

429.436

17



(Como divisional de la patente nº 401.551 del  
7 de Abril de 1.972).

Int. Cl.ª C07C // A01N  
Número 429.436

# MEMORIA DESCRIPTIVA

correspondiente a la solicitud de concesión de un.a

## PATENTE DE INVENCION

SOLICITANTE: DIAMOND SHAMROCK CORPORATION

RESIDENCIA: 1100 Superior Avenue, CLEVELAND, Ohio  
Estados Unidos.

ENUNCIADO: UN METODO PARA LA PREPARACION DE CAR-  
BAMATOS DE CETOXIMAS.

Prioridad: Patente estadounidense n.º 132.584 del 8-4-71



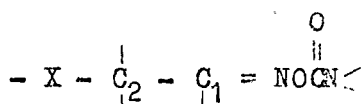
ANTECEDENTES DE LA INVENCION

1. Campo de la invención

Esta invención se refiere a compuestos orgánicos útiles como pesticidas y más especialmente a carbamatos de cetoximas con actividad insecticida, acaricida y, en algunos casos, nematocida comparable o superior a la de los productos comerciales más estrechamente relacionados, al mismo tiempo que presenta una toxicidad para los mamíferos considerablemente menor que la de estos productos comerciales.

2. Descripción de la técnica anterior

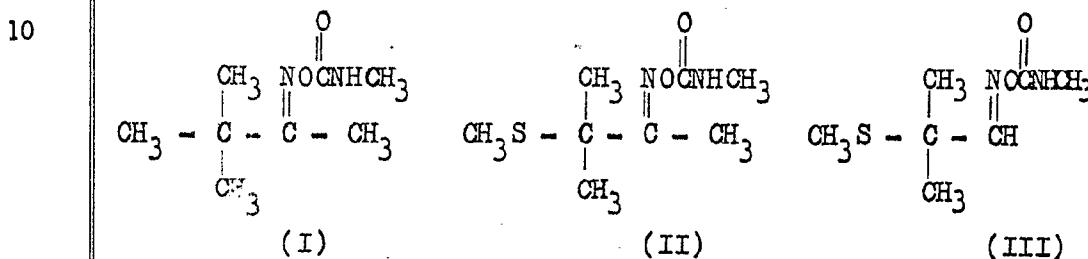
La notable actividad pesticida de los carbamatos de las cetoximas descritos en esta invención es sorprendente e inesperada porque en la técnica anterior se indica que solamente los carbamatos de las aldoximas sustituidas presentan una gran actividad pesticida, mientras que los derivados de cetoxima son esencialmente inactivos. Por ejemplo, en la patente estadounidense nº 3.217.037 y en la nº 3.507.965 se encuentran compuestos, que poseen actividad pesticida, de estructura:



donde X es oxígeno o S(O)<sub>n</sub> donde n es 0, 1 o 2 y las valencias libres están satisfechas por hidrógeno o radicales hidrocarbilo. En estas dos patentes, los compuestos preferidos son aldoximas en las que el átomo de carbono (C<sub>1</sub>) unido a la porción oxima en la estructura anterior está sustituido con hidrógeno. En la revista J. Agr. Food Chem., 14, 356 (1966), los autores de estas patentes afirman: "Los datos... demuestran... el efecto perjudicial... de sustituir el hidrógeno aldehídico por un grupo alquilo. Todos los derivados de ceto



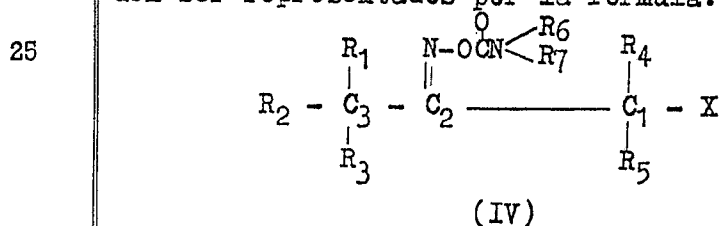
1 xima... son prácticamente inactivos cuando se comparan con  
 los derivados de aldoxima...". Las cetoximas de fórmulas  
 (I) y (II) dadas más adelante son consideradas en esta refe-  
 5 rencia como esencialmente inactivas en comparación con el  
 compuesto de aldoxima de fórmula (III) que es conocido co-  
 mercialmente como Aldicarb (Temik). El compuesto de fórmu-  
 la (II) difiere del compuesto de fórmula (III) en que el hi-  
 drógeno aldehídico de fórmula (III) ha sido sustituido por  
 un grupo metilo.



15 Los derivados de cetoxima de fórmulas (I) y (II)  
 han sido sintetizados de nuevo confirmándose otra vez su pre-  
 tendida falta de actividad respecto a la del compuesto de  
 fórmula (III). Sin embargo, se ha encontrado sorprendentemen-  
 te que los derivados de cetoxima de esta invención poseen  
 20 una gran actividad pesticida, comparable o superior a la del  
 compuesto de fórmula (III).

COMPENDIO DE LA INVENCION

Los carbamatos de cetoximas de esta invención pue-  
 den ser representados por la fórmula:



donde

30  $\text{R}_1$  representa  $\text{R}_2 - \text{R}_4$  o X;



1  $R_2-R_4$  representa hidrógeno, alquilo inferior, alqueni-  
lo inferior, alquinilo inferior, alquile, alquenilo o  
alquinilo inferiores sustituidos, con la condición  
de que  $R_2$  y  $R_3$  pueden estar unidos para formar un an-  
5 lle cicloalifático;

$R_5$  representa  $R_2-R_4$  o X, con la condición de que cuando  
 $R_5$  y X son  $OR_8$ ,  $SR_8$ ,  $S(O)R_8$ ,  $SO_2R_8$  o  $NR_8R_9$ ,  $R_5$  y X  
pueden estar unidos para formar un anillo heterocí-  
clico;

10  $R_6-R_7$  representan hidrógeno, alquilo inferior, alqueni-  
lo inferior o alquinilo inferior;

X representa  $SR_8$ ,  $S(O)R_8$ ,  $SO_2R_8$ ,  $OR_8$ ,  $OSO_2R_8$ ,  $NR_8R_9$ ,  
 $NO_2$ , CN, SCN,  $N_3$  o halógeno;

15  $R_8$  representa hidrógeno, alquile inferior, alquenilo  
inferior, alquinilo inferior, arilo, arilo sustituido,  
carbamil, carbamilo sustituido, acilo o acilo susti-  
tuido, con la condición de que los grupos alquilo o  
alquenilo inferiores pueden estar sustituidos también  
con X y

20  $R_8$  representa hidrógeno o alquile inferior, con la condi-  
ción de que  $R_8$ ,  $R_9$  y N del grupo  $NR_8R_9$  pueden formar  
un anillo heterocíclico.

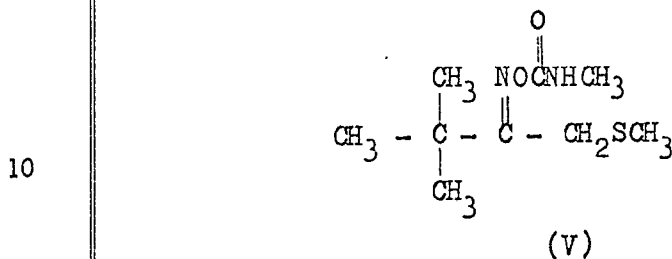
25 El término radical alquile inferior significa un  
radical que contiene de 1 a 7 átomos de carbono aproxima-  
mente.

30 Esta invención comprende específicamente los carba-  
matos de fórmula (IV) donde  $R_2$  y  $R_3$  son radicales alquilo in-  
ferior, tal como metilo;  $R_1$  es  $R_2$  o X;  $R_4$  y  $R_5$  son hidróge-  
no; X es  $-S(O)_nR_8$ , donde n es 0, 1 o 2;  $R_8$  es un radical al-  
quilo inferior como metilo y  $R_7$  y  $R_8$  son individualmente hi-



1 drógeno, un radical alquilo inferior como metile o un radi-  
cal alqueniilo inferior.

Resultó completamente inesperado descubrir que los  
carbamatos de cetoximas, como el carbamato de fórmula (V),  
5 presentan una actividad pesticida comparable a la del carba-  
mato de la aldoxima de fórmula (III):



y simultáneamente presentan una toxicidad para los mamife-  
ros considerablemente menor que la del compuesto de fórmu-  
15 la (III). Así, la toxicidad oral del compuesto de fórmula  
(V), medida sobre ratas albinas y expresada como DL<sub>50</sub>, resul-  
tó ser de 8,5 mgm/kg de peso corporal; la toxicidad dérmica,  
medida sobre conejos albinos, expresada también como DL<sub>50</sub>,  
era de 18,9 mgm/kg de peso corporal. El valor DL<sub>50</sub> es una  
20 forma habitual de expresar la toxicidad e indica la concen-  
tración requerida para matar al 50 % de los animales del  
ensayo. En todos los casos, el valor DL<sub>50</sub> es aproximadamen-  
te ocho veces mayor que el valor registrado para el carbama-  
to del compuesto de aldoxima de fórmula (III).

25 DESCRIPCION DE LAS REALIZACIONES PREFERIDAS

Los compuestos preferidos de fórmula (IV) son los  
carbamatos de las oximas de 1-hidrocarbilitio (o 1-azido)-2-  
alcanonas, donde el nitrógeno del carbamato puede llevar 0,  
1 o 2 grupos alquilo inferiores como sustituyentes; el áte-  
30 mo de carbono (C<sub>1</sub>) sustituido con el grupo hidrocarbilitio



1 (o azido) no lleva más sustituyentes y el átomo de carbono  
(C<sub>3</sub>) no sustituido con grupos hidrocarbilitio (o azido) está  
sustituido preferiblemente con un grupo alquilo y en el mejor  
de los casos está completamente alquilado para conseguir un  
5 grado máximo de ramificación sobre este átomo de carbono.

Un segundo grupo preferido de compuestos de fórmula (IV) son los carbamatos de oximas de las 1-hidrocarbilitio(o 1-azido)-2-alcanonas donde el nitrógeno del carbamato puede llevar 0, 1 o 2 grupos alquilo inferiores como sustituyentes; el átomo de carbono (C<sub>1</sub>) sustituido con el grupo hidrocarbilitio(o azido) no lleva más sustituyentes y el átomo de carbono (C<sub>3</sub>) está preferiblemente sustituido con un sustituyente del grupo X y en el mejor de los casos está además  
10 completamente alquilado para conseguir un grado máximo de ramificación sobre este átomo de carbono.

15 Estos compuestos presentan una actividad extraordinariamente alta como insecticidas y acaricidas, tanto como tóxicos de contacto como sistémicos. En algunos casos, presentan una gran actividad nematocida.

20 Como ejemplos específicos de estos compuestos, podemos mencionar los 1-hidrocarbilitio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutanos tales como:

- 1-metiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 25 1-etiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-n-propiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-isopropiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-n-butiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-terc-butiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 30 1-sec-butiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano



- 1 1-isobutiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-viniltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-(2-propeniltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-(3-buteniltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
5 1-etiniltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-feniltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-benciltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
y similares  
también los análogos 1-hidrocarbiltio-3-metil-2-metilcarba-  
10 miloximinobutanos, tales como:  
1-metiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-etiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-n-propiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-isopropiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
15 1-n-butiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-terc-butiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-sec-butiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-isobutiltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-viniltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
20 1-(2-propeniltio)-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-(3-buteniltio)-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-etiniltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-feniltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-benciltio-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
25 y similares  
así como los análogos 1-hidrocarbiltio-2-metilcarbamiloximi-  
nobutanos, tales como:  
1-metiltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-etiltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
30 1-n-propiltio-2-metilcarbamiloximinobutano

POOR  
QUALITY



- 1 1-isopropiltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-n-butiltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-terc-butiltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-sec-butiltio-2-metilcarbamiloximinobutano
- 5 1-isobutiltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-viniltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-(2-propeniltio)-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-(3-buteniltio)-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-etiniltio-2-metilcarbamiloximinobutano
- 10 1-feniltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
1-benciltio-2-metilcarbamiloximinobutano  
y similares;  
así como los análogos 1-hidrocarbiltio-2-metilcarbamiloximi-  
nopropanos, tales como:
- 15 1-metiltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-etiltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-n-propiltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-isopropiltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-n-butiltio-2-metilcarbamiloximinopropano
- 20 1-terc-butiltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-sec-butiltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-isobutiltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-viniltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-(2-propeniltio)-2-metilcarbamiloximinopropano
- 25 1-(3-buteniltio)-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-etiniltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-feniltio-2-metilcarbamiloximinopropano  
1-benciltio-2-metilcarbamiloximinopropano y similares;  
así como los compuestos de oximas de otras metil-alquil-ce-  
tonas de cadena lineal o ramificada, en las que el grupo me-
- 30

POOR  
QUALITY



1       tilo está sustituido con un grupo hidrocarbilitio tales como:

1-metiltio-2-metilcarbamiloximinopentano

1-metiltio-2-metilcarbamiloximinohexano

1-metiltio-4,4-dimetil-2-metilcarbamiloximinopentano

5       1-metiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinopentano

1-metiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinohexano y si-  
milares.

Otros ejemplos de estos compuestos son aquellos  
en los que la unión sulfuro de los compuestos anteriores es  
10       sustituída por una unión óxido, una unión sulfinilo o una  
unión sulfonilo, como, por ejemplo:

1-metoxi-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

1-etoxi-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

1-(2-propeniloxi)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

15       1-metoxi-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano

1-etoxi-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano

1-(2-propeniloxi)-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano

1-metoxi-2-metilcarbamiloximinobutano

1-etoxi-2-metilcarbamiloximinobutano

20       1-(2-propeniloxi)-2-metilcarbamiloximinobutano

1-metoxi-2-metilcarbamiloximinopropano

1-etoxi-2-metilcarbamiloximinopropano

1-(2-propeniloxi)-2-metilcarbamiloximinopropano y

1-metilsulfinil-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

25       1-etilsulfinil-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

1-(2-propenilsulfinil)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-  
butano

1-metilsulfinil-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano

1-etilsulfinil-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano

30       1-(2-propenilsulfinil)-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano



21 AGO

- 1 1-metilsulfinil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-etilsulfinil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-(2-propenilsulfinil)-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-metilsulfinil-2-metilcarbamiloximinopropano
- 5 1-etilsulfinil-2-metilcarbamiloximinopropano
- 1-(2-propenilsulfinil)-2-metilcarbamiloximinopropano
- y
- 1-metilsulfonil-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-etilsulfonil-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 10 1-(2-propenilsulfonil)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-  
butano
- 1-metilsulfonil-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-etilsulfonil-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-(2-propenilsulfonil)-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 15 1-metilsulfonil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-etilsulfonil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-(2-propenilsulfonil)-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-metilsulfonil-2-metilcarbamiloximinopropano
- 1-etilsulfonil-2-metilcarbamiloximinopropano
- 20 1-(2-propenilsulfonil)-2-metilcarbamiloximinopropano
- y similares.

Otros ejemplos de estos compuestos son aquellos donde X es N<sub>3</sub>.

- 1-azido-2-metilcarbamiloximinopropano
- 25 1-azido-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-azido-2-metilcarbamiloximinopentano
- 1-azido-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 1-azido-3-metil-2-metilcarbamiloximinopentano
- 1-azido-4-metil-2-metilcarbamiloximinopentano
- 30 1-azido-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano



1 1-azido-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinopentano  
1-azido-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinohexano  
1-azido-4,4-dimetil-2-metilcarbamiloximinopentano  
y similares.

