7,33	0,85;7,33	0,78;7,32	16,00;7,32	5,70;7,31	7,18;7,31
2,92;7,30	1,40;7,30	2,88;7,29	0,33;7,25	0,72;7,25	0,93;7,24	1,02;7,24
1,13;7,23	0,80;7,23	0,65;7,22	0,32;7,13	0,34;7,13	2,57;7,12	0,84;7,12
1,04;7,11	4,65;7,11	0,94;7,10	0,83;7,10	2,17;6,77	2,17;6,77	2,07;6,77
2,14;6,76	2,13;5,77	11,89;4,33	1,63;4,32	1,46;4,32	1,59;4,03	0,81;4,02
0,82;3,70	6,48;3,57	0,97;3,36	45,81;2,72	1,46;2,71	1,33;2,70	1,44;2,53
0,35;2,52	0,45;2,52	0,53;2,51	6,82;2,51	14,16;2,50	19,07;2,50	13,75;2,50
6,17;1,99	3,67;1,82	1,22;1,81	1,06;1,73	1,20;1,59	1,14;1,19	0,98;1,17
2,00;1,16	0,97;1,07	1,30;0,00	3,09			
Ejemplo N° 99 [DMSO-D ₆]	10,50	1,50;8,24	1,69;8,23	1,71;8,23	1,72;7,92	

193

1,25;7,34	1,48;7,34	0,65;7,33	1,70;7,32	1,97;7,31	0,70;7,31	1,80;7,14
1,85;7,14	0,60;7,13	0,64;7,12	3,28;7,12	0,71;7,10	0,52;7,10	1,52;6,77
1,42;6,77	1,39;6,76	1,40;6,76	1,44;4,35	1,05;4,34	0,96;4,33	1,04;4,06
1,13;4,04	3,57;4,02	3,64;4,00	1,21;3,33	60,54;3,32	111,85;2,73	0,95;2,71
1,01;2,52	0,47;2,51	30,09;2,50	41,12;2,50	28,24;2,06	10,48;1,99	16,00;1,91
0,49;1,84	0,80;1,75	1,66;1,62	0,82;1,36	0,78;1,19	4,25;1,17	8,53;1,16
4,17;0,00	1,16					
Ejemplo N° 100 [DMSO-D ₆] 10,42 3,63;8,18 3,78;8,17 3,79;8,16 3,92;8,16						
3,96;7,92	3,77;7,41	2,07;7,40	2,09;7,40	1,94;7,39	1,43;7,39	2,12;7,39
5,47;7,38	5,79;7,37	1,31;7,36	2,14;7,36	1,25;7,35	4,99;7,35	2,26;7,34
2,59;7,34	5,94;7,33	5,57;7,32	1,35;7,32	0,88;6,73	3,10;6,73	3,06;6,72
3,07;6,71	3,13;4,87	10,04;4,23	1,22;4,22	3,22;4,21	3,13;4,17	3,20;4,16
3,49;4,15	1,27;4,06	0,39;4,04	1,20;4,02	1,21;4,00	0,42;3,93	1,21;3,34
44,41;3,34	47,95;3,33	89,77;2,52	0,48;2,51	20,91;2,50	28,27;2,40	1,77;2,38
6,05;2,36	6,24;2,34	1,95;1,99	5,34;1,19	1,45;1,17	2,92;1,16	1,40;1,11
0,32;1,09	0,73;1,07	9,81;1,06	7,28;1,04	16,00;1,02	6,97;0,00	0,79
Ejemplo N° 101 [DMSO-D ₆] 10,69 1,52;10,64 0,61;8,21 0,62;8,20 1,49;8,20						
1,49;8,20	0,78;8,20	0,72;8,19	1,52;8,19	1,49;7,97	2,12;7,41	1,69;7,40
0,70;7,39	1,94;7,39	2,11;7,38	0,79;7,37	1,88;7,19	1,61;7,19	0,60;7,19
0,80;7,18	0,60;7,17	2,87;7,16	1,31;7,16	0,52;7,15	1,33;7,14	0,59;6,82
0,50;6,81	0,47;6,80	0,48;6,80	0,48;6,78	1,22;6,77	1,19;6,77	1,19;6,76
1,24;5,76	8,22;4,08	1,03;4,07	1,08;4,07	1,95;4,06	0,85;4,05	0,89;4,04
0,85;4,02	0,81;3,33	37,17;3,33	70,41;3,30	0,54;2,91	0,48;2,90	0,53;2,89
0,93;2,87	1,73;2,86	0,82;2,52	0,41;2,51	16,66;2,50	22,81;2,50	15,48;1,99
3,69;1,76	0,61;1,75	0,69;1,73	8,51;1,72	16,00;1,24	0,41;1,23	0,47;1,22

184

0,54;1,21	0,55;1,20	0,53;1,20	0,61;1,19	1,46;1,18	0,48;1,18	2,27;1,17
0,34;1,16	0,36;1,16	1,09;1,09	0,71;1,08	4,37;1,06	3,62;1,05	2,38;1,04
1,77;1,03	0,87;1,02	0,36;0,99	0,42;0,98	0,59;0,97	0,71;0,96	0,56;0,95
0,41;0,66	0,35;0,65	0,40;0,64	0,39;0,63	0,51;0,63	0,47;0,63	0,40;0,62
0,38;0,00	5,15					
Ejemplo N° 102 [DMSO-D ₆] 10,29 1,60;8,19 1,50;8,19 1,51;8,18 1,53;8,18						
1,56;8,03	1,33;7,42	1,35;7,41	0,56;7,41	1,55;7,40	1,71;7,39	0,64;7,38
1,53;7,20	1,65;7,20	0,53;7,18	0,59;7,18	2,91;7,17	0,59;7,16	0,46;7,16
1,35;6,78	1,25;6,78	1,23;6,77	1,23;6,77	1,27;5,76	0,49;4,10	0,87;4,08
1,95;4,07	0,91;3,36	0,55;3,34	1,05;3,33	44,43;3,30	0,46;2,92	0,91;2,91
1,84;2,90	0,86;2,50	15,50;2,20	0,55;2,19	0,50;2,17	0,79;2,17	1,00;2,15
0,63;2,15	0,91;2,13	0,45;2,11	0,33;2,11	0,56;2,09	0,68;2,08	0,95;2,07
0,78;2,07	0,61;2,06	0,76;1,99	0,33;1,91	0,49;1,89	0,68;1,87	0,33;1,78
0,47;1,77	0,34;1,77	0,34;1,76	0,43;1,73	16,00;0,00	3,15	
Ejemplo N° 103 [DMSO-D ₆] 7,98 0,34;7,97 0,34;7,85 5,61;7,84 1,67;7,84						
1,71;7,83	5,91;7,45	0,45;7,44	4,48;7,44	1,84;7,43	5,08;7,42	5,87;7,41
2,08;7,41	5,39;7,40	0,73;7,21	0,67;7,20	5,45;7,20	1,72;7,19	1,86;7,18
9,84;7,18	2,00;7,16	1,51;7,16	4,62;7,15	0,46;6,64	0,42;6,29	2,62;6,28
5,68;6,28	6,58;6,27	13,56;6,04	0,46;5,85	8,08;5,76	1,39;5,58	16,00;4,10
3,26;4,09	7,56;4,07	3,42;3,93	0,53;3,57	1,58;3,32	103,95;3,30	1,31;2,94
3,07;2,92	6,41;2,91	2,91;2,67	0,35;2,52	0,59;2,51	39,53;2,50	53,86;2,50
37,13;2,33	0,37;2,07	0,43;1,07	2,95;0,00	2,93		
Ejemplo N° 104 [CD ₃ CN] 8,58 1,44;8,56 0,60;8,16 3,63;8,15 3,72;7,96						
4,63;7,50	3,50;7,49	1,49;7,49	3,97;7,48	4,16;7,47	1,78;7,46	3,83;7,13
3,89;7,10	7,32;7,09	1,44;7,08	3,43;6,78	3,31;6,78	3,16;6,77	3,26;6,77

180

3,83;8,01	3,86;7,42	0,40;7,41	3,36;7,41	1,38;7,40	3,88;7,39	4,20;7,38
1,52;7,38	3,81;7,37	0,44;7,21	0,48;7,20	4,15;7,20	1,26;7,18	1,41;7,18
7,38;7,17	1,36;7,16	1,15;7,16	3,36;6,80	3,22;6,79	3,12;6,78	3,18;6,78
3,20;5,76	16,00;5,60	10,42;4,12	2,14;4,10	4,91;4,09	2,24;3,34	50,57;3,33
51,49;3,33	57,39;3,33	66,01;3,30	0,71;3,18	0,34;2,96	2,03;2,95	4,15;2,93
1,90;2,52	0,57;2,52	0,84;2,51	18,33;2,51	32,88;2,50	45,30;2,50	29,95;2,49
15,00;2,33	0,32;2,02	0,35;2,01	1,10;1,99	1,74;1,98	1,10;1,96	0,38;1,21
0,32;1,17	0,51;0,79	6,19;0,77	10,98;0,63	0,39;0,63	0,43;0,62	0,35;0,01
0,48;0,00	18,65;-0,01	0,57				
Ejemplo N° 108 [DMSO-D ₆]						
10,73	3,94;10,68	1,45;8,22	1,61;8,22	1,60;8,21		
4,05;8,20	3,86;8,00	4,82;7,41	0,52;7,41	4,10;7,40	1,94;7,40	4,85;7,39
5,05;7,39	2,22;7,38	4,37;7,38	0,62;7,20	0,49;7,20	3,58;7,19	1,37;7,19
2,37;7,18	6,74;7,18	1,79;7,17	3,11;7,17	3,42;7,16	0,72;7,16	1,27;6,83
1,20;6,83	1,17;6,82	1,19;6,82	1,18;6,79	2,99;6,79	2,92;6,78	2,98;6,78
2,98;5,77	16,00;5,60	11,84;5,59	0,42;4,12	0,79;4,11	3,46;4,10	5,95;4,09
2,70;3,35	80,58;3,33	0,60;2,99	0,53;2,98	1,15;2,97	1,19;2,96	0,65;2,95
2,42;2,94	4,69;2,93	2,26;2,52	0,34;2,51	10,03;2,51	21,21;2,51	28,69;2,50
21,16;2,50	10,09;2,01	0,37;2,00	0,51;1,99	0,65;1,99	0,37;1,76	0,70;1,76
1,31;1,75	1,37;1,74	1,30;1,74	0,75;1,25	0,45;1,25	0,60;1,24	0,80;1,23
0,79;1,23	0,88;1,22	0,86;1,22	0,88;1,21	1,25;1,21	1,18;1,20	1,31;1,20
1,23;1,19	1,11;1,19	0,86;1,18	0,76;1,18	0,35;1,10	0,59;1,09	0,56;1,08
0,42;1,07	11,46;1,06	10,13;1,05	5,88;1,04	5,04;1,04	0,41;1,03	0,48;1,03
2,32;1,02	0,89;0,99	0,99;0,98	1,49;0,97	1,79;0,96	1,40;0,96	0,95;0,93
0,40;0,93	0,49;0,92	0,71;0,91	0,69;0,91	0,52;0,90	0,35;0,82	0,34;0,75
0,38;0,74	0,58;0,74	0,54;0,74	0,50;0,73	0,52;0,73	0,51;0,73	0,34;0,65

