

20 JUL. 1978

Concedido el Registro de acuerdo con los datos que figuran en la presente descripción y según el contenido de la Memoria adjunta.

10 ES	11	NUMERO	1466436	10 AI
	21	FECHA DE PRESENTACION	27-1-78	
	22			



ESPAÑA

PATENTE DE INVENCION

Concedido el Registro de acuerdo con los datos que figuran en la presente descripción y según el contenido de la Memoria adjunta.

30 PRIORIDADES:	32 FECHA	33 PAIS
31 NUMERO		
87946/75	30-12-75	AUSTRALIA

47 FECHA DE PUBLICIDAD	51 CLASIFICACION INTERNACIONAL	62 PATENTE DE LA QUE ES DIVISIONARIA
	C07C	454.728

54 TITULO DE LA INVENCION
UN PROCEDIMIENTO PARA LA PREPARACION DE NUEVOS DERIVADOS DE 3-(2-ARIL-2-PROPILO)UREA.

71 SOLICITANTE (S)
SHOWA DENKO KABUSHIKI-KAISHA.

DOMICILIO DEL SOLICITANTE
13-9 Shiba Daimon 1-chome - Minato-ku, Tokyo - JAPON.

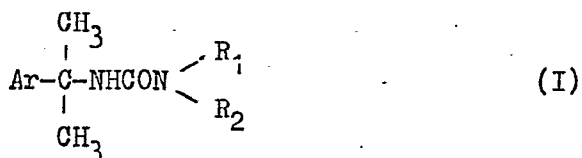
72 INVENTOR (ES)
HIROSHI KUBO; TAKASHI ISONO; NANSHO SEKI y NORIYUKI SATO.

73 TITULAR (ES)

74 REPRESENTANTE
D. BERNARDO UNGRIA GOIBURU.

1 Esta invención se refiere a compuestos de 3-(2-aril-2-propil)urea sustituida, a composiciones herbicidas que los contienen y a un método para controlar el crecimiento de la maleza empleando estos compuestos y composiciones.

5 De acuerdo con esta invención, se proporcionan compuestos de 3-(2-aril-2-propil)urea sustituidos de fórmula general (I):



10

donde Ar es fenilo sustituido con uno o dos átomos de halógeno, trifluormetilo o naftilo, R₁ es hidrógeno, alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₄, alcoxi C₁-C₄ o alquenilo C₂-C₄ y R₂ es alquilo C₁-C₆, alquenilo C₂-C₄, ciclohexilo, bencilo, α,α-dimetilbencilo o fenilo que está opcionalmente sustituido con uno o dos átomos de cloro o grupos metilo o bien R₁ y R₂ forman, junto con el átomo de nitrógeno al que están enlazados, un anillo heterocíclico que opcionalmente está interrumpido por uno o más heteroátomos; composiciones herbicidas que contienen dichos compuestos sustituidos de 3-(2-aril-2-propil)urea como ingredientes activos y un método para el control del crecimiento de la maleza que utiliza estos compuestos y composiciones.

15

20

25

Los compuestos de fórmula general (I) pueden ser preparados por métodos de manufactura de derivados de urea. Por ejemplo, pueden ser preparados haciendo reaccionar un isocianato de fórmula general (II):



30

1 donde Ar tiene el significado dado anteriormente para la fórmula general (I), con una amina de fórmula general (III):



5 donde R₁ y R₂ tienen el significado dado anteriormente para la fórmula general (I). La reacción puede llevarse a cabo sin ningún disolvente o en un disolvente apropiado. Puede utilizarse cualquier disolvente, polar o no polar, aunque se
10 prefieren los disolventes apróticos que no contienen átomos de hidrógeno activo a la vista de la estabilidad del reactivo isocianato. Los disolventes preferidos son benceno, tolueno, xileno, clorobenceno, hidrocarburos alifáticos, diclorometano, cloroformo, tetracloruro de carbono, acetona, metilisobutilcetona (MIBK), acetonitrilo, éter dietílico y/o
15 acetato de etilo. En la práctica, la selección del disolvente adecuado se hace sobre la base de la solubilidad de la amina reaccionante, la cristalinidad del producto resultante etc. La reacción se lleva a cabo habitualmente a una temperatura
20 comprendida entre 10 y 120°C, durante varios minutos a 12 horas. Con las aminas aromáticas secundarias, la reacción se efectúa habitualmente a 60-120°C, durante 2-4 horas. En general, utilizando aminas alifáticas primarias se obtienen productos con buena cristalinidad mientras que el uso
25 de aminas alifáticas secundarias da lugar a productos con menor cristalinidad, aunque con mayor reactividad.

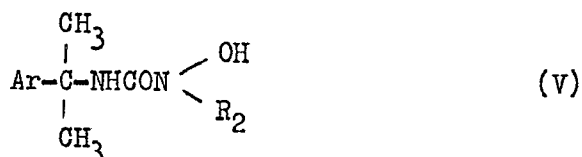
Los compuestos de fórmula general (I) donde R₁ es alcoxi y R₂ es fenilo opcionalmente sustituido con uno o dos átomos de cloro o grupos metilo también pueden ser preparados
30 haciendo reaccionar un isocianato de fórmula general (II)

1 con una N-fenilhidroxilamina de fórmula general (IV):



donde R_2 tiene el significado dado anteriormente. La N-hidroxilurea resultante de fórmula general (V):

5



10

donde Ar tiene el significado antes descrito para la fórmula general (I) y R_2 tiene el mismo significado que antes, se hace reaccionar después con un alcoholato sódico, v.g. etóxido sódico, en etanol y finalmente con un haluro de alquilo, v.g. un cloruro, bromuro o yoduro de alquilo, para dar el producto deseado. La reacción final puede llevarse a cabo calentando las sustancias reaccionantes a 30-80°C.

15

El isocianato de fórmula general (II), que es uno de los materiales de partida, también puede ser preparado por cualquier método conocido. Por ejemplo, se hace reaccionar un ácido carboxílico de fórmula general (VI):

20



25

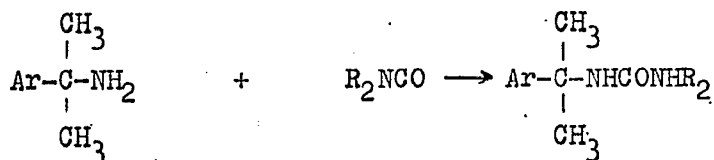
donde Ar tiene el significado dado anteriormente para la fórmula general (I), con cloruro de tionilo para dar el correspondiente cloruro de ácido. El cloruro de ácido se somete después a la transposición de Curtius para dar el isocianato deseado de fórmula general (II). Esta reacción puede llevarse a cabo, por ejemplo, agregando una solución acuosa de azida sódica a una solución del cloruro de ácido en un disolvente, v.g. acetona. En general, las temperaturas de reacción son de 0 a 20°C y los tiempos de reacción de 30 minutos a

30

1 2 horas. A la mezcla de reacción se agrega agua en un disol-
vente orgánico como benceno. La capa de disolvente orgánico
se seca sobre sulfato sódico anhidro y se calienta a 50-80°C
durante 30 minutos a 2 horas. La mezcla de reacción resul-
5 tante que contiene el isocianato deseado puede ser utilizada
directamente en las reacciones posteriores.

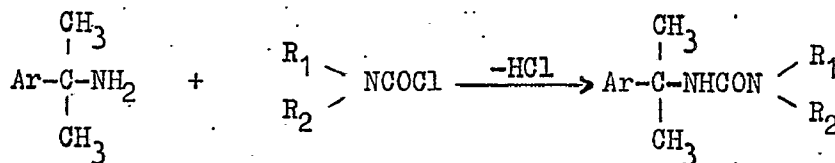
El ácido carboxílico de fórmula general (VI) puede ser
preparado, por ejemplo, por dimetilación del correspondiente
cianuro de bencilo (véase, por ejemplo, A.C. Cope, T.T.
10 Foster y P.H. Towle, J. Amer. Chem. Soc., 71, 3929 (1949)
o L.B. Taranko y R.H. Perry, Jr., J. Org. Chem., 34, 226
(1969)) para formar el correspondiente nitrilo. El nitrilo
puede ser hidrolizado después a la correspondiente amida por
métodos convencionales. La hidrólisis del nitrilo y la co-
15 rrespondiente amida puede realizarse, por ejemplo, calentando
el nitrilo a 80-100°C, durante 2-4 horas, junto con ácido
sulfúrico al 80 %. La amida así obtenida puede ser hidroliza-
da también al correspondiente ácido carboxílico de fórmula
general (VI) (véase, por ejemplo, N. Sperber, D. Papa, E.
20 Schwenk, J. Am. Chem. Soc., 70, 3091 (1948)) por tratamiento
de la amida con un exceso de un nitrito orgánico y cloruro
de hidrógeno gaseoso.

Los compuestos de fórmula general (I) también pueden
ser preparados de acuerdo con los siguientes esquemas de
25 reacción:



30

1



5

En la Tabla I se encuentran ejemplos típicos de los compuestos de esta invención. Los compuestos ilustrados en la Tabla reciben una serie de números de clave. En lo que sigue, los compuestos serán identificados por estos números de clave.

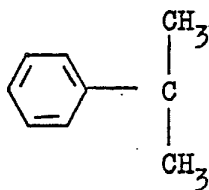
10

En la Tabla I, los puntos de fusión se tomaron en un aparato caliente de Koffler, los espectros de RMN se obtuvieron empleando un 60-MHz en CDCl_3 , CCl_4 o $\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$ con TMS (tetrametilsilano) como patrón interno. Los símbolos s, d, t, q, m. y J representan respectivamente singlete, doblete, triplete, cuartete, multiplete, y constante de acoplamiento spin-spin.

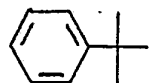
15

En relación con la estructura química, la estructura del 2-fenilpropan-2-ilo

20



es abreviada a



25

30

TABLA I

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN, valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
1				RMN (CCl ₄) 1,62 (6H, s), 3,01 (3H, s), 4,80 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
5		25	1,5684 (pureza 80 %)	
10		63-64		RMN (CCl ₄) 1,49 (6H, s), 6,08 (3H, s), 4,44 (1H, s), 7,0-7,65 (9H, m)
15		52-53		RMN (CCl ₄) 1,50 (6H, s), 2,35 (3H, s), 3,07 (3H, s), 4,49 (1H, s), 6,9-7,4 (8H, m)
20			26	1,5588
25			22	1,5618 (pureza 80 %)
30		69		RMN (CCl ₄) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,47 (6H, s), 3,61 (2H, q, J = 7 Hz), 4,47 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m)

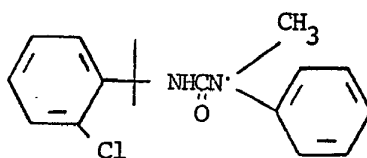
TABLA I

Compues- to n°	Estructura química	Constante Punto de fu- sión (°C)
-------------------	--------------------	--

1

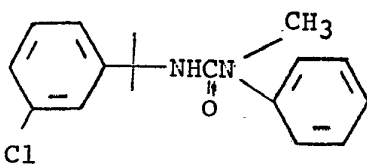
5

1



10

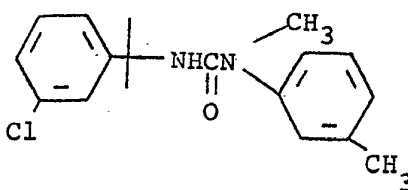
2



63-64

15

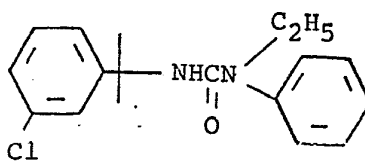
3



52-53

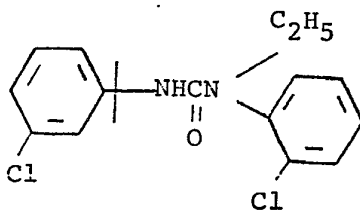
20

4



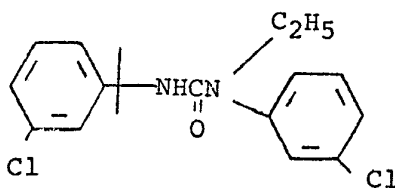
25

5



30

6



69

BLA I

Constante física		RMN, valores δ , 60 MHz (ppm)
Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
	n_D^{25} 1,5684 (pureza 80 %)	RMN (CCl ₄) 1,62 (6H, s), 3,01 (3H, s), 4,80 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
63-64		PMN (CCl ₄) 1,49 (6H, s), 6,08 (3H, s), 4,44 (1H, s), 7,0-7,65 (9H, m)
52-53		RMN (CCl ₄) 1,50 (6H, s), 2,35 (3H, s), 3,07 (3H, s), 4,49 (1H, s), 6,9-7,4 (8H, m)
	n_D^{26} 1,5588	RMN (CCl ₄) 1,04 (3H, t, J = 7 Hz), 1,49 (6H, s), 3,57 (2H, q, J = 7 Hz), 4,26 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m).
	n_D^{22} 1,5618 (pureza 80 %)	RMN (CCl ₄) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,47 (6H, s), 3,61 (2H, q, J = 7 Hz), 4,47 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n.º	Estructura química	Constante física		RMN, valores δ . 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
7		116-117		RMN (CDCl ₃) 1,01 (3H, t, J = 7 Hz), 1,51 (6H, s), 3,59 (2H, q, J = 7 Hz), 4,39 (1H, s), 7,0-7,55 (8H, m)
8			18 n_D 1,5537	RMN (CCl ₄) 0,92 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,6 (4H, m), 1,47 (6H, s), 3,51 (2H, t, J = 7 Hz), 4,32 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
9		70-71		RMN (CDCl ₃) 1,51 (6H, s), 3,13 (3H, s), 4,63 (1H, s), 7,2-7,5 (9H, m)
10		106		RMN (CDCl ₃) 1,63 (6H, s), 3,12 (3H, s), 4,83 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m)
11		78-79		
12		110		RMN (CDCl ₃) 0,90 (3H, t, J = 7 Hz), 1,63 (6H, s), 3,56 (2H, q, J = 7 Hz), 4,64 (1H, s), 7,0-7,6 (7H, m)

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continua)

Constante física

Compuesto n°	Estructura química	Punto de fusión (°C)	Índice de refracción
7		116-117	
8			n_D^{18} 1
9		70-71	
10		106	
11		78-79	
12		110	

1
5
10
15
20
25
30

TABLA I (continuación)

Constante física		
temperatura de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	RMN, valores δ . 60 MHz (ppm)
116-117		RMN(CDCl ₃) 1,01 (3H, t, J = 7 Hz), 1,51 (6H, s), 3,59 (2H, q, J = 7 Hz), 4,39 (1H, s), 7,0-7,55 (8H, m)
	n_D^{18} 1,5537	RMN(CCl ₄) 0,92 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,6 (4H, m), 1,47 (6H, s), 3,51 (2H, t, J = 7 Hz), 4,32 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
70-71		RMN(CDCl ₃) 1,51 (6H, s), 3,13 (3H, s), 4,63 (1H, s), 7,2-7,5 (9H, m)
106		RMN(CDCl ₃) 1,63 (6H, s), 3,12 (3H, s), 4,83 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m).
78-79		
110		RMN(CDCl ₃) 0,90 (3H, t, J = 7 Hz), 1,63 (6H, s), 3,56 (2H, q, J = 7 Hz), 4,64 (1H, s), 7,0-7,6 (7H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN, valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
13		78		
14		82-83		RMN(CDCl ₃) 1,50 (6H, s), 3,14 (3H, s), 4,60 (1H, s), 7,2-7,5 (8H, m)
15			n_D^{23} 1,5680	RMN(CDCl ₃) 1,52 (6H, s), 2,39 (3H, s), 3,13 (3H, s), 4,64 (1H, s), 6,9-7,55 (7H, m)
16			n_D^{23} 1,5632	RMN(CDCl ₃) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,48 (6H, s), 3,63 (2H, q, J = 7 Hz), 4,46 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
17			n_D^{23} 1,5578	
18		65		
19		52-53	(Pureza 80 %)	RMN(CDCl ₃) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz), 1,49 (6H, s), 2,37 (3H, s), 3,58 (2H, q, J = 7 Hz), 4,44 (1H, s), 7,0-7,55 (7H, m)

TABLA I (continuac:

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción
13		78	
14		82-83	
15			n_D^{23} 1,56
16			n_D^{23} 1,56
17			n_D^{23} 1,55
18		65	
19		52-53	(pureza

1
5
10
15
20
25
30

TABLA I (continuación)

<u>Constante física</u>		<u>RMN, valores δ, 60 MHz (ppm)</u>
<u>Temperatura de medición (°C)</u>	<u>Índice de refrac- ción (n_D)</u>	
78		
82-83		RMN(CDCl ₃) 1,50 (6H, s), 3,14 (3H, s), 4,60 (1H, s), 7,2-7,5 (8H, m)
	n_D^{23} 1,5680	RMN(CDCl ₃) 1,52 (6H, s), 2,39 (3H, s), 3,13 (3H, s), 4,64 (1H, s), 6,9-7,55 (7H, m)
	n_D^{23} 1,5632	RMN(CDCl ₃) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,48 (6H, s), 3,63 (2H, q, J = 7 Hz), 4,46 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
	n_D^{23} 1,5578	
65		
52-53	(pureza 80 %)	RMN(CDCl ₃) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz), 1,49 (6H, s), 2,37 (3H, s), 3,58 (2H, q, J = 7 Hz), 4,44 (1H, s), 7,0-7,55 (7H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN, valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
20			23 1,5610 n _D (pureza 75 %)	RMN (CDCl ₃) 0,81 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,5 (2H, m), 1,48 (6H, s), 3,53 (2H, t, J = 7 Hz), 4,47 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
21			23 1,5608 n _D (pureza 65 %)	RMN (CDCl ₃) 0,81 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,5 (4H, m), 1,47 (6H, s), 3,56 (2H, t, J = 7 Hz), 4,47 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
22				RMN (CDCl ₃) 0,91 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,7 (4H, m), 1,62 (6H, s), 2,83 (3H, s), 3,17 (2H, q, J = 7 Hz), 4,64 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)
23				RMN (CDCl ₃) 1,08 (6H, t, J = 7 Hz), 1,76 (6H, s), 3,16 (4H, q, J = 7 Hz), 4,96 (1H, s), 7,0-7,6 (4H, m)
24				RMN (CDCl ₃) 1,13 (6H, t, J = 7 Hz), 1,64 (6H, s), 3,21 (4H, q, J = 7 Hz), 4,60 (1H, s), 7,2-7,5 (4H, m)
25				RMN (CDCl ₃) 0,91 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,7 (4H, m), 1,62 (6H, s), 2,83 (3H, s), 3,17 (2H, q, J = 7 Hz), 4,64 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)
26				

1

5

10

15

20

25

50

TABLE I (continued)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
20			n _D ²³ 1,561 (pureza 7)
21			n _D ²³ 1,560 (pureza 6)
22		130-131	*
23		103-104	
24		93	
25		90-92	
26		119	

BLA I (continuación)

Constante física

Indice de refrac
ción (n_D)

RMN, valores δ , 60 MHz (ppm)

n_D²³ 1,5610
(pureza 75 %)

RMN(CDCl₃) 0,81 (3H, t, J = 7 Hz),
1,0-1,5 (2H, m), 1,48 (6H, s),
3,53 (2H, t, J = 7 Hz), 4,47 (1H,
s), 7,0-7,6 (8H, m)

n_D²³ 1,5608
(pureza 65 %)

RMN(CDCl₃) 0,81 (3H, t, J = 7 Hz),
1,0-1,5 (4H, m), 1,47 (6H, s), 3,56
(2H, t, J = 7 Hz), 4,47 (1H, s),
7,0-7,6 (8H, m)

)-131

RMN(CDCl₃) 0,91 (3H, t, J = 7 Hz),
1,0-1,7 (4H, m), 1,62 (6H, s),
2,83 (3H, s), 3,17 (2H, q, J = 7
Hz), 4,64 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)

3-104

RMN(CDCl₃) 1,08 (6H, t, J = 7 Hz),
1,76 (6H, s), 3,16 (4H, q, J = 7
Hz), 4,96 (1H, s), 7,0-7,6 (4H, m)

93

RMN(CDCl₃) 1,13 (6H, t, J = 7 Hz),
1,64 (6H, s), 3,21 (4H, q, J = 7
Hz), 4,60 (1H, s), 7,2-7,5 (4H, m)

)-92

RMN(CDCl₃) 0,91 (3H, t, J = 7 Hz),
1,0-1,7 (4H, m), 1,62 (6H, s),
2,83 (3H, s), 3,17 (2H, q, J = 7
Hz), 4,64 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN, valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión(°C)	Índice de refracción (n _D)	
27		113		RMN (CDCl ₃) 0,95-1,9 (10H, m), 1,58 (6H, s), 3,25 (2H, m), 4,1 (1H, ancho), 4,80 (1H, s), 5,08-6,20 (3H, m), 7,0-7,3 (4H, m)
28		115		
29		94-95		RMN (CDCl ₃) 1,10 (6H, t, J = 7 Hz) 1,58 (6H, s), 3,22 (4H, q, J = 7 Hz), 4,60 (1H, s), 7,24 (4H, s)
30		138-139		RMN (CDCl ₃) 1,0-1,9 (10H, m), 1,62 (6H, s), 2,70 (3H, s), 3,90 (1H, ancho), 4,64 (1H, s), 7,05-7,35 (4H, m)
31		75		RMN (CDCl ₃) 1,09 (6H, t, J = 7 Hz) 1,74 (6H, s), 3,19 (4H, q, J = 7 Hz), 4,90 (1H, s), 7,05-7,55 (3H, m)
32		121-122		RMN (CDCl ₃) 1,60 (6H, s), 2,84 (6H, s), 4,70 (1H, s), 7,2-7,5 (3H, m)
33		93-94		

TABLA I (continuac:

Compues to n ^o	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión(°C)	Índice de ción (n _D)
27		113	
28		115	
29		94-95	
30		138-139	
31		75	
32		121-122	
33		93-94	

BLA I (continuación)

Constante física

to de Índice de refrac
ión(°C) ción (n_D)

RMN, valores δ , 60 MHz (ppm)

113

RMN(CDCl₃) 0,95-1,9 (10H, m),
1,58 (6H, s), 3,25 (2H, m), 4,1
(1H, ancho), 4,80 (1H, s), 5,08-
6,20 (3H, m), 7,0-7,3 (4H, m)

115

RMN(CDCl₃) 1,10 (6H, t, J = 7 Hz)
1,58 (6H, s), 3,22 (4H, q, J = 7
Hz), 4,60 (1H, s), 7,24 (4H, s)

94-95

RMN(CDCl₃) 1,0-1,9 (10H, m), 1,62
(6H, s), 2,70 (3H, s), 3,90 (1H,
ancho), 4,64 (1H, s), 7,05-7,35
(4H, m)

138-139

RMN(CDCl₃) 1,09 (6H, t, J = 7 Hz)
1,74 (6H, s), 3,19 (4H, q, J = 7
Hz), 4,90 (1H, s), 7,05-7,55 (3H,
m)

75

RMN(CDCl₃) 1,60 (6H, s), 2,84 (6H,
s), 4,70 (1H, s), 7,2-7,5 (3H, m)

121-122

93-94

TABLA I (continuación)

Compuesto no	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
34		102-103	
35		84	
36		67-68	
37		109	
38		150-151	
39		164-165	

PMN, valores δ , 60 MHz (ppm)

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continua)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física Punto de fusión (°C) Índice de refracción (n _D)
34		102-103
35		84
36		67-68
37		109
38		150-151
39		164-165

1
5
10
15
20
25
30

TABLA I (continuación)