5 Otros ejemplos de estos compuestos son aquellos  
en los que dos miembros del grupo  $R_1$ ,  $R_2$  y  $R_3$  están unidos  
entre sí para formar un anillo como, por ejemplo:

1-ciclopropil-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano  
1-metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclopropil)-2-metiltio-  
10 etano  
2-azido-1-metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclopropil)etano  
1-ciclobutil-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano  
1-metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclobutil)-2-metiltioetano  
2-azido-1-metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclobutil)etano  
1-ciclopentil-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano  
15 1-metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclopentil)-2-metiltio-  
etano  
1-ciclohexil-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano  
1-metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclohexil)-2-metiltio-  
20 etano  
2-azido-1-metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclohexil)etano  
y similares;

así como los compuestos donde  $R_1$  es X como, por ejemplo:  
1,3-bis(metiltio)-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
25 3-metil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltio-3-nitrobutano  
3-metoxi-3-metil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltiobutano  
3-ciano-3-metil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltiobutano  
1-azido-3-metil-2-metilcarbamiloximino-3-metiltiobutano  
1-azido-3-metoxi-3-metil-2-metilcarbamiloximinobutano  
30 3-azido-3-metil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltiobutano



- 1 3-azido-1-metoxi-3-metil-2-metil carbamiloximinobutano  
1-metoxi-3-metil-2-metil carbamiloximino-3-nitrobutano  
1-metoxi-3-metil-2-metil carbamiloximino-3-metiltiobutano  
3-ciano-1-metoxi-3-metil-2-metil carbamiloximinobutano  
5 1,3-bis(metoxi)-3-metil-2-metil carbamiloximinobutano  
1,3-bis(ciano)-3-metil-2-metil carbamiloximinobutano  
1-ciano-3-metil-2-metil carbamiloximino-3-metiltiobutano  
1-ciano-3-metoxi-3-metil-2-metil carbamiloximinobutano  
1-nitro-3-metil-2-metil carbamiloximino-3-metiltiobutano  
10 1-nitro-3-metoxi-3-metil-2-metil carbamiloximinobutano  
3-metil-3-dimetilamino-2-metil carbamiloximino-1-metiltio-  
butano  
1-metoxi-3-metil-3-dimetilamino-2-metil carbamiloximinobutano  
3-metil-1-dimetilamino-2-metil carbamiloximino-3-metiltio-  
15 butano  
3-metoxi-3-metil-1-dimetilamino-2-metil carbamiloximinobu-  
tano  
y similares;  
así como compuestos donde R<sub>5</sub> es X como, por ejemplo:  
20 1,1-bis(metiltio)-3,3-dimetil-2-metil carbamiloximinobutano  
1,1-bis(metoxi)-3,3-dimetil-2-metil carbamiloximinobutano  
1-metoxi-3,3-dimetil-2-metil carbamiloximino-1-metiltiobu-  
tano  
1,1-etilenditio-3,3-dimetil-2-metil carbamiloximinobutano  
25 3,3-dimetil-2-metil carbamiloximino-1,1-(1,2-propilenditio)-  
butano  
3,3-dimetil-2-metil carbamiloximino-1,1-(1,3-propilenditio)-  
butano  
1,1-etilendioxi-3,3-dimetil-2-metil carbamiloximinobutano  
30 3,3-dimetil-2-metil carbamiloximino-1,1-(1,2-propilendioxi)-



- 1 butano  
3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1,1-(1,3-propilendioxi)-  
butano  
2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(1,3-oxatiolan-2-il)-  
5 propano  
2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(1,3-oxatian-2-il)pro-  
pano  
2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(3-metil-1,3-oxazoli-  
din-2-il)propano  
10 2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(3-metiltetrahidro-  
1,3-oxazin-2-il)propano  
2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(1,3-dimetilimidazoli-  
din-2-il)propano  
2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(1,3-dimetilpirimidin-  
15 2-il)propano  
2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(3-metilthiazolidin-2-  
il)propano  
2,2-dimetil-1-metilcarbamiloximino-1-(3-metiltetrahidro-1,3-  
tiazin-2-il)propano  
20 y similares.

Otros ejemplos de estos compuestos son los si-  
guientes:

- 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-metiltioetiltio)bu-  
tano  
25 1-(2-etiltioetiltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobu-  
tano  
1-(2-metoxietiltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobu-  
tano  
1-(2-etoxietiltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano  
30 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-metilsulfinitil-



- 1           tio)butano
- 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-metilsulfoniletio)butano
- 1-(2-metoxietoxi)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 5           3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-metil tioetoxi)butano
- 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-metil tiometiltio)butano
- 1-(2-metoximetiltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 10           1-(2-metoximetoxi)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(3,3,3-trifluorpropiltio)butano
- 1-(3,3,3-tricloropropiltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 15           1-(2-cianoetiltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 3,3-dimetil-1-(2-dimetilaminoetiltio)-2-metilcarbamiloximinobutano
- 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-fenetiltio)butano
- 20           3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-(2'-tienil)etiltio)butano
- 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-propargiltiobutano
- 1-ciano-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
- 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-nitrobutano
- 25           y similares.

Aunque los compuestos anteriores son, con fines ilustrativos, N-metilcarbamatos, el nitrógeno carbámico de estos compuestos puede estar sin sustituir, como los carbamatos simples o puede estar sustituido con un solo sustituyente alquilo, alquenilo o alquinilo, tal como metilo, etil-

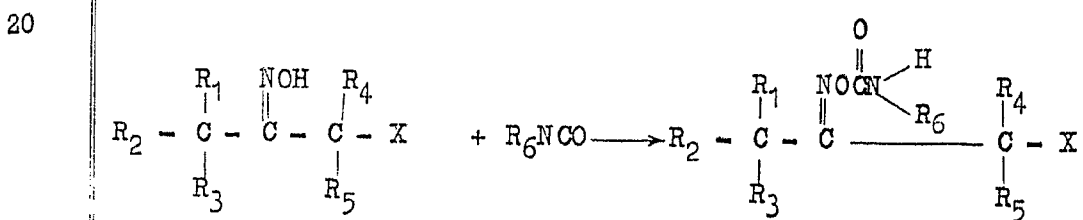
30



1 lo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, alile, pro-  
 2 pargilo o similares o puede estar sustituido con dos gru-  
 3 pos alquilo, alquenilo o alquinilo, siendo estos grupos igua-  
 4 les o diferentes, para dar, por ejemplo, N,N-dimetilcarba-  
 5 miloximas, N,N-dietilcarbamiloximas, N-metil-N-etilcarbamil-  
 6 oximas, N,N-di-n-propilcarbamiloximas, N-metil-N-propilcar-  
 7 bamiloximas, N,N-dialilcarbamiloximas, N,N-dipropargiloxi-  
 8 mas, N-metil-N-alilcarbamiloximas, N-metil-N-propargilcar-  
 9 bamiloximas y similares.

10 Los expertos en la técnica observarán que los de-  
 11 rivados de cetoxima de esta invención pueden encontrarse en  
 12 dos formas geométricas, la forma sin y la forma anti, que  
 13 representan los isómeros cis y trans alrededor del doble en-  
 14 lace de la oxima. Ambos isómeros y sus mezclas están inclui-  
 15 dos dentro de los límites de esta invención.

Estos compuestos pueden ser preparados por una  
 cualquiera de diversos métodos. Un método implica la reac-  
 ción de un isocianato con una oxima como muestra, por ejem-  
 plo, la siguiente ecuación:



25 donde R<sub>1</sub> a R<sub>6</sub> y X son los definidos anteriormente. La oxima  
 y el isocianato se hacen reaccionar en un disolvente orgáni-  
 co inerte, a una temperatura comprendida aproximadamente en-  
 tre 0°C y 150°C y de preferencia entre 20°C y 80°C y a una  
 presión de 1 a 10 atmósferas aproximadamente, de preferencia  
 30 de 1 a 3 atmósferas aproximadamente. La presión de reacción  
 viene determinada por la temperatura de reacción, la concen-



1 tración y la presión de vapor del isocianato.

5 Cualquier disolvente orgánico inerte utilizado en la reacción no debe contener ningún grupo hidroxilo, amino u otros grupos que reaccionen con la función isocianato. Los disolventes inertes útiles son los hidrocarburos alifáticos y aromáticos, como hexano, heptano, octano, benceno, tolueno y xileno; los éteres como éter dietílico, éter dipropílico, éter etilpropílico; los ésteres como acetato de etilo y propionato de etilo; las cetonas como acetona y metil-  
10 etil-cetona y los hidrocarburos clorados como cloruro de metileno, percloroetileno y similares.

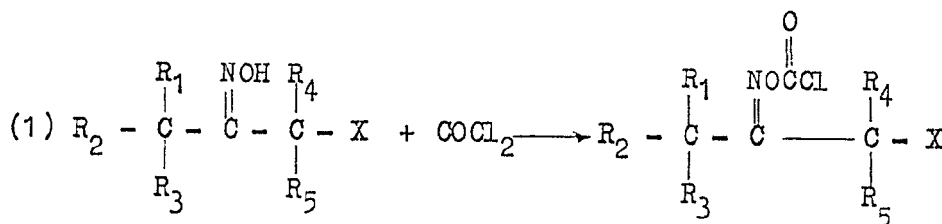
15 Preferiblemente, la reacción se lleva a cabo en presencia de 0,1 a 1,0 % en peso, calculado sobre el peso de las sustancias reaccionantes, de una amina terciaria que actúa como catalizador, tal como trietilamina, N,N-dimetilanilina o similares.

20 La relación molar de isocianato a oxima puede variar aproximadamente entre 0,1:1 y 10:1. Se prefiere una cantidad equimolecular o un ligero exceso de isocianato para asegurar la reacción completa de la oxima. Los tiempos de reacción pueden variar entre algunos minutos y varios días. Habitualmente son suficientes unos tiempos de reacción comprendidos entre  $\frac{1}{2}$  hora y 6 horas.

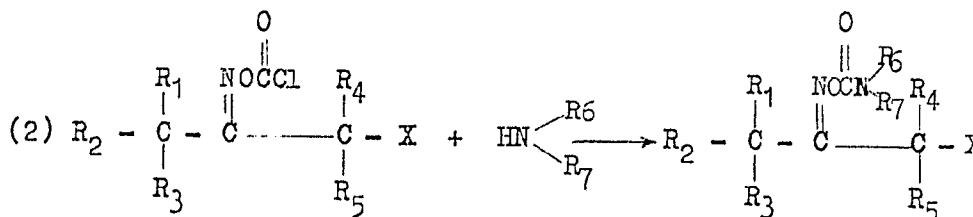
25 Un segundo método para la preparación de estos compuestos implica la reacción de una oxima con fosgeno para obtener un cloroformiato de oxima que después se hace reaccionar con una amina. Este método es ilustrado en las ecuaciones (1) y (2) dadas a continuación:



1



5



10

donde R<sub>1</sub> a R<sub>7</sub> y X son los definidos anteriormente. El método se lleva a cabo en dos etapas, siguiendo las reacciones mostradas en las ecuaciones (1) y (2).

15

En la reacción mostrada en la ecuación (1), una solución de la oxima disuelta en un disolvente inerte, como éter dietílico, se agrega lentamente a una solución de fosgeno disuelto en un disolvente inerte, en presencia de un aceptor de HCl, como una amina terciaria, v.g. N,N-dimetilanilina. La reacción se lleva a cabo a una temperatura comprendida aproximadamente entre -30°C y 100°C y preferiblemente entre 0°C y 50°C. La mezcla de reacción resultante, una solución del cloroformiato en un disolvente orgánico inerte, puede ser filtrada o lavada con agua para separar el hidrocloreuro de amina antes de ser utilizada en la reacción mostrada en la ecuación (2).

20

25

En la reacción mostrada en la ecuación (2), se agrega una amina a la solución de cloroformiato en presencia de un disolvente de la amina, tal como agua, a temperaturas comprendidas aproximadamente entre -40°C y 80°C y de preferencia entre 0°C y 40°C. Puede utilizarse un exceso de la amina superior al molar de forma que la amina actúe como

30



1 sustancia reaccionante y como aceptor de HCl y se obtenga una conversión completa del cloroformiato. Alternativamente, puede utilizarse un aceptor distinto de HCl, tal como una amina terciaria.

5 Los carbamatos líquidos o sólidos producidos por los métodos citados pueden ser recuperados de las mezclas de reacción por medios convencionales. Por ejemplo, pueden ser recuperados separando el disolvente y la amina o el iso-  
10 cianato en exceso por destilación a vacío. Aunque estos pro- ductos se obtienen en forma muy pura, pueden ser purifica- dos de nuevo, si se desea, por recristalización, destilación, cromatografía de absorción u otros procedimientos conocidos.

Las cetoximas intermedias útiles en esta invención pueden ser preparadas por procedimientos conocidos, como la  
15 reacción de una cetona con hidroxilamina en etanol acuoso. Pueden prepararse hidrocarbiloxicetonas o hidrocarbiltioce- tonas por reacción de las halocetonas con mercaptanos o al- coholes, en presencia de un aceptor de ácido, v.g. alcóxido  
20 sódico. Los compuestos ligados con grupos sulfinilo o sulfo- nilo pueden prepararse oxidando el compuesto ligado con sul- furo apropiado empleando metaperyodato sódico o peróxido de hidrógeno ácido, respectivamente.

Aunque los compuestos de esta invención pueden ser aplicados en forma no diluída a la planta o a otro material  
25 que haya de ser tratado, habitualmente es conveniente apli- car estos compuestos en mezcla con coadyuvantes pesticidas inertes, sólidos o líquidos. Por ejemplo, los compuestos pue- den ser aplicados a las plantas con fines pesticidas pulve- rizando las mismas con dispersiones acuosas o en disolventes  
30 orgánicos de los compuestos. La elección de un disolvente



1        apropiado está determinada por factores como la concentra-  
ción del ingrediente activo, la volatilidad requerida en el  
disolvente, el precio de coste de este último y la naturale-  
za del material sometido a tratamiento.

5                Los disolventes que pueden ser empleados como ve-  
hículos de estos compuestos son los hidrocarburos como ben-  
ceno, tolueno, xileno, queroseno, aceite diesel, fuel-oil,  
hidrocarburos y naftas; cetonas como acetona, metil-etil-ce-  
tona y ciclohexanona; hidrocarburos clorados como tricloro-  
10        etileno y percloroetileno; ésteres como acetato de etilo,  
acetato de amilo y acetato de butilo; éteres de etilengli-  
col como los éteres monometílicos y monoalquílicos de dieti-  
lenglicol y el éter monoetílico de propilenglicol; alcoholes  
como etanol, isopropanol, pentanoles y similares.

15                Estos compuestos también pueden ser aplicados a  
las plantas y a otros materiales en combinación con coadyu-  
vantes o vehículos sólidos inertes, como talco, pirofilita,  
atapulgita, greda, tierra de diatomeas, caolinita, montmo-  
rillonita, otros silicatos, sílice, cal, carbonato cálcico,  
20        ciertos vehículos orgánicos como harina de cáscara de nuez,  
serrín de madera, tusas de maíz molidas y similares.

              Con frecuencia es conveniente utilizar un agente  
tensoactivo en las composiciones pesticidas. Puede emplear-  
se un agente tensoactivo aniónico, no iónico o catiónico en  
25        la formulación de composiciones sólidas o líquidas. Los agen-  
tes tensoactivos típicos son alquilsulfonatos, alquilarilsul-  
fonatos, alquilsulfatos, alquilamidosulfonatos, alquilaril-  
poliéter-alcoholes, ésteres de ácidos grasos de alcoholes  
polihídricos, productos de adición con óxido de etileno de  
30        estos ésteres, productos de adición con óxido de etileno de



1 mercaptanos de cadena larga, alquilbenzosulfonatos de sodio  
conteniendo de 12 a 18 átomos de carbono, productos de adi-  
ción de óxido de etileno con alquilfenoles, tales como fe-  
nol condensado con 10 moles de óxido de etileno, cloruro de  
5 cetilpiridinio, jabones como estearato sódico y oleato só-  
dico.

Las formulaciones sólidas y líquidas pueden ser  
preparadas por cualquier método adecuado. Los ingredientes  
activos sólidos, en forma finamente dividida, pueden ser  
10 volteados junto con un vehículo sólido finamente dividido.  
Alternativamente, el ingrediente activo en forma líquida,  
como soluciones, dispersiones, emulsiones o suspensiones,  
puede ser mezclado con el vehículo sólido en forma finamen-  
te dividida, en cantidades suficientemente pequeñas para  
15 conservar la propiedad de libre fluencia de las composicio-  
nes finales en polvo fino.

Quando se utilizan formulaciones sólidas, con ob-  
jeto de obtener un alto grado de cubrimiento con una dosis  
mínima, es conveniente que la formulación se encuentre en  
20 forma de polvo finamente dividido, de finura suficiente pa-  
ra que prácticamente la totalidad de los sólidos atraviese  
un tamiz Tyler con un tamaño de malla comprendido entre 20  
y 200 aproximadamente.