0,93;0,65	1,05;0,64	1,16;0,64	1,39;0,64	1,30;0,63	1,05;0,63	1,10;0,62	0,78;0,00	5,93
Ejemplo N° 109 [DMSO-D ₆] 10,33 5,34;8,20 5,37;8,19 5,33;8,19 5,42;8,06								
3,12;7,42	0,40;7,42	0,82;7,42	4,50;7,41	2,07;7,41	5,13;7,40	5,43;7,40		
2,23;7,39	4,85;7,39	0,61;7,21	0,68;7,20	5,15;7,20	1,88;7,19	2,14;7,19		
9,54;7,18	1,67;7,17	4,49;7,17	0,52;6,79	4,34;6,79	4,34;6,78	4,32;6,78		
4,35;5,62	16,00;4,13	3,67;4,12	7,87;4,11	3,71;3,58	0,37;3,37	0,76;3,35		
338,69;3,33	1,44;3,33	2,71;2,99	3,38;2,98	6,68;2,97	3,15;2,95	0,62;2,95		
0,68;2,94	0,46;2,93	0,46;2,62	0,55;2,62	0,76;2,61	0,56;2,52	1,45;2,52		
1,93;2,52	2,31;2,51	41,63;2,51	87,11;2,50	117,52;2,50	85,88;2,50	39,66;2,39		
0,47;2,39	0,67;2,38	0,47;2,20	0,73;2,20	0,46;2,19	2,33;2,18	1,90;2,17		
2,94;2,17	3,52;2,16	2,17;2,15	3,09;2,14	0,73;2,14	1,04;2,10	0,57;2,09		
1,04;2,09	1,34;2,08	1,37;2,08	3,15;2,07	3,16;2,07	2,22;2,07	2,30;2,06		
2,91;2,06	1,78;2,05	0,84;2,05	0,87;2,04	0,88;2,04	0,72;2,00	0,42;1,99		
0,61;1,98	0,35;1,98	0,54;1,94	0,49;1,93	1,25;1,93	0,85;1,91	1,89;1,91		
1,80;1,90	1,21;1,90	2,26;1,88	1,25;1,87	0,41;1,86	0,36;1,86	0,35;1,84		
0,48;1,80	0,41;1,79	0,69;1,78	0,85;1,78	1,44;1,77	0,99;1,77	0,91;1,77		
0,88;1,76	1,21;1,75	0,72;1,74	0,47;1,74	0,35;1,73	0,32;1,49	0,50;1,31		
0,53;1,23	0,38;1,08	0,34;1,07	0,39;0,01	0,98;0,00	25,43;-0,01	0,78		
Ejemplo N° 110 [DMSO-D ₆] 10,40 1,02;8,16 0,99;8,16 1,04;8,15 1,03;8,15								
1,07;8,09	0,98;7,40	0,88;7,40	0,35;7,39	1,01;7,38	1,15;7,37	0,41;7,37		
1,04;7,20	1,09;7,18	0,35;7,17	1,95;7,17	0,38;7,15	0,90;6,76	0,85;6,76		
0,83;6,75	0,84;6,75	0,84;4,04	0,84;4,02	0,85;3,94	2,79;3,34	31,11;2,51		
4,74;2,50	6,50;2,50	4,43;2,40	0,42;2,38	1,45;2,36	1,59;2,35	0,53;1,99		
3,78;1,40	0,53;1,19	1,01;1,18	2,06;1,16	3,63;1,14	2,65;1,07	16,00;1,06		

2,01;1,04 4,34;1,02 1,90							
Ejemplo N° 111 [DMSO-D ₆] 10,39 0,56;8,16 0,55;8,16 0,56;8,15 0,56;8,15							
0,59;8,09 0,60;7,40 0,48;7,39 0,55;7,38 0,62;7,37 0,57;7,20 0,59;7,17							
1,06;7,15 0,49;6,76 0,47;6,75 0,46;6,74 0,46;6,74 0,48;3,94 2,46;3,34							
27,70;2,51 3,07;2,50 4,21;2,50 2,82;1,99 0,34;1,16 1,44;1,15 1,43;1,07							
16,00;1,05 2,92							
Ejemplo N° 112 [DMSO-D ₆] 10,41 2,31;8,22 2,22;8,21 2,29;8,01 2,21;7,83							
0,35;7,82 0,36;7,43 0,41;7,42 2,11;7,41 0,83;7,40 2,39;7,39 2,48;7,39							
0,93;7,38 2,23;7,34 0,56;7,33 0,43;7,31 1,42;7,31 1,82;7,29 1,20;7,27							
0,49;7,25 0,41;7,20 0,81;7,20 2,57;7,19 0,92;7,18 1,44;7,18 4,29;7,17							
0,99;7,16 0,89;7,15 1,94;6,84 1,77;6,83 1,75;6,82 1,75;6,82 1,81;6,26							
0,36;6,26 0,42;6,25 0,61;5,84 0,50;5,61 6,29;4,13 1,29;4,11 2,96;4,10							
1,37;4,05 0,41;3,70 2,22;3,34 70,98;2,99 1,23;2,98 2,51;2,96 1,15;2,86							
0,38;2,52 0,51;2,52 0,76;2,51 17,53;2,51 34,04;2,50 47,12;2,50 33,07;2,49							
16,51;2,24 3,42;2,22 4,15;2,06 0,42;2,04 0,77;2,02 0,91;2,01 0,73;1,99							
0,41;1,91 0,43;1,87 0,92;1,71 3,25;0,90 16,00;0,88 15,65;0,86 1,17;0,00 1,83							
Ejemplo N° 113 [CD ₃ CN] 8,59 1,60;8,56 0,71;8,56 0,71;8,38 0,65;8,38							
0,67;8,37 0,68;8,37 0,68;8,14 4,03;8,14 4,16;8,13 4,11;8,13 4,21;7,95							
3,76;7,68 0,33;7,67 0,33;7,47 0,47;7,47 4,23;7,46 1,73;7,46 4,60;7,45							
4,82;7,45 1,84;7,44 4,47;7,44 0,54;7,39 0,62;7,39 0,64;7,39 0,64;7,38							
0,64;7,10 0,55;7,09 4,60;7,09 1,51;7,08 1,78;7,08 8,87;7,08 1,79;7,07							
1,48;7,06 4,33;7,06 0,49;6,76 3,77;6,76 3,90;6,76 3,90;6,75 3,80;5,45							
2,55;4,88 16,00;4,21 1,80;4,20 4,70;4,19 4,88;4,17 4,86;4,17 5,10;4,16							
3,79;4,16 5,61;4,15 2,15;4,15 1,96;4,08 0,34;4,06 0,97;4,05 0,98;4,04							
0,34;2,34 1,48;2,33 1,52;2,27 9,09;2,26 9,27;2,18 87,47;2,09 31,03;2,08							

129

0,55;1,97	4,58;1,97	3,02;1,96	2,10;1,96	2,73;1,95	21,51;1,95	39,41;1,94
55,04;1,94	37,15;1,94	19,43;1,34	1,11;1,22	1,29;1,20	2,46;1,20	0,81;1,19
1,28;1,14	1,03;1,13	0,87;1,11	0,33;1,09	0,39;1,08	0,47;1,08	0,48;1,07
0,94;1,07	0,97;1,07	0,91;1,07	0,68;1,06	0,64;1,06	1,70;1,06	0,62;1,06
0,69;1,05	0,95;1,05	0,96;1,05	1,04;1,04	0,49;1,04	0,54;1,04	0,41;0,58
0,78;0,58	0,74;0,58	0,35;0,57	0,38;0,57	0,84;0,57	0,75;0,56	1,73;0,55
4,37;0,55	4,57;0,54	2,10;0,54	2,18;0,54	4,56;0,53	4,30;0,53	1,75;0,26
0,75;0,26	0,74;0,25	0,76;0,25	0,83;0,24	0,33;0,23	1,51;0,22	4,61;0,22
4,58;0,21	4,27;0,21	4,75;0,20	1,33;0,00	6,10		
Ejemplo N° 114 [CD ₃ CN]						
8,59	2,54;8,59	1,53;8,58	1,54;8,58	2,57;7,37		
3,17;7,37	1,88;7,36	1,84;7,36	3,12;6,82	2,59;6,81	2,86;6,67	2,84;6,67
2,67;4,32	0,65;4,32	1,32;4,31	0,57;4,28	0,34;4,28	0,33;4,27	0,33;4,27
0,32;4,26	0,42;4,26	0,38;4,25	0,37;4,02	0,40;4,01	0,53;4,00	0,47;4,00
0,43;3,99	0,57;3,99	0,50;3,98	0,37;3,97	0,42;3,17	16,00;2,24	0,62;2,23
0,43;2,23	0,40;2,23	0,38;2,21	0,39;2,21	0,40;2,20	0,45;2,20	0,37;2,18
0,36;2,16	394,92;2,15	0,79;2,14	0,54;2,14	0,85;2,06	0,40;2,06	0,74;2,05
1,10;2,05	0,75;2,04	0,38;1,98	0,34;1,97	0,52;1,97	9,52;1,96	5,44;1,95
7,79;1,95	72,73;1,95	131,74;1,94	197,34;1,94	136,52;1,93	68,11;1,93	
1,17;1,92	0,67;1,92	0,57;1,91	0,34;1,84	0,41;1,83	0,78;1,83	1,10;1,82
0,76;1,82	0,38;1,78	0,44;1,76	0,33;1,75	0,49;1,75	0,48;1,27	1,08;0,01
0,97;0,00	30,82;-0,01	0,89				
Ejemplo N° 115 [DMSO-D ₆]						
8,20	0,32;7,35	0,40;7,35	0,54;7,32	0,46;7,31		
0,41;7,30	0,42;3,93	2,43;3,89	0,85;3,34	21,37;2,51	1,65;2,51	3,53;2,50
4,82;2,50	3,58;2,49	1,79;2,38	0,51;2,36	0,53;1,99	0,94;1,17	0,51;1,16
0,35;1,07	16,00;1,05	0,70;1,03	1,31;1,02	0,60;0,00	0,48	

Ejemplo N° 116 [DMSO-D ₆] 10,41 1,98;8,21 1,89;8,19 1,97;8,03 2,31;7,42									
1,56;7,41	0,75;7,41	1,83;7,40	2,12;7,39	0,87;7,38	1,88;7,33	0,38;7,20			
1,92;7,20	0,75;7,18	0,78;7,18	3,43;7,16	0,60;7,16	1,60;6,78	1,46;6,78			
1,51;6,77	1,48;6,77	1,53;5,69	0,34;5,67	1,21;5,66	1,23;5,64	0,36;4,31			
0,50;4,30	0,54;4,28	0,65;4,27	0,59;4,06	1,23;4,04	3,73;4,02	3,79;4,00			
1,29;3,94	0,33;3,93	0,47;3,93	0,70;3,91	0,72;3,91	0,77;3,89	0,42;3,88			
0,34;3,57	0,45;3,32	28,64;3,30	0,55;3,12	0,54;3,10	0,38;3,09	0,40;2,81			
0,66;2,81	0,72;2,77	0,82;2,75	0,80;2,73	1,07;2,72	0,80;2,51	7,58;2,51			
15,92;2,50	21,76;2,50	16,77;2,49	8,99;1,99	16,00;1,72	5,27;1,71	5,31;1,40			
0,42;1,20	0,33;1,19	4,44;1,17	8,71;1,16	4,36;1,09	0,44;1,07	13,25;1,05			
12,16;0,00	3,20								
Ejemplo N° 117 [DMSO-D ₆] 8,54 6,04;8,54 6,22;8,34 3,94;8,34 4,00;8,33									
4,08;8,33	4,10;7,40	0,44;7,39	4,29;7,38	1,85;7,38	4,83;7,37	5,80;7,36			
2,11;7,35	5,24;7,35	0,67;7,26	3,11;7,25	3,29;7,24	3,51;7,23	3,12;7,20			
0,65;7,20	5,66;7,19	1,80;7,18	1,92;7,17	10,00;7,17	2,10;7,16	1,59;7,15			
4,54;7,14	0,50;4,53	1,17;4,51	2,29;4,49	2,31;4,48	1,15;3,94	1,70;3,46			
0,35;3,41	0,63;3,35	757,79;3,34	820,12;3,01	0,46;3,00	0,61;2,98	0,56;2,97			
1,30;2,96	1,51;2,94	1,43;2,93	1,61;2,91	2,04;2,89	1,87;2,87	0,78;2,85			
0,84;2,83	0,87;2,82	0,74;2,82	0,92;2,80	1,57;2,79	1,11;2,78	1,40;2,77			
0,98;2,76	0,70;2,75	0,51;2,68	0,42;2,68	0,85;2,67	1,18;2,67	0,86;2,66			
0,43;2,54	0,57;2,54	0,53;2,53	3,59;2,52	5,35;2,51	62,19;2,51	127,34;2,50			
169,68;2,50	125,11;2,49	62,31;2,34	0,43;2,33	0,86;2,33	1,19;2,33	0,89;2,32			
0,45;2,23	0,65;2,21	1,34;2,21	0,89;2,20	1,22;2,19	1,37;2,18	1,43;2,17			
1,06;2,16	0,90;2,16	1,09;2,14	0,56;2,07	1,40;1,50	16,00;1,49	15,95;1,24			
0,51;1,16	2,81;1,07	13,39;0,01	0,78;0,00	25,60					

Ejemplo N° 118 [DMSO-D ₆]	8,61	9,62;8,60	9,81;8,44	6,16;8,44	6,08;8,43	6,35;8,43	6,19;7,33	0,68;7,32	6,73;7,31	2,80;7,31	7,54;7,30	9,22;7,29	3,29;7,28	8,37;7,28	1,18;7,26	4,65;7,25	4,96;7,25	5,29;7,23	4,63;7,16	1,02;7,16	9,31;7,15	2,73;7,14	2,89;7,13	16,00;7,13	3,09;7,12	2,41;7,11	7,12;7,10	0,79;5,76	0,46;4,37	5,36;4,36	4,78;4,35	5,03;3,35	80,36;2,65	4,89;2,64	4,16;2,62	5,19;2,52	0,44;2,52	8,56;2,51	18,70;2,51	25,30;2,50	18,15;2,50	8,58;1,85	3,90;1,84	3,74;1,77	3,55;1,76	4,08;1,64	3,24;1,63	4,07;1,26	0,41;1,23	0,52;1,07	1,69;0,00	2,91
---------------------------------------	------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	------------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	------------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	------------	------------	------------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	------

La intensidad de las señales fuertes se correlaciona con la altura de las señales en un ejemplo impreso de un espectro de RMN en cm y muestra las proporciones verdaderas de las intensidades de señal. En el caso de señales anchas, pueden mostrarse una gran variedad de picos o la media de la señal y sus intensidades relativas comparadas con la señal más intensa en el espectro.