<u>Constante física</u>		
<u>Punto de fusión (°C)</u>	<u>Índice de refracción (n_D)</u>	<u>RMN, valores δ, 60 MHz (ppm)</u>

102-103

84

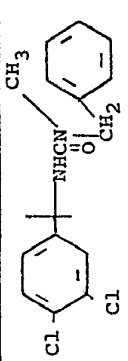
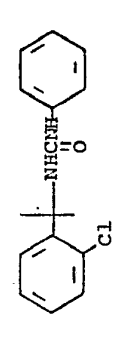
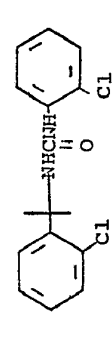
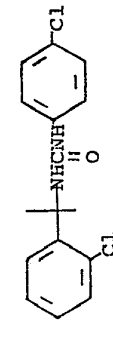
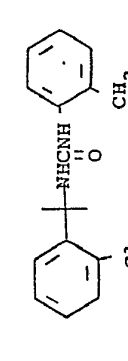
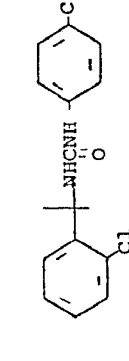
67-68

109

150-151

164-165

TABLE I (continuación)

Compu- esto n.º	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Indice de refrac- ción (n _D)
40		82-83	1.540
41		176-177	1.530
42		198-198	1.520
43		239-240	1.510
44		205-206	1.500
45		185-186	1.490

1

5

10

15

20

25

30

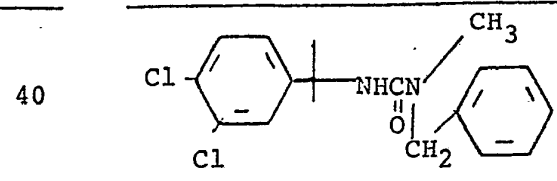
TABLA I (continuac

1
5
10
15
20
25
30

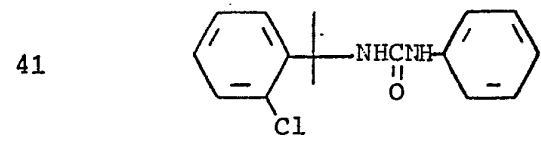
Compues
to n°

Estructura química

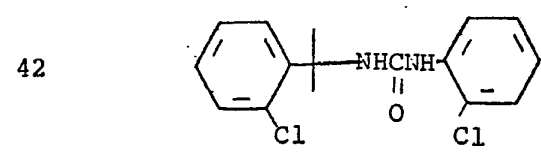
Constante fí:
Punto de
fusión. (°C) Índic
 cíd



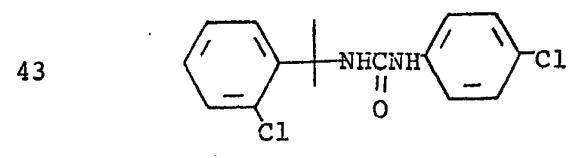
82-83



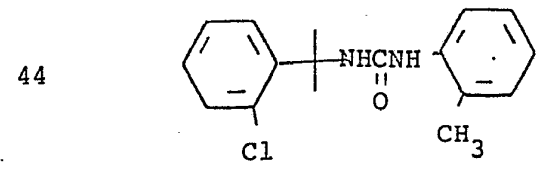
176-177



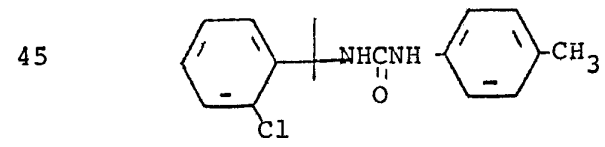
198-198



239-240



205-206



185-186

IA I (continuación)

<u>Constante física</u>		
<u>temperatura de</u> <u>medición (°C)</u>	<u>Indice de refrac-</u> <u>ción (n_D)</u>	<u>RMN, valores δ, 50 MHz</u> <u>(ppm)</u>

2-83

76-177

198-198

239-240

205-206

185-186

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN, valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
46		222		
47		226		
48		183		
49		223		
50		214		
51		225		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (cor :inuac:

1
5
10
15
20
25
30

Compues to n°	Esturctura química	Const ante f Punto de fusión (° C)
46		222
47		226
48		183
49		223
50		214
51		225

TABLA I (continuación)

<u>Constante física</u>		<u>RMN, valores δ, 60 MHz (ppm)</u>
<u>Punto de fusión (°C)</u>	<u>Índice de refrac- ción (n_D)</u>	
222		
226		
183		
223		
214		
225		

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
52		204		
53		226-227		
54		202		
55		235		
56		65		
57		204		RMN (CDCl ₃) 1,50 (6H, s), 1,56 (6H, s), 5,30 (2H, s ancho), 7,2-7,4 (8H, m)

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuac:

Compues to n°	Estructura química	Constante fís	
		Punto de fusión(°C)	Indic ci6
52		204	
53		226-227	
54		202	
55		235	
56		65	
57		204	

TABLA I (continuación)

Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
Punto de fusión(°C)	Índice de refrac- ción (n_D)	

204

226-227

202

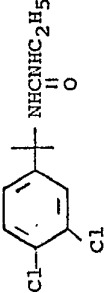
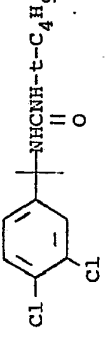
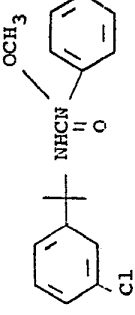
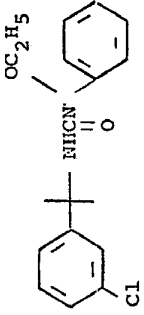
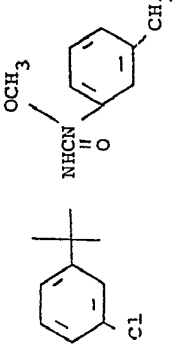
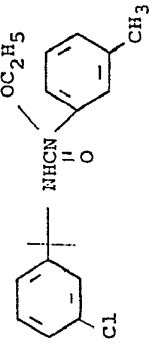
235

65

204

RMN(CDCl₃) 1,50 (6H, s), 1,56
(6H, s), 5,30 (2H, s ancho), 7,2-
7,4 (8H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN, valores δ60, MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
58		164		RMN (CDCl ₃) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz), 1,53 (6H, s), 3,05 (2H, q, J = 7 Hz), 4,80 (1H, s ancho), 5,42 (1H, s), 7,2-7,5 (3H, m)
59		232-233		
60		77		RMN (CCl ₄) 1,64 (6H, s), 3,65 (3H, s), 6,18 (1H, s), 6,8-7,5 (9H, m)
61		71		RMN (CCl ₄) 1,28 (3H, t, J = 7 Hz), 1,64 (6H, s), 3,87 (2H, q, J = 7 Hz), 6,16 (1H, s), 6,8-7,5 (9H, m)
62		87		RMN (CCl ₄) 1,63 (6H, m), 2,27 (3H, s), 3,64 (3H, s), 6,17 (1H, s), 6,7-7,3 (8H, m)
63		85-86		

1

5

10

15

20

25

30

1 TABLA I (continua)

1

5

10

15

20

25

30

Compues to n°	Estructura química	Constante fisi Punto de Indi fusión (°C) refra
58		164
59		232-233
60		77
61		71
62		87
63		85-86

3LA I (continuación)

Constante física		RMN, valores δ 60, MHz (ppm)
Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
164		RMN(CDCl ₃) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz), 1,53 (6H, s), 3,05 (2H, q, J = 7 Hz), 4,80 (1H, s ancho), 5,42 (1H, s), 7,2-7,5 (3H, m)
232-233		
77		RMN(CCl ₄) 1,64 (6H, s), 3,65 (3H, s), 6,18 (1H, s), 6,8-7,5 (9H, m)
71		RMN(CCl ₄) 1,28 (3H, t, J = 7 Hz), 1,64 (6H, s), 3,87 (2H, q, J = 7 Hz), 6,16 (1H, s), 6,8-7,5 (9H, m)
87		RMN(CCl ₄) 1,63 (6H, m), 2,27 (3H, s), 3,64 (3H, s), 6,17 (1H, s), 6,7-7,3 (8H, m)
85-86		

TABLA I (continuación)

Compu- esto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fu- sión (°C)	Índice de refrac- ción (n _D ²⁷)	
64			n _D ²⁷ 1,5663	RMN (CDCl ₃) 1,66 (6H, s), 3,71 (3H, s), 6,32 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
65			n _D ²⁷ 1,5940 (pureza 65 %)	RMN (CDCl ₃) 1,66 (6H, s), 3,71 (3H, s), 6,32 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
66			n _D ²⁷ 1,5788 (pureza 65 %)	RMN (CDCl ₃) 1,67 (6H, s), 3,71 (3H, s), 6,34 (1H, s), 6,9-7,6 (7H, m)
67			n _D ²⁷ 1,5866 (pureza 60 %)	RMN (CDCl ₃) 1,63 (6H, s), 2,22 (3H, s), 3,69 (3H, s), 6,36 (1H, s), 6,9-7,6 (7H, m)
68		60-62		RMN (CCl ₄) 1,52 (6H, s), 3,07 (3H, s), 4,63 (1H, s), 7,0-7,3 (8H, m)
69		82		RMN (CDCl ₃) 1,57 (6H, s), 3,13 (3H, s), 4,65 (1H, s), 7,0-7,6 (7H, m)

TABLE I (contin)

1
5
10
15
20
25
30

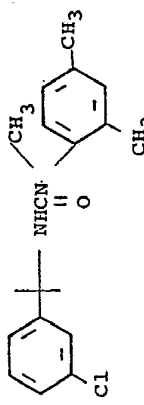
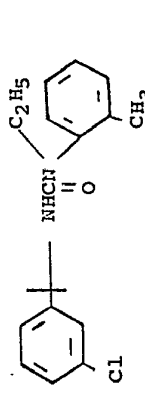
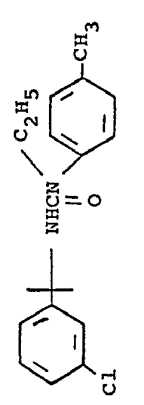
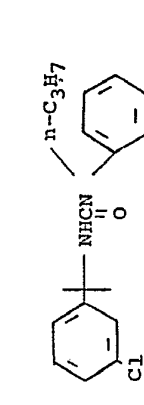
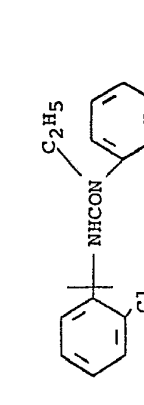
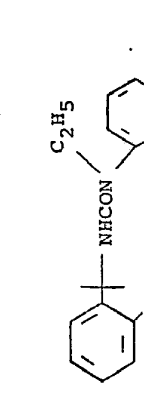
Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Índice d ción (
64			n_D^{27} 1,
65			n_D^{27} 1, (purez
66			n_D^{27} 1, (purez
67			n_D^{27} 1, (purez
68		60-62	
69		82	

TABLA I (continuación)

Constante física

<u>de fu</u> <u>(°C)</u>	<u>Indice de refrac</u> <u>ción (n_D)</u>	<u>RMN valores δ, 60 MHz (ppm)</u>
	n_D^{27} 1,5663	
	n_D^{27} 1,5940 D (pureza 65 %)	RMN(CDCl ₃) 1,66 (6H, s), 3,71 (3H, s), 6,32 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
	n_D^{27} 1,5788 D (pureza 65 %)	RMN(CDCl ₃) 1,67 (6H, s), 3,71 (3H, s), 6,34 (1H, s), 6,9-7,6 (7H, m)
	n_D^{27} 1,5866 D (pureza 60 %)	RMN(CDCl ₃) 1,63 (6H, s), 2,22 (3H, s), 3,69 (3H, s), 6,36 (1H, s), 6,9-7,6 (7H, m)
60-62		RMN(CCl ₄) 1,52 (6H, s), 3,07 (3H, s), 4,63 (1H, s), 7,0-7,3 (8H, m)
82		RMN(CDCl ₃) 1,57 (6H, s), 3,13 (3H, s), 4,65 (1H, s), 7,0-7,6 (7H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
70		74-75		RMN (CDCl ₃) 1,50 (6H, s), 2,24 (3H, s), 2,33 (3H, s), 3,04 (3H, s), 4,37 (1H, s), 7,0-7,3 (7H, m)
71		53-54		RMN (CCl ₄) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,48 (6H, s), 2,26 (3H, s), 3,47 (2H, ancho), 4,06 (1H, s), 7,0-7,3 (8H, m)
72		83		RMN (CDCl ₃) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz), 1,49 (6H, s), 2,34 (3H, s), 3,59 (2H, q, J = 7 Hz), 4,46 (1H, s), 7,1
73		48-48		RMN (CDCl ₃) 0,81 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-1,5 (2H, m), 1,49 (6H, s), 3,52 (2H, t, J = 7 Hz), 4,44 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
74			n _D ²⁴ 1,5594 (pureza 70 %)	RMN (CCl ₄) 0,99 (3H, t, J = 7 Hz), 1,62 (6H, s), 3,55 (2H, q, J = 7 Hz), 4,63 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
75			n _D ²⁴ 1,5668 (pureza 70 %)	RMN (CCl ₄) 1,05 (3H, t, J = 7 Hz), 1,66 (6H, s), 3,54 (2H, q, J = 7 Hz), 4,70 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m)

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continua)

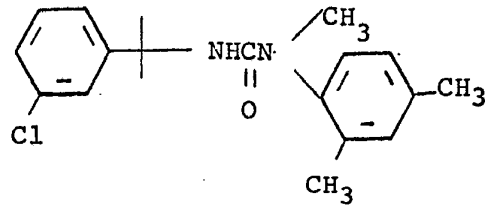
1
5
10
15
20
25
30

Compuesto n°

Estructura química

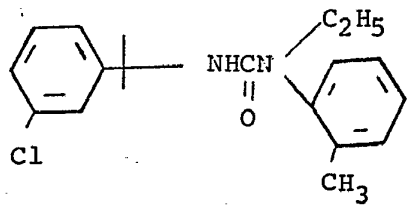
Constante física
Punto de fusión (°C) Índice

70



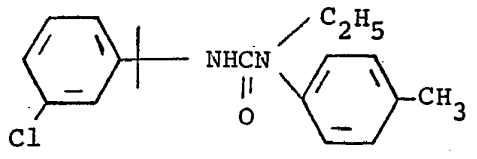
74-75

71



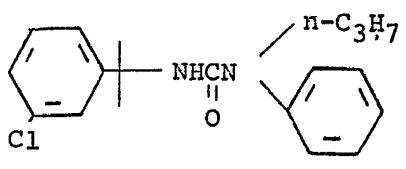
53-54

72



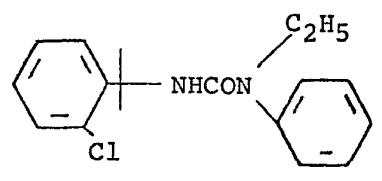
83

73



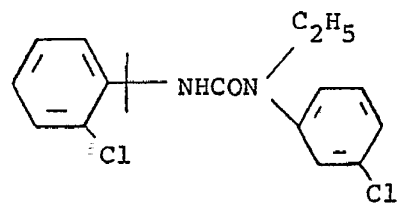
48-48

74



n_D²⁴
(pur)

75



n_D²⁴
(pur)

TABLA I (continuación)

Constante física		
Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
74-75		RMN(CDCl ₃) 1,50 (6H, s), 2,24 (3H, s), 2,33 (3H, s), 3,04 (3H, s), 4,37 (1H, s), 7,0-7,3 (7H, m)
53-54		RMN(CCl ₄) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,48 (6H, s), 2,26 (3H, s), 3,47 (2H, ancho), 4,06 (1H, s), 7,0-7,3 (8H, m)
83		RMN(CDCl ₃) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz), 1,49 (6H, s), 2,34 (3H, s), 3,59 (2H, q, J = 7 Hz), 4,46 (1H, s), 7,
48-48		RMN(CDCl ₃) 0,81 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-1,5 (2H, m), 1,49 (6H, s), 3,52 (2H, t, J = 7 Hz), 4,44 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
	n_D^{24} 1,5594 (pureza 70 %)	RMN(CCl ₄) 0,99 (3H, t, J = 7 Hz), 1,62 (6H, s), 3,55 (2H, q, J = 7 Hz), 4,63 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
	n_D^{24} 1,5668 (pureza 70%)	RMN(CCl ₄) 1,05 (3H, t, J = 7 Hz), 1,66 (6H, s), 3,54 (2H, q, J = 7 Hz), 4,70 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m)

TABLA I (continuación)

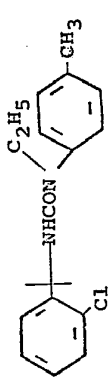
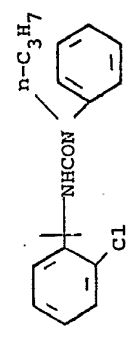
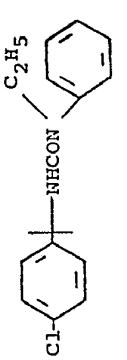
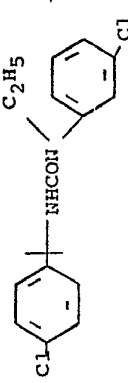
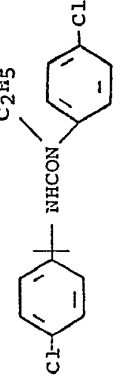
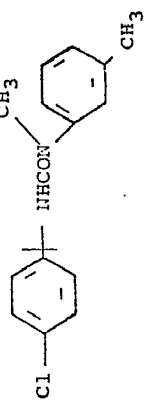
Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D ²⁴)	
76			n _D ²⁴ 1,5542 (pureza 70%)	RMN (CCl ₄) 0,97 (3H, t, J = 7 Hz), 1,62 (6H, s), 2,35 (3H, s), 3,51 (2H, q, J = 7 Hz), 4,60 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m)
77			n _D ²⁴ 1,5527	RMN (CCl ₄) 0,79 (3H, t, J = 7 Hz), 1,2-1,6 (2H, m), 1,62 (6H, s), 3,46 (2H, t, J = 7 Hz), 4,62 (1H, s)
78			n _D ²⁴ 1,5613	RMN (CCl ₄) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,48 (6H, s), 3,59 (2H, q, J = 7 Hz), 4,34 (1H, s), 7,2-7,4 (4H, m), 7,16 (4H, s)
79		106	n _D ²⁴ 1,5712	
80				
81		55		RMN (CDCl ₃) 1,53 (6H, s), 2,40 (3H, s), 3,17 (3H, s), 4,67 (1H, s), 7,0-7,4 (4H, m), 7,28 (4H, s)

TABLA I (continuación)

1

5

10

15

20

25

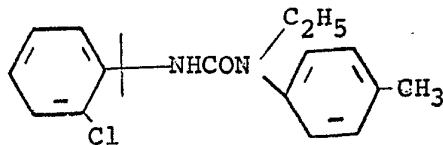
30

Compues
to n°

Estructura química

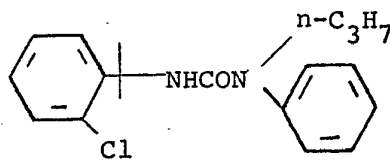
Constante física
Punto de fu- Índice de re
sión (°C) ción (n_D²⁴)

76



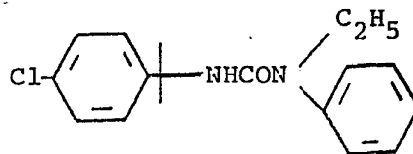
n_D²⁴ 1,5542
(pureza 70%)

77



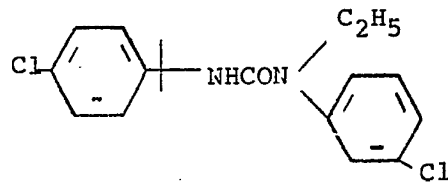
n_D²⁴ 1,5527

78



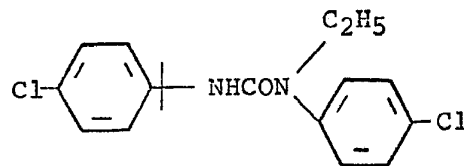
n_D²⁴ 1,5613

79



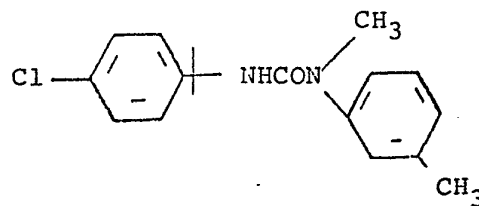
n_D²⁴ 1,5712

80



106

81



55

BLA I (continuación)

Constante física

de fu- (°C)	Indice de refrac- ción (n_D)	RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
n_D^{24} 1,5542 (pureza 70%)		RMN (CCl ₄) 0,97 (3H, t, J = 7 Hz), 1,62 (6H, s), 2,35 (3H, s), 3,51 (2H, q, J = 7 Hz), 4,60 (1H, s), 7,0-7,5 (8H, m)
n_D^{24} 1,5527		RMN (CCl ₄) 0,79 (3H, t, J = 7 Hz), 1,2-1,6 (2H, m), 1,62 (6H, s), 3,46 (2H, t, J = 7 Hz), 4,62 (1H, s)
n_D^{24} 1,5613		RMN (CCl ₄) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,48 (6H, s), 3,59 (2H, q, J = 7 Hz), 4,34 (1H, s), 7,2-7,4 (4H, m), 7,16 (4H, s)
n_D^{24} 1,5712		

106

55

RMN (CDCl₃) 1,53 (6H, s), 2,40 (3H,
s), 3,17 (3H, s), 4,67 (1H, s),
7,0-7,4 (4H, m), 7,28 (4H, s)

TABLA I (continuación)

Compues to n.º	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sión (°C)	Índice de refrac- ción (n_D)	
82		55		RMN (CDCl ₃) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz), 1,51 (6H, s), 2,39 (3H, s), 3,60 (2H, q, J = 7 Hz), 4,50 (1H, s), 7,1- 7,2 (4H, m), 7,24 (4H, s)
83			$n_D^{24} : 1,5610$	RMN (CCl ₄) 0,83 (3H, t, J = 7 Hz), 1,2-1,7 (2H, m), 1,48 (6H, s), 3,50 (2H, t, J = 7 Hz), 4,31 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
84			$n_D^{24} : 1,5503$	
85		56		RMN (CDCl ₃) 1,57 (6H, s), 2,15 (1H, t, J = 3 Hz), 4,31 (2H, d, J = 3 Hz), 4,61 (1H, s), 7,1-7,4 (8H, m)
86		91-92		RMN (CDCl ₃) 1,71 (6H, s), 3,74 (3H, s), 6,33 (1H, s), 7,1-7,6 (9H, m)
87		65		RMN (CDCl ₃) 1,34 (3H, t, J = 7 Hz), 1,73 (6H, s), 3,95 (2H, q, J = 7 Hz), 6,36 (1H, s), 7,1-7,6 (9H, m)

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuac

1
5
10
15
20
25
30

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refra ción (n _D)
82		55	
83			n _D ²⁴ : 1,5610
84			n _D ²⁴ : 1,5503
85		56	
86		91-92	
87		65	

TABLA I (continuación)

ante física

f_u Índice de refrac-
ción (n_D)

RMN valores δ, 60 MHz (ppm).

n_D²⁴ : 1,5610

RMN(CDCl₃) 1,02 (3H, t, J = 7 Hz),
1,51 (6H, s), 2,39 (3H, s), 3,60
(2H, q, J = 7 Hz), 4,50 (1H, s), 7,1-
7,2 (4H, m), 7,24 (4H, s)