En las formulaciones en polvo fino, el ingredien-  
25 te activo puede encontrarse en una proporción de 5 a 50 %  
del peso total. Sin embargo, pueden utilizarse concentracio-  
nes fuera de este intervalo y se consideran las composicio-  
nes que contienen de 1 a 99 % en peso de ingrediente activo,  
siendo el resto un vehículo y/o cualquier otro aditivo o co-  
30 adyuvante deseado. Puede ser ventajoso agregar una pequeña



1 cantidad de agente tensoactivo, v.g. de 0,5 a 1 % en peso  
calculado sobre el peso total de la formulación en polvo  
fino.

5 Para la aplicación por pulverización, el ingredien-  
te activo puede ser disuelto o dispersado en un vehículo lí-  
quido, como agua u otro líquido adecuado. El ingrediente ac-  
tivo puede ser agregado en forma de solución, suspensión,  
dispersión o emulsión, en un medio acuoso o no acuoso. Es  
conveniente la presencia en la composición líquida de 0,5  
10 a 1,0 % en peso de agente tensoactivo.

Como coadyuvante puede emplearse cualquier canti-  
dad deseada de agente tensoactivo, por ejemplo hasta el  
250 % del peso de ingrediente activo. Si el agente tensoacti-  
vo se utiliza solamente para comunicar propiedades de moja-  
do a una solución para pulverizaciones, solo es necesario  
15 utilizar un 0,05 % del peso de agente tensoactivo o menos.  
Se emplean mayores cantidades de agente tensoactivo debido  
al comportamiento biológico del mismo más que a sus propie-  
dades humectantes. Estas consideraciones son especialmente  
importantes en el tratamiento de las plantas. Con frecuencia  
20 el ingrediente activo en las formulaciones líquidas puede no  
constituir más del 30 % del peso total y puede ser el 10 %  
en peso o incluso solo el 0,01 % en peso.

Para la aplicación sistémica, puede ser conveniente  
25 aplicar el pesticida al terreno en forma de gránulos de un  
material inerte recubierto de ingrediente activo o incorpo-  
rando este último. Las razones para el uso de gránulos pes-  
ticidas son la eliminación del agua durante la aplicación,  
la reducción del arrastre por el aire, la penetración a tra-  
vés de las capas de vegetación, la facilidad de manipulación  
30



1 y de almacenamiento y la mayor seguridad para los manipula-  
dores de los pesticidas. Son materiales de base útiles pa-  
ra los gránulos la atapulgita, montmorillonita, tusas de  
5 maiz, cáscaras de nuez y vermiculitas expandidas. Según  
sus propiedades físicas, los pesticidas son pulverizados  
directamente sobre la base granulada previamente formada  
o son disueltos en un disolvente adecuado y después pulve-  
rizados sobre la base granulada, después de lo cual el di-  
solvente se elimina por evaporación. Los materiales de base  
10 de los gránulos tienen habitualmente un tamaño de partícu-  
la comprendido entre 60 y 14 mallas de las normas de tam-  
ices estadounidenses, aunque también pueden emplearse otros  
tamaños de partícula.

El término "pesticida" en el sentido utilizado  
15 aquí se refiere a la destrucción y/o control de los inse-  
tos, ácaros, nematodos o similares. Se observará que en el  
empleo de este término se incluyen las aplicaciones común-  
mente denominadas insecticidas, acaricidas, nematocidas o  
similares. Para una mejor comprensión de la naturaleza y  
20 objetos de esta invención, remitimos a los siguientes ejem-  
plos que se incluyen para ilustrar el invento y no como li-  
mitativos del mismo. El espectro infrarrojo de cada produ-  
to descrito aquí concuerda con la estructura atribuida. To-  
dos los porcentajes, proporciones y cantidades dados en es-  
25 tos ejemplos son en peso salvo indicación en contrario. Aná-  
logamente, todas las referencias a las temperaturas son co-  
mo °C salvo indicación en contrario.

EJEMPLO 1

3,3-Dimetil-1-terc-butiltio-2-butanona (compuesto 7569)

30 A una solución de 5,8 g (0,25 moles) de sodio me-



1           tálico en 175 ml de etanol absoluto se añaden gota a gota  
24,4 g (0,27 moles) de 2-metil-2-propanotiol. La solución  
agitada se calienta durante 20 minutos, se enfría y se tra  
ta gota a gota con 44,8 g (0,25 moles) de 1-bromopinacolo-  
5           na, preparada por el procedimiento de J.Am.Chem.Soc., 74,  
4507 (1952). Esta mezcla de reacción se calienta a reflujo  
durante 20 minutos, se enfría y se vierte sobre 200 g de  
una mezcla de hielo y agua. Después de saturarla con cloru  
ro sódico, la mezcla se extrae con cuatro porciones de  
10           éter. Los extractos etéreos combinados se secan sobre sul-  
fato magnésico anhidro, se filtran y se evapora el disolven  
te. Por destilación del residuo a través de una columna  
Vigreux corta se obtiene el producto deseado. Las propie-  
dades de este compuesto y otros compuestos similares pre-  
parados prácticamente por el mismo procedimiento, emplean-  
15           do los mercaptanos y las  $\alpha$ -halocetonas apropiadas, se en-  
cuentran en las Tablas I y II.

EJEMPLO 2

Oxima de 3,3-dimetil-1-terc-butiltio-2-butanona (compues-  
to 7604)

20           Una solución de 27 g (0,14 moles) de 3,3-dimetil-  
1-terc-butiltio-2-butanona, 19,5 g (0,28 moles) de hidro-  
cloruro de hidroxilamina y 14,8 g (0,14 moles) de carbona-  
to sódico anhidro en una mezcla de 200 ml de etanol al 95 %  
25           y 110 ml de agua se calienta a reflujo durante 19,5 horas.  
Por evaporación de las sustancias volátiles en un evapora-  
dor rotatorio se obtiene una papilla que se filtra para ob-  
tener la oxima sólida blanca producida. Las propiedades de  
este compuesto y otros compuestos afines preparados prácti-  
camente por el mismo procedimiento se encuentran en las Ta-  
30

**POOR  
QUALITY**



1 blas III y IV. Cuando la oxima producida es un líquido,  
el aislamiento se realiza por extracción con acetato de  
etilo del residuo que queda después de separar las sustan-  
cias volátiles y destilación posterior del extracto secado.

5

EJEMPLO 3

Preparación del carbamato - Método A

3,3-Dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-terc-butiltiobutano

(Compuesto 7619)

10 Se calienta a reflujo durante 16,5 horas una solu-  
ción de 4,7 g (0,023 moles) de oxima de 3,3-dimetil-1-terc-  
butiltio-2-butanona, 1,4 g (0,025 moles) de isocianato de  
metilo y 3 gotas de trietilamina en 35 ml de éter anhidro.  
Por evaporación de las sustancias volátiles en un evapora-  
dor rotatorio se obtiene el producto deseado en forma de  
15 sólido blanco. Las propiedades de este compuesto y otros  
compuestos análogos preparados prácticamente por el mismo  
procedimiento se encuentran en las Tablas V y VI.

EJEMPLO 4

Preparación del carbamato - Método B

20 2-Carbamiloximino-3,3-dimetil-1-metiltiobutano (Compues-  
to 7859)

A una solución enfriada de 5,4 g (0,055 moles) de  
fosgenic en 50 ml de éter anhidro se añaden gota a gota  
6,1 g (0,05 moles) de N,N-dimetilanilina, seguido de una so-  
25 lución de 8,1 g (0,05 moles) de oxima de 3,3-dimetil-1-me-  
tiltio-2-butanona en 50 ml de éter. La mezcla se agita du-  
rante 2 horas, con lo que se deja que alcance la temperatu-  
ra ambiente, y después se filtra. El filtrado enfriado se  
trata durante 15 minutos con 10 ml (0,15 moles) de amoniaco  
30 acuoso al 29 %. Después de agitar durante 15 minutos más,



1 se separa la capa orgánica, se lava con agua y se seca.  
Por evaporación del disolvente de la capa orgánica seca se  
obtienen 10,1 g de un residuo líquido transparente que so-  
lidifica al permanecer en reposo. Las propiedades de este  
5 compuesto y otros compuestos análogos preparados práctica-  
mente por el mismo procedimiento se encuentran en las Ta-  
blas V y VI.

EJEMPLO 5

Preparación del carbamato - Método C

10 3,3-Dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(1-pirrolidinil)buta-  
no (Compuesto 7870)

A una solución de 12,6 g de 1-bromo-3,3-dimetil-  
2-metilcarbamiloximinobutano en 100 ml de éter anhidro se  
añaden gota a gota 7,8 g (0,11 moles) de pirrolidina. La  
15 mezcla se agita a la temperatura ambiente durante 1 hora y  
a reflujo durante media hora y después se enfría y se lava  
con agua. Se separa la solución etérea, se seca y se evapo-  
ra el disolvente para dar 11,8 g de un aceite ambarino que  
solidifica al permanecer en reposo dando un sólido ámbar,  
20 p.f. 43-46°C. Las propiedades de este compuesto y otros com-  
puestos análogos preparados prácticamente por el mismo pro-  
cedimiento se encuentran en las Tablas V y VI.

EJEMPLO 6

Oxima de 1-bromo-3,3-dimetil-2-butanona (Compuesto 7666)

25 Una solución de 69,5 g (1,0 moles) de hidrocloru-  
ro de hidroxilamina en 100 ml de agua se enfría en un baño  
de hielo a medida que se añaden 90 g (0,5 moles) de 1-bro-  
mo-3,3-dimetil-2-butanona. Después de añadir 100 ml de eta-  
nol al 95 %, la mezcla se agita durante 16 horas y se deja  
30 calentar a la temperatura ambiente. La suspensión blanca



1 resultante se filtra y el sólido se lava con agua y se se-  
ca para dar 55 g del compuesto deseado, p.f. 111-112°C.

Análisis para  $C_6H_{12}NBrO$ :

Calculado : N, 7,2 %; Br, 41,2 %

5 Encontrado: N, 7,1 %; Br, 42,4 %.

EJEMPLO 7

Oxima de 3,3-dimetil-1-nitro-2-butanona (Compuesto 7668)

10 A una solución agitada de 18,2 g (0,26 moles) de  
nitrito sódico en 130 ml de dimetilsulfóxido se añaden po-  
co a poco 29,0 g (0,15 moles) de oxima de 1-bromo-3,3-di-  
metil-2-butanona. Se produce una reacción suavemente exotér-  
mica y se emplea refrigeración externa para mantener la tem-  
peratura por debajo de 27°C. Se añade disolvente adicional  
15 para mantener la posibilidad de agitar. Después de 20 horas  
de agitación, la mezcla se vierte sobre hielo y agua para  
dar un sólido que se recoge en un filtro. Los 10 g de sólido,  
p.f. 115-120°C, así obtenidos se recristalizan en una  
mezcla caliente de benceno y éter de petróleo para dar 7 g  
de cristales blancos, p.f. 124-125°C.

20 Análisis para  $C_6H_{12}N_2O_3$ :

Calculado : C, 45,0 %; H, 7,6 %

Encontrado: C, 45,2 %; H, 7,8 %

EJEMPLO 8

3,3-Dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metilsulfinilbutano

25 (Compuesto 7804)

Una mezcla agitada de 9,0 g (0,042 moles) de meta-  
peroxydato sódico en 60 ml de agua y 25 ml de metanol se  
enfria a 0°C a medida que se añaden poco a poco 8,7 g  
(0,04 moles) de 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metil-  
30 tiobutano. Después de agitar a 0-10°C durante 18 horas, la



1 mezcla se deja calentar a la temperatura ambiente y se eva-  
poran las sustancias volátiles en un evaporador rotatorio  
para dar un residuo que se extrae con acetato de etilo. El  
extracto seco se evapora para dar 9 g (96 %) de un aceite  
5 amarillo viscoso que es el compuesto deseado.

Análisis para  $C_9H_{18}N_2O_3S$ : \_ \_

Calculado : C, 46,1 %; H, 7,7 %

Encontrado: C, 45,2 %; H, 7,5 %

EJEMPLO 9

10 2,2-Dimetil-3-metilcarbamiloximino-4-metiltiopentano (Com-  
puesto 8071)

A una solución de tiometóxido sódico, preparada a  
partir de 4,1 g (0,18 átomos-gramo) de sodio, 8,7 g (0,21  
moles) de metanotiol y 110 ml de etanol, se añaden 34,5 g  
15 (0,18 moles) de 4-bromo-2,2-dimetil-3-pentanona, a lo largo  
de 25 minutos, a una temperatura de  $0 \pm 5^\circ C$ . Después de ca-  
lentar a  $40-45^\circ C$  durante 30 minutos, se filtra la solución,  
se evapora el disolvente y se destila para dar 12 g (42 %)  
de un líquido incoloro que hierve a  $57^\circ C/4,3$  mm,  $n_D^{25} 1,4589$ .

20 Análisis para  $C_8H_{16}OS$ :

Calculado : C, 59,9 %; H, 10,1 %

Encontrado: C, 59,2 %; H, 10,1 %

Se calientan a reflujo durante 120 horas 7 g  
(0,044 moles) de este compuesto y 18 g (0,26 moles) de hi-  
25 drocloruro de hidroxilamina en 150 ml de etanol absoluto  
conteniendo 30 ml de piridina. Vertiendo la solución trans-  
parente en agua de hielo se obtiene un sólido que se recoge  
y seca. Este sólido blanco, p.f.  $128-129^\circ C$ , es el compuesto  
deseado, oxima de 2,2-dimetil-4-metiltio-3-pentanona.

30 Análisis para  $C_8H_{17}NOS$ :



1                    Calculado : C, 54,8 %; H, 9,8 %; N, 8,0 %  
                     Encontrado: C, 54,3 %; H, 9,4 %; N, 7,8 %

5                    Se calienta a reflujo durante 17 horas una solu-  
                     ción de 4,6 g (0,026 moles) de esta oxima, 1,7 g (0,029 mo-  
                     les) de isocianato de metilo y 3 gotas de trietilamina en  
                     60 ml de benceno. Por evaporación de las sustancias voláti-  
                     les se obtienen 6,2 g de residuo sólido, p.f. 93-94°C, que  
                     es el compuesto deseado.

10                    Análisis para  $C_{10}H_{20}N_2O_2S$ :  
                     Calculado : C, 51,7 %; H, 8,7 %; N, 12,1 %  
                     Encontrado: C, 51,6 %; H, 8,5 %; N, 12,1 %

EJEMPLO 10

4,4-Dimetil-3-metilcarbamiloximino-1-metiltiopentano (Com-  
                     puesto 8111)

15                    Una solución de tiometóxido sódico, preparada a  
                     partir de 5,8 g (0,25 átomos-gramo) de sodio, 13,5 g (0,28  
                     moles) de metanotiol y 170 ml de etanol absoluto, se trata  
                     con 36,6 g (0,25 moles) de 1-cloro-4,4-dimetil-3-pentanona  
                     a -3°-8°C, durante 30 minutos. Después de calentarla a 40-  
20                    45°C durante 45 minutos, la mezcla se filtra y se destila  
                     para dar 12 g de un líquido incoloro que hierve a 73°C/2 mm,  
                      $n_D^{24}$  1,4623.

25                    Análisis para  $C_8H_{16}OS$ :  
                     Calculado : C, 59,9 %; H, 10,1 %  
                     Encontrado: C, 60,1 %; H, 10,0 %

30                    Se calienta a reflujo durante 48 horas una solu-  
                     ción de 22,5 g (0,14 moles) de esta cetona y 58,4 g (0,84  
                     moles) de hidrocloruro de hidroxilamina en 525 ml de etanol  
                     absoluto y 105 ml de piridina. Vertiendo la mezcla de reaco-  
                     ción en agua de hule se obtienen 17,8 g de un sólido blan-

POOR  
QUALITY



1 co, p.f. 84°C, que es la oxima de 4,4-dimetil-1-metiltio-3-pentanona deseada.

Análisis para  $C_8H_{17}NOS$ :

Calculado : N, 8,0 %

5 Encontrado: N, 8,1 %

Calentando a reflujo una solución de 5,3 g (0,03 moles) de esta oxima, 1,9 g (0,033 moles) de isocianato de metilo y 3 gotas de trietilamina en 50 ml de éter anhidro, se obtienen, después de evaporar las sustancias volátiles, 10 7,6 g de un residuo sólido blanco, p.f. 56-58°C, que es el compuesto deseado.