Las listas de los picos de RMN de ¹H son similares a las impresiones de RMN de ¹H clásicas, y por tanto, comprenden normalmente todos los picos enumerados en las interpretaciones de RMN clásicas.

Además, como las impresiones de RMN de ¹H clásicas, éstas pueden mostrar señales de disolvente, señales de estereoisómeros de los compuestos diana, que son de igual modo parte de la materia sujeto de la invención y/o picos de impurezas.

En la lista de señales de compuestos en el intervalo delta de disolventes y/o agua, en nuestras listas de picos de RMN de ¹H , se muestran los picos de disolvente habituales, por ejemplo, picos de DMSO en DMSO-d₆ y el pico de agua, que por término medio normalmente tiene una intensidad alta.

Habitualmente, por término medio, los picos de estereoisómeros de los compuestos diana y/o picos de impurezas tienen una intensidad más baja que los picos de los compuestos diana (por ejemplo, de una pureza de >90 %).

5 Dichos estereoisómeros y/o impurezas pueden ser típicas para los procedimientos de preparación en cuestión. Por lo tanto, sus picos pueden ayudar a identificar cualquier reproducción de nuestro procedimiento de preparación usando "huellas digitales de subproductos".

10 Si se necesita, un cálculo experto de los picos de los compuestos diana con procedimientos conocidos (MestreC, simulación ACD, no solo usando valores esperados evaluados empíricamente) puede aislar los picos de los compuestos diana, usando, si es adecuado, filtros de intensidad adicionales. Este aislamiento sería similar a la clasificación de picos correspondiente de la interpretación de RMN de ^1H clásica.

15 Si, como puede ser el caso, las señales que tienen valores δ idénticos aparecen como resultado del redondeo del valor de δ a dos valores decimales, sus intensidades después de la adición dan la misma imagen que también puede observarse en una impresión de RMN clásica en el intervalo de este valor de δ .

Ejemplos de uso

20 Ejemplo A

Ensayo de Alternaria (tomate) / de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,N-dimetilformamida

Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

25 Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas

de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas de tomate jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento se inocula a las plantas una suspensión de esporas de *Alternaria solani* y después se dejan a 100 % de humedad relativa y 22°C durante 24 h. Las plantas permanecen a 96 % de humedad atmosférica relativa y a una temperatura de 20°C.

Se lleva a cabo la evaluación 7 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 500 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

- Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %):
- 2 (94 %), 3 (95 %), 5 (100 %), 6 (95 %), 7 (95 %), 8 (100 %), 9 (100 %), 10 (70 %), 15 (100 %), 19 (100 %), 20 (100 %), 21 (100 %), 22 (95 %), 23 (95 %), 24 (95 %), 25 (100 %), 26 (100 %), 27 (100 %), 28 (100 %), 29 (100 %), 30 (100 %), 31 (94 %), 32 (78 %), 33 (89 %), 34 (100 %), 35 (94 %), 37 (95 %), 38 (95 %), 39 (80 %), 40 (100 %), 41 (70 %), 43 (94 %), 44 (80 %), 45 (95 %), 46 (70 %), 47 (90 %), 50 (95 %), 51 (95 %), 52 (90 %), 54 (80 %), 55 (80 %), 58 (80 %), 59 (70 %), 62 (94 %), 63 (100 %), 64 (100 %), 65 (100 %), 66 (70 %), 67 (80 %), 70 (90 %), 74 (95 %), 75 (95 %), 76 (100 %), 77 (89 %), 82 (89 %), 83 (89 %), 86 (90 %), 87 (80 %), 88 (90 %), 89 (90 %), 90 (95 %), 91 (90 %), 92 (90 %), 93 (95 %), 94 (90 %), 95 (80 %), 96 (90 %), 97 (70 %), 98 (90 %), 99

190

(80 %), 100 (80 %), 101 (90 %), 102 (95 %), 104 (80 %), 106 (80 %), 108 (80 %), 109 (90 %), 112 (90 %), 113 (90 %) 117 (94 %).

Ejemplo B

Ensayo de Botrytis (alubia) / de protección

- 5 Disolventes: 24,5 partes en peso de acetona
 24,5 partes en peso de dimetilacetamida
Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

10 Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas de disolventes y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

15 Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Después de secado el recubrimiento por pulverización, en cada hoja se colocan 2 piezas pequeñas de agar colonizado por *Botrytis cinerea*. Las plantas se colocan después en una cámara oscura a aproximadamente 20°C y a una humedad atmosférica relativa del 100 %.

20 2 días después de la inoculación se evalúa el tamaño de las áreas infectadas en las hojas. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 100 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

- 25 2 (100 %), 5 (100 %), 7 (95 %), 8 (99 %), 9 (93 %), 15 (82 %), 19 (99 %), 20 (98

195

%), 21 (98 %), 22 (89 %), 23 (100 %), 24 (76 %), 25 (90 %), 26 (93 %), 27 (92 %), 28 (95 %), 29 (100 %), 30 (100 %), 31 (90 %), 32 (98 %), 33 (98 %), 34 (99 %), 35 (96 %), 40 (100 %), 43 (99 %), 51 (99 %), 52 (78 %), 58 (100 %), 59 (100 %), 63 (94 %), 64 (100 %), 65 (97 %), 74 (100 %), 76 (100 %), 77 (100 %),
5 78 (100 %), 85 (100 %), 86 (100 %), 87 (100 %), 89 (100 %), 91 (100 %) 117 (100 %).

Ejemplo C

Ensayo con *Fusarium graminearum* (cebada)/de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,N-dimetilacetamida

10 Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

15 Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida.

Después del secado del recubrimiento por pulverización se rocía a las plantas con esporas de una suspensión de esporas de *Fusarium graminearum*.

20 Las plantas se introducen en una cámara de invernadero bajo una campana de incubación transparente a 22 °C y una humedad atmosférica relativa del 100 %.

Se lleva a cabo la evaluación 5 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una
25 eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 1000 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

5 5 (100 %), 8 (88 %), 15 (100 %), 19 (100 %), 20 (94 %), 21 (100 %), 22 (100 %), 23 (88 %), 24 (100 %), 25 (94 %), 26 (88 %), 27 (94 %), 28 (100 %), 29 (94 %), 30 (88 %), 31 (100 %), 32 (86 %), 34 (100 %), 36 (93 %), 40 (100 %), 50 (83 %), 55 (83 %), 58 (100 %), 59 (94 %), 63 (83 %), 65 (83 %), 76 (90 %), 77 (90 %) 117 (100 %).

10 **Ejemplo D**

Ensayo de *Fusarium nivale* (var. *majus*) (trigo) / de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,N-dimetilacetamida

Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se
15 mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida.

20 Después del secado del recubrimiento por pulverización se rocía a las plantas con esporas de una suspensión de esporas de *Fusarium nivale* (var. *majus*).

Las plantas se introducen en una cámara de invernadero bajo una campana de incubación transparente a 10 °C y una humedad atmosférica
25 relativa del 100 %.

Se lleva a cabo la evaluación 5 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención
5 muestran, a una concentración del compuesto activo de 1000 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

5 (100 %), 8 (100 %), 15 (100 %), 19 (100 %), 20 (100 %), 21 (100 %), 22 (86 %), 23 (86 %), 24 (100 %), 25 (100 %), 26 (86 %), 27 (86 %), 28 (100 %), 29
10 (86 %), 30 (86 %), 31 (100 %), 32 (86 %), 34 (100 %), 36 (88 %), 37 (86 %), 38 (86 %), 40 (100 %), 43 (80 %), 47 (80 %), 50 (83 %), 55 (100 %), 58 (100 %), 59 (100 %), 63 (83 %), 65 (100 %), 76 (100 %), 77 (100 %) 117 (100 %).

Ejemplo E

Ensayo de *Leptosphaeria nodorum* (trigo) / de protección

15 Disolvente: 49 partes en peso de N,M-dimetilformamida
Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuestos activos, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la
20 concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de trigo con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento, las plantas se inoculan con una suspensión acuosa de esporas de *Leptosphaeria nodorum* y después
25 permanecen a una humedad atmosférica relativa del 100 % y a 22°C durante

48 h. Después, las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica relativa del 90 % a una temperatura de 22°C.

La evaluación se lleva a cabo 7-9 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una
5 eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 500 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

10 2 (80 %), 3 (89 %), 5 (94 %), 6 (70 %), 8 (95 %), 9 (95 %), 10 (80 %), 11 (70 %), 15 (95 %), 19 (95 %), 20 (95 %), 21 (95 %), 22 (80 %), 23 (90 %), 24 (90 %), 25 (95 %), 26 (80 %), 28 (90 %), 29 (90 %), 30 (90 %), 31 (90 %), 32 (90 %), 33 (70 %), 34 (95 %), 35 (90 %), 36 (90 %), 37 (90 %), 40 (95 %), 43 (90 %), 55 (90 %), 58 (94 %), 59 (89 %), 60 (78 %), 62 (78 %), 63 (94 %), 64 (94
15 %), 65 (94 %), 70 (90 %), 74 (88 %), 76 (89 %), 77 (94 %), 78 (100 %), 82 (88 %), 83 (75 %), 84 (88 %), 85 (75 %), 86 (70 %), 87 (70 %), 89 (80 %), 90 (89 %), 91 (78 %), 92 (90 %), 93 (80 %), 95 (90 %), 96 (90 %), 97 (80 %), 99 (95 %), 100 (70 %), 101 (70 %), 102 (90 %), 107 (90 %), 108 (70 %), 112 (90 %), 113 (78 %) 117 (86 %).

20 **Ejemplo F**

Ensayo de Phytophthora (tomate) / de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,M-dimetilformamida

Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se
25 mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas

de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas de tomate jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento, las plantas se inoculan con una suspensión de esporas de *Phytophthora infestans* y, después, permanecen a una humedad relativa del 100 % y a 22°C durante 24 h. Después, las plantas se introducen en una cámara climatizada a una humedad atmosférica relativa del 96 % a una temperatura de 20°C.

Se lleva a cabo la evaluación 7 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 500 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

2 (94 %), 3 (90 %), 5 (95 %), 7 (95 %), 8 (95 %), 9 (90 %), 10 (70 %), 11 (80 %), 14 (70 %), 15 (95 %), 17 (80 %), 19 (100 %), 20 (100 %), 21 (90 %), 22 (90 %), 23 (80 %), 24 (90 %), 25 (80 %), 26 (95 %), 27 (80 %), 28 (95 %), 29 (90 %), 30 (80 %), 31 (80 %), 32 (70 %), 33 (70 %), 34 (95 %), 35 (80 %), 36 (80 %), 37 (70 %), 38 (70 %), 39 (80 %), 40 (70 %), 41 (70 %), 43 (70 %), 44 (70 %), 45 (90 %), 46 (70 %), 47 (80 %), 48 (70 %), 52 (95 %), 56 (80 %), 58 (70 %), 62 (80 %), 63 (95 %), 64 (80 %), 65 (90 %), 66 (80 %), 67 (70 %), 69 (70 %), 70 (95 %), 71 (80 %), 74 (90 %), 75 (80 %), 82 (70 %), 83 (70 %), 85 (90 %), 87 (90 %), 88 (80 %), 89 (90 %), 90 (78 %), 92 (80 %), 93 (90 %), 96 (70 %)

260

%), 113 (70 %).

Ejemplo G

Ensayo de Puccinia triticina (trigo) / de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,N-dimetilacetamida

5 Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

10 Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida.

Después del secado del recubrimiento por pulverización se rocía a las plantas con esporas de una suspensión de esporas de Puccinia triticina. Las plantas permanecen en una cabina de incubación a 20 °C y una humedad atmosférica relativa del 100 % durante 48 horas.

15 Las plantas se colocan en el invernadero a una temperatura de aproximadamente 20 °C y a una humedad atmosférica relativa de aproximadamente el 80 %.

Se lleva a cabo la evaluación 8 días después de la inoculación. Un 0 %
20 significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 1000 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

25 N° de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

201

5 (100 %), 8 (100 %), 15 (94 %), 19 (100 %), 19 (95 %), 20 (100 %), 21 (95 %),
22 (75 %), 23 (75 %), 24 (100 %), 25 (88 %), 26 (100 %), 27 (75 %), 28 (100
%), 29 (94 %), 30 (88 %), 31 (94 %), 32 (89 %), 34 (94 %), 36 (78 %), 37 (78
%), 40 (100 %), 43 (100 %), 50 (86 %), 55 (100 %), 58 (100 %), 59 (100 %), 63
5 (86 %), 65 (86 %), 76 (88 %), 77 (88 %) 117 (100 %).