RMN(CCl₄) 0,83 (3H, t, J = 7 Hz),
1,2-1,7 (2H, m), 1,48 (6H, s), 3,50
(2H, t, J = 7 Hz), 4,31 (1H, s),
7,0-7,5 (9H, m)

n_D²⁴ : 1,5503

RMN(CDCl₃) 1,57 (6H, s), 2,15 (1H,
t, J = 3 Hz), 4,31 (2H, d, J = 3 Hz),
4,61 (1H, s), 7,1-7,4 (8H, m)

RMN(CDCl₃) 1,71 (6H, s), 3,74 (3H,
s), 6,33 (1H, s), 7,1-7,6 (9H, m)

RMN(CDCl₃) 1,34 (3H, t, J = 7 Hz),
1,73 (6H, s), 3,95 (2H, q, J = 7 Hz),
6,36 (1H, s), 7,1-7,6 (9H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Punto de fusión (°C)	Constante física Índice de refracción (n _D ²⁰)	RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
88		50		RMN(CCl ₄) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz), 1,3-1,9 (2H, m), 1,66 (6H, s), 3,80 (2H, t, J = 7 Hz), 6,17 (1H, s), 6,9-7,6 (9H, m)
89			n _D ²⁰ 1,5564 (pureza 80%)	RMN(CCl ₄) 1,25 (6H, d, J = 7 Hz), 1,65 (6H, s), 4,04 (1H, hep., J = 7 Hz), 6,17 (1H, s), 7,0-7,5 (9H, m)
90		75		
91		89-90		
92		<50		
93		73		

1

5

10

15

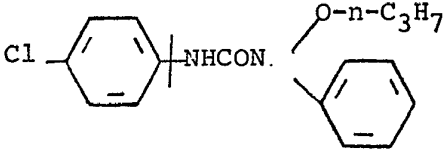
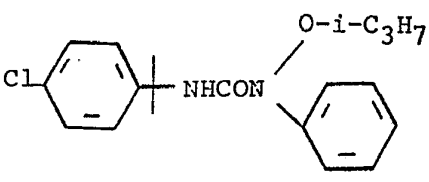
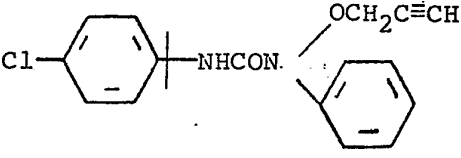
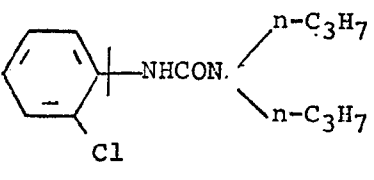
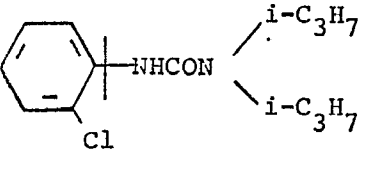
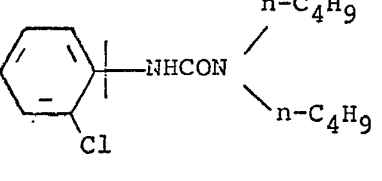
20

25

30

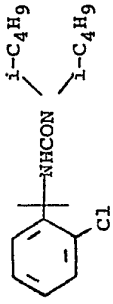
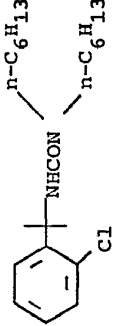
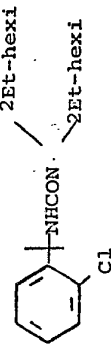
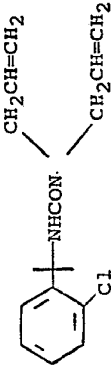
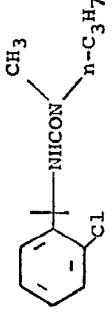
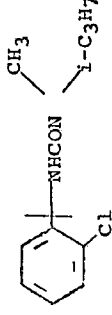
TABLA I (continua)

1
5
10
15
20
25
30

Compuesto n°	Estructura química	Constantes físicas	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)
88		50	
89			n_D^{20} 1,5564 (pureza 80%)
90		75	
91		89-90	
92		<50	
93		73	

BLA I (continuación)datos físicosn_D²⁰ Índice de refrac-
ción (n_D²⁰)n_D²⁰ 1,5564
(pureza 80%)RMN valores δ , 60 MHz (ppm)RMN(CCl₄) 1,00 (3H, t, J = 7 Hz),
1,3-1,9 (2H, m), 1,66 (6H, s),
3,80 (2H, t, J = 7 Hz), 6,17 (1H,
s), 6,9-7,6 (9H, m)RMN(CCl₄) 1,25 (6H, d, J = 7 Hz),
1,65 (6H, s), 4,04 (1H, hep., J =
7 Hz), 6,17 (1H, s), 7,0-7,5 (9H,
m)

TABLE I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
94		88		
95			n _D ²⁴ 1,4924	
96			n _D ²⁴ 1,5065	
97		101		
98		< 50		
99		94		

1

5

10

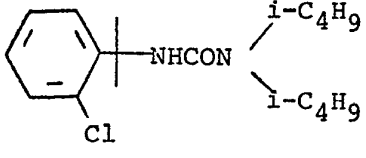
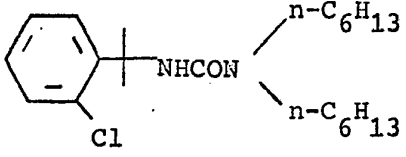
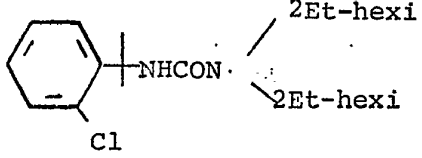
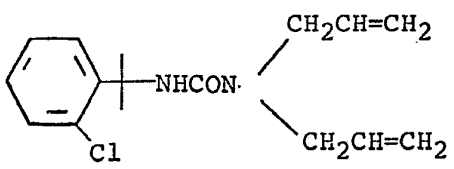
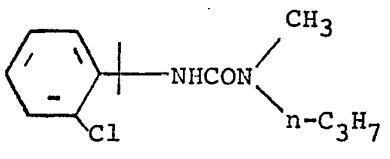
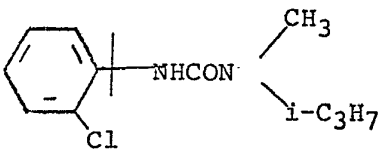
15

20

25

30

TABLA I (continuac

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refra ción (n _D)
5 94		88	
10 95			n _D ²⁴ 1,4924
15 96			n _D ²⁴ 1,5065
20 97		101	
25 98		< 50	
30 99		94	

BLA I (continuación)

Propiedades físicas

Indice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

n_D^{24} 1,4924

n_D^{24} 1,5065

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		PMN valores δ : 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
100		68-70		
101		76		
102		89		
103		152		
104		115		
105		122		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuac

1
5
10
15
20
25
30

Compues to n°	Estructura química	Constante físic	
		Punto de fu sión (°C)	Indice d ción (
100		68-70	
101		76	
102		89	
103		152	
104		115	
105		122	

BLA I (continuación)

<u>Constante física</u>		
<u>de fu</u> <u>(°C)</u>	<u>Indice de refrac</u> <u>ción (n_D)</u>	<u>PMN valores δ, 60 MHz (ppm)</u>

68-70

76

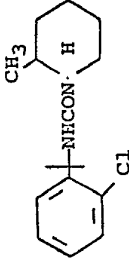
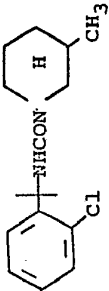
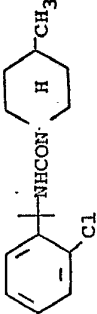
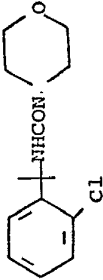
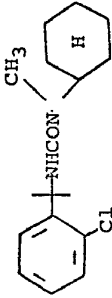
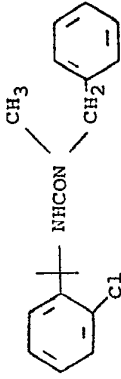
89

52

.5

22

TABLA I (continuación)

Compues to n.º	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sión (°C)	Índice de refrac ción (n_D)	
106		128		
107		116		
108		124		
109		156-157		
110		100		
111		110		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuació)

Compues to n ^o	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Índice de r ción (n _D)
106		128	
107		116	
108		124	
109		156-157	
110		100	
111		110	

30

Tabla I (continuación)

Constante física

de fusión (°C) Índice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

3

5

1

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
112		131-132		RMN (CDCl ₃) 1,25 (12H, d, J = 7 Hz), 1,65 (6H, s), 3,90 (hep., J = 7 Hz), 4,65 (1H, s), 7,0-7,5 (4H, m)
113		90-91		
114		<50 (pureza 80 %)		
115		101		
116		103		
117		65-68		

1

5

10

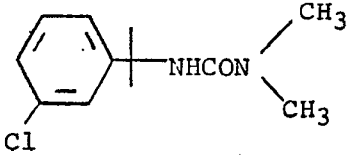
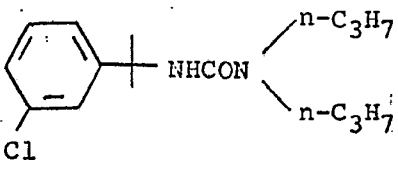
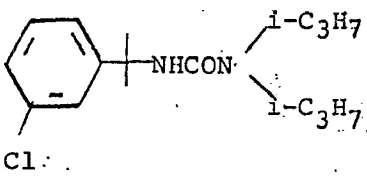
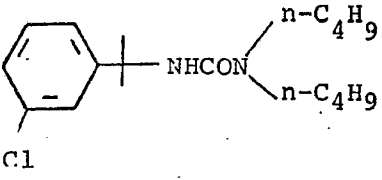
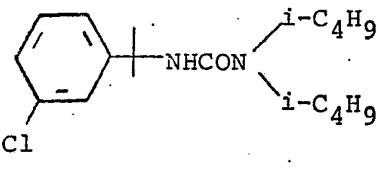
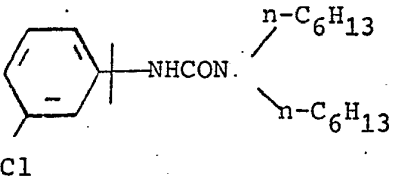
15

20

25

50

TABLE I (continuació)

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Índice de ref cción (n _D)
112		131-132	
113		90-91	
114		<50 (pureza 80 %)	
115		101	
116		103	
117		65-68	

BLA I (continuación)

Constante física

fu Índice de refrac
C) ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

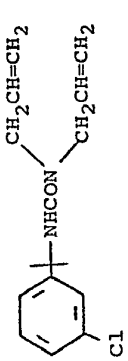
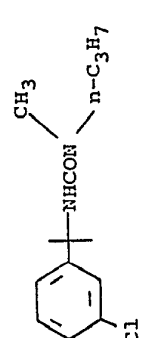
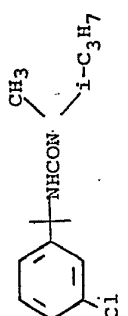
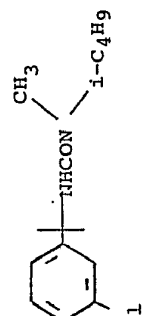
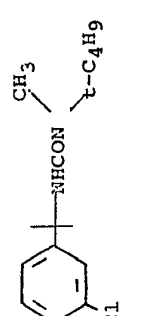
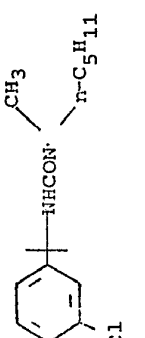
32

91

ca 80 %)

RMN(CDC₁₃) 1,25 (12H, d, J = 7 Hz),
1,65 (6H, s), 3,90 (hep., J = 7 Hz),
4,65 (1H, s), 7,0-7,5 (4H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n.º	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
118		77		RMN (CCl ₄) 0,89 (3H, t, J = 7 Hz), 1,2-1,6 (2H, m), 1,60 (6H, s), 2,81 (3H, s), 3,14 (2H, t, J = 7 Hz), 4,70 (1H, s), 7,1-7,3 (4H, m)
119		< 55		
120		119-120		
121		85-86		RMN (CCl ₄) 0,86 (6H, d, J = 7 Hz), 1,3-1,7 (1H, m), 1,57 (6H, s), 2,79 (3H, s), 2,98 (2H, d, J = 7 Hz), 4,70 (1H, s), 7,0-7,3 (4H, m)
122		196		
123		80		RMN (CCl ₄) 0,92 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-1,6 (6H, m), 1,61 (6H, s), 2,84 (3H, s), 3,19 (2H, t, J = 7 Hz), 4,58 (1H, s), 7,2-7,4 (4H, m)

1

5

10

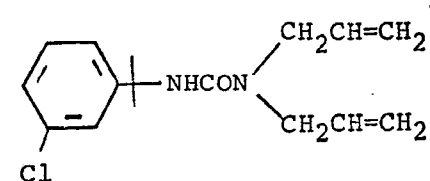
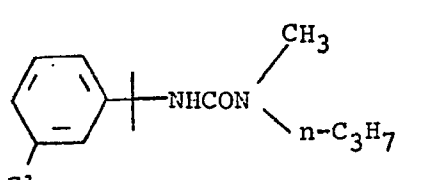
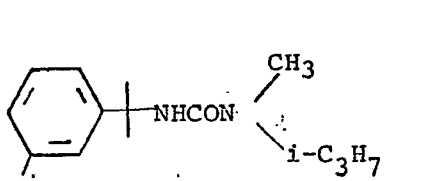
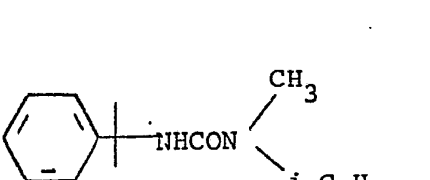
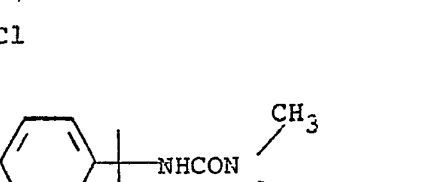
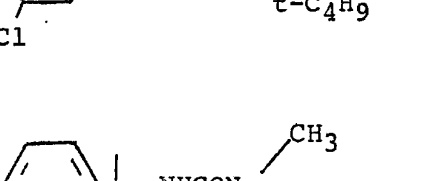
15

20

25

30

TABLE I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
118		77	
119		< 55	
120		119-120	
121		85-86	
122		196	
123		80	

ABLA I (continuación).

nte física

Índice de refrac
ción (n_D).

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CCl_4) 0,89 (3H, t, J = 7 Hz), 1,2-
1,6 (2H, m), 1,60 (6H, s), 2,81 (3H,
s), 3,14 (2H, t, J = 7 Hz), 4,70 (1H,
s), 7,1-7,3 (4H, m)

RMN(CCl_4) 0,86 (6H, d, J = 7 Hz), 1,3-
1,7 (1H, m), 1,57 (6H, s), 2,79 (3H,
s), 2,98 (2H, d, J = 7 Hz), 4,70 (1H,
s), 7,0-7,3 (4H, m)

RMN(CCl_4) 0,92 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-
1,6 (6H, m), 1,61 (6H, s), 2,84 (3H, s),
3,19 (2H, t, J = 7 Hz), 4,58 (1H, s),
7,2-7,4 (4H, m)

TABLA I (continuación)

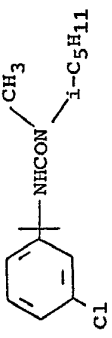
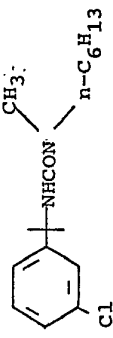
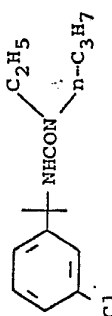
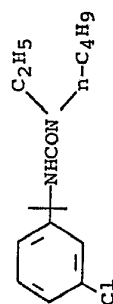

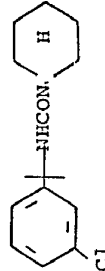
Compu- esto n.º	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fu- sión (°C)	Índice de refrac- ción (n_D)	
124		112-113		RMN(CCl ₄) 0,94 (6H, d, J = 7 Hz), 1,1-1,6 (3H, m), 1,60 (6H, s), 2,81 (3H, s), 3,20 (2H, t, J = 7 Hz), 4,62 (1H, s), 7,2-7,4 (4H, m)
125		75		
126		86		RMN(CCl ₄) 0,87 (3H, t, J = 7 Hz), 1,07 (3H, t, J = 7 Hz), 1,55 (6H, s), 3,16 (2H, q, J = 7 Hz), 3,07 (2H, t, J = 7 Hz), 1,3-1,7 (2H, m), 4,72 (1H, m), 7,0-7,3 (4H, m)
127		85-86		
128		153		
129		157		

TABLA I (continuaci

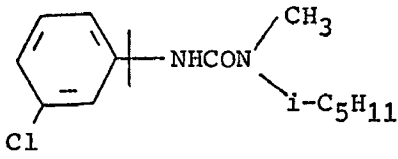
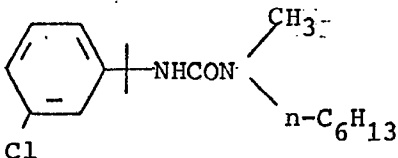
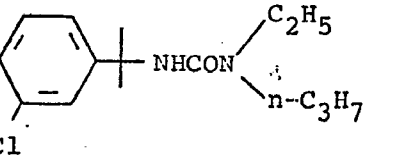
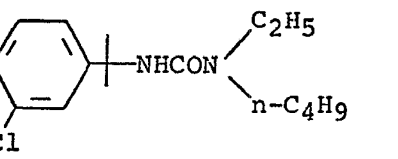
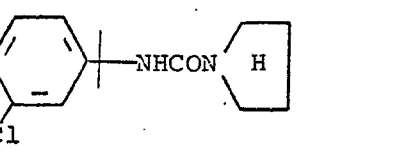
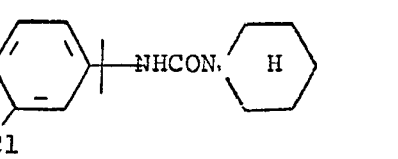
Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refra ción (n _D)
124		112-113	
125		75	
126		86	
127		85-86	
128		153	
129		157	

TABLA I (continuación)

Constante física

Temperatura (°C) Índice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

13

RMN(CCl₄) 0,94 (6H, d, J = 7 Hz),
1,1-1,6 (3H, m), 1,60 (6H, s),
2,81 (3H, s), 3,20 (2H, t, J = 7
Hz), 4,62 (1H, s), 7,2-7,4 (4H, m)

RMN(CCl₄) 0,87 (3H, t, J = 7 Hz),
1,07 (3H, t, J = 7 Hz), 1,55 (6H,
s), 3,16 (2H, q, J = 7 Hz), 3,07
(2H, t, J = 7 Hz), 1,3-1,7 (2H,
m), 4,72 (1H, m), 7,0-7,3 (4H, m)

-86

53

57

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		PMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
130		113-114		
131		123		
132		141		
133		153		
134		162		
135				

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuac:

1
5
10
15
20
25
30

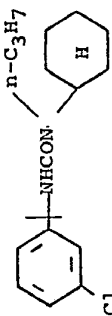
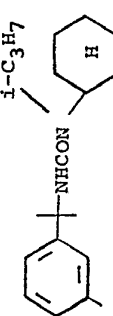
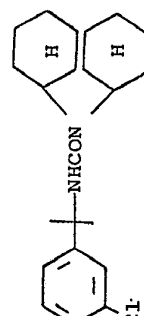
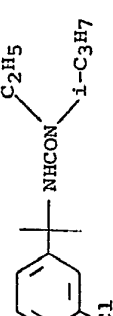
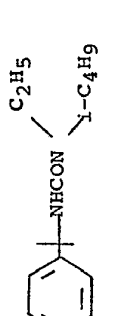
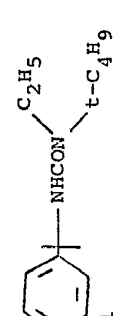
Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refra ción (n _D)
130		113-114	
131		123	
132		141	
133		153	
134		162	
135			

A I (continuación)

nte física
Indice de refrac
ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

TABLA I (continuación)

Compu- to n°	Estructura química	Constante física Punto de fu- sión (°C)	Indice de refrac- ción (n _D)	RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
136		109		
137		92-94		
138		79-80		
139		60		
140		95		
141		85-87		

RMN (CDCl₃) 0,90 (6H, d, J = 7 Hz), 1,6-2,0 (1H, m), 1,63 (6H, s), 3,01 (2H, d, J = 7 Hz), 3,26 (2H, q, J = 7 Hz), 4,67 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)

1 TABLA I (continua)

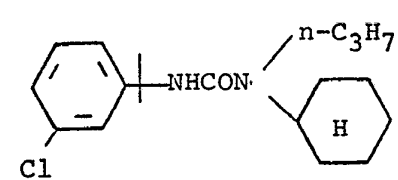
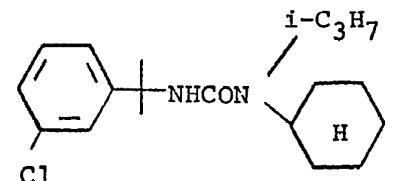
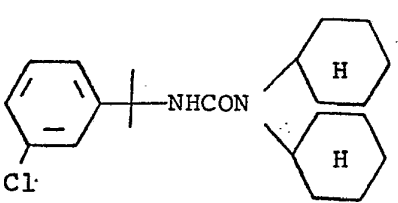
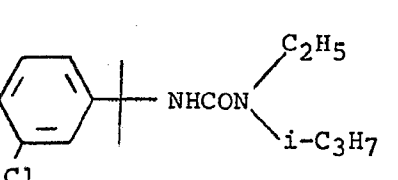
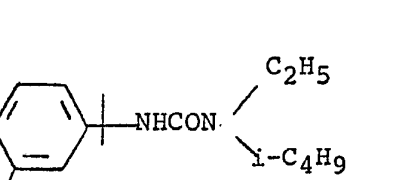
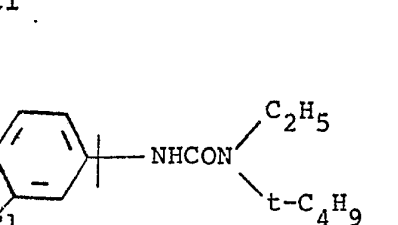
Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
5 136		109	
10 137		92-94	
15 138		79-80	
20 139		60	
25 140		95	
30 141		86-87	

TABLA I (continuación)

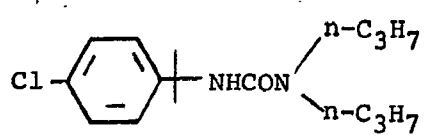
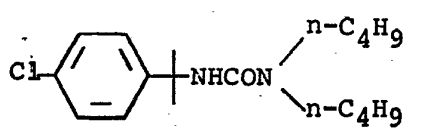
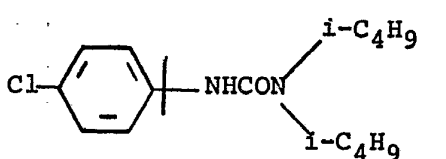
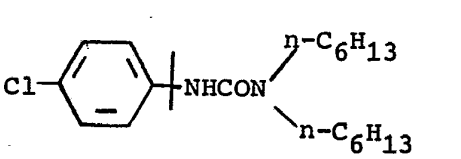
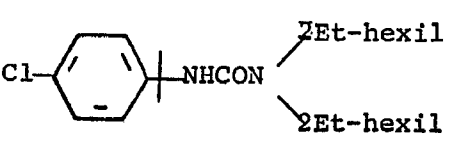
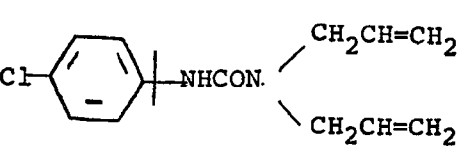
ante físicaIndice de refrac
ción (n_D)RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CDCl₃) 0,90 (6H, d, J = 7
Hz), 1,6-2,0 (1H, m), 1,63 (6H,
s), 3,01 (2H, d, J = 7 Hz), 3,26
2H, q, J = 7 Hz), 4,67 (1H, s),
7,1-7,4 (4H, m)