Análisis para  $C_{10}H_{20}N_2O_2S$ :

Calculado : C, 51,7 %; H, 8,7 %; N, 12,1 %

Encontrado: C, 51,6 %; H, 8,5 %; N, 12,5 %

15 EJEMPLO 11

1-Ciclohexil-1-metilcarbamiloximine-2-metiltioetano (Com-  
puesto 8169)

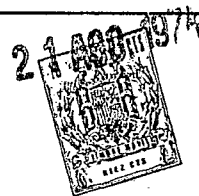
A una solución de 10,8 g (0,47 moles) de sodio en 330 ml de etanol absoluto se añaden 25 g (0,52 moles) de metanotiol seguido de 76 g (0,47 moles) de cloroacetilciclohexano. Ambas adiciones se realizan a unos 0°C. Después de calentar a 40-45°C durante 1 hora, la mezcla de reacción se filtra, se evapora y se destila para dar 29,8 g de un líquido incoloro, p.e. 88-89°C/0,6-1,3 mm,  $n_D^{24}$  1,4970, la cetona deseada. 25

Análisis para  $C_9H_{16}OS$ :

Calculado : C, 62,7 %; H, 9,4 %

Encontrado: C, 63,0 %; H, 8,6 %

30 Se calienta a reflujo durante 41 horas una solución de 26 g (0,15 moles) de 1-metiltioacetilciclohexano,



1 21 g (0,3 moles) de hidrocioruro de hidroxilamina y 16 g  
(0,15 moles) de carbonato sódico anhidro en 155 ml de eta-  
nol al 95 % y 104 ml de agua. Por evaporación de las sustan-  
cias volátiles se obtienen 18 g de un sólido, p.f. 63-64°C,  
5 que es la oxima deseada.

Análisis para  $C_9H_{17}NO$ :

Calculado : C, 57,7 %; H, 9,2 %; N, 7,5 %

Encontrado: C, 57,5 %; H, 9,0 %; N, 7,4 %

10 Calentando una solución de 5,6 g (0,03 moles) de  
esta oxima, 1,9 g (0,033 moles) de isocianato de metilo y  
3 gotas de trietilamina en 50 ml de éter absoluto, a reflu-  
jo durante 17 horas, se obtiene, después de separar las sus-  
tancias volátiles, 7,3 g de un sólido que se recristaliza en  
etanol-agua para obtener un sólido blanco, p.f. 70-71°C, que  
15 es el compuesto deseado.

Análisis para  $C_{11}H_{20}N_2O_2S$ :

Calculado : C, 54,1 %; H, 8,3 %; N, 11,5 %

Encontrado: C, 54,2 %; H, 8,3 %; N, 11,7 %

EJEMPLO 12

20 1-Metilcarbamiloximino-1-(1-metilciclohexil)-2-metiltioeta-  
no (Compuesto 8179)

Se prepara 1-(metiltioacetil)-1-metilciclohexano  
tratando una solución de tiometóxido sódico [obtenida a par-  
tir de 3 g (0,13 átomos-gramo) de sodio, 6,7 g (0,14 moles)  
25 de metarsotol y 95 ml de etanol absoluto] con 22,5 g (0,13  
moles) de 1-cloroacetil-1-metilciclohexano, durante 20 minu-  
tos a 4°C. Después de calentar a 40-45°C durante 1 hora,  
se filtra la mezcla de reacción y se destila para dar 7 g  
de un líquido incoloro, p.e. 86-87°C/0,8 mm,  $n_D^{24}$  1,4954.

30 Análisis para  $C_{10}H_{18}OS$ :



1                   Calculado : C, 64,5 %; H, 9,7 %

                  Encontrado: C, 64,0 %; H, 9,6 %

                  Esta cetona se convierte en la oxima calentando una solución de 5 g (0,027 moles) de cetona, 3,8 g (0,054 moles) de hidrocloreuro de hidroxilamina y 3 g (0,027 moles) de carbonato sódico anhidro en 30 ml de etanol al 95 % y 26 ml de agua, durante 95 horas. De la solución resultante se evaporan las sustancias volátiles para dar un residuo líquido en dos capas, que se extrae con acetato de etilo. La capa orgánica, se seca, se filtra y se evapora para dar 3,4 g de un líquido ambarino,  $n_D^{24}$  1,5164.

                  Análisis para  $C_{10}H_{19}NOS$ :

                  Calculado : C, 59,7 %; H, 9,5 %; N, 7,0 %

                  Encontrado: C, 59,8 %; H, 9,5 %; N, 7,0 %

15                   Se calienta a reflujo durante 16 horas una solución de 2,2 g (0,011 moles) de esta oxima, 0,7 g (0,012 moles) de isocianato de metilo y 3 gotas de trietilamina en 25 ml de éter anhidro. Por evaporación de las sustancias volátiles se obtienen 3,5 g de un líquido ambarino viscoso,  $n_D^{25}$  1,5200, que es el compuesto deseado.

                  Análisis para  $C_{12}H_{22}N_2O_2S$ :

                  Calculado : C, 55,8 %; H, 8,6 %

                  Encontrado: C, 55,7 %; H, 8,6 %

EJEMPLO 13

25                   1-(1-Adamantil)-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano

(Compuesto 8191)

                  Se calienta a reflujo durante 29 horas una solución de 4 g (0,018 moles) de 1-metiltioacetiladamantano, 2,5 g (0,036 moles) de hidrocloreuro de hidroxilamina y 1,9 g (0,018 moles) de carbonato sódico anhidro en 20 ml de etanol



1 al 95 % y 18 ml de agua. Por evaporación de las sustancias volátiles se obtiene una suspensión que se filtra para obtener 4,2 g de la oxima en forma de sólido blanco, p.f. 100-103°C.

5 Análisis para  $C_{13}H_4NOS$ :

Calculado : C, 65,2 %; H, 8,8 %; N, 5,9 %

Encontrado: C, 65,5 %; H, 8,8 %; N, 5,6 %

10 Se calienta a reflujo durante 17 horas una solución de 3 g (0,013 moles) de esta oxima, 0,8 g (0,014 moles) de isocianato de metilo y 3 gotas de trietilamina en 50 ml de éter anhidro. Por evaporación de las sustancias volátiles se obtienen 3,9 g de un sólido blanco, p.f. 99-100°C, que es el compuesto deseado.

15 Análisis para  $C_{15}H_{24}N_2O_2S$ :

Calculado : C, 60,8 %; H, 8,2 %; N, 9,5 %

Encontrado: C, 60,2 %; H, 8,1 %; N, 9,5 %

EJEMPLO 14

1-Cloro-4,4-dimetil-2-metilcarbamiloximinopentano (Compuesto 8108)

20 A una mezcla agitada y enfriada de 20,2 g (0,29 moles) de hidrocloreuro de hidroxilamina en 30 ml de agua se añaden 21,5 g (0,145 moles) de 1-cloro-4,4-dimetil-2-pentona, seguido de 30 ml de etanol al 95 %. La mezcla enfriada se agita durante 6 horas, se deja en reposo durante la  
25 noche y se separan los volátiles por evaporación para obtener un residuo que se extrae con acetato de etilo. Este extracto se seca, se evapora y se destila para dar un líquido incoloro, p.e. 76-77°C/1,3 mm,  $n_D^{24}$  1,4672, que es la oxima deseada.

30 Análisis para  $C_7H_{16}ClNO$ :



1                   Calculado : C, 51,4 %; H, 8,6 %; N, 8,6 %

                  Encontrado: C, 50,7 %; H, 8,4 %; N, 8,1 %

                  Se calienta a reflujo durante 17 horas una solu-  
ción de 7 g (0,043 moles) de la oxima anterior, 2,7 g (0,047  
5                   moles) de isocianato de metilo y 3 gotas de trietilamina en  
50 ml de éter anhidro. Por evaporación de las sustancias vo-  
látiles se obtiene el carbamato deseado en forma de líquido  
viscoso e incoloro,  $n_D^{24}$  1,4802.

                  Análisis para  $C_9H_{17}ClN_2O_2$ :

10                   Calculado : N, 12,7 %

                  Encontrado: N, 12,8 %

EJEMPLO 14A

3,3-Dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metilsulfoniloxibutano

(Compuesto 9350)

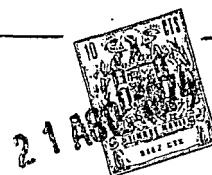
15                   Una solución de 7,5 g (0,04 moles) de 1-hidroxi-  
3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano y 5,0 g (0,044 mo-  
les) de cloruro de metanosulfonilo en 50 ml de benceno se  
trata gota a gota con 4,6 g (0,044 moles) de trietilamina,  
enfriando para mantener la temperatura por debajo de 35°C.  
20                   Después de la adición, la mezcla agitada se calienta a 35°C  
durante 2 horas y a continuación se lava con solución acuosa  
de bicarbonato sódico y con agua. La capa orgánica se se-  
ca sobre sulfato magnésico, se filtra y se evaporan las sus-  
tancias volátiles para dar 6,7 g (63 %) de un residuo líqui-  
do amarillento viscoso,  $n_D^{25}$  1,4810.

                  Análisis para  $C_9H_{18}N_2O_2S$ :

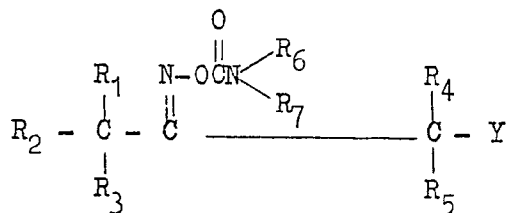
                  Calculado : C, 40,6 %; H, 6,8 %; N, 10,5 %

                  Encontrado: C, 41,2 %; H, 6,8 %; N, 10,5 %

30                   El Ejemplo 5 describe el Método C para preparar  
estas composiciones, en el que un compuesto de fórmula



1



5

con un radical halógeno reactivo Y, tal como cloro o bromo, se hace reaccionar con HX donde X es el definido anteriormente, en presencia de un aceptor de HY. La Tabla VI contiene otras composiciones preparadas por el Método C.

10

TABLA I

CETONAS

Compuesto número	Nombre químico
7218	3,3-dimetil-1-metiltio-2-butanona
7443	1-carbometoximetiltio-3,3-dimetil-2-butanona
7533	1-metiltio-2-propanona
15 7557	3-metil-3-metiltio-2-butanona
7558	1-isopropiltio-3,3-dimetil-2-butanona
7569	3,3-dimetil-1-terobutiltio-2-butanona
7572	1-isobutiltio-3,3-dimetil-2-butanona
20 7573	1-aliltio-3,3-dimetil-2-butanona
7637	1-benciltio-3,3-dimetil-2-butanona
7665	3,3-dimetil-1-feniltio-2-butanona
7667	1,3-bis(metiltio)-3-metil-2-butanona
7765	3,3-dimetil-1-fenoxi-2-butanona
25 7807	1,3-bis(metiltio)-2-propanona
7837	3-metil-1-metiltio-2-butanona
7838	3,3-dimetil-1-n-propiltio-2-butanona
7860	1-etiltio-3,3-dimetil-2-butanona
7900	1-metiltio-2-butanona
30 7909	3,3-dimetil-1-metiltio-2-hexanona



TABLA I (continuación)

Compuesto número	Nombre químico
7965	4,4-dimetil-1-metiltio-3-pentanona
8059	1-cloro-4,4-dimetil-2-pentanona
5 8126	1-metil-1-(metiltioacetil)-ciclohexano
8127	metiltioacetilciclohexano
8373	metiltioacetilciclopropano
8504	4,4-dimetil-1-metiltio-2-pentanona
9011	4-metil-1-metiltio-2-pentanona
10 9061	1-metiltio-2-pentanona
9274	1,1-bis(metiltio)-3,3-dimetil-2-butanona
9275	1-(2-etiltioetiltio)-3,3-dimetil-2-butanona
9278	1-metoxi-3,3-dimetil-2-butanona
15 9380	1-(3,3,3-trifluorpropiltio)-3,3-dimetil-2-butanona
9382	1-(3,3,3-tricloropropil)-3,3-dimetil-2-butanona
9383	3,3-dimetil-1-(2-feniletiltio)-2-butanona
9385	3,3-dimetil-1-propargiltio-2-butanona.
20	-
	-
	-
25	-
	-
	-
30	-

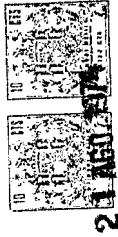
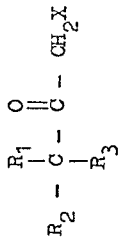


TABLA II



Compuesto n.º	Intervalo de ebullición en O C/mm Hg.				Indice de refracción/20	Rendimiento %	Análisis	
	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	X			Calculado	Encontrado
7218	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	1,4650/24	62	C 52,9 H 7,9	C 52,6 H 7,5
7443	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> OCOCH <sub>2</sub> S-	94/0,8	64	C 46,1 H 7,7	C 46,9 H 7,9
7533	H-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	63-4/29	45	C 54,5 H 9,2	C 54,2 H 9,2
7557	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	H-	48/8,1	57	C 62,0 H 10,4	C 61,8 H 10,2
7558	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHS-	96/8,9	68	C 63,8 H 10,7	C 63,6 H 10,6
7569	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CS-	84-92/9,8	67	C 63,8 H 10,7	C 63,1 H 10,8
7572	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> S-	101/9,8	62	C 62,7 H 9,4	C 62,8 H 9,1
7573	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	58-9/1,2	24	C 70,2 H 8,2	C 70,9 H 9,0
7637	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> S-	104,5-106/0,5-0,6	57	C 69,2 H 7,7	C 70,0 H 7,7
7665	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> S-	102/0,5	38	C 47,2 H 7,9	C 46,8 H 7,8
7667	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> S-	91-5/3,9	56	-	-
7765 (a)	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-	106-8/1,8	72	C 54,6 H 9,1	C 54,9 H 9,7
7807 (b)	CH <sub>3</sub> S-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	108/9,5	27	C 62,0 H 10,4	C 61,7 H 10,3
7837	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	61/8	48	-	-
7838	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	49/0,3	50	-	-
7860	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S-	58/2,1	55	C 50,8 H 8,5	C 50,7 H 8,5
7900	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	50/5	-	-	-
7909	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	59/0,2	-	C 62,0 H 10,4	C 62,3 H 10,7

1

5

10

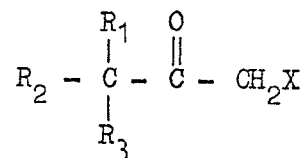
15

20

25

30

TABLA II



	Compues to núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	X	Intervalo de ebullición en °C/mm Hg	Indic refrac
1	7218	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	73/9,3	1,4650
	7443	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> OCOCH <sub>2</sub> S-	94/0,8	1,4720
5	7533	H-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	63-4/29	1,4691
10	7557	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	H-	48/8,1	1,4625
	7558	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHS-	96/8,9	1,4568
	7569	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CS-	84-92/9,8	1,4595
15	7572	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> S-	101/9,8	1,4592
	7573	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	58-9/1,2	1,4762
	7637	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> S-	104,5-106/0,5-0,6	1,5306
	7665	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> S-	102/0,5	1,5425
20	7667	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> S-	91-5/3,9	1,5138
	7765 <sup>(a)</sup>	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-	106-8/1,8	1,5036
	7807 <sup>(b)</sup>	CH <sub>3</sub> S-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	108/9,5	1,5302
	7837	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	61/8	-
25	7838	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	49/0,3	1,4617
	7860	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S-	58/2,1	1,4609
	7900	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	50/5	-
30	7909	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	59/0,2	-

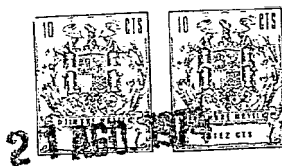
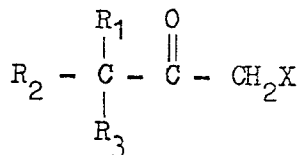


TABLA II



Intervalo de ebullición en °C/mm Hg	Indice de refracción/°C	Rendimiento %	Análisis	
			Calculado	Encontrado
73/9,3	1,4650/24	62		
94/0,8	1,4720/24	64	C 52,9 H 7,9	C 52,6 H 7,5
63-4/29	1,4691/24	45	C 46,1 H 7,7	C 46,9 H 7,9
48/8,1	1,4625/24	57	C 54,5 H 9,2	C 54,2 H 9,2
96/8,9	1,4568/24	68	C 62,0 H 10,4	C 61,8 H 10,2
84-92/9,8	1,4595/24	67	C 63,8 H 10,7	C 63,6 H 10,6
101/9,8	1,4592/24	62	C 63,8 H 10,7	C 63,1 H 10,8
58-9/1,2	1,4762/24	24	C 62,7 H 9,4	C 62,8 H 9,1
104,5-106/0,5-0,6	1,5306/24	57	C 70,2 H 8,2	C 70,9 H 9,0
102/0,5	1,5425/24	38	C 69,2 H 7,7	C 70,0 H 7,7
91-5/3,9	1,5138/23	56	C 47,2 H 7,9	C 46,8 H 7,8
106-8/1,8	1,5036/23	72	-	-
108/9,5	1,5302/24	27	-	-
61/8	-	48	C 54,6 H 9,1	C 54,9 H 9,7
49/0,3	1,4617/24	50	C 62,0 H 10,4	C 61,7 H 10,3
58/2,1	1,4609/25	55	-	-
50/5	-	-	C 50,8 H 8,5	C 50,7 H 8,5
59/0,2	-	-	C 62,0 H 10,4	C 62,3 H 10,7