Ejemplo H

Ensayo con *Pyrenophora teres* (cebada)/de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,M-dimetilformamida

Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

10 Para producir una preparación adecuada de compuestos activos, se
mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas
de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la
concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de
15 cebada con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación
establecida. Un día después del tratamiento, las plantas se inoculan con una
suspensión acuosa de esporas de *Pyrenophora teres* y después permanecen
a una humedad atmosférica relativa del 100 % y a 22°C durante 48 h. Después,
las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica
20 relativa del 80 % a una temperatura de 20°C.

La evaluación se lleva a cabo 7-9 días después de la inoculación. Un 0
% significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una
eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención
25 muestran, a una concentración del compuesto activo de 500 ppm, una eficacia

202

del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %) 2 (95 %), 3 (95 %), 5 (100 %), 6 (70 %), 7 (80 %), 8 (100 %), 9 (94 %), 10 (80 %), 11 (70 %), 13 (80 %), 15 (100 %), 19 (100 %), 20 (100 %), 21 (100 %), 22 (95 %), 23 (95 %), 24 (95 %), 25 (100 %),
5 26 (95 %), 27 (90 %), 28 (100 %), 29 (100 %), 30 (100 %), 31 (100 %), 32 (78 %), 33 (78 %), 34 (94 %), 35 (78 %), 36 (89 %), 37 (100 %), 38 (95 %), 39 (95 %), 40 (95 %), 41 (95 %), 43 (95 %), 44 (90 %), 45 (95 %), 46 (70 %), 47 (90 %), 50 (95 %), 51 (90 %), 52 (80 %), 55 (95 %), 58 (90 %), 59 (90 %), 60 (90 %), 61 (70 %), 62 (95 %), 63 (95 %), 64 (100 %), 65 (95 %), 66 (95 %), 67 (95 %),
10 %, 70 (80 %), 71 (80 %), 72 (80 %), 73 (70 %), 74 (100 %), 75 (100 %), 78 (95 %), 82 (94 %), 83 (94 %), 84 (94 %), 85 (100 %), 86 (100 %), 87 (90 %), 88 (90 %), 89 (95 %), 90 (95 %), 91 (95 %), 92 (95 %), 93 (100 %), 94 (95 %), 95 (100 %), 96 (100 %), 97 (100 %), 98 (95 %), 99 (95 %), 100 (100 %), 101 (95 %), 102 (95 %), 103 (90 %), 104 (95 %), 105 (95 %), 106 (95 %), 107 (95 %), 108 (95 %), 109 (95 %), 112 (95 %), 113 (94 %) 117 (100 %).

Ejemplo I

Ensayo de Septoria tritici (trigo) / de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,N-dimetilacetamida

Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

20 Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con la cantidad establecida de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes con
25 la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida.

207

Después del secado del recubrimiento por pulverización se rocía a las plantas con una suspensión de esporas de *Septoria tritici*. Las plantas permanecen en una cabina de incubación a 20 °C y una humedad atmosférica relativa del 100 % durante 48 horas. A continuación, las plantas se introducen en una campana
5 transparente a y a una humedad atmosférica relativa del 100 % durante horas.

Las plantas se colocan en el invernadero a una temperatura de aproximadamente 15 °C y a una humedad atmosférica relativa del 80 %.

Se lleva a cabo la evaluación 21 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una
10 eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 1000 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

15 8 (100 %), 15 (100 %), 19 (100 %), 21 (100 %), 22 (86 %), 23 (86 %), 24 (100 %), 25 (86 %), 26 (86 %), 28 (100 %), 29 (71 %), 30 (100 %), 31 (100 %), 32 (100 %), 34 (93 %), 36 (100 %), 40 (90 %), 43 (100 %), 47 (100 %), 50 (90 %), 55 (90 %), 58 (89 %), 63 (100 %), 65 (90 %), 76 (100 %), 77 (100 %) 117 (100 %).

20 **Ejemplo J**

Ensayo de Sphaerotheca (pepino) / de protección

Disolvente: 49 partes en peso de N,M-dimetilformamida

Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuestos activos, se
25 mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas

de disolvente y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de pepino con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento se inocula a las plantas una suspensión de esporas de *Sphaerotheca fuliginea*. Después, las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica relativa del 70 % y a una temperatura de 23°C.

Se lleva a cabo la evaluación 7 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 500 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

15	Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)
	2 (91 %), 5 (95 %), 7 (90 %), 8 (99 %), 9 (86 %), 10 (94 %), 11 (88 %), 15 (98 %), 19 (98 %), 20 (100 %), 21 (100 %), 22 (90 %), 23 (89 %), 24 (94 %), 25 (94 %), 26 (98 %), 28 (100 %), 29 (83 %), 30 (95 %), 31 (95 %), 33 (95 %), 34 (100 %), 36 (94 %), 40 (94 %), 47 (96 %), 50 (94 %), 55 (95 %), 58 (96 %), 59 (98 %), 60 (90 %), 63 (93 %), 64 (86 %), 65 (100 %), 70 (94 %), 74 (93 %), 75 (95 %), 76 (100 %), 78 (100 %), 82 (95 %), 83 (98 %), 84 (98 %), 85 (85 %), 86 (100 %), 87 (95 %), 88 (95 %), 89 (100 %), 90 (95 %), 91 (100 %), 92 (98 %), 93 (98 %), 94 (93 %), 95 (95 %), 96 (95 %), 97 (100 %), 98 (90 %), 99 (98 %), 100 (95 %), 101 (98 %), 102 (100 %), 104 (93 %), 106 (75 %), 107 (100 %), 108 (95 %), 109 (93 %), 112 (95 %), 113 (98 %) 117 (95 %).
25	

23

Ejemplo K

Ensayo de Uromyces (alubia) / de protección

Disolventes: 24,5 partes en peso de acetona

24,5 partes en peso de dimetilacetamida

5 Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas de disolventes y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la concentración deseada.

10 Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Después de secado el recubrimiento por pulverización, se inocula a las plantas una suspensión acuosa de esporas del patógeno de la roya de la alubia *Uromyces appendiculatus* y se dejan en una cabina de incubación a 15 aproximadamente 20°C y a una humedad atmosférica relativa del 100 % durante 1 día.

Las plantas se colocan después en un invernadero a aproximadamente 21 °C y a una humedad atmosférica relativa de aproximadamente el 90 %.

Se lleva a cabo la evaluación 10 días después de la inoculación. Un 0 % 20 significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 100 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

25 N° de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

206

5 (98 %), 8 (100 %), 15 (94 %), 19 (94 %), 20 (94 %), 21 (94 %), 22 (94 %), 23 (95 %), 24 (91 %), 25 (94 %), 26 (94 %), 27 (94 %), 28 (95 %), 29 (94 %), 30 (95 %), 31 (94 %), 32 (96 %), 33 (95 %), 34 (95 %), 36 (85 %), 40 (81 %), 40 (75 %), 43 (90 %), 51 (86 %), 63 (75 %), 64 (78 %), 65 (95 %), 76 (95 %), 77 (98 %), 78 (94 %), 85 (85 %), 86 (95 %), 87 (93 %), 89 (95 %), 91 (95 %) 117 (90 %).

Ejemplo L

Ensayo de *Venturia* (manzana) / de protección

Disolventes: 24,5 partes en peso de acetona
10 24,5 partes en peso de dimetilacetamida
Emulsionante: 1 parte en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con las cantidades establecidas de disolventes y emulsionante, y se diluye el concentrado con agua hasta la
15 concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Después de secado el recubrimiento por pulverización, se inocula a las plantas una suspensión acuosa de conidios del patógeno de la sarna de la manzana
20 ***Venturia inaequalis*** y después se dejan en una cabina de incubación a aproximadamente 20°C y a una humedad atmosférica relativa del 100 % durante 1 día.

Las plantas se colocan después en un invernadero a aproximadamente 21 °C y a una humedad atmosférica relativa de aproximadamente el 90 %.

25 Se lleva a cabo la evaluación 10 días después de la inoculación. Un 0 %

201

significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 100 ppm, una eficacia del 70 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %) 2 (95 %), 5 (98 %), 7 (76 %), 8 (96 %), 9 (95 %), 15 (94 %), 19 (93 %), 20 (99 %), 21 (99 %), 22 (76 %), 23 (98 %), 24 (83 %), 25 (94 %), 26 (93 %), 27 (89 %), 28 (100 %), 29 (95 %), 30 (99 %), 31 (100 %), 32 (90 %), 33 (95 %), 34 (95 %), 35 (95 %), 40 (94 %), 43 (98 %), 50 (88 %), 51 (74 %), 52 (94 %), 58 (99 %), 59 (97 %), 63 (99 %), 64 (99 %), 65 (96 %), 70 (100 %), 74 (95 %), 76 (100 %), 77 (100 %), 78 (100 %), 86 (95 %), 89 (94 %), 91 (95 %) 117 (100 %).

Ejemplo M

Ensayo de *Pyricularia* (arroz) / de protección

Disolvente: 28,5 partes en peso de acetona

Emulsionante: 1,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con la cantidad establecida de disolvente y el concentrado se diluye con agua y la cantidad indicada del emulsionante hasta la concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de arroz con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento se inocula a las plantas una suspensión acuosa de esporas de *Pyricularia oryzae*. Después, las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica relativa del 100 % y

208

a una temperatura de 25 °C.

Se lleva a cabo la evaluación 5 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

- 5 En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 250 ppm, una eficacia del 80 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

- 19 (92 %), 20 (92 %), 21 (98 %), 28 (90 %), 29 (95 %), 30 (94 %), 31 (98 %), 34
10 (95 %).

Ejemplo N

Ensayo de Rhizoctonia (arroz) / de protección

Disolvente: 28,5 partes en peso de acetona

Emulsionante: 1,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

- 15 Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con la cantidad establecida de disolvente y el concentrado se diluye con agua y la cantidad indicada del emulsionante hasta la concentración deseada.

- 20 Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de arroz con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento, se inocula a las plantas hifas de *Rhizoctonia solani*. Después, las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica relativa del 100 % y a una temperatura de 25 °C.

- 25 Se lleva a cabo la evaluación 4 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una

eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 250 ppm, una eficacia del 80 % o mayor.

- 5 N° de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)
19 (100 %), 20 (100 %), 21 (100 %), 28 (100 %), 29 (100 %), 30 (100 %), 31 (100 %), 34 (85 %).

Ejemplo O

Ensayo de Cochliobolus (arroz) / de protección

- 10 Disolvente: 28,5 partes en peso de acetona
Emulsionante: 1,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con la cantidad establecida de disolvente y el concentrado se diluye con agua y la cantidad indicada del emulsionante hasta la concentración deseada.

- 15 Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de arroz con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento se inocula a las plantas una suspensión acuosa de esporas de *Cochliobolus miyabeanus*. Después, las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica relativa del 100 % y a una temperatura de 25 °C.

Se lleva a cabo la evaluación 4 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

- 25 En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención

muestran, a una concentración del compuesto activo de 250 ppm, una eficacia del 80 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

19 (96 %), 20 (96 %), 21 (96 %), 28 (95 %), 29 (95 %), 30 (96 %), 31 (95 %), 34 (90 %).

Ejemplo P

Ensayo de Gibberella (arroz) / de protección

Disolvente: 28,5 partes en peso de acetona

Emulsionante: 1,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con la cantidad establecida de disolvente y el concentrado se diluye con agua y la cantidad indicada del emulsionante hasta la concentración deseada.

Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de arroz con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento se inocula a las plantas una suspensión acuosa de esporas de *Gibberella zeae*. Después, las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica relativa del 100 % y a una temperatura de 25 °C.

Se lleva a cabo la evaluación 5 días después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 250 ppm, una eficacia del 80 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

28 (85 %), 29 (80 %), 31 (80 %), 34 (80 %).

Ejemplo Q

Ensayo de Phakopsora (Soja) / de protección

5 Disolvente: 28,5 partes en peso de acetona

Emulsionante: 1,5 partes en peso de alquilarilpoliglicoléter

10 Para producir una preparación adecuada de compuesto activo, se mezcla una parte en peso de compuesto activo con la cantidad establecida de disolvente y el concentrado se diluye con agua y la cantidad indicada del emulsionante hasta la concentración deseada.

15 Para examinar la actividad protectora, se pulverizan plantas jóvenes de arroz con la preparación de compuesto activo a la tasa de aplicación establecida. Un día después del tratamiento se inocula a las plantas una suspensión acuosa de esporas de *Phakopsora pachyrhizi*. Después, las plantas se introducen en un invernadero a una humedad atmosférica relativa del 80 % y a una temperatura de 20 °C.