TABLA I (continuación)

Compues to n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refrac ción (n_D)	
142		112		
143		103		
144		108-109		
145		< 55		
146			n_D^{24} 1,5049	
147		75		RMN (CCl4) 1,57 (6H, s), 3,76 (4H, m), 4,64 (1H, s), 4,9-6,1 (6H, m), 7,19 (4H, m)

TABLA I (continuac

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refr cción (n _D)
142		112	
143		103	
144		108-109	
145		< 55	
146			n _D ²⁴ 1,504
147		75	

ABLA I (continuación)

Constante física
Indice de refrac
cion (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

19

n_D^{24} 1,5049

RMN(CCl₄) 1,57 (6H, s), 3,76 (4H, m), 4,64 (1H, s), 4,9-6,1 (6H, m), 7,19 (4H, m)

Tabla I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
148		115.		
149		122		
150		81		RMN (CCl ₄) 0,94 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,6 (4H, m), 2,78 (3H, s), 3,13 (2H, t, J = 7 Hz), 4,58 (1H, s), 7,21 (4H, m)
151		105		
152		63-64		
153		136		

1

5

10

15

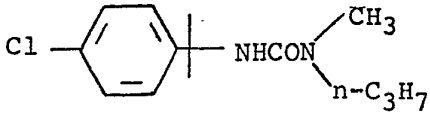
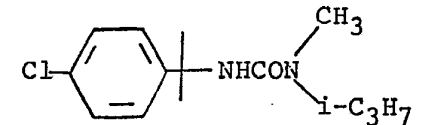
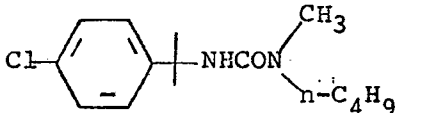
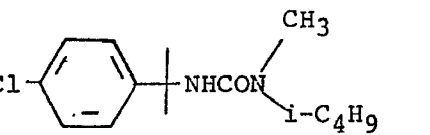
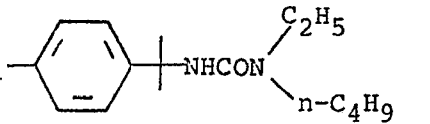
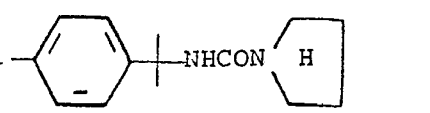
20

25

30

TABLA I (continuaci

1
5
10
15
20
25
30

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refrac ción (n _D)
148		115.	
149		122	
150		81	
151		105	
152		63-64	
153		136	

ABLA I (continuación)

te física

ndice de refrac
ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CCl₄) 0,94 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-
1,6 (4H, m), 2,78 (3H, s), 3,13 (2H,
t, J = 7 Hz), 4,58 (1H, s), 7,21 (4H,
m)

TABLA I. (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
154		190		
155		172		
156		135		
157		143		
158		112		
159		180		

1

5

10

15

20

25

50

TABLA I. (continuaci

1

5

10

15

20

25

30

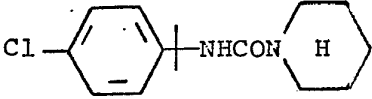
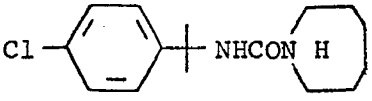
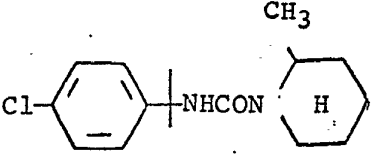
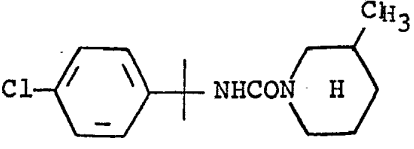
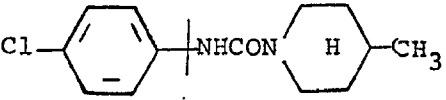
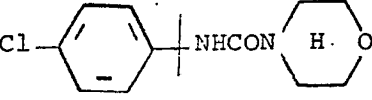
Compues to n ^o	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Índice de refra ción (n _D)
154		190	
155		172	
156		135	
157		143	
158		112	
159		180	

TABLA I. (continuación)

tante física

fu Índice de refrac
) ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

TABLA I (continuación)

Compués to n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sión (°C)	Índice de refrac ción (°C)	
160		149-150		RMN(CDCl ₃) 1,0-1,9 (10H, m), 1,64 (6H, s), 2,74 (3H, s), 3,95 (1H, ancho), 4,64 (1H, s), 7,27 (4H, s)
161		104-105		
162		130		
163		70-72		
164		134		
165		118-119		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continua)

1

5

10

15

20

25

30

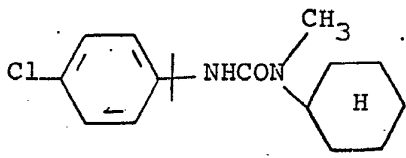
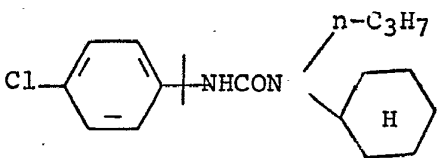
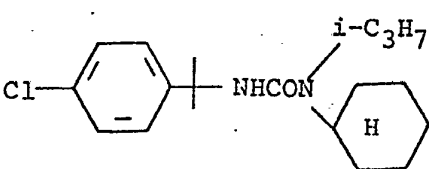
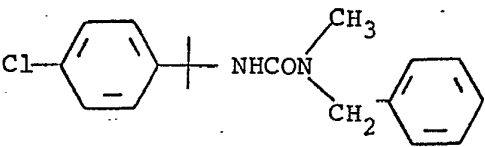
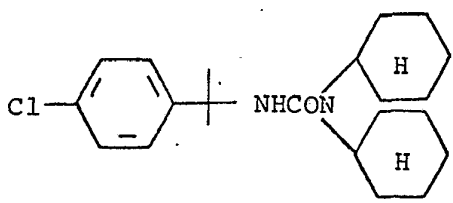
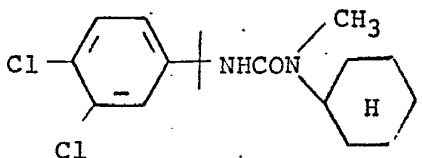
Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refrac ción (°C)
160		149-150	
161		104-105	
162		130	
163		70-72	
164		134	
165		118-119	

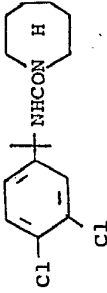
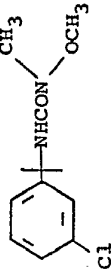
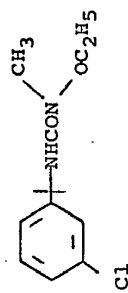
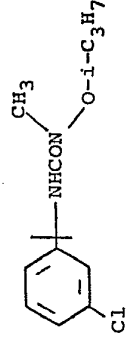
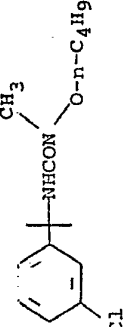
TABLA I (continuación)

ante física

n Índice de refracción (°C)RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CDCl₃) 1,0-1,9 (10H, m), 1,64 (6H, s), 2,74 (3H, s), 3,95 (1H, ancho), 4,64 (1H, s), 7,27 (4H, s)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
166		132		
167		60		
168		p.e. 109-111°/0,1	n _D 1,5175	RMN (CCl ₄) 0,93 (3H, t, J = 7 Hz), 1,60 (6H, s), 0,9-1,3 (2H, m), 2,97 (3H, s), 3,74 (2H, t, J = 7 Hz), 6,17 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)
169		p.e. 136°/0,55	n _D 1,5154	
170		p.e. 116°/0,1	n _D 1,5121	
171		p.e. 126-129°/0,15	n _D 1,5119	

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuación)

Propiedades físicas

\bar{n}_D Índice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

n_D^{28} 1,5175

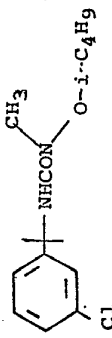
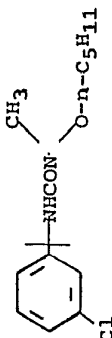
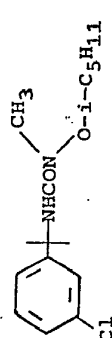
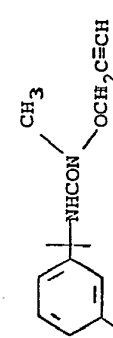
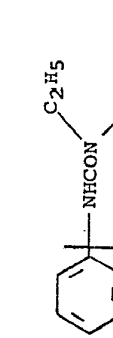
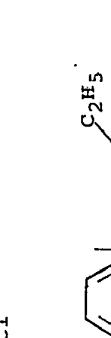
RMN(CCl₄) 0,93 (3H, t, J = 7 Hz),
1,60 (6H, s), 0,9-1,3 (2H, m),
2,97 (3H, s), 3,74 (2H, t, J = 7 Hz),
6,17 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)

n_D^{26} 1,5154

n_D^{27} 1,5121

-129°/
 n_D^{27} 1,5119

Tabla I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
172		P.e. 126-127°/0,15	n _D 1,51100	
173		P.e. 129°/0,09	n _D 1,5087	
174		P.e. 121°/0,07	n _D 1,5091	
175		P.e. 139-140°/0,1	n _D 1,5326	RMN (CCl ₄) 1,63 (6H, s), 2,54 (1H, t, J = 2,5 Hz), 2,99 (3H, s), 3,35 (2H, d, J = 7 Hz), 6,13 (1H, s), 7,0-7,4 (4H, m)
176		P.e. 116°/0,15	n _D 1,5192	RMN (CCl ₄) 1,06 (3H, t, J = 7 Hz), 1,63 (6H, s), 3,40 (2H, q, J = 7 Hz), 3,64 (3H, s), 6,01 (1H, s), 7,1-7,3 (4H, m)
177		P.e. 115°/0,1	n _D 1,5129	

1

5

10

15

20

25

30

1 TABLA I (continuación)

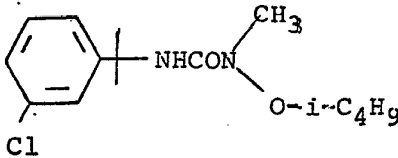
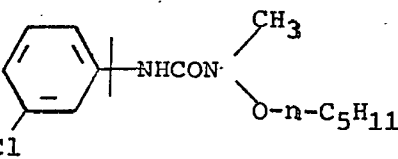
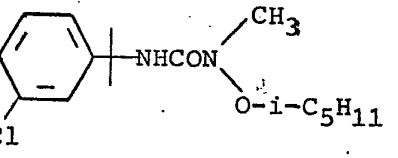
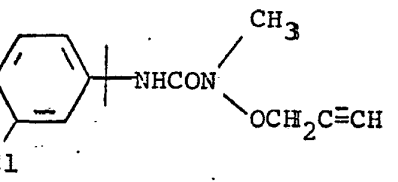
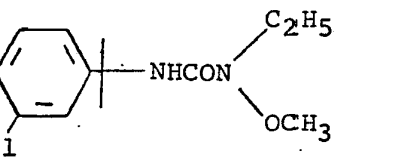
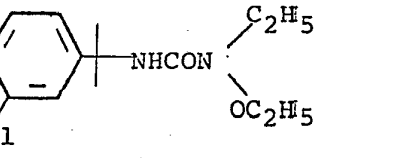
Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D ²⁷)
5 172		p.e. 126-127°/0,15	n _D ²⁷ 1,51100
10 173		p.e. 129°/0,09	n _D ²⁷ 1,5087
15 174		p.e. 121°/0,07	n _D ²⁷ 1,5091
175		p.e. 139-140°/0,1	n _D ²⁷ 1,5326
20 176		p.e. 116°/0,15	n _D ²⁷ 1,5192
25 177		p.e. 115°/0,1	n _D ²⁷ 1,5129

TABLA I (continuación)

Constante física

\bar{n}_D °C	Índice de refracción (n_D)	RMN valores δ ; 60 MHz (ppm)
5	n_D^{27} 1,51100	
°/	n_D^{27} 1,5087	
°/	n_D^{27} 1,5091	
3- 1	n_D^{27} 1,5326	RMN (CCl ₄) 1,63 (6H, s), 2,54 (1H, t, J = 2,5 Hz), 2,99 (3H, s), 3,35 (2H, d, J = 7 Hz), 6,13 (1H, s), 7,0-7,4 (4H, m)
6°/	n_D^{27} 1,5192	RMN (CCl ₄) 1,06 (3H, t, J = 7 Hz), 1,63 (6H, s), 3,40 (2H, q, J = 7 Hz), 3,64 (3H, s), 6,01 (1H, s), 7,1-7,3 (4H, m)
5°/	n_D^{27} 1,5129	

TABLA I (continuación)

Compués to n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refrac ción (n _D)	
178		p.e. 120°/ 0,095	n _D ²⁷ 1,5099	
179		p.e. 121°/ 0,08	n _D ²⁷ 1,5067	
180		p.e. 136°/ 0,1	n _D ²⁷ 1,5061	
181		p.e. 133°/ 0,15 p.f. <50		
182		p.e. 147- 150°/1,0 p.f. <50		RMN (CCl ₄) 0,86 (3H, t, J = 7 Hz), 1,57 (6H, s), 3,38 (2H, q, J = 7 Hz), 1,2-1,8 (2H, m), 3,54 (3H, s), 6,14 (1H, s), 7,0-7,4 (4H, m)
183			n _D ²⁷ 1,5063	

TABLE I (continuac

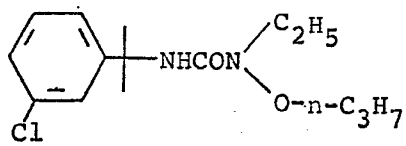
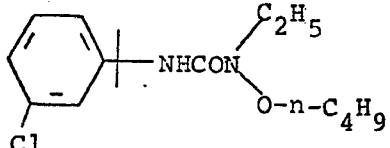
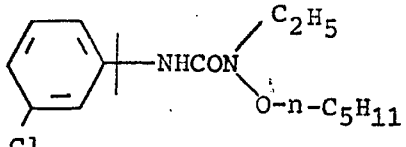
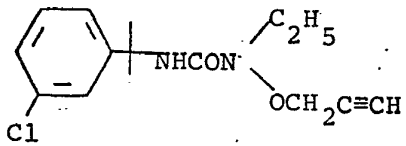
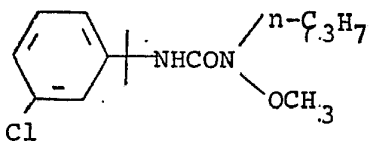
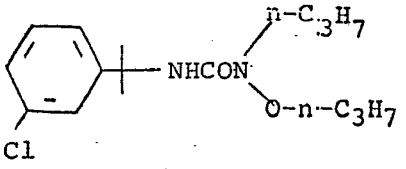
Compues to n°	Estructura química	Constante física:	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de ref ción (n _D ²⁷)
178		p.e. 120°/ 0,095	n _D ²⁷ 1,5099
179		p.e. 121°/ 0,08	n _D ²⁷ 1,5067
180		p.e. 136°/ 0,1	n _D ²⁷ 1,5061
181		p.e. 133°/ 0,15 p.f. <50	
182		p.e. 147- 150°/1,0 p.f. <50	
183			n _D ²⁷ 1,506

TABLA I (continuación)

ante física:

<u>$\frac{u}{j}$</u>	<u>Indice de refrac</u> <u>ción (n_D)</u>	<u>RMN valores δ , 60 MHz (ppm)</u>
---------------------------------	---	---

°/
 n_D^{27} 1,5099

°/
 n_D^{27} 1,5067

5°/
 n_D^{27} 1,5061

3°/
0

RMN (CCl₄) 0,86 (3H, t, J = 7 Hz),
1,57 (6H, s), 3,38 (2H, q, J = 7
Hz), 1,2-1,8 (2H, m), 3,54 (3H, s),
6,14 (1H, s), 7,0-7,4 (4H, m)

7-
0
50

n_D^{27} 1,5063

TABLA I (continuación)

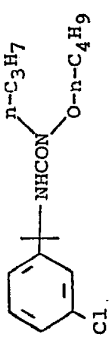
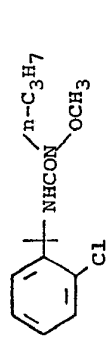
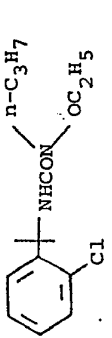
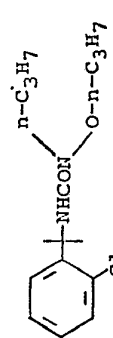
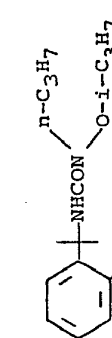
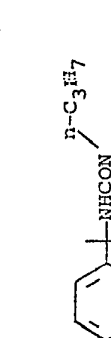
Compuesto to n ^o	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
184		< 50	n _D ²⁷ 1,5040	RMN (CCl ₄) 0,87 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-1,8 (2H, m), 1,80 (6H, s), 3,30 (2H, t, J = 7 Hz), 3,68 (3H, s), 6,27 (1H, s), 7,1-7,7 (4H, m)
185		< 50	n _D ²⁷ 1,5151	RMN (CCl ₄) 0,86 (3H, t, J = 7 Hz), 1,26 (3H, t, J = 7 Hz), 1,79 (6H, s), 3,29 (2H, t, J = 7 Hz), 3,88 (2H, q, J = 7 Hz), 6,30 (1H, s), 7,1-7,6 (4H, m), 1,2-1,7 (2H, m)
186		< 50	n _D ²⁷ 1,5117	
187		< 50	n _D ²⁷ 1,5087	
188		< 50		
189		< 50		

TABLA I (continuación)

Constante física

n_D^{27} Índice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

n_D^{27} 1,5040

RMN(CCl₄) 0,87 (3H, t, J = 7 Hz),
1,1-1,8 (2H, m), 1,80 (6H, s),
3,30 (2H, t, J = 7 Hz), 3,68 (3H,
s), 6,27 (1H, s), 7,1-7,7 (4H, m)

n_D^{27} 1,5151

RMN(CCl₄) 0,86 (3H, t, J = 7 Hz),
1,26 (3H, t, J = 7 Hz), 1,79 (6H,
s), 3,29 (2H, t, J = 7 Hz), 3,88
(2H, q, J = 7 Hz), 6,30 (1H, s),
7,1-7,6 (4H, m), 1,2-1,7 (2H, m)

n_D^{27} 1,5117

n_D^{27} 1,5087

TABLA I (continuación)

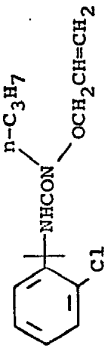
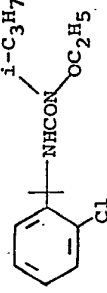
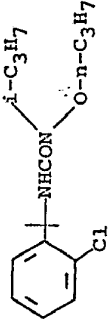
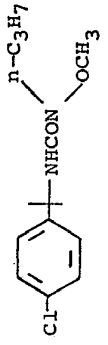
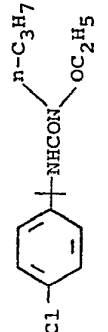

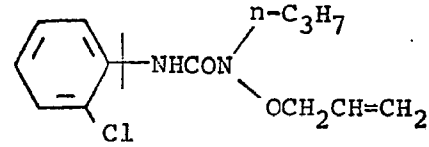
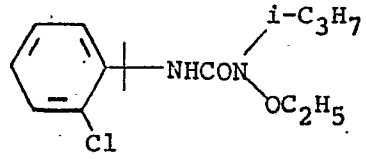
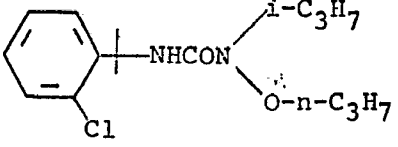
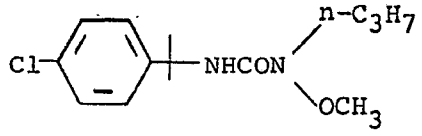
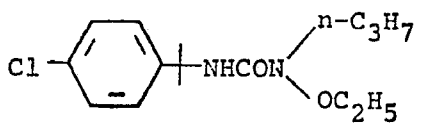
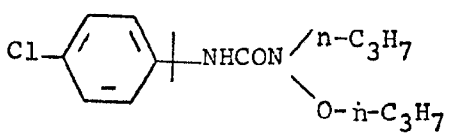
Compues to n.º	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sión (°C)	Índice de refrac- ción (n _D)	
190			n _D ²⁷ 1,5187	RMN (CCl ₄) 0,87 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-1,8 (2H, m), 1,79 (6H, s), 3,31 (2H, t, J = 7 Hz), 4,03 (2H, d, t, J = 6 Hz, 3 Hz), 5,1-6,3 (2H, m), 6,33 (1H, s), 7,1-7,6 (4H, m)
191			n _D ²⁷ 1,5123	RMN (CCl ₄) 1,06 (6H, d, J = 7 Hz), 1,24 (3H, t, J = 7 Hz), 1,78 (6H, s), 3,90 (2H, q, J = 7 Hz), 4,12 (1H, hep., J = 7 Hz), 6,39 (1H, s), 7,1-7,6 (4H, m)
192			n _D ²⁷ 1,5102	
193		82-83		
194		<55		
195		<55		

TABLA I (continuaci

1
5
10
15
20
25
30

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refr ción (n _D ²⁷)
190			n _D ²⁷ 1,5187
191			n _D ²⁷ 1,5123
192			n _D ²⁷ 1,5102
193		82-83	
194		<55	
195		<55	

BLA I (continuación)

nte física

Indice de refrac-
ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

n_D^{27} 1,5187


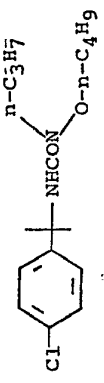
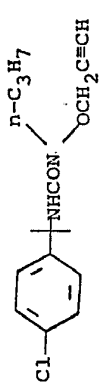
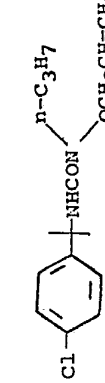
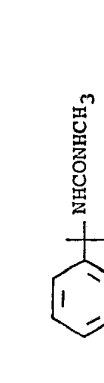

RMN(CCl₄) 0,87 (3H, t, J = 7 Hz),
1,1-1,8 (2H, m), 1,79 (6H, s), 3,31
(2H, t, J = 7 Hz), 4,03 (2H, d, t,
J = 6 Hz, 3 Hz), 5,1-6,3 (2H, m),
6,33 (1H, s), 7,1-7,6 (4H, m)

n_D^{27} 1,5123

RMN(CCl₄) 1,06 (6H, d, J = 7 Hz),
1,24 (3H, t, J = 7 Hz), 1,78 (6H,
s), 3,90 (2H, q, J = 7 Hz), 4,12
(1H, hep., J = 7 Hz), 6,39 (1H, s),
7,1-7,6 (4H, m)

n_D^{27} 1,5102

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
196		< 55		
197			24 n _D 1,5069	RMN (CCl ₄) 0,86 (3H, t, J = 7 Hz), 0,98 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-1,7 (6H, m), 1,61 (6H, s), 3,35 (2H, t, J = 7 Hz), 3,80 (2H, t, J = 7 Hz), 6,13 (1H, s), 7,27 (4H, s)
198		< 50		
199		67		
200		150-151		
201		112		