TABLA II (continuación)

Compués to. núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	X	Intervalo de ebullición en °C/mm Hg	Índice de refracción <sub>D</sub> <sup>20</sup>	Rendimiento %	Análisis	
								Calculado	Encontrado
7965	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> -	70/1,6	1,4623/24,5	30	C 59,9 H 10,1	C 60,1 H 10,0
8059	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	Cl-	63-5/10	1,4347/24,5	76	C 57,4 H 8,7	C 56,6 H 8,8
8126	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	86-7/0,8	1,4954/24	29	C 64,5 H 9,6	C 64,0 H 9,6
8127	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> S-	88-9/0,6	1,4970/24	37	C 62,7 H 9,4	C 63,0 H 8,6
8373	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	71-4/7,8	1,4980/22,5	71	C 55,4 H 7,7	C 55,6 7,9
8504	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	68/4,8	1,4600/22	66	C 59,9 H 10,0	C 59,0 H 9,8
9011	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	81/9,3	1,4610/23	76		(c)
9061	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	72/7,8	1,4645/22	78	C 54,5 H 9,2	C 53,3 H 8,9
9274	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(e)	(f)	-	-	C 50,0 H 8,4	C 49,7 H 8,4
9275	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	110/0,3	1,5025/24	65	C 54,8 H 8,7	C 54,6 H 9,2
9278 <sup>(d)</sup>	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> O-	78/47	1,4136/23	57	C 64,5 H 10,8	C 64,3 H 10,8
9380	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CF <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	60/0,08	1,4253/24	40	C 47,4 H 6,6	C 47,6 H 6,6
9382	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	Cl <sub>3</sub> COCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	113/0,1	1,5055/24	39	C 40,0 H 5,4	C 40,2 H 5,5
9383	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	128/0,06	1,5300/24	61	C 71,2 H 8,5	C 71,1 H 8,4
9385	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	HC≡CCH <sub>2</sub> S-	72/0,08	1,5112/24	14	C 63,5 H 8,2	C 63,3 H 8,2

(a) J. Am. Chem. Soc., 77, 3272 (1955)

(b) Arkivi Kemi, 5, 533 (1953) and CA 48: 9321 (1954)

(c) Ann. 672, 156 (1964)

(d) J. Am. Chem. Soc., 72, 5161 (1950)

(e) X<sub>2</sub> = (CH<sub>3</sub>S-)<sub>2</sub>

(f) p. f. = 50-51°

TABLA II (continua)

Compues to núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	X	Intervalo de ebullición en °C/mm Hg	Indice refra.
7965	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> -	70/1,6	1,46
8059	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	Cl-	63-5/10	1,43
8126	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	86-7/0,8	1,49
8127	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	88-9/0,6	1,49
8373	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	71-4/7,8	1,49
8504	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	68/4,8	1,46
9011	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	81/9,3	1,46
9061	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	72/7,8	1,46
9274	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(e)	(f)	
9275	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	110/0,3	1,50
9278 <sup>(a)</sup>	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> O-	78/47	1,41
9380	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CF <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	60/0,08	1,42
9382	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	Cl <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	113/0,1	1,50
9383	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	128/0,06	1,53
9385	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	HC≡CCH <sub>2</sub> S-	72/0,08	1,51
(a)	J. Am. Chem. Soc., <u>77</u> , 3272 (1955)					
(b)	Arkivi Kemi, <u>5</u> , 533 (1953) and CA 48: 9321 (1954)					
(c)	Ann. <u>672</u> , 156 (1964)					
(d)	J. Am. Chem. Soc., <u>72</u> , 5161 (1950)					
(e)	X <sub>2</sub> = (CH <sub>3</sub> S-) <sub>2</sub>					
(f)	p. f. = 50-51°					



TABLA II (continuación)

Intervalo de ebullición en °C/mm Hg	Índice de refracción/°C	Rendimiento %	Análisis	
			Calculado	Encontrado
70/1,6	1,4623/24,5	30	C 59,9 H 10,1	C 60,1 H 10,0
63-5/10	1,4347/24,5	76	C 57,4 H 8,7	C 56,6 H 8,8
86-7/0,8	1,4954/24	29	C 64,5 H 9,6	C 64,0 H 9,6
88-9/0,6	1,4970/24	37	C 62,7 H 9,4	C 63,0 H 8,6
71-4/7,8	1,4980/22,5	71	C 55,4 H 7,7	C 55,6 7,9
68/4,8	1,4600/22	66	C 59,9 H 10,0	C 59,0 H 9,8
81/9,3	1,4610/23	76		(c)
72/7,8	1,4645/22	78	C 54,5 H 9,2	C 53,3 H 8,9
(f)	-	-	C 50,0 H 8,4	C 49,7 H 8,4
110/0,3	1,5025/24	65	C 54,8 H 8,7	C 54,6 H 9,2
78/47	1,4136/23	57	C 64,5 H 10,8	C 64,3 H 10,8
60/0,08	1,4253/24	40	C 47,4 H 6,6	C 47,6 H 6,6
113/0,1	1,5055/24	39	C 40,0 H 5,4	C 40,2 H 5,5
128/0,06	1,5300/24	61	C 71,2 H 8,5	C 71,1 H 8,4
72/0,08	1,5112/24	14	C 63,5 H 8,2	C 63,3 H 8,2



1

TABLA III

OXIMAS

	<u>Compuesto número</u>	<u>Nombre químico</u>
	7252	Oxima de 3,3-dimetil-1-metiltio-2-butanona
5	7470	Oxima de 1-carbometoximetiltio-3,3-dimetil-2-butanona
	7575	Oxima de 3-metil-3-metiltio-2-butanona
	7578	Oxima de 1-metiltio-2-propanona
10	7604	Oxima de 3,3-dimetil-1-terc-butiltio-2-butanona
	7605	Oxima de 1-isopropiltio-3,3-dimetil-2-butanona
	7618	Oxima de 1-isobutiltio-3,3-dimetil-2-butanona
	7682	Oxima de 1-benciltio-3,3-dimetil-2-butanona
	7711	Oxima de 3,3-dimetil-1-feniltio-2-butanona
15	7796	Oxima de 3,3-dimetil-1-fenoxi-2-butanona
	7820	Oxima de 1,3-bis(metiltio)-2-propanona
	7858	Oxima de 1-hidroxi-3,3-dimetil-2-butanona
	7861	Oxima de 1-etiltio-3,3-dimetil-2-butanona
	7896	Oxima de 3,3-dimetil-1-n-propiltio-2-butanona
20	7898	Oxima de 1-aliltio-3,3-dimetil-2-butanona
	7917	Oxima de 1-metiltio-2-butanona
	7925	Oxima de 3,3-dimetil-1-metiltio-2-hexanona
	7946	Oxima de 1,3-bis(metiltio)-3-metil-2-butanona
	8077	Oxima de 1-cloro-4,4-dimetil-2-butanona
25	8109	Oxima de 4,4-dimetil-1-metiltio-3-pentanona
	8145	Oxima de metiltioacetilciclohexano
	8154	Oxima de 1-metil-1-(metiltioacetil)-ciclohexano
	8358	Oxima de 1-cloro-3,3-dimetil-2-butanona
	8420	Oxima de metiltioacetilciclopropano
30	8424	Oxima de 1,1-etilenditio-3,3-dimetil-2-butanona



TABLA III (continuación)

Compuesto número	Nombre químico
1	8507 Oxima de 4,4-dimetil-1-metiltio-2-pentanona
5	8508 Oxima de 3,3-dimetil-1-metiltio-2-pentanona
	8872 Oxima de 3,3-dimetil-1-metilsulfonil-2-butanona
	8873 Oxima de 3,3-dimetil-1-metilsulfinil-2-butanona
	9059 Oxima de 1-metiltio-2-pentanona
	9060 Oxima de 4-metil-1-metiltio-2-pentanona
10	9301 Oxima de 1-metoxi-3,3-dimetil-2-butanona
	9302 Oxima de 1-etoxi-3,3-dimetil-2-butanona
	9332 Oxima de 1-(2-etiltioetiltio)-3,3-dimetil-2-butanona
15	9381 Oxima de 1-(3,3,3-trifluorpropil)-3,3-dimetil-2-butanona
	9384 Oxima de 3,3-dimetil-1-(2-feniletiltio)-2-butanona.
20	-
	-
	-
25	-
	-
	-
30	-



TABLA IV

R<sub>1</sub> NOH

R<sub>2</sub> - C - C - CH<sub>2</sub>X

R<sub>3</sub>

Compuesto número	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	X	Punto de fusión en °C	Rendimiento %	Análisis	
						Calculado	Encontrado
7252	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	(a)	92	-	-
7470	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> OOCOCH <sub>2</sub> S-	-	87	C 49,3 H 7,7 N 6,4	C 49,4 H 7,7 N 6,2
7575	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	75-76 (b)	81	-	-
7578	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	(c)	79	C 40,3 H 7,6	C 40,7 H 7,6
7604	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CS-	120-121	75	C 59,1 H 10,4	C 59,1 H 10,4
7605	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHS-	51-52	63	C 57,1 H 10,1	C 56,5 H 9,5
7618	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> S-	(d)	38	C 59,1 H 10,4	C 59,2 H 10,5
7682	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> S-	84-87	100	C 65,8 H 8,1	C 65,6 H 9,2
7711	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> S-	83-84	29	C 64,5 H 7,7	C 64,1 H 8,0
7796	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-	104-105	83	C 69,5 H 8,3 N 6,8	C 70,1 H 8,3 N 6,9
7820	CH <sub>3</sub> S-	H-	CH <sub>3</sub> S-	(e)	89	C 36,3 H 6,7 N 8,5	C 36,4 H 6,4 N 8,5
7858 (f)	CH <sub>3</sub> -	OH <sub>3</sub> -	HO-	87-88	87	-	-
7861	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S-	71-72	96	N 8,0	N 7,9
7896	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	(g)	92	N 7,4	N 7,3
7898	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	57-58	56	N 7,5	N 7,3
7917	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	-	-	N 10,5	N 10,4
7925	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	(h)	-	N 7,4	N 7,4
7946	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	70-75	75	C 43,5 N 7,8	C 42,8 N 7,8

1

5

10

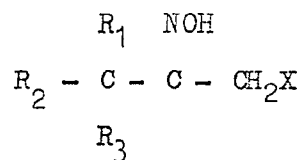
15

20

25

30

TABLA IV



	Compuesto número	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	X	Punto de fusión en °C	Ref
	7252	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	(a)	
	7470	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> OCOCH <sub>2</sub> S-	-	
	7575	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	75-76 <sup>(b)</sup>	
10	7578	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	(c)	
	7604	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CS-	120-121	
	7605	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHS-	51-52	
15	7618	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> S-	(d)	
	7682	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> S-	84-87	
	7711	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> S-	83-84	
	7796	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-	104-105	
20	7820	CH <sub>3</sub> S-	H-	CH <sub>3</sub> S-	(e)	
	7858 <sup>(f)</sup>	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	HO-	87-88	
	7861	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S-	71-72	
25	7896	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	(g)	
	7898	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	57-58	
	7917	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	-	
	7925	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	(h)	
50	7946	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	70-75	

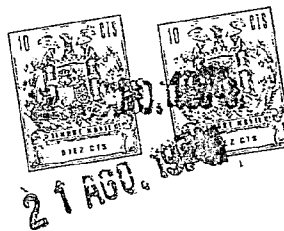


TABLA IV

R<sub>1</sub> NOH

R<sub>2</sub> - C - C - CH<sub>2</sub>X

R<sub>3</sub>

X	Punto de fusión en °C	Rendimiento %	Análisis	
			Calculado	Encontrado
CH <sub>3</sub> S-	(a)	92	-	-
CH <sub>3</sub> OCOCH <sub>2</sub> S-	-	87	C 49,3 H 7,7 N 6,4	C 49,4 H 7,7 N 6,2
H-	75-76 (b)	81	-	-
CH <sub>3</sub> S-	(c)	79	C 40,3 H 7,6	C 40,7 H 7,6
(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CS-	120-121	75	C 59,1 H 10,4	C 59,1 H 10,4
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHS-	51-52	63	C 57,1 H 10,1	C 56,5 H 9,5
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> S-	(d)	38	C 59,1 H 10,4	C 59,2 H 10,5
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> S-	84-87	100	C 65,8 H 8,1	C 65,6 H 9,2
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> S-	83-84	29	C 64,5 H 7,7	C 64,1 H 8,0
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-	104-105	83	C 69,5 H 8,3 N 6,8	C 70,1 H 8,3 N 6,9
CH <sub>3</sub> S-	(e)	89	C 36,3 H 6,7 N 8,5	C 36,4 H 6,4 N 8,5
HO-	87-88	87	-	-
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> S-	71-72	96	N 8,0	N 7,9
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	(g)	92	N 7,4	N 7,3
CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	57-58	56	N 7,5	N 7,3
CH <sub>3</sub> S-	-	-	N 10,5	N 10,4
CH <sub>3</sub> S-	(h)	-	N 7,4	N 7,4
CH <sub>3</sub> S-	70-75	75	C 43,5 N 7,8	C 42,8 N 7,8

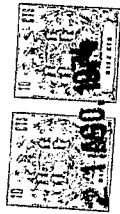


TABLA IV (continuación)

Compuesto número	Punto de fusión en °C			X	R <sub>3</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>1</sub>	Rendimiento %	Análisis	
	(l)	(m)	(n)						Calculado	Encontrado
8077	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	Cl-	H-	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	38	C 51,4 H 8,6 N 8,1	C 50,7 H 8,4 N 8,1
8109	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	73	C 57,7 H 9,2 N 7,5	C 57,5 H 9,0 N 7,4
8145	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	H-	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	64	C 59,7 H 9,5 N 7,0	C 59,8 H 9,5 N 7,0
8154	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	63	C 48,2 H 8,1 N 9,4	C 48,3 H 8,1 N 9,5
8358	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	Cl-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	37	N 9,7	N 9,5
8420	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	H-	CH <sub>3</sub> S-	H-	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	95	N 6,8	N 7,2
8424	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(1)	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	33	C 54,8 H 9,8	C 54,6 H 9,8
8507	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	50	C 54,8 H 9,8	C 54,4 H 9,7
8508	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	50	N 7,3	N 7,2
8872	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	40	C 47,4 H 8,5 N 7,9	C 47,3 H 8,3 N 7,9
8873	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S(O)-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	35	C 49,0 H 8,9 N 9,5	C 49,0 H 8,9 N 9,3
9059	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	72	C 52,1 H 9,4 N 8,7	C 51,5 H 9,4 N 8,2
9060	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	93	C 57,9 H 10,4	C 57,6 H 9,9
9301	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> O-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	45	N 8,8	N 8,6
9302	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	74	C 51,1 H 9,0 N 6,0	C 51,1 H 8,9 N 5,8
9332	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	81	C 44,4 H 6,6	C 45,0 H 6,7
9381	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	89		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA IV (continu

	Compuesto número	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	X	Punto de fusión en °C
1	8077	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	Cl-	(i)
5	8109	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> -	84
	8145	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -		H-	CH <sub>3</sub> S-	63-4
	8154	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -		CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	(j)
10	8358	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	Cl-	102-3
	8420	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -		H-	CH <sub>3</sub> S-	(k)
	8424	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	(l)	117
15	8507	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	(m)
	8508	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	(n)
	8872	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> -	73-5
	8873	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S(O)-	104-6
20	9059	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	(o)
	9060	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	(p)
25	9301	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> O-	(q)
	9302	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-	(r)
	9332	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	42-5
30	9381	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	41-3



TABLA IV (continuación)