Se lleva a cabo la evaluación 1 día después de la inoculación. Un 0 % significa una eficacia que corresponde a la del control, mientras que una eficacia del 100 % significa que no se observa infección.

20 En este análisis, los compuestos siguientes de acuerdo con la invención muestran, a una concentración del compuesto activo de 250 ppm, una eficacia del 80 % o mayor.

Nº de Ejemplo [Tabla 1] (eficacia en %)

5 (80 %).

25 **Ejemplo R**

202

Producción de DON/acetil-DON por *Fusarium graminearum*

Los compuestos se analizaron en placas de microtitulación en un medio líquido inductor de DON (1 g de $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, 0,2 g de $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, 3 g de KH_2PO_4 , 10 g de glicerol, 5 g de NaCl y 40 g de sacarosa por litro) y DMSO (0,5 %) La inoculación se efectuó con una suspensión concentrada de esporas de *Fusarium graminearum* con una concentración final de 2000 esporas/ml.

La placa se incubó a 28 °C y a una humedad atmosférica elevada durante 7 días.

Al principio y tras 3 días se midió la DO a DO620 (mediciones repetidas: 3 x 3 mediciones por pocillo) para calcular la inhibición del crecimiento.

Después de 7 días, se añadió 1 volumen de una mezcla de acetonitrilo/agua 84/16, y se retiró después una muestra del medio líquido de cada pocillo y se diluyó 1:100 en acetonitrilo al 10 %. Las proporciones de DON y acetil-DON de las muestras se analizaron mediante HPLC-EM/EM y los valores medidos se usaron para el cálculo de la inhibición de la producción de fumonisina DON/AcDON en comparación con un control sin compuesto activo.

Las mediciones de HPLC-EM/EM se realizaron con los parámetros siguientes:

Tipo de ionización: IES negativa

20 Voltaje de pulverización de iones: -4500 V

Temperatura del gas de pulverización: 500°C

Potencial de clúster: -40 V

Energía de colisión: -22eV

Gas de colisión: N_2

25 Traza RMN: 355.0 > 264.9; Columna de HPLC: Waters Atlantis T3 (trifuncional

C18 de unión, sellada)

Tamaño de partícula: 3 µm

Dimensiones de la columna> 50 x 2 mm

Temperatura: 40°C

5 Disolvente A: agua/NH₄OAc 2,5 mM + CH₃COOH al 0,05 % (v/v)

Disolvente B: metanol/NH₄OAc 2,5 mM + CH₃COOH al 0,05 % (v/v)

Caudal: 400 µl/minuto

Volumen de inyección: 11 µl

Gradiente:

Tiempo [min]	A %	B %
0	100	0
0.75	100	0
1.5	5	95
4	5	95
5	100	0
10	100	0

10

Ejemplos de inhibición DON

Los ejemplos siguientes mostraron una actividad de inhibición > 80 % de la producción de DON/AcDON a una concentración de 50 µM. La inhibición del crecimiento de *Fusarium graminearum* en los ejemplos mencionados varió del

15 0 al 100 % a 50 µM.

Nº de Ejemplo	% Inhibición de la producción de DON/AcDON a 50 µM	% Inhibición del crecimiento fúngico de <i>Fusarium graminearum</i> a 50 µM
---------------	--	---

244

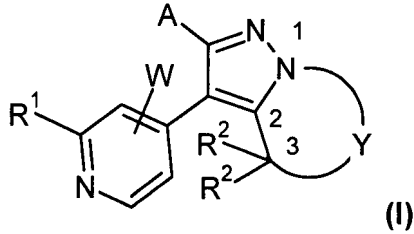
Nº de Ejemplo	% Inhibición de la producción de DON/AcDON a 50 µM	% Inhibición del crecimiento fúngico de <i>Fusarium graminearum</i> a 50 µM
2	100	99
3	94	30
5	99	100
6	99	70
7	99	100
8	99	100
9	99	100
10	100	87
11	100	92
13	96	17
14	93	24
15	99	88
16	93	0
19	100	100
20	100	95
21	100	97
22	100	97
23	100	97
24	99	74
25	99	92
26	98	57

Nº de Ejemplo	% Inhibición de la producción de DON/AcDON a 50 µM	% Inhibición del crecimiento fúngico de Fusarium graminearum a 50 µM
27	99	56
28	99	100
29	99	100
30	99	88
31	99	97
32	99	94
33	99	100
34	99	98
36	99	94
37	99	93
38	99	89
41	98	100
42	98	100
43	98	100
44	100	61
45	100	21
46	100	52
47	100	76
50	92	57
51	100	41
52	99	19

Nº de Ejemplo	% Inhibición de la producción de DON/AcDON a 50 µM	% Inhibición del crecimiento fúngico de <i>Fusarium graminearum</i> a 50 µM
54	100	0
56	92	27
58	100	100
59	100	100
60	100	100
61	100	0
62	100	35
63	100	100
64	100	100
65	100	100
66	98	50
67	100	60

REIVINDICACIONES

1. Compuestos de la fórmula (I)



5 en la que los símbolos tienen los siguientes significados:

Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros, cuyos miembros de anillo adicionales se seleccionan entre el grupo que consiste en $C(R^2)_2$, O, S, NR^3 , $C(R^2)=C(R^2)$, $C(R^2)=N$, $N=N$, $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $S(=O)_p(=NR^4)_q$ y $SiR^{5a}R^{5b}$;

R^2 representan en cada caso, independientemente entre sí H, halógeno, ciano, hidroxilo, -CHO, -NHCHO, -N₃, -N=C=O, -N=C=S, -SH, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, alquilo C₁-C₅, alquenilo C₂-C₅, alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, cicloalquenilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, haloalcoxi C₁-C₅, cicloalcoxi C₃-C₆, alqueniloxi C₂-C₅, haloalqueniloxi C₃-C₅, alquiniloxi C₂-C₅, alquilcarbonilo C₂-C₅, alquilcarboniloxi C₂-C₅, haloalquilcarboniloxi C₂-C₅, alcoxicarbonilalcoxi C₃-C₅, alquiltio C₁-C₅, haloalquiltio C₁-C₅, cicloalquiltio C₃-C₆, alquil(tiocarbonilo) C₂-C₅, alquiltio(tiocarbonilo) C₂-C₅, alquilsulfinilo C₁-C₅, haloalquilsulfinilo

5 C₁-C₅, cicloalquilsulfinilo C₃-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₅, haloalquilsulfonilo C₁-C₅, cicloalquilsulfonilo C₃-C₆, trialquilsililo C₃-C₅, halotrialquilsililo C₃-C₅, alquilamino C₁-C₅, haloalquilamino C₂-C₅, cicloalquilamino C₃-C₆, dialquilamino C₂-C₅ o halodialquilamino C₃-C₅;

10 R³ representa H, -CN, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -CHO, -NHCHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, hidroxilo, alquilo C₁-C₅, alquenilo C₂-C₅, alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, cicloalquenilo C₃-C₆, cicloalquilalquilo C₄-C₁₀, alquilocicloalquilo C₄-C₇, alquilocicloalquilalquilo C₅-C₇, haloalquilo C₂-C₅, alquilcarbonilo C₁-C₄, haloalquilcarbonilo C₁-C₄, cicloalquilcarbonilo C₃-C₇, alcoxycarbonilo C₁-C₆, haloalcoxycarbonilo C₁-C₄, cicloalcoxycarbonilo C₃-C₆, alcoxialquilcarbonilo C₂-C₆, alcoxialcoxycarbonilo C₂-C₆, (alquiltio)carbonilo C₁-C₆, alcoxi(tiocarbonilo) C₁-C₆, alquil(tiocarbonilo) C₁-C₆, alquiltio(tiocarbonilo) C₁-C₆, alquilaminocarbonilo C₁-C₆, cicloalquilaminocarbonilo C₃-C₆, dialquilaminocarbonilo C₂-C₆, alquilamino(tiocarbonilo) C₁-C₆, dialquilamino(tiocarbonilo) C₂-C₆, alcoxi(alquil)aminocarbonilo C₂-C₆, alcoxi C₁-C₅, haloalcoxi C₁-C₅, alquiltio C₁-C₅, haloalquiltio C₁-C₅, cicloalquiltio C₃-C₆, alquilaminosulfonilo C₁-C₅, trialquilsililo C₃-C₅ o halotrialquilsililo C₃-C₅;

15

20 R⁴ representa en cada caso H, ciano, amino, hidroxilo, alquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, alquilcarbonilo C₁-C₄, haloalquilcarbonilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄, fenilo o benzoílo;

25

- R^{5a} , R^{5b} independientemente entre sí representan alquilo C₁-C₄, alquenilo C₂-C₅, alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₅, halocicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilalquilo C₄-C₇, alquilocicloalquilo C₄-C₇, alquilocicloalquilalquilo C₅-C₇, haloalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅ o haloalcoxi C₁-C₅;
- R^6 representa en cada caso H, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilalquilo C₄-C₇, alquilocicloalquilo C₄-C₇ o bencilo;
- R^{6a} representa en cada caso alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilalquilo C₄-C₇ o alquilocicloalquilo C₄-C₇;
- A representa un anillo fenilo que puede estar opcionalmente mono o polisustituido con R^7 o representa un anillo tiofenilo que puede estar mono o polisustituido con R^8 ;
- R^7 independientemente entre sí representan halógeno, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, alquilocicloalquilo C₄-C₇, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆, ciano, nitro, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, alquiltio C₁-C₆, alquilsulfinilo C₁-C₆, alquilsulfonilo C₁-C₆, haloalquiltio C₁-C₆, haloalquilsulfinilo C₁-C₆, haloalquilsulfonilo C₁-C₆, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, alquilcarbonilo C₁-C₆, alcoxicarbonilo C₁-C₆, alquilaminocarbonilo C₁-C₆, dialquilaminocarbonilo C₂-C₆ o trialquilsililo C₃-C₆;
- R^8 independientemente entre sí representan halógeno, ciano, alquilo C₁-C₃, alcoxi C₁-C₃, haloalquilo C₁-C₃, haloalcoxi C₁-C₃;
- R^1 representa H, halógeno, ciano, hidroxilo, alquilo C₁-C₄, CONR^{9a}R^{9b},

COOH, COOR¹², -NR^{9a}R^{9b}, -N(R^{9b})COR^{9a}, -N(R^{9b})CSR^{9a}, -
N(R^{9b})COOR¹², -N(R^{9b})SO₂R¹², -NR¹⁰-NR^{IIa}R^{IIb}, -S(O)_mR¹², -OR¹², -
N=CR^{13a}R^{13b} o -NR¹⁰N=CR^{14a}R^{14b};

R^{9a} y R^{11a} independientemente entre sí representan cada uno H, alquilo

5 C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆,
haloalquenilo C₂-C₆, haloalquinilo C₂-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆,
alcoxialcoxialquilo C₃-C₆, alcoxialquenilo C₃-C₆, alcoxialquinilo C₃-
C₆, dialcoxialquilo C₃-C₆, trialcoxialquilo C₄-C₁₀, haloalcoxialquilo C₂-
C₆, alcoxihaloalquilo C₂-C₆, haloalcoxihaloalquilo C₂-C₆,
10 hidroxialquilo C₁-C₆, cianoalquilo C₁-C₁₀, alquiltioalquilo C₂-C₆,
alquilsulfinilalquilo C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₃-C₆,
haloalquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquilaminoalquilo C₅-C₁₀,
dialquilaminoalquilo C₄-C₁₀, halodialquilaminoalquilo C₄-C₁₀,
cicloalquil(alquil)aminoalquilo C₅-C₁₀ o -(CR^{15a}R^{15b})_mR¹⁶;

15 R^{9b} y R^{IIb} independientemente entre sí representan cada uno H, alquilo

C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆,
haloalquenilo C₂-C₆, haloalquinilo C₂-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆,
alcoxialcoxialquilo C₃-C₆, alcoxialquenilo C₃-C₆, alcoxialquinilo C₃-
C₆, dialcoxialquilo C₃-C₆, trialcoxialquilo C₄-C₁₀, haloalcoxialquilo C₂-
20 C₆, alcoxihaloalquilo C₂-C₆, haloalcoxihaloalquilo C₂-C₆,
hidroxialquilo C₁-C₆, cianoalquilo C₁-C₁₀, alquiltioalquilo C₂-C₆,
alquilsulfinilalquilo C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₃-C₆,
haloalquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquilaminoalquilo C₅-C₁₀,
dialquilaminoalquilo C₄-C₁₀, halodialquilaminoalquilo C₄-C₁₀,
25 cicloalquil(alquil)aminoalquilo C₅-C₁₀ o -(CR^{15a}R^{15b})_mR¹⁶;

o

R^{9a} y R^{9b} o R^{11a} y R^{11b} , en cada caso, junto con el átomo de nitrógeno o la unidad (NCO) o la unidad (NCS) a la que están unidos, forman un anillo de 3 a 6 miembros que opcionalmente puede comprender adicionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en O, NR^3 , $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $SiR^{5a}R^{5b}$ y $S(=O)_p(=NR^4)_q$ y que pueden estar opcionalmente sustituidos en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en halógeno, -CN, alquilo C_1-C_2 y alcoxi C_1-C_2 ;