1

5

10

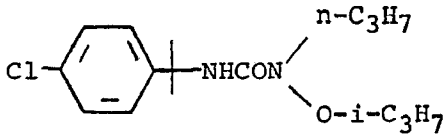
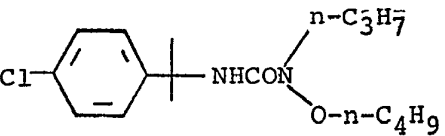
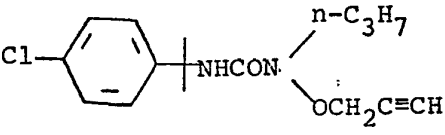
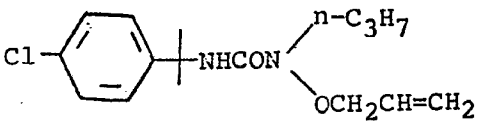
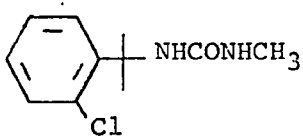
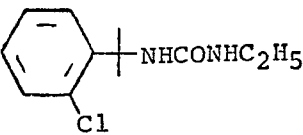
15

20

25

30

1 TABLA I (continuación)

5	Compues to n°	Estructura química	Constante física	
			Punto de fu sión (°C)	Indice de refrac ción (n _D)
	196		< 55	
10	197			n _D ²⁴ 1,5069
	198		< 50	
15	199		67	
20	200		150-151	
25	201		112	

30

ABLA I (continuación)

ante física

fu Indice de refrac
C) ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

n_D²⁴ 1,5069

RMN(CCl₄) 0,86 (3H, t, J = 7 Hz),
0,98 (3H, t, J = 7 Hz), 1,1-1,7 (6H,
m), 1,61 (6H, s), 3,35 (2H, t, J = 7
Hz), 3,80 (2H, t, J = 7 Hz), 6,13
(1H, s), 7,27 (4H, s)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
202		85		
203			n _D 1,5321 (pureza 85 %)	RMN (CDCl ₃) 0,79 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,5 (4H, m), 1,69 (6H, s), 3,04 (2H, t, J = 7 Hz), 4,95 (1H, s), 7,0-7,6 (4H, m)
204		134		
205			n _D 1,5277 (pureza 85 %)	
206		101-102		
207		171		

1

5

10

15

20

25

30

1 TABLA I (continuac

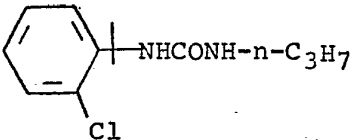
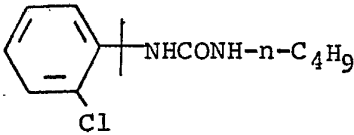
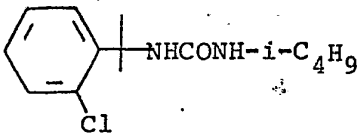
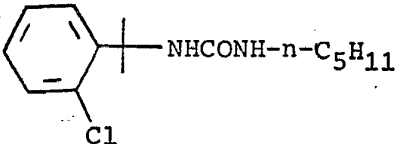
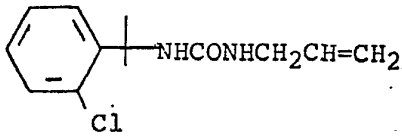
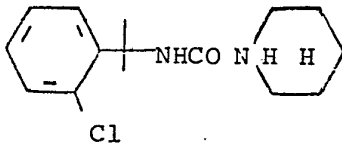
Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de ref. ción (n _D)
5 202		85	
10 203			n _D ²⁴ 1,5321 (pureza 85
15 204		134	
20 205			n _D ²⁴ 1,5277 (pureza 85 %
206		101-102	
25 207		171	
30			

TABLA I (continuación)

Constante física		<u>RMN valores δ, 60 MHz (ppm)</u>
<u>Temperatura de fusión ($^{\circ}$C)</u>	<u>Índice de refracción (n_D)</u>	
85	n_D^{24} 1,5321 (pureza 85 %)	RMN(CDCl ₃) 0,79 (3H, t, J = 7 Hz), 1,0-1,5 (4H, m), 1,69 (6H, s), 3,04 (2H, t, J = 7 Hz), 4,95 (1H, s), 7,0-7,6 (4H, m)
134	n_D^{24} 1,5277 (pureza 85 %)	
102		

TABLA I: (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
208		145		RMN (CDCl ₃) 1,73 (6H, s), 4,16 (2H, d, J = 6 Hz), 4,68 (1H, ancho), 5,23 (1H, s), 7,0-7,6 (8H, m)
209		146-147		
210		164		
211		160		RMN (CDCl ₃) 0,98' (3H, t, J = 7 Hz), 1,56 (6H, s), 3,06 (2H, d-q, J = 6 Hz, 7 Hz), 4,60 (1H, t ancho, J = 6 Hz), 5,22 (1H, s), 7,1-7,4 (4H, m)
212		106		
213		88-90		

1

5

10

15

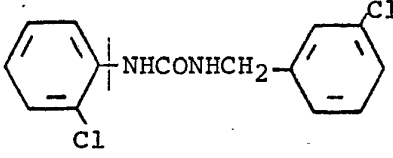
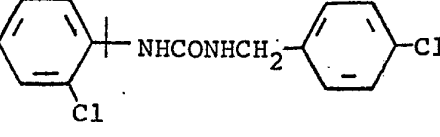
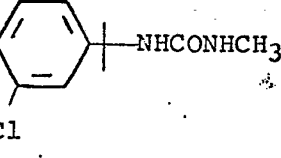
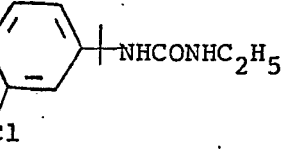
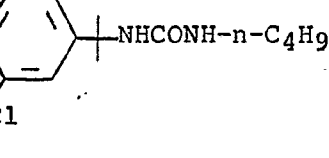
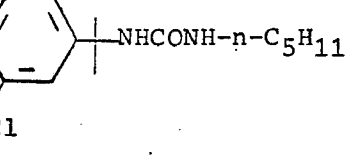
20

25

30

TABLA I (continuac:

1
5
10
15
20
25
30

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Índice de rei cción (n _D)
208		145	
209		146-147	
210		164	
211		160	
212		106	
213		88-90	

LA I: (continuación)

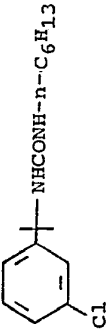
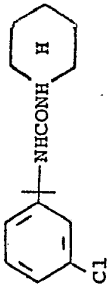


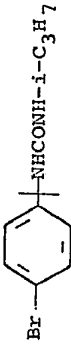
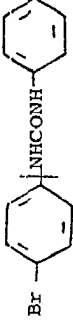
e física

Indice de refrac
ción (n_D)RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CDCl₃) 1,73 (6H, s), 4,16
(2H, d, J = 6 Hz), 4,68 (1H,
ancho), 5,23 (1H, s), 7,0-7,6
(8H, m)

RMN(CDCl₃) 0,98' (3H, t, J = 7 Hz)
1,56 (6H, s), 3,06 (2H, d-q, J =
6 Hz, 7 Hz), 4,60 (1H, t ancho,
J = 6 Hz), 5,22 (1H, s), 7,1-7,4
(4H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		PMN valores, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
214		84-85		
215		150-151		
216		132		
217		157		
218		201-202		
219		234		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuació)

1

Constante física

5

Compues
to n°

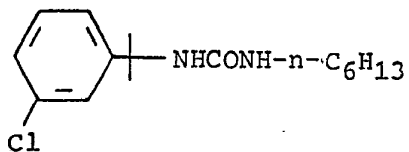
Estructura química

Punto de fu
sión (°C)

Índice de refra
cción (n_D)

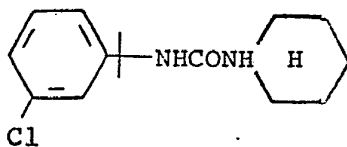
10

214



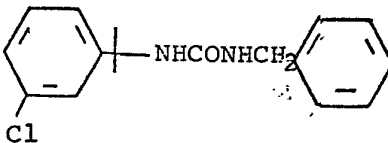
84-85

215



150-151

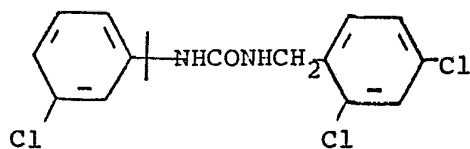
216



132

15

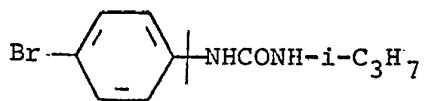
217



157

20

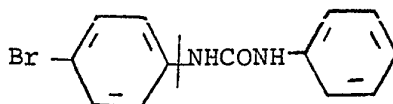
218



201-202

25

219



234

30

I (continuación)

de física

Índice de refrac
ción (n_D)

PMN valores δ , 60 MHz (ppm)

TABLA I (continuación)

Compues to n°	Estructura química	Constante física Punto de fu sión (°C)	Indice de refrac- ción (n _D)	RUN valores δ, 60 MHz (ppm)
220		165-166		
221		208		
222		233		
223		187		
224		189		
225		148-149		

1

5

10

15

20

25

30

1 TABLA I (continuación)

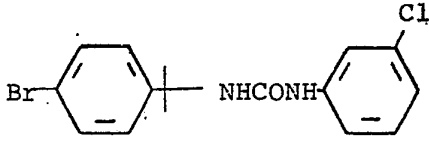
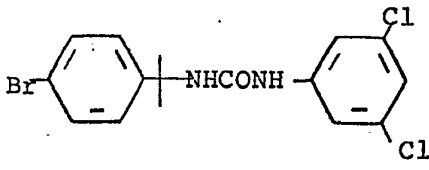
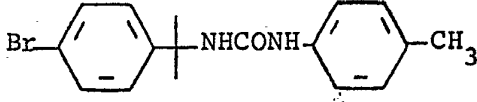
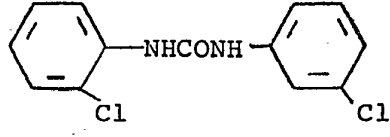
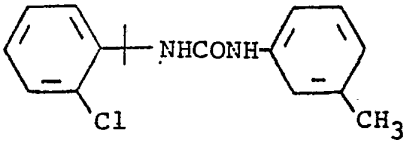
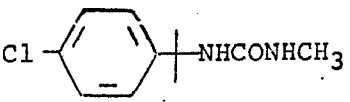
Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
5 220		165-166	
10 221		208	
15 222		233	
20 223		187	
25 224		189	
30 225		148-149	

Tabla I (continuación)

Propiedad física

1 Índice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

.66

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
226		134		
227		132		
228		123		
229		90		
230		70		
231		69		

RMN (CDCl₃) 1,53 (6H, s), 3,18 (3H, s), 4,64 (1H, s), 7,1-7,5 (9H, m)

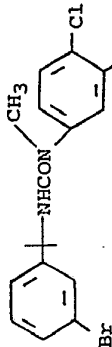
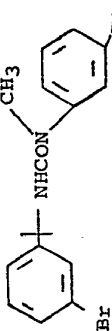
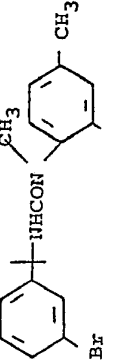
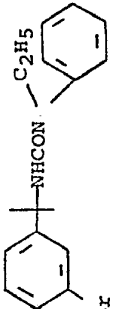
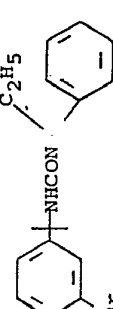
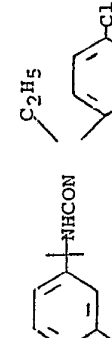
LA I (continuación)

e física
Indice de refrac
ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CDC₁₃) 1,53 (6H, s), 3,18
(3H, s), 4,64 (1H, s), 7,1-7,5
(9H, m)

TABLA I (continuación)

Compu- to n°	Estructura química	Constante física Punto de fu- sión (°C)	Indice de refrac- ción (n _D)	RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
232		109		
233		64-65		
234		88		RMN (CDCl ₃) 1,51 (6H, s), 2,28 (3H, s), 2,37 (3H, s), 3,08 (3H, s), 4,40 (1H, s), 7,1-7,5 (7H, m)
235		67		RMN (CDCl ₃) 1,04 (3H, t, J = 7 Hz), 1,50 (6H, s), 3,65 (2H, q, J = 7 Hz), 4,06 (1H, s), 7,1-7,6 (9H, m)
236		50-51		
237		124-125		

1

5

10

15

20

25

50

Tabla I (continuación)

Propiedades físicas

Indice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CDCl₃) 1,51 (6H, s), 2,28 (3H, s),
2,37 (3H, s), 3,08 (3H, s), 4,40 (1H,
s), 7,1-7,5 (7H, m)

RMN(CDCl₃) 1,04 (3H, t, J = 7 Hz), 1,50
(6H, s), 3,65 (2H, q, J = 7 Hz), 4,06
(1H, s), 7,1-7,6 (9H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n ^o	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	índice de refracción (n _D)	
238		78-79		
239		47-48		
240		130		
241		88		
242		83		
243		78		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuación)

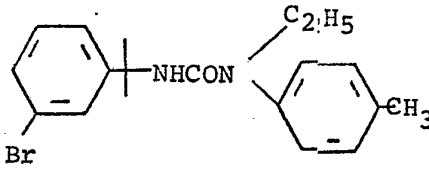
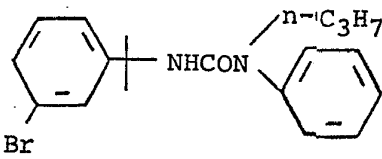
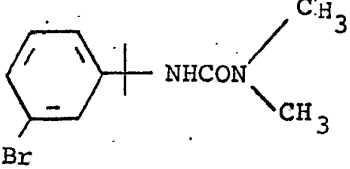
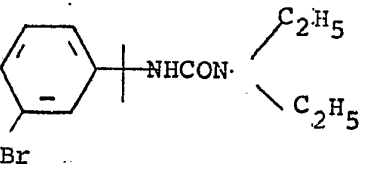
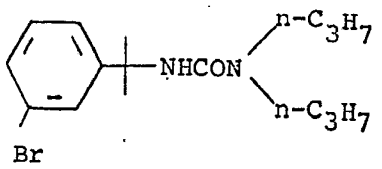
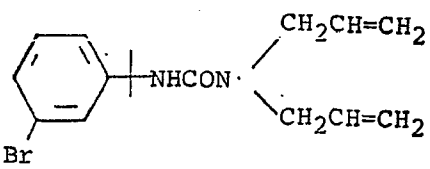
Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
238		78-79	
239		47-48	
240		130	
241		88	
242		83	
243		78	

TABLA I (continuación)

tante física
Índice de refrac
ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

9

8

TABLE I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Punto de fusión (°C)	Constante física Índice de refracción (n _D)	RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
244		135		
245		84		
246		117		
247			n _D ²⁷ 1,5708	RMN (CCl ₄) 1,01 (3H, t, J = 7 Hz), 1,48 (6H, s), 3,58 (2H, q, J = 7 Hz), 4,28 (1H, s), 7,0-7,6 (9H, m)
248			n _D ²⁷ 1,5653	
249		122		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuación)

1

5

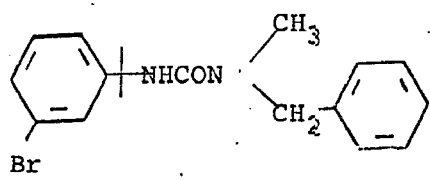
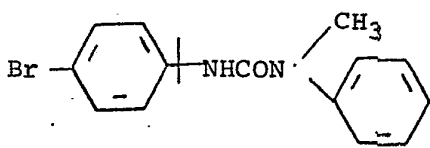
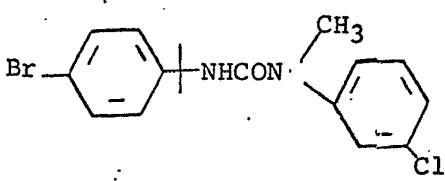
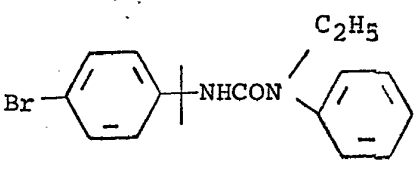
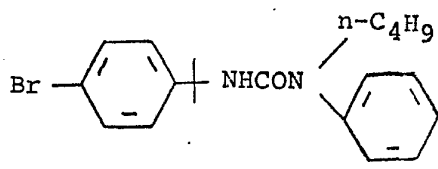
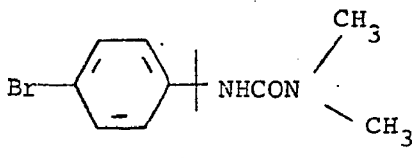
10

15

20

25

30

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción, (n _D)
244		135	
245		84	
246		117	
247			n _D ²⁷ 1,5708
248			n _D ²⁷ 1,5653
249		122	

ABLA I (continuación)

Propiedades físicas

Índice de refracción, n_D

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

n_D^{27} 1,5708

RMN (CCl₄) 1,01 (3H, t, J = 7 Hz),
1,48 (6H, s), 3,58 (2H, q, J = 7 Hz),
4,28 (1H, s), 7,0-7,6 (9H, m).

n_D^{27} 1,5653

TABLA I (continuación)

Compuesto nº	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
250		90		
251		107		
252		192		
253		148		RMN (CDCl ₃) 1,1-1,8 (10H, m), 1,62 (6H, s), 2,73 (3H, s), 3,90 (1H, ancho), 4,67 (1H, s), 7,1-7,5 (4H, m)
254		83		
255		146		RMN (CDCl ₃) 0,9-1,9 (10H, m), 1,65 (6H, s), 2,76 (3H, s), 3,9 (1H, ancho), 4,65 (1H, s), 7,05-7,5 (4H, m)

1

5

10

15

20

25

30

1 TABLA I (continuación)

5
10
15
20
25
30

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
250		90	
251		107	
252		192	
253		148	
254		83	
255		146	

TABLA I (continuación)

Propiedades físicas

Indice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CDCl₃) 1,1-1,8 (10H, m), 1,62 (6H, s), 2,73 (3H, s), 3,90 (1H, ancho), 4,67 (1H, s), 7,1-7,5 (4H, m)

RMN(CDCl₃) 0,9-1,9 (10H, m), 1,65 (6H, s), 2,76 (3H, s), 3,9 (1H, ancho), 4,65 (1H, s), 7,05-7,5 (4H, m)

TABLA I (continuación)

Compues to n.º	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sión (°C)	Indice de refrac ción (n_D)	
256		102		RMN (CDCl ₃) 0,93 (3H, t, J = 7 Hz), 1,64 (6H, s), 1,0-1,7 (4H, m), 2,87 (3H, s), 3,21 (2H, t, J = 7 Hz), 4,65 (1H, s), 7,1-7,5 (4H, m)
257		175-176		
258		166		
259		214		
260		233		
261		151		

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuación)

Propiedades físicasIndice de refracción (n_D)RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

RMN(CDCl₃) 0,93 (3H, t, J = 7 Hz),
1,64 (6H, s), 1,0-1,7 (4H, m), 2,87
(3H, s), 3,21 (2H, t, J = 7 Hz),
4,65 (1H, s), 7,1-7,5 (4H, m)

TABLA I (continuación)

Compues to n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fu sion (°C)	Índice de refrac ción (n_D)	
262		203-204		
263		127		
264		160		
265		127		
266			n_D^{24} 1,5443	RMN (CCl ₄) 1,52 (6H, s), 3,13 (3H, s), 4,47 (1H, s), 6,9-7,4 (9H, m)
267		208		

TABLA I (continuaci

1
5
10
15
20
25
30

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de ref cción (n _D)
262		203-204	
263		127	
264		160	
265		127	
266			n _D ²⁴ 1,54
267		208	

BLA I (continuación)

ante física

Indice de refrac
ción (n_D)RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

04

 n_D^{24} 1,5443RMN (CCl₄) 1,52 (6H, s), 3,13 (3H, s), 4,47 (1H, s), 6,9-7,4 (9H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
268		100		RMN (CDCl ₃) 1,19 (3H, t, J = 7 Hz), 1,2-1,9 (10H, m), 3,19 (2H, q, J = 7 Hz), 4,03 (1H, ancho), 4,64 (1H, s), 6,9-7,5 (4H, m)
269		65		RMN (CCl ₄) 0,91 (3H, t, J = 7 Hz), 1,57 (6H, s), 2,75 (3H, s), 3,12 (2H, q, J = 7 Hz), 1,1-1,7 (4H, m), 4,61 (1H, s), 6,7-7,4 (4H, m)
270		65		RMN (CDCl ₃) 1,70 (6H, s), 3,72 (3H, s), 6,28 (1H, s), 6,9-7,6 (9H, m)
271		67		RMN (CCl ₄) 1,54 (6H, s), 3,12 (3H, s), 4,53 (1H, s), 7,1-7,5 (9H, m)
272		94		
273		78		RMN (CCl ₄) 0,92 (3H, t, J = 7 Hz), 1,60 (6H, s), 1,0-1,7 (4H, m), 2,78 (3H, s), 3,13 (2H, q, J = 7 Hz), 4,67 (1H, s), 7,3-7,6 (4H, m)

1

5

10

15

20

25

30

TABLA I (continuaci

1

5

10

15

20

25

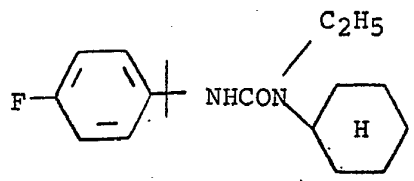
30

Compues
to n°

Estructura química

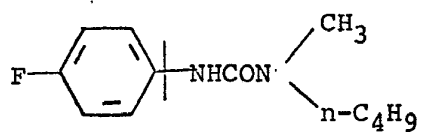
Constante física
Punto de fu
sión (°C) Índice de r
ción (n_D)

268



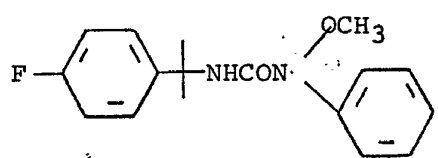
100

269



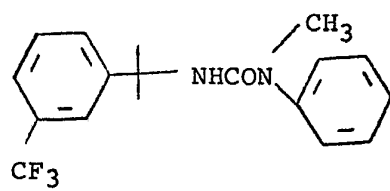
65

270



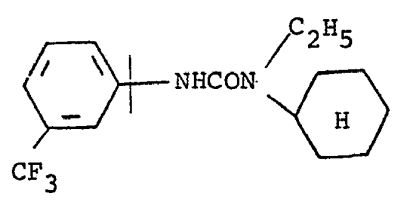
65

271



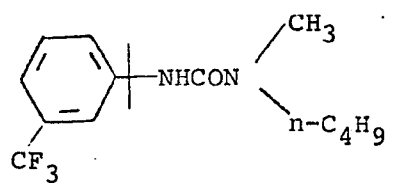
67

272



94

273



78

BLA I (continuación)Constante física

<u>Temperatura</u> (°C)	<u>Índice de refracción</u> (n_D)
----------------------------	--