X	Punto de fusión en °C	Rendimiento %	Análisis	
			Calculado	Encontrado
Cl-	(i)	38	C 51,4 H 8,6 N 8,6	C 50,7 H 8,4 N 8,1
CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> -	84	73	N 8,0	N 8,1
CH <sub>3</sub> S-	63-4	64	C 57,7 H 9,2 N 7,5	C 57,5 H 9,0 N 7,4
CH <sub>3</sub> S-	(j)	63	C 59,7 H 9,5 N 7,0	C 59,8 H 9,5 N 7,0
Cl-	102-3	37	C 48,2 H 8,1 N 9,4	C 48,3 H 8,1 N 9,5
CH <sub>3</sub> S-	(k)	95	N 9,7	N 9,5
(l)	117	33	N 6,8	N 7,2
CH <sub>3</sub> S-	(m)	50	C 54,8 H 9,8	C 54,6 H 9,8
CH <sub>3</sub> S-	(n)	50	C 54,8 H 9,8	C 54,4 H 9,7
CH <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> -	73-5	40	N 7,3	N 7,2
CH <sub>3</sub> S(O)-	104-6	35	C 47,4 H 8,5 N 7,9	C 47,3 H 8,3 N 7,9
CH <sub>3</sub> S-	(o)	72	C 49,0 H 8,9 N 9,5	C 49,0 H 8,9 N 9,3
CH <sub>3</sub> S-	(p)	93	C 52,1 H 9,4 N 8,7	C 51,5 H 9,4 N 8,2
CH <sub>3</sub> O-	(q)	45	C 57,9 H 10,4	C 57,6 H 9,9
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-	(r)	74	N 8,8	N 8,6
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	42-5	81	C 51,1 H 9,0 N 6,0	C 51,1 H 8,9 N 5,8
F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	41-3	89	C 44,4 H 6,6	C 45,0 H 6,7



TABLA IV (continuación)

Compuesto Número	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	X	Punto de fusión en °C	Rendimiento %	Análisis	
	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -				Calculado	Encontrado
9384	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	48-50	98	C 66,9 H 8,4	C 67,8 H 8,5
(a) n <sub>D</sub> <sup>25</sup> 1,4965								
(b) J. Agr. Food Chem., 14, 356 (1966)								
(c) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5150								
(d) p.e. 104° C/0,8 mm								
(e) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5592								
(f) Beilstein II 424								
(g) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4879								
(h) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4863								
(i) p.e. 76-7° C/1,3 mm; n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4672								
(j) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5164								
(k) n <sub>D</sub> <sup>23</sup> 1,5340								
(l) X <sub>2</sub> = SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-								
(m) n <sub>D</sub> <sup>23</sup> 1,4884								
(n) p.e. 95° C/0,7 mm; n <sub>D</sub> <sup>23</sup> 1,4948								
(o) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5010								
(p) n <sub>D</sub> <sup>20</sup> 1,4952								
(q) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4460								
(r) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4420								

1

5

10

15

20

25

30

1 TABLA IV (continua)

Compuesto número	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	X	Punto de fusión en °C
5 9384	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	48-50
	(a) n <sub>D</sub> <sup>25</sup> 1,4965				
	(b) J. Agr. Food Chem., <u>14</u> , 356 (1966)				
	(c) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5150				
10 (d)	p.e. 104° C/0,8 mm				
	(e) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5592				
	(f) Beilstein II 424				
	(g) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4879				
	(h) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4863				
15 (i)	p.e. 76-7° C/1,3 mm; n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4672				
	(j) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5164				
	(k) n <sub>D</sub> <sup>23</sup> 1,5340				
	(l) X <sub>2</sub> = SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-				
	(m) n <sub>D</sub> <sup>23</sup> 1,4884				
20 (n)	p.e. 95° C/0,7 mm; n <sub>D</sub> <sup>23</sup> 1,4948				
	(o) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,5010				
	(p) n <sub>D</sub> <sup>20</sup> 1,4952				
	(q) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4460				
	(r) n <sub>D</sub> <sup>24</sup> 1,4420				

25

30

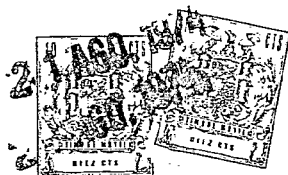


TABLA IV (continuación)

	Punto de fusión en °C	Rendimiento %	Análisis	
			Calculado	Encontrado
H <sub>2</sub> S-	48-50	98	C 66,9 H 8,4	C 67,8 H 8,5





AGO. 1974

TABLA V (continuación)

1

Compuesto  
número

Nombre químico

7870 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(1-pirrolidinil)butano

5

7871 3,3-dimetil-2-dimetilcarbamiloximino-1-metiltiobutano

7895 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metilcarbamiloxibutano

7897 1-aliltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

10

7916 2-metilcarbamiloximino-1-metiltiobutano

7929 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-n-propiltiobutano

7934 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltiohexano

15

7960 1,3-bis(metiltio)-3-metil-2-metilcarbamiloximino-butano

7991 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-tiocianatobutano

20

8018 1-ciclohexiltio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

8031 1-acetoxi-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

8035 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(4'-metilfeniltio)butano

25

8036 1-(4'-terobutilfeniltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

8070 1-(4'-metoxifeniltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano

8071 2,2-dimetil-3-metilcarbamiloximino-4-metiltiopentano

30

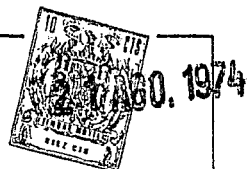
8073 1-(4'-clorofeniltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamil-



1

TABLA V (continuación)


<u>Compuesto número</u>	<u>Nombre químico</u>
	oximinobutano
5 8108	1-cloro-4,4-dimetil-2-metilcarbamiloximinopentano
8111	4,4-dimetil-3-metilcarbamiloximino-1-metiltiopentano
8169	1-ciclohexil-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano
10 8179	1-(1-metilciclohexil)-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano
8327	1,3-bis(metiltio)-2-carbamiloximino-3-metilbutano
8423	1,1-etilenditio-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
15 8465	1-ciclopropil-1-metilcarbamiloximino-2-metiltioetano
8519	4,4-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltiopentano
20 8520	3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltiopentano
8713	1-cloro-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
8813	1-ciclopropil-1-etilcarbamiloximino-2-metiltioetano
25 8814	1-alilcarbamiloximino-1-ciclopropil-2-metiltioetano
8868	3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metilsulfonilbutano
8997	1-azido-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
30 9026	3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-metiltio-



1

TABLA V (continuación)

Compuesto número	Nombre químico
	etiltio)butano
5	9057 2-metilcarbamiloximino-1-metiltiopentano
	9058 4-metil-2-metilcarbamiloximino-1-metiltiopentano
	9071 2-alilcarbamiloximino-4-metil-1-metiltiopentano
	9072 2-alilcarbamiloximino-1-metiltiopentano
	9226 2-alilcarbamiloximino-3,3-dimetil-1-(2-metiltio- etiltio)butano
10	9300 1-metoxi-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
	9315 1-etoxi-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobutano
	9336 1-hidroxi-3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximinobu- tano
15	9337 1-(2-etiltioetiltio)-3,3-dimetil-2-metilcarbamil- oximinobutano
	9349 hidrocloreuro de 3,3-dimetil-1-dimetilamino-2-me- tilcarbamiloximinobutano
	9350 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-metilsulfo- niloxibutano
20	9386 1-(3,3,3-trifluorpropiltio)-3,3-dimetil-2-metil- carbamiloximinobutano
	9387 2-etilcarbamiloximino-1-(3,3,3-trifluorpropiltio)- 3,3-dimetilbutano
25	9388 2-alilcarbamiloximino-1-(3,3,3-trifluorpropiltio)- 3,3-dimetilbutano
	9389 3,3-dimetil-2-metilcarbamiloximino-1-(2-feniletil- tio)butano
	9390 2-etilcarbamiloximino-3,3-dimetil-1-(2-feniletil- tio)butano
30	

21 AGO. 1974  


1

TABLA V (continuación)

<u>Compuesto número</u>	<u>Nombre químico</u>
-------------------------	-----------------------

9391	2-alilcarbamiloximino-3,3-dimetil-1-(2-feniletiltio)butano
------	--

5

9392	3,3-dimetil-1-dimetilamino-2-metilcarbamiloximinobutano
------	---

10

15

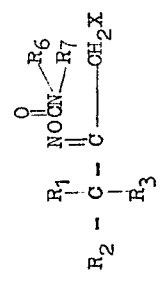
20

25

30



TABLA VI



Compuesto n.º	Estructura							Punto de fusión en °C (Índice de refracción/°C)		Análisis	
	R1	R2	R3	R6	R7	X	Método*	Calculado	Encontrado		
7268	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	50-52	C 49,5 H 8,3 N 13,0	C 49,3 H 8,9 N 12,9	
7472 (a)	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	A	45-46	C 55,8 H 9,4	C 55,8 H 9,1	
7503	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	H <sub>3</sub> COOCH <sub>2</sub> S-	A	(1,5016/23,5)	C 47,8 H 7,3	C 48,0 H 7,6	
7577 (a)	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	A	79	-	-	
7603	H-	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	47-50	C 40,9 H 6,9	C 40,8 H 6,7	
7619	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CS-	A	105-106	C 55,3 H 9,3	C 55,1 H 9,3	
7620	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHS-	A	63-64	C 53,6 H 9,0	C 53,6 H 8,5	
7639	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> S-	A	66-67	C 55,3 H 9,3	C 55,2 H 9,5	
7702	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	54-56	C 61,2 H 7,5	C 61,1 H 7,5	
7718	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> S-	A	106-107	C 60,0 H 7,2	C 60,0 H 7,4	
7797	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,4941/24)	C 51,7 H 8,7 N 12,1	C 51,1 H 8,5 N 11,6	
7799	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH=CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5017/24)	C 54,1 H 8,3 N 11,5	C 53,5 H 8,0 N 11,2	
7803	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O-	A	128-129	C 63,6 H 7,6 N 10,6	C 63,7 H 7,7 N 10,7	
7804	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S(O)-	H-	CH <sub>3</sub> S(O)-	D	(1,5040/24)	C 46,1 H 7,7 N 12,0	C 45,2 H 7,5 N 11,9	

1

5

10

15

20

25

50





TABLA VI (continuación)

Compu- to núm.	X							Método	Punto de fusión er °C		Análisis	
	R1	R2	R3	R6	R7	R8	R9		Calculado	Encontrado	C	H
7821	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	Br-	A	83-84	C 38,3 H 6,0 N 11,4	C 38,5 H 6,0 N 11,4		
7834	CH <sub>3</sub> S-	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	114-115	C 37,8 H 6,4 N 12,6	C 37,8 H 6,2 N 12,7		
7859	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	B	58-60	C 47,0 H 7,9 N 13,7	C 46,7 H 7,7 N 13,5		
7862	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	45-47	C 51,7 H 8,7 N 12,2	C 51,3 H 7,5 N 12,2		
7867	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5015/24)	N 13,7	N 13,5		
7870	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N- (b)	C	43-46	N 17,4	N 17,0		
7871	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	B	(1,4953/24)	C 51,7 H 8,7 N 12,1	C 51,6 H 8,5 N 11,8		
7895	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> NHCOO-	A	(1,4796/24)	C 49,0 H 7,8	C 49,7 H 7,8		
7897	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	A	(1,5075/25)	N 11,5	N 11,9		
7916	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5050/24)	C 44,2 H 7,4 N 14,7	C 44,4 H 8,0 N 15,0		
7929	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	68-70	C 53,6 H 9,0 N 11,4	C 53,2 H 9,1 N 11,4		
7934	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,4937/24)	C 53,8 H 9,0 N 11,4	C 53,2 H 8,8 N 11,5		
7960	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5339/24)	C 43,2 H 7,2 N 11,2	C 43,7 H 7,2 N 11,7		
7991	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	NCS-	C	85-86	C 47,1 H 6,6 N 18,3	C 47,5 H 6,6 N 18,8		
8018	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> S-	C	105-106	C 58,7 H 9,1 N 9,8	C 59,1 H 9,1 N 9,8		

1

5

10

15

20

25

30



TABLA VI (contin)

	Compues to núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	X	Método	Punto d (Índice)
1									
5	7821	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	Br-	A	
	7834	CH <sub>3</sub> S-	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	
	7859	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	B	
10	7862	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	
	7867	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,50)
	7870	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N-(b)	C	
15	7871	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> S-	B	(1,49)
	7895	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> NHCOO-	A	(1,47)
	7897	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	A	(1,50)
	7916	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,50)
20	7929	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	
	7934	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,49)
25	7960	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,53)
	7991	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	NCS-	C	
30	8018	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> S-	C	1



TABLA VI (continuación)

X	Método	Punto de fusión er. °C (Índice de refracción/°C)	Análisis	
			Calculado	Encontrado
Br-	A	83-84	C 38,3 H 6,0 N 11,2	C 38,5 H 6,0 N 11,4
CH <sub>3</sub> S-	A	114-115	C 37,8 H 6,4 N 12,6	C 37,8 H 6,2 N 12,7
CH <sub>3</sub> S-	B	58-60	C 47,0 H 7,9 N 13,7	C 46,7 H 7,7 N 13,5
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	45-47	C 51,7 H 8,7 N 12,2	C 54,3 H 7,5 N 12,2
CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5015/24)	N 13,7	N 13,5
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N-(b)	C	43-46	N 17,4	N 17,0
CH <sub>3</sub> S-	B	(1,4953/24)	C 51,7 H 8,7 N 12,1	C 51,6 H 8,5 N 11,8
CH <sub>3</sub> NHCOO-	A	(1,4796/24)	C 49,0 H 7,8	C 49,7 H 7,8
CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> S-	A	(1,5075/25)	N 11,5	N 11,9
CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5050/24)	C 44,2 H 7,4 N 14,7	C 44,4 H 8,0 N 15,0
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	68-70	C 53,6 H 9,0 N 11,4	C 53,2 H 9,1 N 11,4
CH <sub>3</sub> S-	A	(1,4937/24)	C 53,8 H 9,0 N 11,4	C 53,2 H 8,8 N 11,5
CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5339/24)	C 43,2 H 7,2 N 11,2	C 43,7 H 7,2 N 11,7
NCS-	C	85-86	C 47,1 H 6,6 N 18,3	C 47,5 H 6,6 N 18,2
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> S-	C	105-106	C 58,7 H 9,3 N 9,8	C 59,1 H 9,1 N 9,8

TABLA VI (continuación)

Compues to núm.	R1	R2	R3	R6	R7	X	Método*	Punto de fusión °C (Índice de refracción/°C)	Análisis	
						Calculado			Encontrado	
8031	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> COO-	C	48-50	C 52,1 H 7,9 N 12,2	C 54,8 H 7,8 N 12,4
8035	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-CH <sub>3</sub> C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	106-107	C 61,2 H 7,5 N 9,5	C 60,8 H 7,6 N 9,1
8036	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CO <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	(1,5348/24)	C 64,2 H 8,4 N 8,3	C 64,7 H 8,4 N 8,4
8070	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-CH <sub>3</sub> OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	90-92	C 58,0 H 7,2 N 9,0	C 57,6 H 7,0 N 8,7
8071 (c)	-	-	-	-	-	-	A	93-94	C 51,7 H 8,7 N 12,1	C 51,6 H 8,5 N 12,1
8073	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-ClC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	111-112	C 53,4 H 6,1 N 8,9	C 53,0 H 6,1 N 8,9
8108 (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	H-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,4802/24)	N 12,7	N 12,8
8111	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> <sup>-</sup>	A	56-58	C 51,7 H 8,7 N 12,1	C 51,6 H 8,5 N 12,1
8169	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	H-	H-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	70-71	C 54,1 H 8,3 N 11,5	C 54,2 H 8,3 N 11,8
8179	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5200/25)	C 55,8 H 8,6	C 55,7 H 8,6
8327	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	B	-	C 41,2 H 6,9 N 12,0	C 41,4 H 6,8 N 12,1
8423	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(a)	A	83-86	C 45,8 H 6,9	C 45,6 H 6,9
8465	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	H-	H-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5297/23)	N 13,9	N 14,3
8519 (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	H-	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,4960/23)	C 51,7 H 8,7	C 51,3 H 8,5
8520	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5030/23)	C 51,7 H 8,7	C 51,4 H 8,5

1

5

10

15

20

25

30



TABLA VI (continua)