R^{12} representa en cada caso alquilo C_1-C_{10} , alquenilo C_2-C_{10} , alquinilo C_2-C_{10} , haloalquilo C_1-C_{10} , haloalquenilo C_2-C_{10} , haloalquinilo C_2-C_{10} , alcoxialquilo C_2-C_{10} , alcoxialcoxialquilo C_3-C_{10} , alcoxialquenilo C_3-C_{10} , alcoxialquinilo C_3-C_{10} , dialcoxialquilo C_3-C_{10} , trialcoxialquilo C_4-C_{10} , haloalcoxialquilo C_2-C_{10} , alcoxihaloalquilo C_2-C_{10} , haloalcoxihaloalquilo C_2-C_{10} , hidroxialquilo C_2-C_{10} , cianoalquilo C_2-C_{10} , alquiltioalquilo C_2-C_{10} , alquilsulfinilalquilo C_2-C_{10} , alquilaminoalquilo C_3-C_{10} , haloalquilaminoalquilo C_3-C_{10} , cicloalquilaminoalquilo C_5-C_{10} , dialquilaminoalquilo C_4-C_{10} , halodialquilaminoalquilo C_4-C_{10} , cicloalquil(alquil)aminoalquilo C_6-C_{10} o $-(CR^{15a}R^{15b})_mR^{16}$;

R^{15a} , R^{15b} independientemente entre sí representan H, halógeno, alquilo C_1-C_5 , haloalquilo C_1-C_5 o alcoxi C_1-C_5 ;

o

un par geminal de R^{15a} y R^{15b} , junto con el átomo de carbono al que está

unido, forma $C(=O)$ o un anillo cicloalquilo C_3-C_6 o un anillo halocicloalquilo C_3-C_6 ;

5 R^{16} representa fenilo, cicloalquilo C_3-C_8 , cicloalquenilo C_3-C_8 , un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros o naftalenilo, o un sistema de anillos bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros; o un anillo heterocíclico no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en $C(=O)$, $C(=S)$, $C(=NR^4)$, $SiR^{5a}R^{5b}$ y $S(=O)_p(=NR^4)_q$; en el que cada anillo o cada sistema de anillos puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con hasta 5 sustituyentes seleccionados independientemente unos de otros entre R^{17} ;

15 R^{17} en cada caso, independientemente entre sí representan halógeno, alquilo C_1-C_6 , alquenilo C_2-C_6 , alquinilo C_2-C_6 , cicloalquilo C_3-C_6 , alquilocicloalquilo C_4-C_{10} , halocicloalquilo C_3-C_6 , haloalquilo C_1-C_6 , haloalquenilo C_2-C_6 , ciano, nitro, alcoxi C_1-C_6 , cicloalcoxi C_3-C_8 , halocicloalcoxi C_3-C_8 , haloalcoxi C_1-C_6 , alquiltio C_1-C_6 , alquilsulfinilo C_1-C_6 , alquilsulfonilo C_1-C_6 , haloalquiltio C_1-C_6 , haloalquilsulfinilo C_1-C_6 , haloalquilsulfonilo C_1-C_6 , alquilamino C_1-C_6 , dialquilamino C_1-C_6 , alquilcarbonilo C_1-C_6 , alcoxicarbonilo C_1-C_6 , alquilaminocarbonilo C_1-C_6 , dialquilaminocarbonilo C_3-C_6 , trialquilsililo C_3-C_6 , fenilo, naftalenilo o un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros;

m representa 0, 1 ó 2;

25 R^{10} representa en cada caso H, alquilo C_1-C_5 , alquenilo C_2-C_5 , alquinilo

C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₅, haloalquenilo C₂-C₅, haloalquinilo C₂-C₅, alcoxialquilo C₂-C₅, alquilcarbonilo C₂-C₅ o alcoxi-C₁-C₅;

5 R^{13a}, R^{13b} independientemente entre sí representan H, -CN, -C(=O)OR¹⁸, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₈, halocicloalquilo C₃-C₈, cicloalquenilo C₃-C₈, cicloalquilalquilo C₄-C₁₀, alquilcicloalquilo C₄-C₁₀, alquilcicloalquilalquilo C₅-C₁₀, alquilamino C₁-C₆, dialquilamino C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₂-C₆, haloalquilaminoalquilo C₂-C₆, cicloalquilaminoalquilo C₄-C₆,
10 dialquilaminoalquilo C₃-C₆, halodialquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquil(alquil)aminoalquilo C₅-C₁₀, alcoxi C₁-C₆, haloalcoxi C₁-C₆, cicloalcoxi C₃-C₁₀, alquiltio C₁-C₁₀, haloalquiltio C₁-C₁₀, cicloalquiltio C₃-C₁₀, trialquilsililo C₃-C₁₀ o halotrialquilsililo C₃-C₁₀, o fenilo o un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros, un sistema de
15 anillos bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros, o un anillo heterocíclico no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} y S(=O)_p(=NR⁴)_q; en el que cada anillo o cada sistema de anillos
20 puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 5 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en alquilo C₁-C₃, halógeno, -CN y alcoxi C₁-C₃;

o

25 R^{13a} y R^{13b} junto con el átomo de carbono al que están unidos forman un anillo de 3 a 6 miembros, en el que dicho anillo puede contener

- opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR^3 , C(=O) , C(=S) , $\text{C(=NR}^4\text{)}$, $\text{SiR}^{5a}\text{R}^{5b}$ y $\text{S(=O)}_p\text{(=NR}^4\text{)}_q$ y puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en alquilo $\text{C}_1\text{-C}_2$, halógeno, -CN y alcoxi $\text{C}_1\text{-C}_2$;
- 5 R^{14a} , R^{14b} independientemente entre sí representan H , -CN , -C(=O)OR^{18} , alquilo $\text{C}_1\text{-C}_6$, alquenilo $\text{C}_2\text{-C}_6$, alquinilo $\text{C}_2\text{-C}_6$, cicloalquilo $\text{C}_3\text{-C}_8$, halocicloalquilo $\text{C}_3\text{-C}_8$, cicloalquenilo $\text{C}_3\text{-C}_8$, cicloalquilalquilo $\text{C}_4\text{-C}_{10}$, alquilocicloalquilo $\text{C}_4\text{-C}_{10}$, alquilocicloalquilalquilo $\text{C}_5\text{-C}_{10}$, alquilamino $\text{C}_1\text{-C}_6$, dialquilamino $\text{C}_2\text{-C}_6$, alquilaminoalquilo $\text{C}_2\text{-C}_6$, haloalquilaminoalquilo $\text{C}_2\text{-C}_6$, cicloalquilaminoalquilo $\text{C}_4\text{-C}_6$, dialquilaminoalquilo $\text{C}_3\text{-C}_6$, halodialquilaminoalquilo $\text{C}_3\text{-C}_6$, cicloalquil(alquil)aminoalquilo $\text{C}_5\text{-C}_{10}$, alcoxi $\text{C}_1\text{-C}_6$, haloalcoxi $\text{C}_1\text{-C}_6$, cicloalcoxi $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, alquiltio $\text{C}_1\text{-C}_{10}$, haloalquiltio $\text{C}_1\text{-C}_{10}$, cicloalquiltio $\text{C}_3\text{-C}_{10}$, trialquilsililo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$ o halotrialquilsililo $\text{C}_3\text{-C}_{10}$; o fenilo o un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros, un sistema de anillos bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros, o un anillo heterocíclico no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene
- 10 opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR^3 , C(=O) , C(=S) , $\text{C(=NR}^4\text{)}$, $\text{SiR}^{5a}\text{R}^{5b}$ y $\text{S(=O)}_p\text{(=NR}^4\text{)}_q$; en el que cada anillo o cada sistema de anillos puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 5 sustituyentes seleccionados entre el grupo que
- 15 consiste en alquilo $\text{C}_1\text{-C}_3$, halógeno, -CN y alcoxi $\text{C}_1\text{-C}_3$;
- 20
- 25

- o
- 5 R^{14a}, R^{14b} junto con el átomo de carbono al que están unidos forman un anillo de 3 a 6 miembros, en el que dicho anillo puede contener opcionalmente componentes de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR³, C(=O), C(=S), C(=NR⁴), SiR^{5a}R^{5b} y S(=O)p(=NR⁴)_q y puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en alquilo C₁-C₂, halógeno, -CN y alcoxi C₁-C₂;
- 10 p, q independientemente entre sí, representan 0, 1 ó 2, con la condición de que la suma de p y q sea 1 ó 2;
- R¹⁸ representa alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, cicloalquilalquilo C₄-C₇ o alquilocicloalquilo C₄-C₇,
- W representa H
- 15 o
- W representa halógeno, CN, haloalquilo C₁-C₄, alquilo C₁-C₄, alcoxi C₁-C₄
- y sales agroquímicamente activas de los mismos.
2. Compuestos de la fórmula (I) de acuerdo con la Reivindicación 1,
- 20 en la que los símbolos tienen los siguientes significados:
- Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros, cuyos miembros de anillo adicionales se seleccionan entre el grupo que consiste en C(R²)₂, O, S, SO₂, NR³, -C(R²)=C(R²)-, C(=O) y C(=S);
- 25

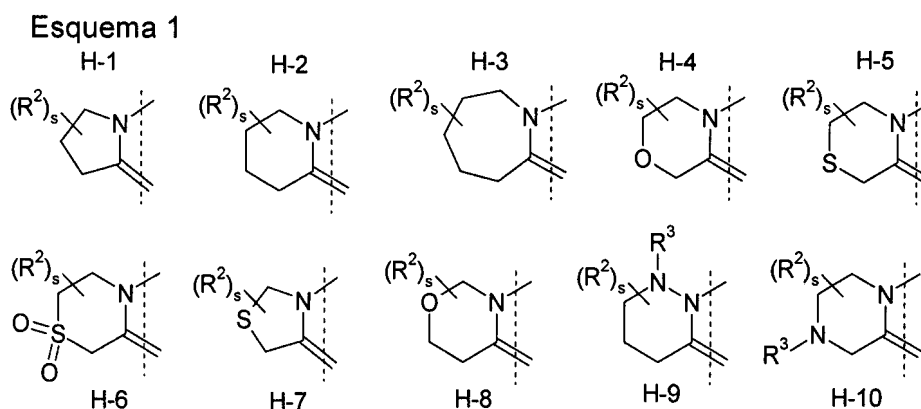
- 5 R^2 representa en cada caso independientemente entre sí H, halógeno, ciano, hidroxilo, -CHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, alquilo C₁-C₅, alquenilo C₂-C₅, alquinilo C₂-C₅, cicloalquilo C₃-C₆, halocicloalquilo C₃-C₆, cicloalquenilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₅, alcoxi C₁-C₅, haloalcoxi C₁-C₅, cicloalcoxi C₃-C₆, alqueniloxi C₂-C₅, haloalqueniloxi C₃-C₅, alquiniloxi C₂-C₅, alquilcarbonilo C₂-C₅, alquiltio C₁-C₅, haloalquiltio C₁-C₅ o cicloalquiltio C₃-C₆;
- 10 R^3 representa H, -CN, -C(=O)NH₂, -C(=O)NHCN, -CHO, -C(=O)OR⁶, -C(=O)NHOR^{6a}, alquilo C₁-C₅, haloalquilo C₂-C₅, alquilcarbonilo C₁-C₄, haloalquilcarbonilo C₁-C₄, cicloalquilcarbonilo C₃-C₆, alcoxycarbonilo C₁-C₄, haloalcoxycarbonilo C₁-C₄, cicloalcoxycarbonilo C₃-C₆, alcoxialquilcarbonilo C₃-C₆, alcoxialcoxycarbonilo C₃-C₆, (alquiltio)carbonilo C₁-C₄, alcoxi(tiocarbonilo) C₁-C₄, alquil(tiocarbonilo) C₁-C₄, alquiltio(tiocarbonilo) C₁-C₄, alquilaminocarbonilo C₁-C₄, cicloalquilaminocarbonilo C₃-C₆, dialquilaminocarbonilo C₂-C₆, alquilamino(tiocarbonilo) C₂-C₆, dialquilamino(tiocarbonilo) C₂-C₆ o alcoxi(alquil)aminocarbonilo C₃-C₆;
- 15 R^6 representa en cada caso H o alquilo C₁-C₄;
- 20 R^{6a} representa en cada caso alquilo C₁-C₄;
- A representa un anillo fenilo que puede estar opcionalmente mono o polisustituido con R^7 o representa un anillo tiofenilo que puede estar mono o polisustituido con R^8 ;
- 25 R^7 independientemente entre sí representan halógeno, alquilo C₁-C₄, haloalquilo C₁-C₄, ciano, alcoxi C₁-C₄, haloalcoxi C₁-C₄, alquiltio C₁-