<u>RMN valores δ, 60 MHz (ppm)</u>
--

10

RMN(CDCl₃) 1,19 (3H, t, J = 7 Hz), 1,2-1,9 (10H, m), 3,19 (2H, q, J = 7 Hz), 4,03 (1H, ancho), 4,64 (1H, s), 6,9-7,5 (4H, m)

65

RMN(CCl₄) 0,91 (3H, t, J = 7 Hz), 1,57 (6H, s), 2,75 (3H, s), 3,12 (2H, q, J = 7 Hz), 1,1-1,7 (4H, m), 4,61 (1H, s), 6,7-7,4 (4H, m)

65

RMN(CDCl₃) 1,70 (6H, s), 3,72 (3H, s), 6,28 (1H, s), 6,9-7,6 (9H, m)

67

RMN(CCl₄) 1,54 (6H, s), 3,12 (3H, s), 4,53 (1H, s), 7,1-7,5 (9H, m)

94

78

RMN(CCl₄) 0,92 (3H, t, J = 7 Hz), 1,60 (6H, s), 1,0-1,7 (4H, m), 2,78 (3H, s), 3,13 (2H, q, J = 7 Hz), 4,67 (1H, s), 7,3-7,6 (4H, m)

TABLA I. (continuación)

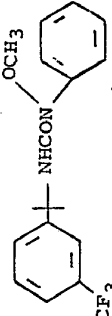
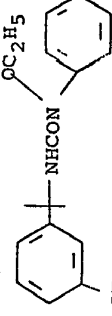
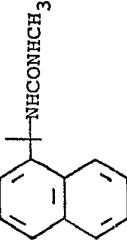
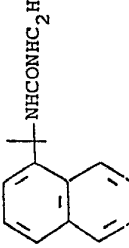
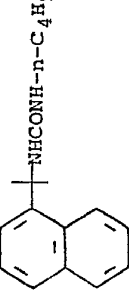
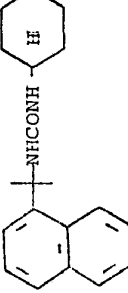
Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	
274		85		RMN(CDCl ₃) 1,64 (6H, s), 3,75 (3H, s), 6,38 (1H, s), 7,0-7,7 (9H, m)
275		61		RMN(CDCl ₃) 1,35 (3H, t, J = 7 Hz), 1,75 (6H, s), 3,97 (2H, q, J = 7 Hz), 6,41 (1H, s), 7,0-7,7 (9H, m)
276		202		RMN(C ₅ D ₅ N) 2,01 (6H, s), 2,63 (3H, d, J = 6 Hz), 5,92 (1H, d, J = 6 Hz), 6,93 (1H, s), 7,15-8,0 (6H, m), 8,97-9,20 (1H, m)
277		168		
278		140		
279		173		

TABLA I. (continuación)

1
5
10
15
20
25
30

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
274		85	
275		61	
276		202	
277		168	
278		140	
279		173	

Tabla I. (continuación)

Constante física

<u>Temperatura (°C)</u>	<u>Indice de refracción (n_D)</u>
-------------------------	---

RMN valores δ, 60 MHz (ppm)

RMN(CDCl₃) 1,64 (6H, s), 3,75 (3H, s), 6,38 (1H, s), 7,0-7,7 (9H, m)

RMN(CDCl₃) 1,35 (3H, t, J = 7 Hz), 1,75 (6H, s), 3,97 (2H, q, J = 7 Hz), 6,41 (1H, s), 7,0-7,7 (9H, m)

RMN(C₅D₅N) 2,01 (6H, s), 2,63 (3H, d, J = 6 Hz), 5,92 (1H, d, J = 6 Hz), 6,93 (1H, s), 7,15-8,0 (6H, m), 8,97-9,20 (1H, m)

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
280		179-180		RMN (CDCl ₃) 1,02 (6H, t, J = 7 Hz), 1,96 (6H, s), 3,14 (4H, q, J = 7 Hz), 4,71 (1H, s ancho), 7,20-7,95 (6H, m), 8,56-8,80 (1H, m)
281		159		
282		132		
283		150-151		
284		154-155		

1

5

10

15

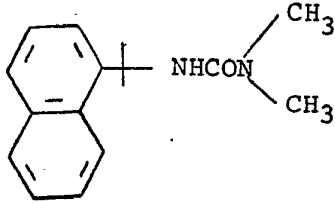
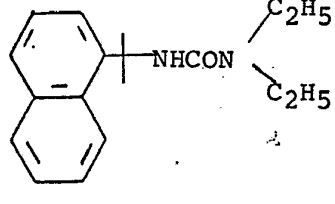
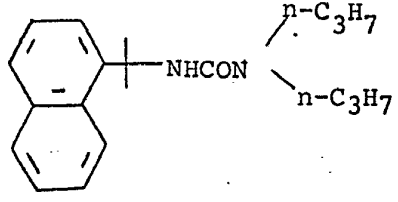
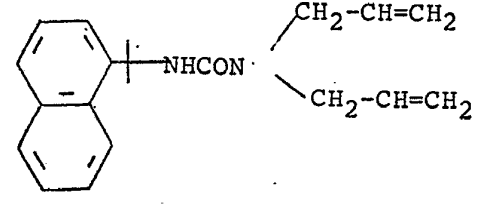
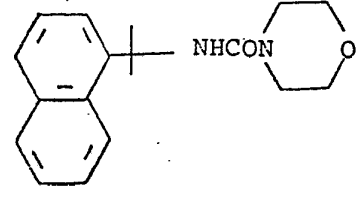
20

25

30

TABLA I (continuación)

1
5
10
15
20
25
30

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
280		179-180	
281		159	
282		132	
283		150-151	
284		154-155	

A I (continuación)

Constante física

de fusión (°C) Índice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz

9-180

RMN(CDCl₃) 1,02 (6H, t, J = 7 Hz),
1,96 (6H, s), 3,14 (4H, q, J = 7
Hz), 4,71 (1H, s ancho), 7,20-
7,95 (6H, m), 8,56-8,80 (1H, m)

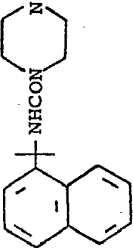
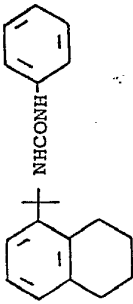
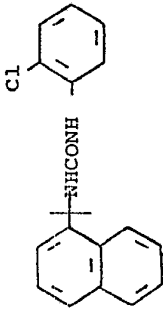
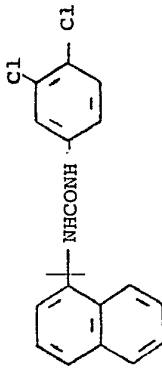
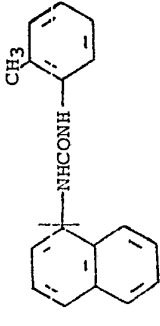
159

132

0-151

4-155

Tabla I (continuación)

		Constante física				
Compuesto nº	Estructura química	Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)	RMN valores δ, 60 MHz (ppm)		
285		152-154		RMN (CDCl ₃) 1,97 (6H, s), 3,18 (4H, m), 3,52 (4H, m), 4,94 (1H, s), 7,2-8,0 (6H, m), 8,9-9,2 (1H, m)		
286		181-182				
287		197		RMN (C ₅ D ₅ N) 2,02 (6H, s), 5,15 (1H, s), 7,1-8,1, 8,8-9,3 (12H, m)		
288		230		RMN (C ₅ D ₅ N) 2,05 (6H, s), 5,04 (1H, s), 6,6-9,1 (11H, m)		
289		216				

1

5

10

15

20

25

50

1 TABLA I (continuación)

1

5

10

15

20

25

30

Compuesto n°

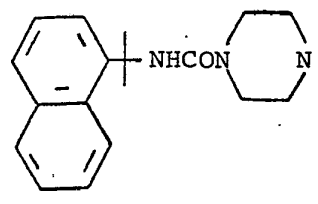
Estructura química

Constante física

Punto de fusión (°C)

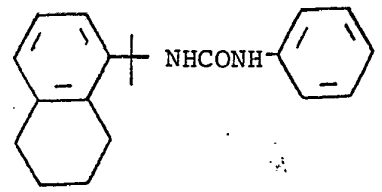
Índice de refracción (n_D)

285



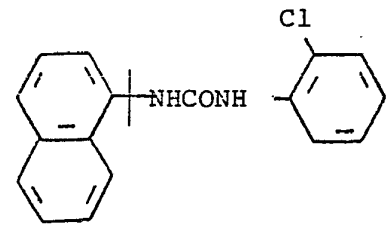
152-154

286



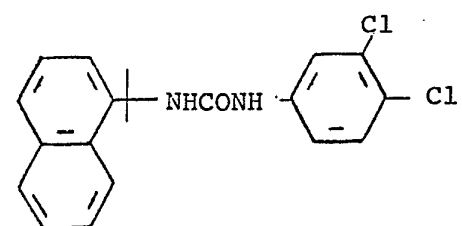
181-182

287



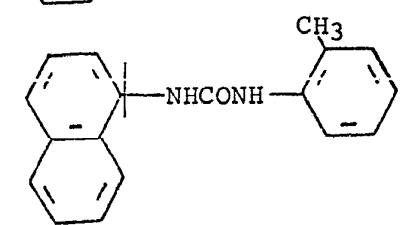
197

288



230

289



216

LA I (continuación)

Constante física

de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)
----------------	--------------------------------

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

-154

RMN (CDCl₃) 1,97 (6H, s), 3,18 (4H, m), 3,52 (4H, m), 4,94 (1H, s), 7,2-8,0 (6H, m), 8,9-9,2 (1H, m)

-182

RMN (C₅D₅N) 2,02 (6H, s), 5,15 (1H, s), 7,1-8,1, 8,8-9,3 (12H, m)

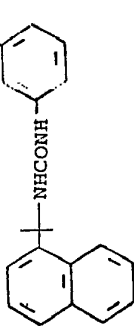
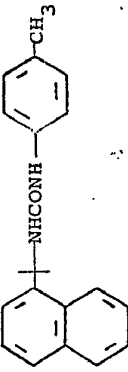
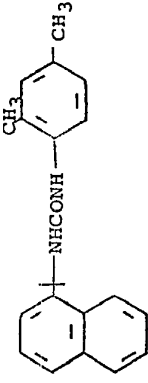
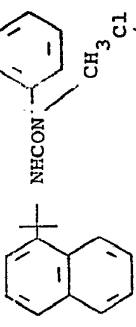
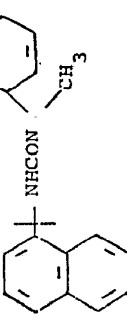
97

RMN (C₅D₅N) 2,05 (6H, s), 5,04 (1H, s), 6,6-9,1 (11H, m)

30

16

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física		RMN valores δ , 60 MHz (ppm)
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n_D)	
290		183-184		
291		194-195		
292		224		
293		125		RMN (CDCl ₃) 1,79 (6H, s), 2,13 (3H, s), 5,52 (1H, s), 6,44 (1H, s), 6,7-8,0 (11H, m), 8,4-8,7 (1H, m)
294		134-136		

1

5

10

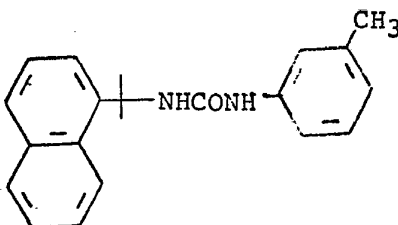
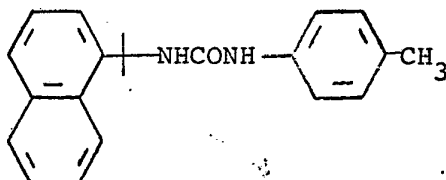
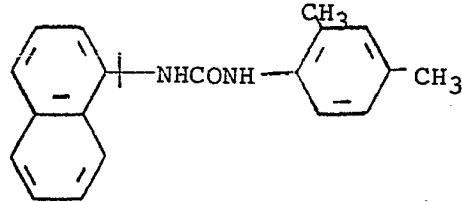
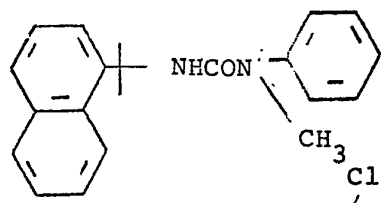
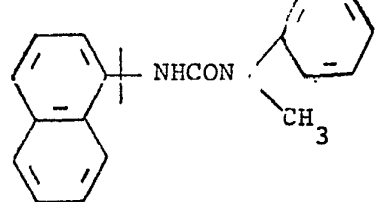
15

20

25

30

TABLA I (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fusión (°C)	Índice de refracción (n _D)
290		183-184	
291		194-195	
292		224	
293		125	
294		134-136	

1

5

10

15

20

25

30

BLA I (continuación)

Constante física

fu Índice de refrac
ción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

-184

-195

224

RMN(CDCl₃) 1,79 (6H, s), 2,13 (3H,
s), 5,52 (1H, s), 6,44 (1H, s),
6,7-8,0 (11H, m), 8,4-8,7 (1H, m)

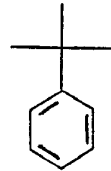
25

-136

TABLA I: (continuación)

Compuesto n°	Estructura química	Constante física	Punto de fusión (°C)	Indice de refracción (n _D)	RMN valores δ, 60 MHz (ppm)
295		116-117			RMN (CDCl ₃) 0,95 (3H, t, J = 7 Hz), 1,95 (6H, s), 3,56 (2H, q, J = 7 Hz), 4,56 (1H, s ancho), 7,1-7,9 (11H, m), 8,2-8,5 (1H, m)
296		108-110			
297		104-105			RMN (CDCl ₃) 0,95 (3H, t, J = 7 Hz), 1,84 (6H, s), 2,25 (3H, s), 3,54 (2H, q, J = 7 Hz), 4,58 (1H, s), 7,0-7,9 (10H, m), 8,2-8,5 (1H, m)

NOTA.- Con respecto a la estructura química, 2-fenil-propan-2-il la estructura



se representa de forma abreviada por

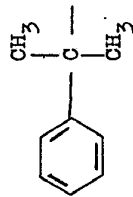
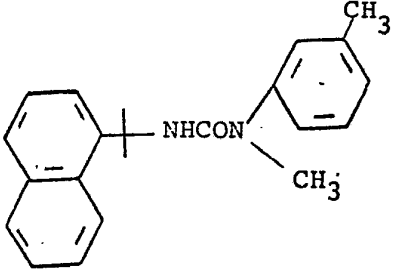
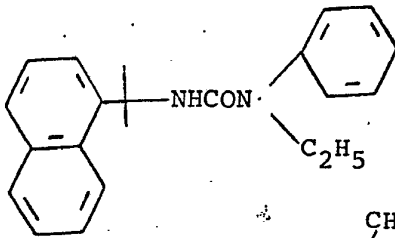
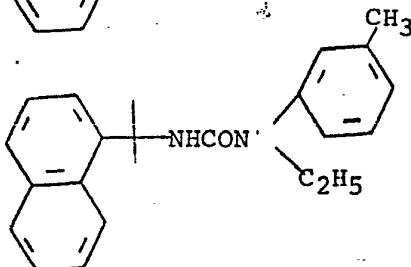
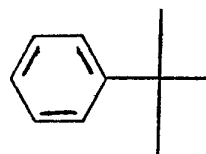


TABLA I: (continuac

Compues to n°	Estructura química	Constante física	
		Punto de fu sión (°C)	Indice de ción (n _D)
295		116-117	
296		108-110	
297		104-105	

NOTA.- Con respecto a la estructura química, 2-fenil-propan-2-il la e

se representa de forma abreviada por



BLA I: (continuación)

Constante física:

n_D^{20} : Índice de refracción (n_D)

RMN valores δ , 60 MHz (ppm)

-117

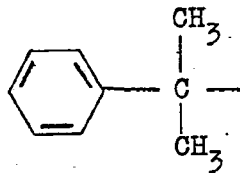
RMN(CDCl₃) 0,95 (3H, t, J = 7 Hz),
1,95 (6H, s), 3,56 (2H, q, J = 7 Hz), 4,56 (1H, s ancho), 7,1-7,9 (11H, m), 8,2-8,5 (1H, m)

-110

RMN(CDCl₃) 0,95 (3H, t, J = 7 Hz),
1,84 (6H, s), 2,25 (3H, s), 3,54 (2H, q, J = 7 Hz), 4,58 (1H, s), 7,0-7,9 (10H, m), 8,2-8,5 (1H, m)

-105

-propan-2-il la estructura



1 Los siguientes ejemplos específicos ilustran el método de preparación de los compuestos de la invención.

Síntesis 1

3-(m-cloro- α,α -dimetilbencil)-1-metil-1-fenilurca

5 Se añaden poco a poco y agitando fuertemente 140 g de hidróxido potásico a una solución de 142 g de cianuro de m-clorobencilo y 400 g de yoduro de metilo en 600 ml de dimetilsulfóxido, a una temperatura de 30 a 40°C, durante un periodo de 2 horas. Una vez terminada la adición, la mezcla se calienta a 60-70°C y se mantiene a esa temperatura durante 3 horas. A la mezcla de reacción resultante se agrega benceno y agua. Se separa la capa bencénica, se lava con una solución acuosa diluída alcalina y después con agua y se seca sobre sulfato sódico. La capa bencénica seca se concentra por evaporación del disolvente y el residuo se destila a presión reducida para dar 149 g de cianuro de m-cloro- α,α -dimetilbencilo como líquido incoloro, con un punto de ebullición de 75-80°C/0,4 mm Hg.

10

15

20 Se añaden 127 g del nitrilo así obtenido a 150 ml de ácido sulfúrico al 80 % y la mezcla se calienta con agitación a 95-100°C durante 2 horas. La mezcla de reacción caliente se vierte en 1 litro de agua. Los cristales así precipitados se separan por filtración, se lavan con agua y después con hexano y se recristalizan en una mezcla de benceno y etanol para obtener 131 g de 2-(m-clorofenil)-2-metilpropionamida como cristales blancos.

25

30 Se disuelven 94 g de este producto en 400 ml de ácido acético y a través de la solución resultante a la temperatura ambiente se hace pasar cloruro de hidrógeno anhidro durante 30 minutos. Después se añaden gota a gota a la solu-

1 ción 77 g de nitrito de n-butilo, agitando durante un perio-
do de 2 horas. Después de la adición gota a gota, la mezcla
se calienta a reflujo durante 8 horas y después se evapora
el disolvente a presión reducida. El residuo se disuelve en
5 benceno y se extrae con hidróxido sódico 2 N. El extracto se
acidula con ácido clorhídrico 2 N. Los cristales así precipi-
tados se separan por filtración. Los cristales crudos se
recristalizan en una mezcla de benceno y n-hexano para obte-
ner 82 g de ácido 2-(m-clorofenil)-2-metilpropiónico como
10 cristales blancos.

 A 80 g del producto así obtenido se añaden 100 ml de
benceno y 100 g de cloruro de tionilo. La mezcla se calienta
a reflujo durante 2 horas. Después se evaporan el benceno y
el exceso de cloruro de tionilo para obtener 94 g de cloru-
15 ro de 2-(m-clorofenil)-2-metilpropionilo como líquido inco-
loro. A una solución de 2,2 g del cloruro de ácido resultan-
te en 5 ml de acetona se añaden gota a gota, con agitación,
0,7 g de azida sódica en 5 ml de agua, a lo largo de un pe-
riodo de 15 minutos, mientras se mantiene la mezcla a una
20 temperatura de 10°C durante toda la adición. La reacción se
prosigue durante 30 minutos más. Se extrae la mezcla de reac-
ción, con benceno, y el extracto bencénico se seca sobre sul-
fato sódico y se calienta a 60°C durante 1 hora. Después de
enfriar, se agrega la solución resultante de isocianato de
25 N-cloro- α,α -dimetilbencilo a 1,1 g de N-metilanilina y la
mezcla se calienta a reflujo durante 3 horas. Después de en-
friar, la mezcla de reacción se lava con hidróxido sódico
2 N, ácido clorhídrico 2 N y agua, en ese orden y se seca so-
bre sulfato sódico. Después se evapora el disolvente para
30 obtener cristales que se recristalizan en n-hexano para dar

1 2,3 g del compuesto del título como cristales blancos.

Síntesis 2

3-(m-Cloro- α,α -dimetilbencil)-1-metil-1-(2,4-xilil)urea

5 Se añaden 2,0 g de isocianato de m-cloro- α,α -dimetilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro en la forma descrita en la Síntesis 1, a 1,4 g de N-metil-2,4-xilidina y la mezcla se calienta a 100°C durante 3 horas. A la mezcla de reacción se agrega benceno y agua. Se separa la
10 capa bencénica y se lava con ácido clorhídrico 2 N y agua, sucesivamente, y se seca sobre sulfato magnésico. Después se evapora el disolvente para obtener cristales que se recrystalizan en n-hexano para dar 2,4 g del compuesto del título como cristales blancos.

Síntesis 3

15 1-n-Butil-3-(m-cloro- α,α -dimetilbencil)-1-metilurea

20 Se añaden 3,9 g de isocianato de m-cloro- α,α -dimetilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro en la forma descrita en la Síntesis 1, a una solución de 1,8 g de N-n-butyl-N-metilamina en 20 ml de benceno, y la mezcla se agita fuertemente. Después de dejar en reposo durante la noche, la solución reaccionante se lava con solución acuosa de ácido clorhídrico 2 N, solución acuosa de hidróxido sódico 2 N y agua, en ese orden, y la capa orgánica se seca sobre sulfato sódico. Se concentra la capa por evaporación del
25 disolvente para obtener cristales que se recrystalizan en n-hexano para obtener 5,0 g del compuesto del título en forma cristalina.

Síntesis 4

30 3-(p-Cloro- α,α -dimetilbencil)-1,1-dietilurea

Se añaden 3,9 g de isocianato de p-cloro- α,α -dimetil-

1 bencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro en
la forma descrita en la Síntesis 1, a una solución de 1,7 g
de dietilamina en 20 ml de benceno. Después de agitar fuer-
5 temente, la mezcla se calienta a 50°C durante 2 horas y des-
pués se enfría. Después de enfriar, la mezcla de reacción se
trata en la forma descrita en la Síntesis 3 para obtener
4,9 g del compuesto del título, en forma cristalina.

Síntesis 5

3-(3,4-Dicloro- α,α -dimetilbencil)-1-n-propil-1-fenilurea

10 Se añaden 1,5 g de N-n-propilanilina a una solución de
0,01 moles de isocianato de 3,4-dicloro- α,α -dimetilbencilo
(preparado a partir del correspondiente cianuro en la forma
descrita en la Síntesis 1) en 10 ml de benceno y la mezcla
se calienta a reflujo durante 8 horas. La mezcla de reacción
15 se trata como en la Síntesis 1 para obtener 2,6 g de un lí-
quido viscoso que contiene 75 % del compuesto del título.

Síntesis 6

3-(2,4-Dicloro- α,α -dimetilbencil)-1-(p-clorofenil)-1-
etilurea

20 Se añaden 4,6 g de isocianato de 2,4-dicloro- α,α -dime-
tilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro
en la forma descrita en la Síntesis 1, a una solución de
3,2 g de p-cloro-N-etilanilina en 20 ml de tolueno y la mez-
cla se calienta a reflujo durante 4 horas. La mezcla de
25 reacción se trata como en la Síntesis 3 para obtener 6,5 g
del compuesto del título en forma cristalina.