	Compues to núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	X	Método <sup>x</sup>	Pun (Ind)
1									
5	8031	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> COO-	C	
	8035	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-CH <sub>3</sub> C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	
	8036	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	(1
10	8070	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-CH <sub>3</sub> OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	
	8071 (c)	-	-	-	-	-	-	A	
15	8073	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	4-ClC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	
	8108	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(
	8111	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> -	A	
20	8169	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -		H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	
	8179	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -		CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(
	8327	CH <sub>3</sub> S-	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> S-	B	
25	8423	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(d)	A	
	8465	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -		H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(
	8519	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C-	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(
30	8520	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(



TABLA VI (continuación)

X	Método <sup>±</sup>	Punto de fusión °C (Índice de refracción/°C)	Análisis	
			Calculado	Encontrado
-	C	48-50	C 52,1 H 7,9 N 12,2	C 54,8 H 7,8 N 12,4
6H <sub>4</sub> S-	C	106-107	C 61,2 H 7,5 N 9,5	C 60,8 H 7,6 N 9,1
) <sub>3</sub> CC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	(1,5348/24)	C 64,2 H 8,4 N 8,3	C 64,7 H 8,4 N 8,4
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S-	C	90-92	C 58,0 H 7,2 N 9,0	C 57,6 H 7,0 N 8,7
	A	93-94	C 51,7 H 8,7 N 12,1	C 51,6 H 8,5 N 12,1
H <sub>4</sub> S-	C	111-112	C 53,4 H 6,1 N 8,9	C 53,0 H 6,1 N 8,9
	A	(1,4802/24)	N 12,7	N 12,8
2	A	56-58	C 51,7 H 8,7 N 12,1	C 51,6 H 8,5 N 12,5
	A	70-71	C 54,1 H 8,3 N 11,5	C 54,2 H 8,3 N 11,8
	A	(1,5200/25)	C 55,8 H 8,6	C 55,7 H 8,6
	B	-	C 41,2 H 6,9 N 12,0	C 41,4 H 6,8 N 12,1
	A	83-86	C 45,8 H 6,9	C 45,6 H 6,9
	A	(1,5297/23)	N 13,9	N 14,3
	A	(1,4960/23)	C 51,7 H 8,7	C 51,3 H 8,5
	A	(1,5030/23)	C 51,7 H 8,7	C 51,4 H 8,5



TABLA VI (continuación)

Compues to. núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	X	Método	Punto de fusión °C Índice de refracción/n <sub>D</sub> °C	Análisis	
									Calculado	Encontrado
8713	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	Cl-	A	77-78	N 13,6	N 13,8
8813	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	H-CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5205/24)	C 50,0 H 7,5	C 49,8 H 7,3
8814	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	H-CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5296/24)	H 12,3	N 12,2
8868	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> -	A	(1,4923/22)	N 11,2	N 11,1
8997	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	N <sub>3</sub> -	C	67-68	C 45,1 H 7,1	C 45,7 H 7,2
9026	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	C	51-56	C 47,5 H 8,0	C 47,5 H 8,0
9057	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5030/24)	C 47,0 H 7,9 N 13,7	C 46,8 H 7,9 N 13,9
9058	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5005/24)	C 49,5 H 8,3 N 12,8	C 49,4 H 8,4 N 12,7
9071	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5035/23)	C 54,1 H 8,3 N 11,5	C 54,1 H 8,3 N 11,3
9072	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,5070/23)	N 12,2	N 12,3
9226	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,5285/24)	C 51,4 H 7,9 N 9,2	C 51,4 H 7,8 N 9,4
9300	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> O-	A	(1,4650/24)	C 53,4 H 9,0	C 52,8 H 9,0
9315	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-	A	(1,4649/24)	N 13,0	N 13,4
9336	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	HO-	A	(1,4830/23)	C 51,1 H 8,5 N 14,9	C 51,4 H 8,6 N 15,2
9337	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,5261/23)	C 49,3 H 8,3	C 49,8 H 8,3
9349	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> N-(e)	C	137-138	C 47,7 H 8,8 N 16,7	C 47,7 H 8,8 N 16,7
9350	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SO <sub>3</sub> -	E	(1,4810/25)	C 40,6 H 6,8 N 10,5	C 41,2 H 6,8 N 10,5

TABLA VI (continua)

Compues to núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	X	Método	Pun. Ind.
8713	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	Cl-	A	
8813		-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,
8814		-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,
8868	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SO <sub>2</sub> -	A	(1,
8997	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	N <sub>3</sub> -	C	
9026	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	C	
9057	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,
9058	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,
9071	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	H-	H-	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,
9072	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	H-	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> S-	A	(1,
9226	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,
9300	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> O-	A	(1,
9315	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O-	A	(1,
9336	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	HO-	A	(1,
9337	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,
9349	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> N <sup>(e)</sup> -	C	
9350	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	CH <sub>3</sub> SO <sub>3</sub> -	E	(1,4



TABLA VI (continuación)

X	Método	Punto de fusión °C (Índice de refracción/°C)	Análisis	
			Calculado	Encontrado
	A	77-78	N 13,6	N 13,8
-	A	(1,5205/24)	C 50,0 H 7,5	C 49,8 H 7,3
-	A	(1,5296/24)	N 12,3	N 12,2
O <sub>2</sub> -	A	(1,4923/22)	N 11,2	N 11,1
	C	67-68	C 45,1 H 7,1	C 45,7 H 7,2
CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	C	51-56	C 47,5 H 8,0	C 47,5 H 8,0
-	A	(1,5030/24)	C 47,0 H 7,9 N 13,7	C 46,8 H 7,9 N 13,9
-	A	(1,5005/24)	C 49,5 H 8,3 N 12,8	C 49,4 H 8,4 N 12,7
-	A	(1,5035/23)	C 54,1 H 8,3 N 11,5	C 54,1 H 8,3 N 11,3
-	A	(1,5070/23)	N 12,2	N 12,3
CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,5285/24)	C 51,4 H 7,9 N 9,2	C 51,4 H 7,8 N 9,4
-	A	(1,4650/24)	C 53,4 H 9,0	C 52,8 H 9,0
I <sub>2</sub> O-	A	(1,4649/24)	N 13,0	N 13,4
-	A	(1,4830/23)	C 51,1 H 8,5 N 14,9	C 51,4 H 8,6 N 15,2
I <sub>2</sub> SCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,5261/23)	C 49,3 H 8,3	C 49,8 H 8,3
I <sub>2</sub> N-(e)	C	137-138	C 47,7 H 8,8 N 16,7	C 47,7 H 8,8 N 16,7
3-	E	(1,4810/25)	C 40,6 H 6,8 N 10,5	C 41,2 H 6,8 N 10,5



TABLA VI (continuación)

Compuesto no. núm.	R1	R2	R3	R6	R7	X	Método #	Punto de fusión °C (Índice de refracción/°C)	Análisis	
	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-			Calculado	Encontrado
9386	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	64.66	C 44,0 H 6,3	C 44,2 H 6,5
9387	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,4623/24)	C 45,9 H 6,7 N 8,9	C 46,7 H 6,9 N 9,0
9388	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,4717/24)	C 47,9 H 6,4 N 8,6	C 48,7 H 6,6 N 9,1
9389	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,5405/24)	C 62,3 H 8,0	C 62,8 H 7,8
9390	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,5348/24)	C 63,4 H 8,1	C 63,6 H 8,1
9391	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A	(1,4253/24)	C 64,7 H 7,8	C 65,5 H 8,1
9392	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> N-	C	42.43	N 19,5	N 19,3

# Método: A = Ejemplo 3

B = Ejemplo 4

C = Ejemplo 5

D = Ejemplo 8

E = Ejemplo 14A

(a) J. Agr. Food Chem., 14, 356 (1966)

(b) 1-pirrolidinilo

(c) Ejemplo 9

(d) X<sub>2</sub> = SCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>S-

(e) Sal de hidrocloreuro

TABLA VI (continua)

1  
5  
10  
15  
20  
25  
30

Compues to núm.	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	X	Método
9386	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A
9387	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H-	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A
9388	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	F <sub>3</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A
9389	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A
9390	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A
9391	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	H-	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> S-	A
9392	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	CH <sub>3</sub> -	H-	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> N-	C

\* Método: A = Ejemplo 3  
 B = Ejemplo 4  
 C = Ejemplo 5  
 D = Ejemplo 8  
 E = Ejemplo 14A

(a) J. Agr. Food Chem., 14, 356 (1966)

(b) 1-pirrolidinilo

(c) Ejemplo 9

(d) X<sub>2</sub> = SCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>S-

(e) Sal de hidrocioruro

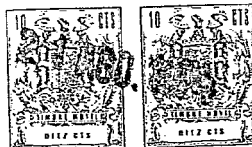


TABLA VI (continuación)

R7	X	Método	Punto de fusión °C (Índice de refracción/°C)	Análisis	
				Calculado	Encontrado
H-	$F_3CCH_2CH_2S-$	A	64-66	C 44,0 H 6,3	C 44,2 H 6,5
H-	$F_3CCH_2CH_2S-$	A	(1,4620/24)	C 45,9 H 6,7 N 8,9	C 46,7 H 6,9 N 9,0
2- H-	$F_3CCH_2CH_2S-$	A	(1,4717/24)	C 47,9 H 6,4 N 8,6	C 48,7 H 6,6 N 9,1
H-	$C_6H_5CH_2CH_2S-$	A	(1,5405/24)	C 62,3 H 8,0	C 62,8 H 7,8
H-	$C_6H_5CH_2CH_2S-$	A	(1,5348/24)	C 63,4 H 8,1	C 63,6 H 8,1
2- H-	$C_6H_5CH_2CH_2S-$	A	(1,4253/24)	C 64,7 H 7,8	C 65,5 H 8,1
H-	$(CH_3)_2N-$	C	42-43	N 19,5	N 19,3



1 Se ha evaluado la actividad biológica de los com-  
 puestos contra las siguientes plagas representativas: esca-  
 rabajo mejicano de la judía (Epilachna varivestis), larva  
 de esciara del sur (Prodenia eridania), mosca doméstica  
 5 (Musca domestica), áfido de la judía (Aphis fabae) y ara-  
 ñuela roja (Tetranychus sp.). Estas dos últimas plagas son  
 tratadas por contacto y por aplicación sistémica.

Con fines comparativos, se incluyen en los resul-  
 tados de los ensayos los obtenidos con el Compuesto 7472 y  
 10 el Compuesto 7577 conocidos y con Aldicarb. Todos los com-  
 puestos ensayados son clasificados empleando la siguiente  
 escala:

	Actividad por contacto	Actividad sistémica
	Clasificación = $\approx$ 50 % de mor- talidad a una concentración en partes por millón de	Clasificación = $\approx$ 50 % de mor- talidad a una concentración en libras/ acre (Kg/Ha)
	0 >500	0 >16 (17,9)
	1 500-250	1 16-8 (17,9-8,96)
20	2 250-128	2 8-4 (8,96-4,48)
	3 128-64	3 4-2 (4,48-2,24)
	4 64-32	4 2-1 (2,24-1,12)
	5 32-16	5 1-1/2 (2,24-0,56)
25	6 6-8	6 1/2-1/4 (0,56-0,28)
	7 8-4	7 1/4-1/8 (0,28-0,14)
	8 4-2	8 1/8-1/16 (0,14-0,07)
30	9 2	9 1/16 ( $\approx$ 0,07)



1 Los ensayos empleados son los siguientes:

EJEMPLO 15

Afido de la judía - Ensayo por pulverización y sistémico

5 Este ensayo determina la actividad insecticida  
del compuesto sometido a prueba contra el afido de la judía  
Aphis fabae. Se preparan unas formulaciones de reserva con  
teniendo 500 ppm de cada producto químico ensayado, emplean  
do 0,05 g del producto químico de ensayo (o 0,05 ml si es  
un líquido), 4,0 ml de acetona conteniendo 0,25 % (volumen/  
10 volumen) de Triton X-155 y 96,0 ml de agua desionizada y se  
utilizan como inundación del terreno y como tratamiento por  
pulverización. Las formulaciones de reserva se diluyen para  
obtener las concentraciones más bajas apropiadas, manteniend  
do el nivel de concentración de todos los coadyuvantes. El  
15 afido de la judía se cultiva sobre plantas de berro (varie-  
dad Tall Single), no intentándose seleccionar los insectos  
de una edad dada en estos ensayos. Los berros para ensayo  
se cultivan como planta única en un suelo contenido en mace-  
tas individuales de fibra de 2,25" (5,7 cm) y después se  
20 infestan con poblaciones de 100 a 200 áfidos.

En la aplicación por pulverización, se pulverizan  
uniformemente sobre las plantas 50 ml de formulación de re-  
serva o diluída. En la aplicación sistémica, se aplica al te  
25 rreno que contiene la planta 11,2 ml de formulación de reser  
va o diluída. Una dosis de 11,2 ml de formulación conteniend  
do 500 ppm de producto químico de ensayo es equivalente a  
una dosis del producto químico de ensayo de 16 libras/acre  
(17,9 kg/Ha).

30 Las unidades vegetales de ensayo situadas bajo lu-  
ces fluorescentes reciben riego desde el fondo durante el



1 periodo que dura el ensayo. El porcentaje de mortalidad se  
determina 3 días después del tratamiento. Los resultados  
de este ensayo se encuentran en la Tabla VII como Af (pulve  
5 rización de contacto con los áfidos) y como AfS (inundación  
del terreno de acción sistémica sobre los áfidos).

#### EJEMPLO 16

#### Arañuela roja - Ensayo por pulverización y sistémico

Este ensayo determina la actividad acaricida del  
compuesto de prueba contra la arañuela roja, Tetranychus sp.  
10 Se preparan formulaciones de reserva conteniendo 500 ppm  
de cada producto químico de ensayo, por el procedimiento des  
crito en el Ejemplo 15 y se utilizan como tratamientos de  
inundación del terreno y por pulverización. El cultivo de  
reserva de ácaros se mantiene sobre el follaje de judía tre  
15 padora Scarlet. Aproximadamente 18 a 24 horas después del  
ensayo, los ácaros se transfieren a las hojas primarias de  
dos plantas de judía de Lima (variedad Sieva), cultivadas en  
macetas de 2,25" (5,7 cm).

Se utilizan los métodos de aplicación por pulveri  
20 zación y sistémico descritos en el Ejemplo 15 para aplicar  
las formulaciones de ensayo a las plantas infectadas y al  
terreno. Al cabo de 3 días, se examinan dos de las cuatro  
hojas tratadas y se determina la mortalidad. Si un compues  
25 to es un acaricida efectivo, quedan las otras dos hojas para  
obtener información sobre la actividad residual de la for  
mulación. Los resultados de este ensayo se encuentran en la  
Tabla VII como Ac (ensayo de pulverización de contacto con  
los ácaros) y AS (ensayo de inundación del terreno de acción  
30 sistémica sobre los ácaros).



1

EJEMPLO 17

Mosca doméstica - Ensayo por pulverización

5

Este ensayo determina la actividad insecticida del compuesto sometido a prueba contra moscas domésticas adultas, Musca domestica. Se preparan formulaciones de reserva conteniendo 500 ppm de cada producto químico de ensayo, utilizando el procedimiento descrito en el Ejemplo 15 y se diluyen para obtener las concentraciones más bajas adecuadas.

10

Se introducen 10 moscas adultas en una jaula cilíndrica de tela metálica de 1,5 x 4" (3,7 x 10 cm), fabricada con tela metálica de acero inoxidable de 20 mallas y se pulverizan con 50 ml de la formulación de reserva o diluida. Las moscas reciben alimento y bebida procedentes de una solución de dextrosa, empleando una mecha de papel sobre la cara externa del cilindro de tela metálica y pueden comer y beber a voluntad. El porcentaje de mortalidad obtenido se determina 3 días después del tratamiento. Los resultados de este ensayo se encuentran en la Tabla VII como MD (ensayo por pulverización de moscas domésticas).

15

20

EJEMPLO 18

Larva de esciara del sur - Ensayo por pulverización

25

En unos tubos de plástico que contienen agua se mantienen las parejas de hojas primarias totalmente abiertas cortadas de unas plantas de judía trepadora Scarlet y se pulverizan con la formulación de ensayo preparada en la forma descrita en el Ejemplo 15. Después de que el depósito pulverizado sobre las hojas está seco, se separan las hojas emparejadas. Una hoja se coloca en un égar acuoso al 1,5 % y se infesta con 10 larvas de esciara del sur recién salidas del huevo. El receptáculo de ensayo tapado se mantiene a

30



1 72°F (22°C) durante 3 días y después se determina el porcen-  
taje de mortalidad. Los resultados de este ensayo se encuen-  
tran en la Tabla VII como ES (ensayo por pulverización so-  
bre la larva de esciara del sur).