- C₄, alquilsulfinilo C₁-C₄, alquilsulfonilo C₁-C₄ o haloalquiltio C₁-C₄;
- R⁸ independientemente entre sí representan halógeno, ciano, alquilo C₁-C₃, alcoxi C₁-C₃, haloalquilo C₁-C₃;
- R¹ representa H, halógeno, alquilo C₁-C₃, ciano, -NR^{9a}R^{9b}, -N(R^{9b})COR^{9a}, -N(R^{9b})CSR^{9a}, -N(R^{9b})COOR¹², -OR¹², -S(O)mR^{6a}, COOR₁₂ o -CONR^{9a}R^{9b};
- R^{9a} representa en cada caso H, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆, haloalquinilo C₂-C₆, alcoxialquilo C₂-C₆, alcoxialcoxialquilo C₃-C₆, alcoxialquenilo C₃-C₆, alcoxialquinilo C₃-C₆, dialcoxialquilo C₃-C₆, haloalcoxialquilo C₂-C₆, alcoxihaloalquilo C₂-C₆, haloalcoxihaloalquilo C₂-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, cianoalquilo C₁-C₆, alquiltioalquilo C₂-C₆, alquilsulfinilalquilo C₂-C₆, alquilaminoalquilo C₃-C₆, haloalquilaminoalquilo C₃-C₆, cicloalquilaminoalquilo C₅-C₁₀, dialquilaminoalquilo C₄-C₁₀, halodialquilaminoalquilo C₄-C₁₀ o -(CR^{15a}R^{15b})_mR¹⁶;
- R^{9b} representa en cada caso H, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆ o -(CR^{15a}R^{15b})_mR¹⁶;
- o
- R^{9a}, R^{9b}, en cada caso, junto con el átomo de nitrógeno o la unidad de (NCO) o de (NCS) a la que están unidos, forman un anillo de 3 a 6 miembros que opcionalmente puede comprender adicionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en NR³, C(=O), C(=S), O y que está opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 a 4 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en halógeno, -CN, alquilo C₁-C₂ y

- alcoxi C₁-C₂;
- 5 R¹² representa en cada caso alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, haloalquilo C₁-C₆, haloalquenilo C₂-C₆ o -(CR^{15a}R^{15b})_mR¹⁶;
- R^{15a}, R¹⁵ independientemente entre sí representan H, halógeno o alquilo C₁-C₄;
- 10 R¹⁶ representa fenilo, cicloalquilo C₃-C₈, cicloalquenilo C₃-C₈, un anillo heteroaromático de 5 ó 6 miembros o naftalenilo, o un sistema de anillos bicíclico heteroaromático de 8, 9 ó 10 miembros; o un anillo heterocíclico no aromático de 5 ó 6 miembros que contiene opcionalmente miembros de anillo seleccionados entre el grupo que consiste en C(=O), C(=S), C(=NR⁴); en el que cada anillo o cada sistema de anillos puede estar opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con hasta 3 sustituyentes seleccionados independientemente los unos de los otros entre
- 15 R¹⁷;
- R¹⁷ en cada caso, independientemente entre sí representan halógeno, ciano, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₆, alquinilo C₂-C₆, cicloalquilo C₃-C₆, haloalquilo C₁-C₆, alcoxi C₁-C₆;
- 20 m representa 0, 1 ó 2,
- W representa H
- o
- W representa flúor, cloro, CN, CF₃, metilo, etilo, metoxi y sales agroquímicamente activas de los mismos.
- 25 3. Compuestos de la fórmula (I) de acuerdo con la Reivindicación 1 ó 2 en la que los símbolos tienen los siguientes significados:

Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros seleccionado entre el grupo que consiste en: H-1, H-2, H-3, H-4, H-5, H-6, H-7, H-8, H-9 y H-10 que se muestra en el

5 Esquema 1, en el que s es un número de 0 a 4;



R^2 en cada caso, independientemente entre sí, representan H, F, Cl, Br, I, ciano, hidroxilo, -CHO, -C(=O)OR⁶, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, pentafluoroetilo, metoxi, etoxi, n-propoxi, isopropoxi, trifluorometoxi, difluorometoxi o acetilo, propionilo, isobutirilo, 2,2-dimetilpropanoilo;

10

R^3 representa H, -CHO, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, acetilo, propionilo, isobutirilo, 2,2-dimetilpropanoilo, trifluoroacetilo, difluoroacetilo, CH₃OC(O), CH₃CH₂C(O), (CH₃)₂CHC(O) o CF₃OC(O), CF₂HOC(O);

15

R^6 representa en cada caso H, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo;

A representa un anillo fenilo o tiofeno que está opcionalmente sustituido con radicales seleccionados entre el grupo que consiste en F, Cl, Br, I, ciano, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo,

20

trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, pentafluoroetilo o metoxi, etoxi, n-propoxi, isopropoxi;

R^1 representa H, F, Cl, Br, I, CH_3 , $S(O)_mMe$, $-NR^{9a}R^{9b}$, $N(R^{9b})COR^{9a}$, $N(R^{9b})COOR^{12}$;

5 R^{9a} en cada caso, representa H, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo, terc-butilo, isobutilo, n-pentilo, n-hexilo, $-CH=CH_2$, $-CH_2CH=CH_2$, $-CH=CHCH_3$, $-CH_2C\equiv CH$, $-C\equiv CH$, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, pentafluoroetilo, metoximetilo, etoximetilo, metoxietilo, terc-butoximetilo, hidroximetilo, 1-
10 hidroxietilo, 2-hidroxipropan-2-ilo o $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{9b} representa en cada caso H, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo, terc-butilo, isobutilo, n-pentilo, n-hexilo, $-CH_2CH=CH_2$, $-CH=CHCH_3$, $-CH_2C\equiv CH$, $-C\equiv CH$;

R^{9a} , R^{9b} en cada caso, junto con el nitrógeno al que están unidos, forman
15 un anillo de 5 ó 6 miembros que está opcionalmente sustituido en los átomos de carbono del anillo con 1 ó 2 sustituyentes seleccionados entre el grupo que consiste en F, Cl, Br, I, $-CN$ y metilo, etilo;

R^{12} representa metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo,
20 terc-butilo, isobutilo, $-CH_2CH=CH_2$, $-CH=CHCH_3$, $CH_2C\equiv CH$, $-C\equiv CH$, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo o $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{16} representa ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, ciclopentenilo, ciclohexenilo, fenilo o tienilo, pudiendo estar cada
25 uno de los mismos sustituido con hasta 2 radicales seleccionados entre el grupo R^{17} ;

R¹⁷ en cada caso, independientemente entre sí, representan F, Cl, Br, I, metilo, etilo, isopropilo, n-propilo, n-butilo, sec-butilo, terc-butilo, isobutilo, trifluorometilo, difluorometilo, diclorometilo, metoxi, etoxi o ciano;

5 m representa 0, 1 y 2,

W representa H

o

W representa flúor, cloro, CN, CF₃, metilo, etilo

y sales agroquímicamente activas de los mismos como fungicidas.

10 4. Compuestos de la fórmula (I) de acuerdo con una o más de las

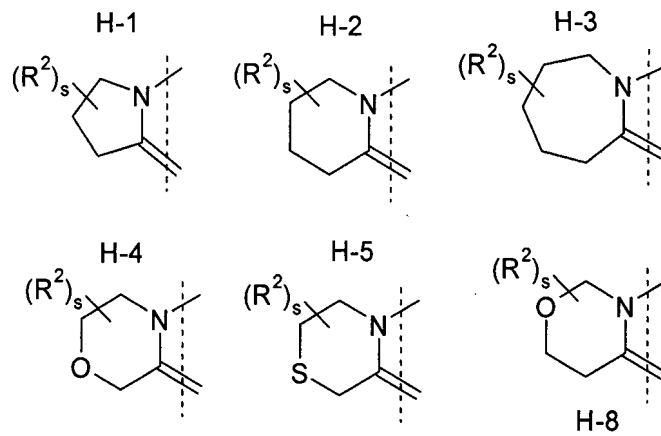
Reivindicaciones 1 a 3

en la que los símbolos tienen los siguientes significados:

Y junto con el átomo de nitrógeno adyacente "1" y los dos átomos de carbono "2" y "3" forma un anillo heterocíclico no aromático de 5 a 7 miembros seleccionado entre el grupo que consiste en: H-1, H-2, H-3, H-4, H-5 y H-8 que se muestra en el Esquema 2, en el que s es un número de 0 a 4;

15

Esquema 2



R^2 en cada caso, independientemente entre sí representan H, flúor, cloro, ciano, CF_3 , metilo o metoxi;

5 A representa un anillo fenilo o tiofeno que está opcionalmente sustituido con radicales seleccionados entre el grupo que consiste en F, Cl, ciano, CH_3 , CF_3 ;

R^1 representa H, flúor, cloro, $S(O)_mMe$, $NR^{9a}R^{9b}$, $N(R^{9b})COR^{9a}$, $N(R^{9b})COOR^{12}$;

10 R^{9a} representa en cada caso H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, sec-butilo, terc-butilo, n-pentilo, n-hexilo, metoximetilo, etoximetilo, etoxietilo, metoxietilo, metoxipropilo, hidroximetilo, 1-hidroxietilo, 2-hidroxietilo, hidroxipropilo o $-(CH_2)_mR^{16}$;

15 R^{9b} representa en cada caso H, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, alilo o propargilo;

R^{12} representa metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, t-butilo, alilo, propargilo o $-(CH_2)_mR^{16}$;

R^{16} representa ciclopropilo, ciclopentilo, ciclobutilo, ciclohexilo, tienilo o

fenilo, pudiendo estar cada uno de los mismos sustituido con un radical seleccionado entre el grupo R¹⁷;

m representa 0, 1 ó 2;

R¹⁷ representa metilo, etilo, flúor, cloro, CF₃, OMe, ciano;

5 W representa H,

o

W representa flúor, cloro, ciano;

y sales agroquímicamente activas de los mismos como fungicidas.

5. Procedimiento para controlar hongos fitopatógenos y productores de
10 micotoxinas, que se caracteriza porque los piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I) según una o más de las reivindicaciones 1 a 4, se aplica a los hongos y/o a su hábitat.

6. Composición para controlar hongos fitopatógenos y productores de micotoxinas, que se caracteriza porque comprende al menos un piridinilpirazol
15 bicíclico de la fórmula (I) según una o más de las reivindicaciones 1 a 4, además de expansores y/o tensioactivos.

7. Uso de piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I), según una o más de las reivindicaciones 1 a 4, para controlar los hongos fitopatógenos dañinos.

8. Procedimiento para preparar composiciones para controlar hongos
20 fitopatógenos dañinos, que se caracteriza porque los piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I) según una o más de las reivindicaciones 1 a 4, se mezclan con expansores y/o tensioactivos.

9. Uso de compuestos de la fórmula (I), según una o más de las reivindicaciones 1 a 4, para tratar plantas transgénicas.

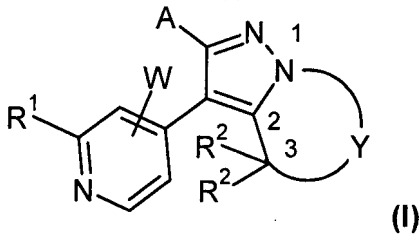
25 10. Uso de compuestos de la fórmula (I), según una o más de las

reivindicaciones 1 a 4, para tratar semillas y semillas de plantas transgénicas.

RESUMEN

PIRIDINILPIRAZOLES BICÍCLICOS

Piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I)



5

en la que los símbolos tienen los significados indicados en la descripción y sales agroquímicamente activas de los mismos y su uso para el control de microorganismos no deseados en la protección de cultivos y en la protección de materiales y para la reducción de micotoxinas en plantas y partes de plantas y, también, procedimientos para preparar compuestos de la fórmula (I).