Síntesis 7

3-(3,4-Dicloro- α,α -dimetilbencil)-1-etilurea

30 Se añaden 4,6 g de isocianato de 3,4-dicloro- α,α -dime-
tilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro

1 en la forma descrita en la Síntesis 1, a una solución de
2,0 g de monoetilamina (en solución acuosa al 70 %) en 20 ml
de dioxano y la mezcla se deja en reposo durante la noche.
Se concentra la mezcla de reacción a presión reducida para
5 obtener cristales que se recristalizan en etanol/agua para
dar 4,9 g del compuesto del título en forma cristalina.

Síntesis 8

3-(m-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-ciclohexil-1-metilurea

Se añade una solución de 1,2 g de N-metil-N-ciclohexil-
10 amina en 5 ml de n-hexano a una solución de 0,01 moles de
isocianato de m-cloro- α , α -dimetilbencilo (preparado a partir
del correspondiente cianuro en la forma descrita en la sín-
tesis 1) en 10 ml de benceno. La mezcla se mantiene a la
temperatura ambiente durante 6 horas y se concentra a pre-
15 sión reducida para obtener cristales que se recristalizan en
n-hexano para dar 2,8 g del compuesto del título como cris-
tales blancos.

Síntesis 9

3-(3,4-Dicloro- α , α -dimetilbencil)-1-metil-1-fenilurea

Se añaden 4,6 g de isocianato de 3,4-dicloro- α , α -dime-
20 tilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro en
la forma descrita en la Síntesis 1, a una solución de 2,2 g
de N-metilnilina en 20 ml de benceno y la mezcla se calien-
ta a reflujo durante 2 horas. La mezcla de reacción se trata
25 como en la Síntesis 6 para obtener 5,8 g del compuesto del
título en forma de cristales.

Síntesis 10

1-Bencil-3-(3,4-dicloro- α , α -dimetilbencil)-1-metilurea

A una solución de 0,01 moles de isocianato de 3,4-di-
30 cloro- α , α -dimetilbencilo (preparado a partir del correspon-

1 diente cianuro en la forma descrita en la Síntesis 1) en
10 ml de acetona, se añaden 1,2 g de N-metil-N-bencilamina
y la mezcla se calienta a 40°C durante 8 horas. Después se
evapora el disolvente para dar cristales que se lavan con
5 n-hexano para obtener 2,5 g del compuesto del título en for-
ma de cristales blancos.

Síntesis 11

3-(o-Cloro- α,α -dimetilbencil)-1-p-tolilurea

10 Una solución de 1,1 g de toluidina en 10 ml de benceno
se agrega a una solución de 0,01 moles de isocianato de
o-cloro- α,α -dimetilbencilo (preparado a partir del correspon-
diente cianuro en la forma descrita en la Síntesis 1) en
20 ml de benceno. La mezcla se mantiene a la temperatura am-
biente durante 1 hora. Los cristales precipitados se recris-
15 talizan en etanol/agua para dar 2,5 g del compuesto del tí-
tulo en forma de cristales blancos.

Síntesis 12

3-(m-Cloro- α,α -dimetilbencil)-1-metoxi-1-fenilurea

20 Una solución de 2,2 g de N-fenilhidroxilamina en 10 ml
de benceno se agrega a una solución de 0,02 moles de isocia-
nato de m-cloro- α,α -dimetilbencilo (preparado a partir del
correspondiente cianuro en la forma descrita en la Sínte-
sis 1) en 10 ml de benceno. La mezcla se agita bien y se de-
ja en reposo durante la noche. Los cristales precipitados se
25 filtran y se lavan con n-hexano para dar 5,7 g de 3-(m-cloro-
 α,α -dimetilbencil)-1-hidroxi-1-fenilurea. A 3,1 g de la urea
se añade una solución de 550 mg de metóxido sódico en 10 ml
de metanol. La mezcla se homogeneiza por agitación y se aña-
den a la misma 1,5 g de yoduro de metilo. Después la mezcla
30 se calienta a reflujo durante 2 horas. Se evapora el disol-

1 vente y el residuo se extrae con benceno después de agregar
agua. La capa bencénica se seca sobre sulfato sódico y el di-
solvente se destila para dar cristales que se recristalizan
5 en una mezcla de n-hexano y benceno para obtener 2,7 g del
compuesto del título.

Síntesis 13

3-(m-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-etoxi-1-(m-tolil)-
urea

10 Se añade una solución de 2,4 g de N-(m-tolil)hidroxil-
amina en 10 ml de éter a una solución de 0,02 moles de iso-
cianato de m-cloro- α , α -dimetilbencilo (preparado a partir
del correspondiente cianuro en la forma descrita en la Síntesis 1) en 10 ml de éter. La mezcla se agita fuertemente
15 y se deja en reposo durante la noche . Se evapora el disol-
vente para dar cristales blancos que se lavan con n-hexano
para obtener 6,1 g de 3-(m-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-hidro-
xi-1-(m-tolil)urea. A 3,2 g de la urea así preparada se añade una solución de 700 mg de etóxido sódico en 10 ml de eta-
20 nol. La mezcla se homogeneiza por agitación y se añaden a la
misma 1,7 g de bromuro de etilo. Después la mezcla se ca-
lienta a 60°C durante 2 horas. Se evapora el disolvente y
luego se añade agua. La mezcla se extrae con benceno. La ca-
pa orgánica se seca sobre cloruro cálcico anhidro y se evapo-
25 ra el disolvente para dar cristales que se recristalizan en
n-hexano para obtener 3,0 g del compuesto del título.

Síntesis 14

3-(m-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-(m-clorofenil)-1-
metilurea

30 Se añaden 3,9 g de isocianato de m-cloro- α , α -dimetil-
bencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro en

1 la forma descrita en la Síntesis 1, a una solución de 2,5 g
de m-cloro-N-metilanilina en 20 ml de benceno y la mezcla se
calienta a reflujo durante 5 horas. La mezcla de reacción
se trata como en la Síntesis 6 para obtener 5,8 g del com-
5 puesto del título en forma cristalina.

Síntesis 15

3-(m-Cloro- α,α -dimetilbencil)-1-metil-1-pentilurea

Una solución de 3,9 g de isocianato de m-cloro- α,α -
10 dimetilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianu-
ro en la forma descrita en la Síntesis 1, en 10 ml de n-hexa-
no se agrega a 2,4 g de N-metil-N-pentilamina. La mezcla se
deja en reposo durante la noche y después los cristales pre-
cipitados se separan por filtración y se lavan bien con
n-hexano frío para obtener 5,4 g del compuesto del título.

Síntesis 16

1-Isobutil-3-(p-cloro- α,α -dimetilbencil)-1-metilurea

15 Se añaden 3,9 g de isocianato de p-cloro- α,α -dimetil-
bencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro en
la forma descrita en la Síntesis 1, a 1,9 g de N-isobutil-N-
20 metilamina. Los cristales precipitados se separan por fil-
tración y se recristalizan en n-hexano para dar 5,2 g del
compuesto del título.

Síntesis 17

1-n-Butil-3-(p-cloro- α,α -dimetilbencil)-1-etilurea

25 Una solución de 3,9 g de isocianato de p-cloro- α,α -
dimetilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianu-
ro en la forma descrita en la Síntesis 1; en 20 ml de
metil-isobutilcetona se agrega a 2,2 g de N-n-butil-N-etil-
30 amina. Se evapora el disolvente a presión reducida para
obtener cristales que después se recristalizan en n-hexano

1 para obtener 5,1 g del compuesto del título.

Síntesis 18

3-(p-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-etil-1-fenilurea

5 Una solución de 3,9 g de isocianato de p-cloro- α , α -dime-
tilbencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro
en la forma descrita en el Ejemplo 1, en 20 ml de tolueno
se agrega a 2,7 g de N-etilanilina y la mezcla se calienta
a reflujo durante 3 horas. Después de enfriar, la mezcla de
10 reacción se lava con HCl 2 N, NaOH 2 N y agua, en ese orden,
y la capa orgánica se seca sobre sulfato sódico. Se evapora
el disolvente a presión reducida para obtener 6,2 g del com-
puesto del título en forma de aceite pardo pálido.

Síntesis 19

3-(p-Cloro- α , α -dimetilbencil)-1-etoxi-1-fenilurea

15 Una solución de 19,6 g de isocianato de p-cloro- α , α -
dimetilbencilo (preparado a partir del correspondiente cia-
nuro en la forma descrita en la Síntesis 1) en 10 ml de éter
se agrega gota a gota y agitando a una solución de 10,9 g
de N-fenilhidroxilamina en 10 ml de éter, a lo largo de un
20 periodo de 10 minutos. Después de la adición gota a gota,
la mezcla se agita durante 30 minutos más para precipitar
3-(p-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-hidroxi-1-fenilurea. Los
cristales precipitados se separan por filtración y se secan.
Se añaden 3,0 g de la urea así obtenida y se disuelven com-
25 pletamente en una solución de 750 mg de etóxido sódico en
10 ml de etanol. A la solución resultante se agregan 1,2 g
de bromuro de etilo y la mezcla se calienta a 60°C durante
2 horas. Se evapora el disolvente a presión reducida y se
agrega agua al residuo. Después la mezcla se extrae con ben-
30 ceno. La capa bencénica se lava con NaOH 2 N y después con

1 agua y se seca sobre sulfato sódico. Se evapora el disolvente para dar cristales que se recrystalizan en una mezcla disolvente de benceno y hexano para obtener 3,1 g del compuesto del título en forma de cristales blancos.

5 Síntesis 20

3-(3,4-Dicloro- α,α -dimetilbencil)-1-ciclohexil-1-etilurea

Una solución de 2,3 g de isocianato de 3,4-dicloro- α,α -dimetilbencilo (preparado a partir del correspondiente isocianuro en la forma descrita en la Síntesis 1) en 10 ml de cloroformo se agrega a 1,5 g de N-etil-N-ciclohexilamina. Se evapora el disolvente para dar cristales blancos que después se recrystalizan en una mezcla disolvente de benceno y n-heptano para obtener 2,6 g del compuesto del título.

15 Síntesis 21

3-(m-Trifluormetil- α,α -dimetilbencil)-1-metil-1-fenil-urea

Una solución de 2,3 g de isocianato de m-trifluormetil- α,α -dimetilbencilo en 5 ml de benceno se agrega a una solución de 1,1 g de N-metil-anilina en 5 ml de benceno y la mezcla se calienta a reflujo durante 2 horas. Después de enfriar, la mezcla de reacción se lava con NaOH 2 N, HCl 2 N y agua en ese orden, y se seca sobre sulfato sódico. Se evapora el disolvente para dar cristales que después se recrystalizan en n-hexano para obtener 2,6 g del compuesto del título.

25 Síntesis 22

3-(m-trifluormetil- α,α -dimetilbencil)-1-metoxi-1-fenil-urea

30 Una solución de 2,2 g de isocianato de m-trifluormetil- α,α -dimetilbencilo en 10 ml de diclorometano se agrega gota

1 a gota a una solución de 1,1 g de N-fenilhidroxilamina en
10 ml de diclorometano, a lo largo de un periodo de 10 minu-
tos. Una vez terminada la adición gota a gota, la mezcla se
5 agita durante 30 minutos. Después se evapora el disolvente
para dar cristales blancos. Estos se secan bien y se disuel-
ven en una solución de 600 mg de metóxido sódico en 10 ml
de metanol. A la solución resultante se añaden 2,0 g de yo-
duro de metilo y la mezcla se calienta a reflujo durante
10 2 horas. Se concentra la mezcla de reacción y después se
agrega agua. La mezcla se extrae con benceno y la capa ben-
cénica se lava con NaOH 2 N y después con agua y se seca so-
bre sulfato sódico. Se evapora el disolvente a presión re-
ducida para dar cristales que después se recrystalizan en
una mezcla disolvente de n-hexano y benceno para obtener 2,4
15 g del compuesto del título.

Síntesis 23

1-Ciclohexil-1-etil-3-(p-fluor- α , α -dimetilbencil)urea

Una solución de 1,8 g de isocianato de p-fluor- α , α -di-
20 metilbencilo en 20 ml de n-hexano se agrega a 1,4 g de N-
etil-N-ciclohexilamina y la mezcla se deja en reposo durante
la noche. Después se evapora el disolvente para dar crista-
les que se lavan con n-pentano frío para obtener 2,7 g del
compuesto del título en forma de cristales blancos.

Síntesis 24

25 3-(p-Cloro- α , α -dimetilbencil)-1,1-hexametilenurea

Se mezclan 2,0 g de isocianato de p-cloro- α , α -dimetil-
bencilo con 1,1 g de hexametilenimina con lo que se produ-
ce inmediatamente la precipitación de cristales. Los crista-
les se recrystalizan en una mezcla disolvente de benceno y
30 n-heptano para obtener 2,7 g del compuesto del título.

Síntesis 25

3-(m-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-metoxi-1-n-propilurea

Una solución de 8,0 g de N-n-propilhidroxilamina en 25 ml de benceno se añade gota a gota, con intensa agitación, a una solución de 19,6 g de isocianato de m-cloro- α , α -dimetilbencilo en 20 ml de benceno, a lo largo de un periodo de 30 minutos. Después de la adición gota a gota, se prosigue la reacción durante 2 horas más. La solución reaccionante se lava con HCl 2 N y después se extrae con NaOH 2 N. La capa de NaOH 2 N se acidula con HCl concentrado y después se extrae con benceno. La capa bencénica se lava con agua y se seca sobre sulfato sódico. Después se evapora el disolvente a presión reducida. El residuo resultante cristaliza dando 24,0 g de 3-(m-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-hidroxi-1-propilurea como cristales blancos. Se disuelven 2,7 g de la urea así obtenida en una solución de 600 mg de metóxido sódico en 15 ml de metanol. A la solución resultante se agregan 1,6 g de yoduro de metilo y la mezcla se calienta a reflujo durante 3 horas. Se concentra la solución reaccionante y después se agrega agua. La mezcla se extrae con benceno y la capa bencénica se lava con HCl 2 N, NaOH 2 N y agua, en ese orden, y se seca sobre sulfato sódico. Se evapora el disolvente a presión reducida. El aceite obtenido como residuo se destila a presión reducida para obtener 1,9 g del compuesto del título en forma de aceite con un punto de ebullición de 147-157°C/1,0 mm Hg, que cristaliza después en cristales con un punto de fusión inferior a 50°C.

Síntesis 26

3-(p-cloro- α,α -dimetilbencil)-1-etoxi-1-n-propilurea

Se añade una solución de 2,0 g de isocianato de p-cloro- α,α -dimetilbencilo en 5 ml de benceno a 0,8 g de N-n-propilhidroxilamina y la mezcla se deja en reposo durante la noche. Se concentra la solución reaccionante para dar cristales blancos que se lavan con HCl 2 N, agua y n-hexano, en ese orden. La 3-(p-cloro- α,α -dimetilbencil)-1-hidroxi-1-n-propilurea resultante se seca en un desecador a presión reducida y se disuelve en una solución de 700 mg de etóxido sódico en 10 ml de etanol. A la solución resultante se agregan 1,2 g de bromuro de etilo y la mezcla se calienta a 60°C durante 3 horas. Se concentra la solución reaccionante y se agrega benceno. La sal que precipita se separa por filtración y la solución bencénica se lava con HCl 2 N, NaOH 2 N y agua, en ese orden y se seca sobre sulfato sódico. Se evapora el benceno. El residuo resultante cristaliza al enfriar dando 2,1 g del compuesto del título.

Síntesis 27

3-(m-cloro- α,α -dimetilbencil)-1-metil-1-n-propiloxiurea

Se suspenden 8,4 g de hidrocloreuro de N-metilhidroxilamina en 50 ml de benceno. A la suspensión se añaden con agitación 11 g de trietilamina. A la mezcla resultante se añade gota a gota, con agitación, una solución de 19,5 g de isocianato de m-cloro- α,α -dimetilbencilo en 20 ml de benceno, durante un periodo de 30 minutos. Después de la adición gota a gota, se efectúa la reacción durante 1 hora más. A continuación se filtra la sal precipitada durante la reacción y el disolvente se evapora a presión reducida para dar cristales blancos que después se recrystalizan en etanol/agua.

1 para obtener 3-(m-cloro- α , α -dimetilbencil)-1-hidroxi-1-metil-
urea. Se disuelven 2,4 g de la N-hidrourea así obtenida en
una solución de 750 mg de etóxido sódico en 10 ml de etanol.
5 A la solución se añaden 1,7 g de bromuro de n-pentilo y la
mezcla se calienta a reflujo durante 4 horas. Se concentra
la solución reaccionante y después se añade agua. La mezcla
resultante se extrae con benceno. La capa bencénica se lava
con agua y se seca sobre sulfato sódico y se evapora el di-
solvente. El residuo se destila a presión reducida para ob-
10 tener 2,2 g del compuesto del título en forma de aceite que
tiene un punto de ebullición de 129°C/0,09 mm Hg.

Síntesis 28

3-(m-Bromo- α , α -dimetilbencil)-1-metil-1-fenilurea

15 Se mezclan 2,4 g de isocianato de m-bromo- α , α -dimetil-
bencilo, preparado a partir del correspondiente cianuro en
la forma descrita en la Síntesis 1, con 1,1 g de N-metil-
anilina y la mezcla se calienta a 60°C durante 2 horas. Los
cristales blancos que se forman al enfriar se filtran y se
lavan con n-hexano para obtener 3,0 g del compuesto del tí-
20 tulo.

Síntesis 29

3-[2-(α -Naftil)-2-propil]-1-metilurea

25 A una solución de 4,0 g de una solución acuosa de mono-
metilamina al 30 % en 10 ml de dioxano se añade lentamente
gota a gota, con agitación, una solución de 4,2 g de isocia-
nato de 2-(α -naftil)-2-propilo en 5 ml de dioxano. La mez-
cla se calienta a 50°C durante 1 hora. Después se evapora el
disolvente a presión reducida. Los cristales crudos resultan-
tes se recristalizan en etanol/agua para obtener 4,1 g del
30 compuesto del título.

Síntesis 30

1 A una solución de 1,6 g de dietilamina en 10 ml de ben-
ceno se agrega una solución de 4,2 g de isocianato de 2-(α -
naftil)-2-propilo en 10 ml de benceno. La mezcla se calienta
5 a 50°C durante 2 horas. Después se evapora el disolvente a
presión reducida para obtener cristales crudos y a conti-
nuación se recrystalizan en benceno/n-hexano para obtener
5,0 g del compuesto del título.

Síntesis 31

10 A una solución de 2,2 g de N-metilanilina en 10 ml de
benceno se agrega una solución de 4,2 g de isocianato de
2-(α -naftil)-2-propilo en 10 ml de benceno. La mezcla se ca-
lienta a reflujo durante 2 horas. Después de enfriar, la so-
lución reaccionante se lava con ácido clorhídrico 2 N, solu-
15 ción acuosa de sosa cáustica 2 N y agua, en ese orden, y se
seca sobre sulfato sódico. Se evapora el disolvente a pre-
sión reducida para obtener cristales crudos que después se
recrystalizan en n-hexano para obtener 5,4 g del compuesto
del título.

20 Ahora hemos encontrado que ciertos compuestos de urea
en cuya estructura está unido un grupo arilo a través del
átomo de carbono terciario del grupo isopropilo al átomo de
nitrógeno amínico del esqueleto de urea, son útiles herbici-
25 das selectivos. La estructura de los compuestos de urea de
acuerdo con esta invención es única y claramente diferencia-
da de la de los herbicidas del tipo de urea de la técnica
anterior.

30 Los compuestos de fórmula general (I) presentan una
fitotoxicidad selectiva notablemente elevada. Así, pueden
controlar una amplia gama de malas hierbas sin producir nin-

1 guna fitotoxicidad en ciertas plantas útiles. Por ejemplo,
pueden controlar las malas hierbas pertenecientes a la fami-
lia de las gramíneas, como almarejo de las praderas (*Alopecurus* sp.),
cerreig (*Echinochloa* sp.), pata de gallina
5 (*Digitaria* sp.) pelosa (*Poa* sp.), almorejo verde (*Setaria* sp.),
avenas (*Avena* sp.), galio (*Eleusini* sp.), y sorgo (*Sorghum*
sp.); maleza de hoja ancha como cenizo (*Chenopodium* sp.),
bledo (*Amaranthus* sp.), pamplina (*Stellaria* sp.), falsa pam-
plina (*Lindernia* sp.), monocoria (*Monochoria* sp.), ambrosía
10 común (*Ambrosia* sp.), verdolaga o portulaca común (*Portulaca*
sp.), zamarraga anual (*Eigeron* sp.), polígono (*Polygonum* sp.)
y *Rotala* sp.; y de la familia de las ciperáceas como juncia
púrpura, planta de sombrilla o juncia (*Cyperus* sp.), enea
(*Eleocharis* sp.), junquillo (*Scirpus* sp.) y *Kilinga* verde
15 (*Kyllinga* sp.).

La maleza perteneciente a la familia de las ciperáceas
es tan persistente y prolífica que es difícil de erradicar.
La propagación por tubérculos constituye un importante me-
dio de extensión en las zonas cultivadas. El control de esta
maleza con herbicidas conocidos del tipo de urea, como
20 fenurón, monurón, diurón o linurón, solo es parcialmente efi-
caz y los tubérculos mantienen la capacidad de repetidos cre-
cimientos después de que los brotes o las partes foliares de
las plantas han sido afectados por los productos químicos.

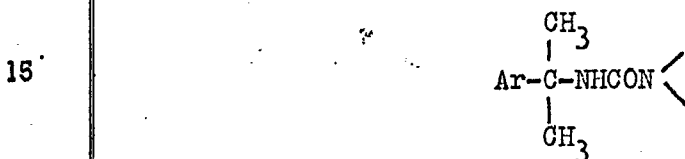
25 La acción herbicida de los compuestos de esta invención
es especialmente notable sobre la maleza perteneciente a la
familia de las ciperáceas así como sobre otras malas hier-
bas nocivas que anteriormente han resultado de difícil con-
trol.

30 Los compuestos de fórmula general (I) son prácticamente

1 no fitotóxicos para muchos cultivos útiles como arroz, ce-
bada, trigo, soja, cacahuet, maíz, remolacha, algodón, toma-
te, melón, patata, batata, rábano, zanahoria, col, cebolla,
césped, caña de azúcar, tabaco, girasol, fresa, colza, be-
5 renjena, te, árboles frutales, plantas leñosas y pastos.

Debido a su gran selectividad, los compuestos pueden
utilizarse en el control de la maleza en los cultivos antes
descritos, preferiblemente mediante tratamiento de pre-emer-
gencia o mediante tratamiento de incorporación al terreno
10 antes de la siembra.

Refiriéndonos ahora a la relación entre la estructura
y la actividad de los compuestos de esta invención, el es-
queleto básico



es esencial para la actividad herbicida selectiva. Así, so-
lamente una pequeña variación, como la del grupo isopropili-
deno en metileno, etileno o etilideno o del grupo urea en
20 tiourea, reduce significativamente la selectividad y/o la
fitotoxicidad. Además, los compuestos que presentan el es-
queleto básico anterior son generalmente más o menos fito-
tóxicos. La introducción de uno o dos halógenos o grupos
trifluormetilo en las posiciones m o p del anillo aromático,
25 sin embargo, produce un gran aumento de la actividad herbici-
da. Mientras que la introducción de otros radicales en el
anillo aromático reducen la actividad herbicida, el radical
R₁ en la fórmula general (I) desempeña un importante papel
en la actividad; así la introducción de un radical alcoxi
30 inferior o alquilo inferior aumenta la actividad mientras

1 que la sustitución del radical R_1 por un átomo de hidrógeno reduce la actividad. Una clave importante de la actividad herbicida es el volumen molecular del radical R_2 en la fórmula general (I). La actividad es máxima cuando el número
5 de átomos de carbono en la molécula de R_2 es de 4 a 6; así puede conseguirse una fitotoxicidad máxima cuando R' es un radical butilo, amilo, ciclohexilo o fenilo.