5 EJEMPLO 19

Escarabajo mejicano de la judía - Ensayo por pulverización  
de las hojas

10 Este ensayo determina la actividad insecticida del  
compuesto sometido a prueba contra el escarabajo mejicano  
de la judía (Epilachna varivestis). El procedimiento de en-  
sayo es igual al descrito para la larva de la esciara del  
sur en el Ejemplo 18, a excepción de que se emplean larvas  
de un día del escarabajo mejicano de la judía en lugar de  
las larvas de esciara del sur recién salidas del huevo.

15 Estos ensayos se mantienen a 72°F (22°C) durante  
3 días, determinándose entonces la mortalidad y la inhibi-  
ción de la toma de alimento. La inhibición de la toma de  
alimento constituye una indicación de las propiedades repe-  
lentes del material sometido a ensayo. Los resultados de  
20 esta prueba se encuentran en la Tabla VIII como EM (ensayo  
de pulverización de las hojas contra el escarabajo mejica-  
no de la judía).

25

30



TABLA VII

	<u>Compues to núm.</u>	<u>EM<sup>1</sup></u>	<u>GS<sup>2</sup></u>	<u>MD<sup>3</sup></u>	<u>AC<sup>4</sup></u>	<u>Af<sup>5</sup></u>	<u>AcS<sup>6</sup></u>	<u>AfS<sup>7</sup></u>
1	7268	5	0	1	7	9	5	7
	7472	0	0	0	0	1	0	1
5	7503	3	0	0	1	6	1	0
	7577	0	0	0	0	0	0	0
	7603	0	0	5	0	4	0	3
	7718	5	0	1	0	2	0	1
	7797	2	0	3	3	6	3	4
10	7799	5	0	2	2	5	2	0
	7804	6	2	2	5	8	5	7
	7859	4	0	0	5	7	3	4
	7862	2	0	3	3	6	1	4
15	7867	2	0	3	1	6	1	4
	7871	0	0	0	1	5	1	5
	7897	4	0	3	4	4	1	3
	7916	0	0	3	0	5	0	3
	7934	5	0	0	6	6	2	2
20	7960	4	0	0	5	5	0	0
	7991	5	0	0	0	2	0	0
	8071	1	0	0	0	4	0	4
	8111	0	0	1	3	3	0	0
	8465	4	1	2	2	5	0	4
25	8519	0	0	0	2	5	-	-
	8520	5	0	0	6	8	5	4
	8868	7	0	2	6	8	6	7
	8997	7	2	2	3	7	3	6
	9026	6	0	0	4	4	0	0
30	9057	0	0	1	0	7	0	4



TABLA VII (continuación)

Compuesto núm.	EM <sup>1</sup>	ES <sup>2</sup>	MD <sup>3</sup>	AC <sup>4</sup>	Af <sup>5</sup>	AcS <sup>6</sup>	AfS <sup>7</sup>
9058	0	0	1	2	7	0	6
Aldicarb	4	0	7	4	9	5	9

- 1 EM = Escarabajo mejicano de la judía
- 2 ES = Larva de la esciara del sur
- 3 MD = Mosca doméstica
- 4 Ac = Contacto con ácaros
- 5 Af = Contacto con áfidos
- 6 AcS = Acción sistémica sobre ácaros
- 7 AfS = Acción sistémica sobre áfidos.

Debe observarse que el Compuesto 7268 presenta una notable actividad contra todas las pestes, a excepción de la larva de la esciara del sur y de la mosca doméstica. Esta actividad es comparable o superior a la del producto comercial Aldicarb (fórmula III) y muy superior a la del Compuesto 7472 (fórmula I), el derivado no sustituido de 3,3-dimetil-2-butanona o a la del Compuesto 7577 (fórmula II), la cetoxima análoga de Aldicarb.

La elevada actividad insecticida y acaricida del Compuesto 7268 es demostrada además por los resultados de los ensayos especiales descritos a continuación.

EJEMPLO 20

Ensayo sistémico del Compuesto 7268 contra el pulgón *Lygus* y el escarabajo manchado del pepino

Las técnicas empleadas son esencialmente iguales a las de los ensayos sistémicos descritos en el Ejemplo 15. El compuesto de ensayo es el Compuesto 7268. Se utiliza una planta de judía Sieva por maceta y sobre cada planta se depo



1 sitan, limitándolos con una, jaula cinco insectos adultos.  
 Se utiliza una planta para cada especie de ensayo. Los con-  
 5 troles no presentan mortalidad alguna durante los ensayos.

Dosis li- bras/acre (Kg/Ha)	% de mortalidad					
	Pulgón lygus			Escarabajo manchado del pepino		
	3 días	4 días	6 días	3 días	4 días	6 días
2 (2,24)	100	100	100	60	100	100
1 (1,12)	80	80	100	30	100	100
0,5 (0,56)	0	60	80	20	40	80

EJEMPLO 21

10 Actividad del Compuesto 7268 contra el gusano de la raíz del  
maíz del sur

El organismo de ensayo es una variedad del gusano  
 de la raíz del maíz del sur (Diabrotica undecimpunctata ho-  
 15 wardi) resistente a los insecticidas hidrocarbonados clora-  
 dos y el compuesto de ensayo es el Compuesto 7268. Unas mues-  
 tras duplicadas de mezclas de arena y suelo se tratan con vo-  
 lúmenes apropiados de la formulación de ensayo para dar la  
 dosis deseada. Las muestras de arena-suelo se encuentran en  
 20 vasos de papel tapados y varias horas después del riego to-  
 dos los vasos reciben una intensa sacudida para conseguir  
 la mezcla completa y uniforme del producto químico en el se-  
 no del terreno. Un día después del tratamiento, se colocan  
 en cada vaso dos plantitas de maíz y cinco gusanos de la raíz  
 y se vuelven a colocar las tapas. Cinco días más tarde se de-  
 25 termina la mortalidad. Los resultados se dan a continuación:

Dosis, libras/acre	2,5(2,8)	1,25 (1,40)	1(1,12)
Mortalidad, %	100	100	90



1

EJEMPLO 22

Actividad sistemática del Compuesto 7268 contra el áfido del melón

5

Las técnicas utilizadas son esencialmente las mismas que para los ensayos sistémicos descritos en el Ejemplo 15. Las plantas de ensayo son plantitas de pepino; el compuesto de ensayo es el Compuesto 7268 y la peste es el áfido de melón (Aphis gossypii).

10

Dosis, libras/acre (Kg/Ha)	0,5 (0,56)	0,25 (0,28)	0,125(0,14)	0,062 (0,07)
Control, %	100	100	100	100

EJEMPLO 23

Actividad sistémica residual del Compuesto 7268 contra las larvas del escarabajo mejicano de la judía

15

Se abren tres surcos en el terreno contenido en unas bandejas de fibra de 8" x 10" x 3" (20 x 25 x 7,5 cm) y se distribuyen uniformemente en cada surco 10 semillas de judías pintas. El compuesto de ensayo es el Compuesto 7268. Sobre las semillas colocadas en los surcos abiertos se aplican volúmenes apropiados de la formulación de ensayo para dar las dosis deseadas e inmediatamente se cierran los surcos. A los intervalos semanales indicados se recoge una hoja de cada surco, se coloca sobre ágar acuoso en una placa Petri de plástico y se infesta con larvas del escarabajo de la judía de 10 días de edad. La mortalidad se determina tres días más tarde.

20

25

30



1	Semanas después del tratamiento	% de mortalidad a las dosis indicadas, libras/acre (Kg/Ha)			
		1(1,12)	0,5(0,56)	0,25(0,28)	Control
	3	100	100	100	0
	7	100	100	100	10
5	10	95	100	100	0
	11	95	70	95	0

EJEMPLO 24

Ensayo nematocida de los nudos de la raíz

10 Este ensayo constituye una evaluación de la eficacia del compuesto de prueba contra la infección causada por los nematodos de los nudos de la raíz (Meloidogyne sp.).

15 Un terreno de invernadero mezclado con mantillo, diluido en un tercio con arena limpia lavada, se infesta con unos 2 g por maceta de raíces de tomate provistas de nudos o agallas. El tratamiento se realiza aplicando 25 ml del compuesto formulado sobre el terreno infestado. La formulación de ensayo contiene 0,056 g de Compuesto 7960, 1,0 ml de solución de emulgente de reserva (0,25 % de Triton X-155 en acetona, en volumen) y 24,0 ml de agua desionizada, dando una concentración de 2240 ppm. Las concentraciones menores se consiguen por dilución.

25 Después del tratamiento con la formulación de ensayo, se mezclan íntimamente el terreno, el inoculum y la formulación, se devuelven a la maceta y la mezcla se incuba durante 7 días a 20°C y a humedad constante. Después de la incubación, se colocan en cada maceta dos plantitas de transplantes de tomate Rutgers y tres semillas de berro de huerta (Nasturtium sp.). Al cabo de 3 semanas de cultivo se sacan las raíces del suelo y se clasifica la formación de agallas (infección por el nematode de los nudos de la raíz). Las

30



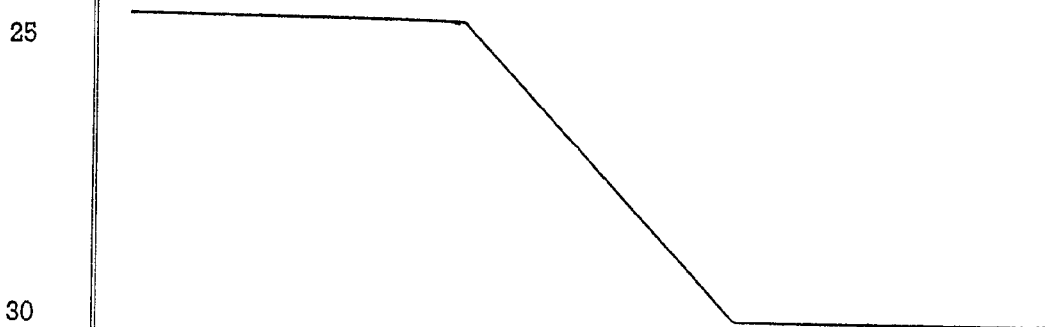
1 raíces de berro se evalúan solamente cuando se ha producido  
 la necrosis del tomate huésped. Se registra una clasificac-  
 5 ción de la infección de 0 a 10: 0 = ausencia de agallas o  
 control completo y 10 = raíces con gran número de agallas  
 comparable al de los controles. Cada uno de los sistemas  
 de raíces de clasifica por separado y el promedio se mul-  
 tiplica por diez y se resta de 100 para obtener el porcenta-  
 je de control de los nematodos. Los resultados de los ensa-  
 yos se encuentran a continuación:

10 Porcentaje de control a la dosis indicada, libras/  
 acre (Kg/Ha)

Compues to n°	8(8,96)	4(4,48)	2(2,24)	1(1,12)	0,5(0,56)
7960	100	100	100	100	97
8423	100	90	60	-	-
15 8997	100	100	0	-	-
9026	90	70	60	30	-

20 Debe entenderse que aunque la invención ha sido  
 descrita haciendo referencia específica a las realizaciones  
 particulares de la misma, no debe ser limitada por éstas,  
 ya que pueden introducirse cambios y alteraciones que se en-  
 cuentran dentro de los límites de esta invención definidos  
 por las reivindicaciones del apéndice.

25 En resumen, la Patente de Invención que se solici-  
 ta deberá recaer sobre las siguientes:



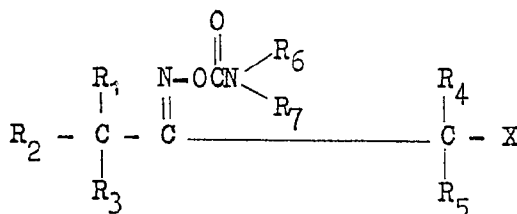


1

REIVINDICACIONES

1. Un método para la preparación de carbamatos de cetoximas de fórmula estructural:

5



donde

10

- (a) R<sub>1</sub> es R<sub>2</sub>-R<sub>4</sub> o X;
- (b) R<sub>2</sub>-R<sub>4</sub> es hidrógeno, alquilo inferior, alquenilo inferior, alquinilo inferior, alquilo inferior sustituido, alquenilo inferior sustituido o alquinilo inferior sustituido, con la condición de que R<sub>2</sub> y R<sub>3</sub> pueden estar unidos entre sí para formar un anillo cicloalifático;
- (c) R<sub>5</sub> es R<sub>2</sub>-R<sub>4</sub> o X, con la condición de que cuando R<sub>5</sub> y X son OR<sub>8</sub>, SR<sub>8</sub>, S(O)R<sub>8</sub>, SO<sub>2</sub>R<sub>8</sub> o NR<sub>8</sub>R<sub>9</sub>, R<sub>5</sub> y X pueden estar unidos para formar un anillo heterocíclico;
- (d) R<sub>6</sub>-R<sub>7</sub> es hidrógeno, alquilo inferior, alquenilo inferior o alquinilo inferior;
- (e) X es SR<sub>8</sub>, S(O)R<sub>8</sub>, SO<sub>2</sub>R<sub>8</sub>, OR<sub>8</sub>, OSO<sub>2</sub>R<sub>8</sub>, NR<sub>8</sub>R<sub>9</sub>, NO<sub>2</sub>, CN, SCN, N<sub>3</sub> o halógeno;
- (f) R<sub>3</sub> es hidrógeno, alquilo inferior, alquenilo inferior, alquinilo inferior, arilo, arilo sustituido, carbamilo, carbamilo sustituido, acilo o acilo sustituido, con la condición de que los grupos alquilo o alquenilo inferiores pueden estar sustituidos además con X y

25

30



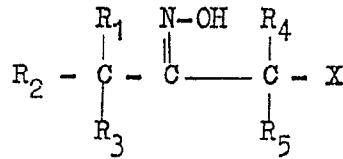
1

(g) R<sub>9</sub> es hidrógeno o alquilo inferior, con la condición de que R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub> y N en el grupo NR<sub>8</sub>R<sub>9</sub> pueden formar un anillo heterocíclico, caracterizado

porque consiste en hacer reaccionar:

5

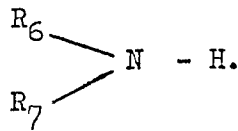
(a) un compuesto de fórmula



10

(b) fosgeno y

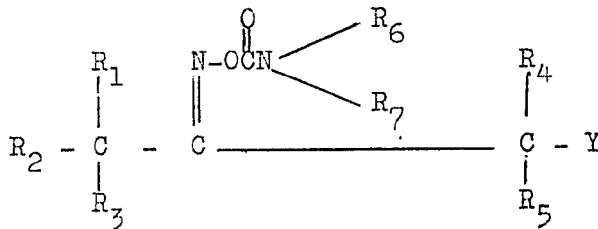
(c) una amina de fórmula



caracterizado porque consiste en hacer reaccionar:

15

(a) un compuesto de fórmula



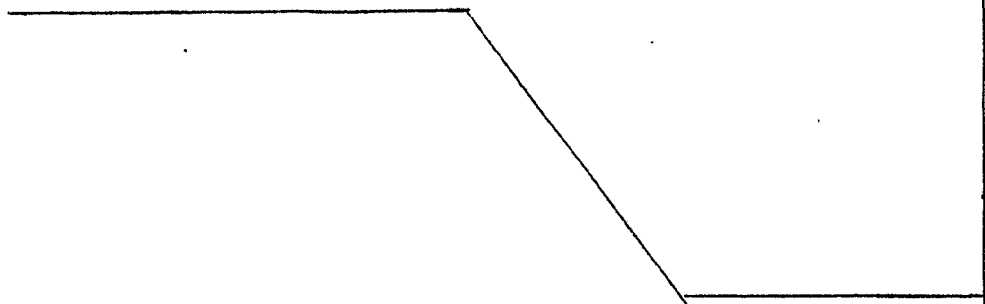
20

donde Y es un halógeno reactivo y

(b) HX,

en presencia de un aceptor de HY.

25



30



1

Todo conforme queda descrito y reivindicado en la presente Memoria descriptiva que consta de sesenta y seis páginas mecanografiadas .

5

Madrid, 21 de Agosto de 1.974  
BERNARDO UNGRIA.  
P.P.

10

15

20

25