10

236

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO
NIT : 800.176.089-2
- / -

 Industria y Comercio SUPERINTENDENCIA	RECIBO DE CAJA	No. 12 - 0099130
		Bogotá D.C., Septiembre 27 de 2012 - 13:22:43

RECIBIDO DE : MARIO DELGADO ECHEVERRY E HIJOS LTDA NI 800.020.909

*** Soporte del Pago ***

TIPO PAGO	BANCO	CUENTA	No. PAGO	FECHA PAGO	VR PAGO
CONSIGNACION	BANCO DE BOGOTA	062754387	195769394	27/09/2012	3.940.000.00

*** Conceptos Pagados ***

CANT.	RENTISTICO	CONCEPTO	Vr.UNDITARIO	Vr.CONCEPTO
1	50005-01-01 SOLICITUDES	1 TRAMITES DE SOL. DE PATENTE DE INVENCIÓN	590.000.00	590.000.00
				\$590.000.00
			=====	

SON: **QUINIENTOS NOVENTA MIL PESOS MONEDA CORRIENTE**

Responsable: 
Recibo de Caja Aplicado al Expediente No. PC1/EP2011 1055153

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO



No. 12-175742- -00000-0000

Fecha: 2012-10-05 16:32:50 Dep. 2020 DIR.NUEVASCR
Tra. 11 PATENTEIYII Eve: 378 FASENACIONALI
Act. 411 PRESENTACION Folios: 240

Sede Centro: Carrera 13 No. 27 - 00 Pisos 3,4,5 y 10 Bogotá, D.C.- Colombia

Web: www.sic.gov.co e-mai: info@sic.gov.co Conmutador: (571) 5870000 Fax: (571) 5870284 Línea: 018000-910165 Call Center: (571) 6513240

Septiembre 27 de 2012 - 13:22:46

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO

DIVISION DE NUEVAS CREACIONES

TARJETA ARCHIVO TEMATICO

PATENTE DE INVENCION ☒ PCT ☒ MODELO DE UTILIDAD ☐ DISEÑO INDUSTRIAL ☐

(21) N° de solicitud: (22) Fecha de solicitud:

(51) Clasificación Internacional :

(71) Solicitante(s) **BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH**

(72) Inventor(es): **MATTES, Amos; HELMKE, Hendrik; HILLEBRAND, Stefan; PERIS, Gorka; SUDAU, Alexander; RODEFELD, Lars; GAUGER, Stefan; BENTING, Jürgen; DAHMEN, Peter; MEISSNER, Ruth; WACHENDORFF-NEUMANN, Ulrike; HADANO, Hiroyuki**

(74) Apoderado: **JAIME EDUARDO DELGADO VILLEGAS**

(30) Prioridad	(31) No. Prioridad	(32) Fecha	(33) País
	10159210.3	07/04/2010	EP
	61/321,704	07/04/2010	US

(85) Fecha límite inicio fase nacional: **07/11/2012**

(86) Datos relativos a la presentación de la solíc. PCT

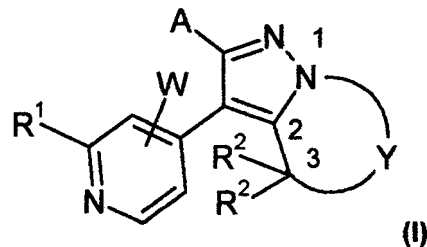
Fecha de presentación de la solicitud: **04/05/2011**

No. de solicitud **PCT/EP2011/055153**

(87) Publicación internacional:

Fecha: **13/10/2011**

No. Publicación: **WO2011/124539 A1**



54) Título **PIRIDINILPIRAZOLES BICÍCLICOS**

(57) Resumen: Piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I) en la que los símbolos tienen los significados indicados en la descripción y sales agroquímicamente activas de los mismos y su uso para el control de microorganismos no deseados en la protección de cultivos y en la protección de materiales y para la reducción de micotoxinas en plantas y partes de plantas y, también, procedimientos para preparar compuestos de la fórmula (I).

CONTINUA AL RESPALDO

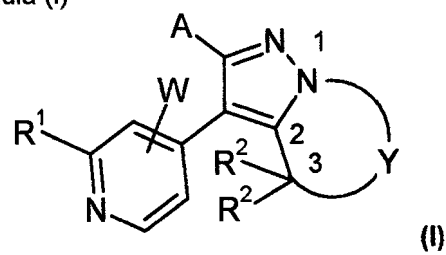
229

SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO						
DIVISION DE NUEVAS CREACIONES						
TARJETA ARCHIVO PROPIETARIOS						
PATENTE DE INVENCION <u> X </u> PCT <u> X </u> MODELO DE UTILIDAD <u> </u> DISEÑO INDUSTRIAL <u> </u>						
(21) N° de solicitud:			(22) Fecha de solicitud:			
(51) Clasificación Internacional :						
(71) Solicitante (s)			BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH			
(72) Inventor(es) MATTES, Amos; HELMKE, Hendrik; HILLEBRAND, Stefan; PERIS, Gorka; SUDAU, Alexander; RODEFELD, Lars; GAUGER, Stefan; BENTING, Jürgen; DAHMEN, Peter; MEISSNER, Ruth; WACHENDORFF-NEUMANN, Ulrike; HADANO, Hiroyuki						
(74) Apoderado: JAIME EDUARDO DELGADO VILLEGAS						
(30) Prioridad	(31)	No. Prioridad	(32)	Fecha	(33)	País
		10159210.3		07/04/2010		EP
		61/321,704		07/04/2010		US
(85) Fecha inicio fase nacional: 07/11/2012				,m	Publicación internacional	
(86) Datos relativos a la presentación de la solicitud PCT				(87)	Fecha: 13/10/2011 Fecha (dd/mm/aa)	
Fecha de presentación de la solicitud: 04/05/2011						
No. de solicitud PCT/EP2011/055153					N° publicación: WO2011/124539 A1	
(54) Título: PIRIDINILPIRAZOLES BICÍCLICOS						

 Industria y Comercio SUPERINTENDENCIA		SUPERINTENDENCIA DE INDUSTRIA Y COMERCIO DIVISION DE NUEVAS CREACIONES EXTRACTO PARA PUBLICACIÓN SOLICITUD DE PATENTE DE INVENCION PCT	
(21) N° de solicitud: 22) Fecha de solicitud:		(51) Int Cl:	
(30) Prioridad		(71) Solicitante(s) BAYER INTELLECTUAL PROPERTY GMBH	
(31) No. Prioridad	(32) Fecha	(72) Inventor(es)	
10159210.3 61/321,704	07/04/2010 07/04/2010	MATTES, Amos HELMKE, Hendrik HILLEBRAND, Stefan PERIS, Gorka SUDAU, Alexander RODEFELD, Lars GAUGER, Stefan BENTING, Jürgen DAHMEN, Peter MEISSNER, Ruth WACHENDORFF-NEUMANN, Ulrike HADANO, Hiroyuki	
(33) País		(74) Apoderado:	
EP US		JAIME EDUARDO DELGADO VILLEGAS	
(85) Fecha límite inicio fase nacional: 07/11/2012		(87) Publicación Internacional	
Datos relativos a la presentación de la solicitud PCT		Fecha 13/10/2011 Fecha (dd/mm/aa)	
Fecha de presentación de la solicitud: 04/05/2011		N° publicación: WO2011/124539 A1	
No. de solicitud PCT/EP2011/055153			
(54) Título: PIRIDINILPIRAZOLES BICÍCLICOS			

Resumen:

Piridinilpirazoles bicíclicos de la fórmula (I)



en la que los símbolos tienen los significados indicados en la descripción y sales agroquímicamente activas de los mismos y su uso para el control de microorganismos no deseados en la protección de cultivos y en la protección de materiales y para la reducción de micotoxinas en plantas y partes de plantas y, también, procedimientos para preparar compuestos de la fórmula (I).

COLUMBIA

240
PX 0A. 11111
SIN

The Undersigned Juan Pedro Vallejo López citizen, adult and living in Madrid in my position of legal representative of the company Bayer Intellectual Property GmbH with headquarters in Alfred-Nobel-Str. 10, 40789 Monheim, DE, which was initially incorporated at Germany, grant ample an sufficient power of attorney to: JAIME EDUARDO DELGADO VILLEGAS and/or CLEMENCIA DELGADO VILLEGAS, attorneys, adults, residing in Bogotá (Colombia), so that on our behalf and representation, carry out in Colombia and in any other Countries all types of errands an especial procedures for the registration and renewal of all kinds of Product and Service trademarks, deposits of name and commercial logotype, industrial models and drawings, invention patents, utility models, Integrated circuits, name of domain, Copyrights, plant varieties, agricultural, veterinary and sanitary registries, capacity certificates, renewal, modification, transfer, assignment and expansions and to be responsible as general attorneys, for the supervision of all matters related to industrial and Intellectual property, being empowered to present and withdraw objections, to present appeals, to request testimonies, to receive documents, to pay legal fees, to approve exploitations, to agree on transactions on trademark agreements with third parties of legal entities, to abandon action, to substitute and to carry out all the necessary actions before any administrative authority of the aforementioned purposes' in the event that such procedures shall be transferred unto a judicial field, the legal representatives are authorized to act as plaintiff or defendant before the competent authorities, having an ample power to settle, to submit to arbitration, to waive, to present appeals and all other necessary special faculties.

For that purpose, I kindly request to grant ample powers to our attorneys, who shall be able to exercise the functions independently or collectively.

The present power of attorney revokes and cancels any other previous powers of attorney given by the Company in the territory of the Colombian Republic.

Sincerely,

ID Card No.

issued in

Atentamente se dirige a usted Juan Pedro Vallejo López mayor de edad y residente en Madrid para manifestarle que en mi condición de representante legal de la firma Bayer Intellectual Property GmbH domiciliada en Alfred-Nobel-Str. 10, 40789 Monheim, DE y constituida inicialmente en Alemania, confiero poder general, amplio y suficiente a los Dres. JAIME EDUARDO DELGADO VILLEGAS, y/o CLEMENCIA DELGADO VILLEGAS, Abogados, mayores y vecinos de Bogotá, D.C. (Colombia), para que en nuestro nombre y representación adelanten en Colombia y en otros países toda clase de diligencias y procedimientos especiales para el Registro y Renovación en su Despacho, de toda clase de Marcas de Producto y Servicio, Depósitos de Nombre y Enseña Comercial, Diseños Industriales y Patentes de Invención, Patentes modelo de Utilidad, Esquemas de Circuitos integrados, Nombres de dominio, Derechos de Autor, Variedades vegetales, registros agrícolas, veterinarios y sanitarios, certificados de capacidad, renovación, modificación, traspaso y ampliación de los mismos y atiendan como Apoderados generales todo asunto referente a la Propiedad Industrial e intelectual, quedando facultados para presentar y retirar Oposiciones, interponer recursos, solicitar testimonios, recibir documentos, cancelar costos legales, probar explotaciones, aceptar transacciones, llegar a acuerdos marcarios con terceras personas o entidades jurídicas, desistir, sustituir y hacer cuanto fuere necesario ante cualquier autoridad administrativa para los fines arriba indicados; y en caso de que el procedimiento debiera pasar a conocimiento judicial, quedan facultados para actuar como demandantes o demandados ante los Jueces que sean competentes, con poder amplio, pudiendo transar, someter a árbitros, desistir, interponer recursos y con todas las demás facultades especiales que fueren necesarias.

Con éste objeto, ruego le confieran personería suficiente a nuestros Apoderados quienes podrán obrar en forma conjunta o independiente e incluso sustituir el presente poder.

Atentamente,

DNI

expedido en



No. 12-175742-00000-0000

Fecha: 2012-10-05 16:32:50 Dep. 2020 DIR NUEVASCR
Tra. 11 PATENTEIYII Eve: 378 FASENACIONALI
Act. 411 PRESENTACION Folios: 240

PATENTE DE INVENCION ☐ MODELO

☐	Indicación que se solicita una patente.
☐	Datos de identificación del solicitante o de la persona que presenta la solicitud
☐	Descripción de la invención
☐	Dibujos de ser estos pertinentes
☐	Comprobante de pago de las tasas establecidas (De ser el caso formato de descuento)
Completa ☐	Incompleta ☐

PATENTE DE INVENCION PCT ☐ MODELO DE UTILIDAD PCT ☐ Art.33 Decisión 486/00, Circular Única

☒	Indicación que se solicita una PCT
☒	Copia de la solicitud en español, tal como fue presentada inicialmente (capítulo descriptivo, reivindicatorio, resumen)
☒	Dibujos de ser estos pertinentes
☒	Comprobante de pago de las tasas establecidas (de ser el caso formato de descuento)
Completa ☒	Incompleta ☐

DISEÑO INDUSTRIAL ☐ (Art. 119 Decisión 486/00)

☐	Indicación que se solicita Diseño industrial
☐	Datos de identificación del solicitante o de la persona que presenta la solicitud
☐	Representación gráfica y fotográfica del Diseño industrial o muestra del material que incorpora el diseño
☐	Comprobante de pago de las tasas establecidas
Completa ☐	Incompleta ☐

ESQUEMA DE TRAZADO ☐ (Art. 92 Decisión 486/00)

☐	Indicación que se solicita un esquema de trazado
☐	Datos de identificación del solicitante o de la persona que presenta la solicitud
☐	Representación gráfica de un esquema de trazado
☐	Comprobante de pago de las tasas establecidas
Completa ☐	Incompleta ☐