Los compuestos de fórmula general (I) pueden ser formulados en diversos preparados. Así, los compuestos pueden ser
10 formulados en cualquier preparado conocido como polvo, gránulos, concentrados emulsionables, polvos mojables y pastas, mediante el uso de vehículos sólidos inertes como arcilla, caolín, tierra de diatomeas, silicato cálcico y talco, medios
15 líquidos como agua, metanol, benceno, tolueno, xileno, metilnaftaleno, metilcellosolve y clorobenceno o agentes humectantes, dispersantes y emulsionantes. Además, las composiciones herbicidas de esta invención pueden utilizarse a la vez o en
mezcla con fertilizantes, mejoradores del terreno, insecticidas, fungicidas, otros herbicidas o reguladores del crecimiento de las plantas.
20

Los procedimientos para la preparación de las composiciones herbicidas de este invento están ilustrados en los siguientes ejemplos.

EJEMPLO 1

25 Se pulveriza bien una mezcla constituida por 50 partes en peso de Compuesto 1, 50 partes en peso de bentonita y 5 partes en peso de éter polioxietilentalquilarílico para obtener un polvo mojable que contiene 50 % del citado ingrediente activo.
30

EJEMPLO 2

Se amasa bien una mezcla formada por 10 partes en peso de Compuesto 16, 15 partes en peso de bentonita, 73 partes en peso de arcilla y 2 partes en peso de dodecibencenosulfonato sódico con unas 25 partes en peso de agua, se granula y después se seca para obtener gránulos que contienen 10 % del ingrediente activo citado.

EJEMPLO 3

Se pulveriza bien una mezcla formada por 50 partes de Compuesto 22, 45 partes en peso de bentonita y 5 partes en peso de éter polioxietilenaalquilarfílico para obtener un polvo mojable que contiene 50 % de dicho ingrediente activo.

EJEMPLO 4

Una mezcla formada por 10 partes en peso de Compuesto 40, 15 partes en peso de bentonita, 73 partes en peso de arcilla y 2 partes en peso de dodecibencenosulfonato sódico se amasa bien con unas 25 partes en peso de agua, se granula y después se seca para obtener gránulos que contienen 10 % de dicho ingrediente activo.

Los efectos de las composiciones herbicidas de esta invención están ilustrados en los diversos ejemplos de ensayos.

ENSAYO 1

Unas macetas de cerámica de 1/8850 áreas de superficie se llenan con tierra de arrozal. Se mezclan con la tierra de la superficie semillas de monocoria (*Monochoria vaginalis*) y cerreig (*Echinochoa crusgalli*). Se transplantan a cada maceta dos vainas de arroz y enea (*Eleocharis acicularis*). Todas las macetas se riegan al día siguiente hasta una profundidad de 4 cm para simular las condiciones de un arrozal.

1 Tres días después del transplante, se utiliza un polvo mo-
 5 jable de cada uno de los ingredientes activos de la inven-
 ción, diluido con 1000 litros/Ha de agua, para tratar el
 agua de irrigación a una dosis de 5 kg/Ha. Como herbicida
 de referencia, se utiliza el diurón (3-(3,4-diclorofenil)-
 1,1-dimetilurea). El ensayo se realiza en un invernadero. Al
 cabo de 21 días, se observan los efectos herbicidas y la fi-
 totoxicidad para el arroz y se puntúa mediante los valores 0
 (ningún daño) a 10 (inhibición total del crecimiento) para
 10 la enea y 0 (ningún daño) a 10 (destrucción total) para las
 otras plantas.

Los resultados de los ensayos se encuentran en la Ta-
 bla II.

TABLA II

Compues- to n ^o	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa- ra el arroz
	<u>Cerreig</u>	<u>Enea</u>	<u>Monocoria</u>	
1	10	10	10	0
2	10	10	10	7
3	10	10	10	1
4	10	10	10	6
5	10	10	10	6
6	10	10	10	0
7	8	10	0	0
8	10	10	10	0
9	10	10	10	5
10	10	10	10	2
11	9	9	0	0
13	9	2	0	0
14	10	10	10	8

TABLA II (continuación)

Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa- ra el arroz	
	Cerreig	Enea	Monocoria		
15	10	9	10	0	
5	16	10	9	10	0
	17	10	9	10	0
	18	10	10	10	0
	19	10	9	8	0
	20	10	10	10	0
10	21	10	9	10	0
	22	7	10	10	1
	23	6	9	10	0
	24	9	10	6	2
	25	10	10	10	4
15	26	10	10	10	5
	27	10	10	10	2
	28	6	5	0	0
	29	10	10	0	0
	30	10	10	10	5
20	31	10	10	10	5
	32	8	9	5	0
	33	9	9	0	2
	34	10	9	3	2
	36	10	10	10	4
25	37	10	9	10	0
	38	9	7	0	0
	40	10	10	0	0
	41	6	2	0	0
	42	9	0	4	0
30	45	9	7	0	0

TABLA II (continuación)

Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa ra el arroz
	<u>Cerreig</u>	<u>Enea</u>	<u>Monocoria</u>	
46	9	9	0	2
49	6	10	0	0
50	6	5	0	0
51	4	6	0	0
56	8	11	0	0
57	10	10	10	0
58	10	7	0	0
59	4	2	0	0
60	10	10	10	8
61	10	10	10	8
62	10	10	10	8
63	10	10	10	8
64	9	10	10	2
65	10	10	10	4
66	9	10	4	0
67	9	10	5	0
68	10	10	10	2
69	10	10	6	0
70	10	10	6	0
71	10	10	10	0
72	10	10	8	0
73	10	10	10	3
74	8	4	0	0
75	6	2	0	0
76	8	2	0	0
77	6	2	2	0
78	10	8	10	8

1

5

10

15

20

25

30

TABLA II (continuación)

Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa- ra el arroz
	Cerreig	Enea	Monocoria	
79	8	6	10	0
81	10	4	0	0
83	10	4	10	0
84	10	8	10	0
85	10	10	10	0
86	10	10	10	8
87	10	10	10	5
88	8	10	9	3
89	7	8	6	0
90	7	6	6	0
91	8	2	2	0
93	6	2	0	0
94	6	1	0	0
98	2	4	10	0
100	10	10	10	0
101	9	4	10	0
102	10	10	10	0
107	6	2	4	0
110	10	10	6	0
111	8	2	2	0
112	6	6	8	0
113	10	10	10	2
115	9	10	10	2
116	10	10	10	0
118	9	10	10	0
119	9	10	10	4

TABLA II (continuación)

1

Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa ra el arroz
	<u>Gerreig</u>	<u>Enea</u>	<u>Monocoria</u>	
120	8	6	0	0
5 121	10	10	10	8
123	10	10	10	2
124	10	10	10	6
125	9	10	4	0
126	10	10	10	6
10 127	10	10	10	6
128	8	8	0	2
129	6	6	2	0
130	8	8	10	0
131	9	10	10	0
15 132	9	10	10	2
133	6	6	2	0
135	10	10	10	2
136	10	10	10	0
138	9	2	0	0
20 139	8	6	0	0
140	10	10	10	2
141	9	10	6	2
142	10	10	10	0
143	8	8	0	2
25 148	10	8	10	4
149	8	8	0	0
150	10	10	10	6
151	9	8	10	0
152	10	10	10	2
30 157	9	4	0	0

TABLA II (continuación)

Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa- ra el arroz
	Cerreig	Enea	Monocoria	
160	10	10	10	2
5 161	10	8	10	0
165	10	8	10	0
166	7	6	10	0
167	8	2	0	0
168	6	2	0	0
10 169	9	4	0	0
170	6	2	0	0
171	9	6	2	0
172	10	2	0	0
173	6	2	4	0
15 174	6	2	0	0
175	8	6	0	0
176	9	8	0	0
177	9	8	0	0
178	8	8	2	0
20 179	8	6	2	0
180	6	4	0	0
181	8	4	0	0
182	9	8	10	2
183	9	4	2	0
25 184	10	2	10	0
185	9	6	10	0
193	6	6	0	0
203	6	2	5	0
204	6	2	4	0
30 205	8	6	8	0

TABLA II (continuación)

Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa- ra el arroz
	<u>Gerreig</u>	<u>Enea</u>	<u>Monocoria</u>	
207	8	6	4	0
5 211	8	8	2	4
212	9	10	10	7
213	9	10	10	2
214	9	10	10	0
215	9	10	10	0
10 216	8	8	2	0
226	6	3	0	0
227	8	4	2	0
228	8	6	4	0
229	6	2	0	0
15 230	10	10	10	8
231	10	10	10	6
232	10	6	8	0
233	10	10	10	4
234	10	8	10	0
20 235	10	10	10	8
236	10	10	10	4
237	8	6	0	2
238	10	10	7	2
239	10	10	10	8
25 240	8	8	2	2
241	9	9	8	4
242	10	10	10	4
243	6	6	6	2
244	9	8	6	4
30 245	10	10	10	6

TABLA II (continuación)

1	Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa- ra el arroz
		Gerreig	Enea	Monocoria	
	246	9	10	10	0
5	247	10	10	10	0
	248	9	10	10	0
	249	8	6	0	0
	250	8	6	0	0
	251	10	6	8	0
10	253	10	10	10	4
	254	10	2	2	0
	255	10	10	10	6
	256	10	10	10	8
	257	8	6	0	2
15	258	8	8	4	4
	259	6	6	4	2
	260	6	6	0	2
	261	9	2	0	0
	264	8	6	0	0
20	265	9	2	0	2
	266	10	10	10	6
	267	9	6	0	0
	268	10	10	10	2
	269	10	10	10	4
25	270	10	10	10	4
	271	10	10	10	4
	272	10	10	10	0
	273	10	10	10	6
	274	10	10	10	7
30	275	10	10	10	4

TABLA II (continuación)

Compuesto nº	Efecto herbicida			Fitotoxicidad pa- ra el arroz
	Cerreig	Enea	Monocoria	
277	7	4	2	0
278	7	4	4	0
280	10	6	10	6
281	9	4	7	0
282	6	6	2	0
284	8	2	2	0
285	7	1	1	0
293	10	9	10	0
294	8	6	7	0
295	7	7	3	0
296	10	9	10	0
297	8	7	3	0
Diurón	10	10	10	10

Los resultados dados en la Tabla II ponen de manifiesto que los compuestos de esta invención presentan intensa actividad herbicida contra diferentes malas hierbas de los arrozales, junto con baja fitotoxicidad para el arroz.

ENSAYO 2

A. Unas macetas de cerámica de 1/8850 áreas se llenan con tierra de arrozal. Se mezclan las semillas de pata de gallina y bleo con la tierra de la superficie que constituye la capa superior de 2 cm de profundidad. Inmediatamente después se rocía sobre la superficie de la tierra un polvo mojable de cada ingrediente activo de la invención, a razón de 10 kg/Ha I.A., diluido con 1000 litros/Ha.

B. Se llenan con tierra de arrozal hasta una profundidad de 10 cm unas macetas de cerámica de 1/8850 áreas. Des-

1 pués se saca la tierra y se pulveriza y mezcla con 10 kg/Ha
I.A. de un polvo mojable de cada ingrediente activo de la in-
vención, diluido con 1000 litros/Ha de agua. La tierra así
5 tratada se devuelve a las macetas. Inmediatamente después se
plantan siete tubérculos de juncia púrpura a 3 cm de profun-
didad.

Los efectos herbicidas se observan al cabo de 14 días
para el Ensayo A y al cabo de 30 días para el Ensayo B y se
puntuán mediante los valores 0 (ningún daño) a 10 (daño to-
tal).

Los resultados de los ensayos se encuentran en la Ta-
bla III. Como herbicida de referencia se utilizó Diurón.

TABLA III

Compuesto nº	<u>Efecto herbicida</u>		
	<u>Pata de gallina</u>	<u>Bledo</u>	<u>Juncia púrpura</u>
1	8	2	6
2	10	10	10
3	8	5	10
4	10	6	10
5	10	8	10
6	8	8	8
7	2	0	4
8	8	2	2
9	9	8	7
10	8	2	6
14	10	4	10
15	8	2	3
16	8	4	7
17	4	1	4
18	8	6	3

TABLA III (continuación)

1

Compuesto nº	Efecto herbicida				
	<u>Pata de gallina</u>	<u>Bledo</u>	<u>Juncia púrpura</u>		
20	8	3	4		
5	22	10	2	4	
	23	10	6	3	
	24	8	3	5	
	25	10	9	10	
	26	9	4	7	
10	27	6	2	4	
	28	6	4	2	
	29	6	2	2	
	30	9	4	9	
	32	7	1	3	
	15	33	8	4	3
		36	8	6	9
37		6	2	7	
46		2	0	8	
50		0	0	7	
20	51	0	0	6	
	56	6	2	3	
	57	6	2	7	
	58	4	1	3	
	60	10	10	10	
	25	61	10	8	10
		62	9	6	10
		63	7	2	6
64		6	0	5	
30	65	10	4	9	
	68	10	8	10	

TABLA III (continuación)

1	Compuesto nº	Efecto herbicida		
		<u>Pata de gallina</u>	<u>Bledo</u>	<u>Juncia púrpura</u>
	69	8	4	9
5	70	8	4	8
	71	10	6	8
	72	4	0	4
	73	10	4	6
	78	9	8	10
10	79	6	2	
	81	6	0	
	83	6	2	
	85	0	6	7
	86	10	8	10
15	87	10	6	10
	88	6	3	6
	98	6	0	2
	100	8	2	6
	101	6	4	
20	102	6	0	
	110	10	2	
	112	8	4	
	113	7	6	9
	118	5	2	
25	119	10	4	10
	120	6	6	8
	121	10	4	10
	123	6	6	9
	124	8	6	9
30				

TABLA III (continuación)

1	Compuesto nº	<u>Efecto herbicida</u>		
		<u>Pata de gallina</u>	<u>Bledo</u>	<u>Juncia púrpura</u>
	126	9	6	
5	127	9	8	10
	132	6	0	
	135	9	8	9
	140	9	8	
	141	8	6	
10	142	6	0	9
	148	8	4	9
	150	8	4	10
	151	3	4	10
	152	6	4	8
15	160	10	4	8
	165	8	2	8
	167	6	2	
	168	6	4	
	169	5	2	4
20	175	8	0	2
	176	6	2	
	177	6	0	
	181	6	0	
	182	8	6	10
25	185	4	0	7
	193	6	0	
	203	6	0	
	204	7	2	
30	205	6	2	

1

TABLA III (continuación)

	<u>Compuesto nº</u>	<u>Efecto herbicida</u>		
		<u>Pata de gallina</u>	<u>Bledo</u>	<u>Juncia púrpura</u>
	211	6	0	2
5	212	6	4	
	213	5	2	
	228	4	0	
	229	2	0	5
	230	10	6	10
10	231	8	6	10
	233	8	2	9
	234	8	2	8
	235	10	6	10
	236	6	4	10
15	238	5	2	6
	239	9	8	9
	240	4	2	6
	241	7	6	9
	242	8	2	9
20	243	8	6	
	245	10	4	10
	246	6	2	
	247	10	6	8
	249	8	2	7
25	250	8	2	2
	251	6	4	8
	253	8	8	7
	255	9	2	9
	256	9	6	10
30	259	2	0	9

1 profundidad de 5 cm y se rocía y mezcla bien con 5 a 10 kg/Ha
I.A. de un polvo mojable de cada ingrediente activo de la in-
vención, diluido con 1000 litros/Ha de agua. La tierra así
tratada se devuelve a las macetas. Inmediatamente después,
5 se siembran a 2 cm de profundidad semillas de soja, cacahuet,
tomate, algodón y maíz. Al cabo de 24 días se determina la
fitotoxicidad para estos cultivos, que se clasifica como si-
gue:

	<u>Fitotoxicidad</u>	<u>Indice</u>
10	9 % o menos de daños	0
	10-19 % "	1
	20-29 % "	2
	30-39 % "	3
	40-49 % "	4
15	50-59 % "	5
	60-69 % "	6
	70-79 % "	7
	80-89 % "	8
	90-99 % "	9
20	100 % (destruidos)	10

Los resultados de los ensayos se encuentran en la Ta-
bla IV. Se utiliza como referencia diurón.

25

30

1

TABLA IV

Compues to n°	Soja		Cacahuet		Tomate		Algodón		Maíz	
	5 kg/Ha	10	5	10	5	10	5	10	5	10
2	3	8	0	0	0	1	0	0	6	7
5	4	2	6	0	0	0	0	0	4	6
	5	1	2	0	0	0	0	0	3	5
	6	2	5	0	0	0	0	0	4	5
	14	1	2	0	0	0	0	0	4	6
	16	0	3	0	0	0	0	0	3	4
10	25	2	4	0	0	0	1	0	5	6
	30	2	6	0	0	0	0	0	3	5
	36	2	3	0	0	0	0	0	4	5
	60	6	7	0	2	0	2	0	7	8
	61	5	6	0	0	0	1	0	5	6
15	62	4	6	0	0	0	0	0	5	6
	65	2	3	0	0	0	0	0	4	6
	68	2	6	0	0	0	1	0	6	7
	230	3	7	0	0	0	0	0	5	7
	245	2	5	0	0	0	0	0	3	5
20	266	1	3			0	0	0	5	7
	271	3	4			1	2	2	3	6
	273	4	4			2	3	0	1	6
	274	3	4			6	7	1	1	8
	280				0		4		0	6
25	281				0		0		0	4
	293				0		4		0	0
	294				0		0		0	0
	295				0		0		0	0
	296				0		0		0	0
30	297				0		0		0	0
	Diurón	5	10	3	6	10	10	0	2	5

ENSAYO 4

1 Unas macetas de cerámica de 1/8850 áreas se llenan con tierra de arrozal. Se mezclan semillas de cereig y monocoria con la tierra de la superficie y se transplanta enea.

5 Todas las macetas se riegan al día siguiente hasta una profundidad de 4 cm para simular las condiciones del arrozal. Tres días después del transplante, se utiliza un polvo mojabable de cada ingrediente activo de la invención, después de diluirlo con 1000 litros/Ha de agua, para tratar el agua de irrigación a una dosis de 1 ó 2 kg/Ha I.A. Se utiliza diurón como herbicida de referencia. Al cabo de 21 días se observan los efectos herbicidas y se clasifican mediante los valores 0 (ningún daño) a 10 (inhibición total del crecimiento) para la juncia y 0 (ningún daño) a 10 (destrucción) para las otras plantas.

15 Unas macetas de cerámica de 1/8850 áreas se llenan con tierra de arrozal hasta una profundidad de 10 cm. Después se saca la tierra y se rocía y mezcla con 4 y 8 kg/Ha I.A. de un polvo mojabable de cada ingrediente activo de la invención, diluido con 1000 litros/Ha. La tierra así tratada se devuelve a las macetas. Inmediatamente después se plantan en la tierra siete tubérculos de juncia púrpura a 3 cm de profundidad.

20 Se observan los efectos herbicidas al cabo de 30 días y se clasifican de la misma forma que en el Ensayo A.

25 Los resultados se encuentran en la Tabla V. Como herbicida de referencia se utiliza diurón.

30

TABLA V (continuación)

1

Compues to nº	Carreig		Enea		Monocoria		juncia púrpura	
	1 kg/10a	2 kg/10a	1	2	1	2	1	2
232	7	9	6	6	6	8	0	2
233	9	10	10	10	6	10	9	9
234							4	7
235	10	10	10	10	10	10	9	10
236	9	10	10	10	10	10	9	10
237	7	8	4	6	0	0	0	0
238	9	9	6	10	0	4	2	5
239	9	10	10	10	10	10	8	9
241	9	9	8	9	0	0	6	9
242							9	9
245	10	10	10	10	10	10	7	8
249							3	6
251							8	8
255	10	10	10	10	10	10	10	10
256	10	10	10	10	10	10	9	10
258	4	6	6	8	0	0	2	3
259							9	9
261							6	8
266	10	10	10	10	10	10	10	10
267	4	6	4	6	0	0	9	10
268	10	10	10	10	8	10	9	9
269	10	10	10	10	8	10	10	10
270	10	10	10	10	10	10	10	10
271	10	10	10	10	10	10	10	10
272	10	10	10	10	8	10	8	9
273	10	10	10	10	10	10	10	10

5

10

15

20

25

30

1

TABLA V (continuación)

Compues to nº	Gerreig		Enea		Monocoria		juncia púrpura	
	1 kg/10a	2 kg/10a	1	2	1	2	1	2
274	10	10	10	10	10	10	10	10
275	10	10	10	10	10	10	10	10
Diurón	10	10	10	10	10	10	1	3

5

ENSAYO 5

10

Unas macetas de cerámica de 1/8850 áreas se llenan con tierra de campo hasta una profundidad de 10 cm. Después se saca la tierra y se rocía y mezcla con 1, 2, 4 y 8 kg/Ha I.A. de un polvo mojable de cada ingrediente activo de la invención, diluido con 1000 litros/Ha. La tierra así tratada se devuelve a las macetas. Inmediatamente después, se plantan en la tierra cuatro tubérculos de juncia amarilla a 3 cm de profundidad.

15

Los efectos herbicidas se observan al cabo de 30 días mediante determinación del peso fresco de la porción terrestre.

20

Los resultados se encuentran en la Tabla VI. Como herbicida de referencia se utiliza diurón.

25

30

1

TABLA VI

Peso fresco de la porción terrestre
(I.A. g/10a) g(%)

Compues- to nº	100	200	400	800
2	2,70 (8)	0,30 (1)	0,05 (0)	0 (0)
5				
9	19,15 (59)	6,20 (19)	2,55 (8)	1,25 (4)
14	28,60 (89)	11,10 (34)	0 (0)	0,05 (0)
25	5,30 (16)	1,50 (5)	0 (0)	0 (0)
26	13,50 (42)	3,90 (12)	1,45 (5)	1,05 (3)
36	23,20 (72)	12,40 (38)	5,30 (16)	0,70 (2)
10				
60	0,10 (0)	0,10 (0)	0 (0)	0 (0)
65	37,80(117)	32,30(100)	6,65 (21)	6,40 (20)
230	2,20 (7)	0,90 (3)	0,35 (1)	0,15 (0)
245	35,50(110)	12,50 (39)	2,60 (8)	0,80 (2)
Diurón	31,80 (98)	30,20 (93)	24,30 (75)	14,35 (44)

15

La preparación, formulación y tamaño de partícula de los polvos mojables, de las suspensiones acuosas, de los polvos finos, de los gránulos, de los concentrados emulsionables y de las soluciones en disolventes son muy conocidos por los expertos en este campo. Los polvos mojables y los concentrados emulsionables se venden como formulaciones que contienen alrededor de 10 a 80 % en peso, habitualmente alrededor de 50 % en peso de los compuestos de esta invención y se diluyen opcionalmente con agua antes de su empleo. La concentración mínima del compuesto de estas formulaciones puede ser alrededor de 0,1 % en peso. Por otra parte, los gránulos y polvos finos se comercializan como formulaciones que contienen los compuestos de esta invención a una concentración de 5 a 80 % en peso aproximadamente y, antes de su uso, se agrega una carga sólida en la medida necesaria y se aplican

20

25

30

1 como formulaciones que contienen un agente tensoactivo y al-
rededor de 5 a 10 % en peso del compuesto de esta invención.
Las formulaciones que contienen cantidades distintas de las
citadas de ingrediente activo podrán ser preparadas fácilmen-
5 te por los expertos en este campo. La aplicación de las com-
posiciones herbicidas de esta invención a la tierra y/o a
las plantas es muy conocida por los expertos y puede ser
efectuada aplicando a la superficie de la tierra, con o sin
vehículo sólido o empleando un vehículo líquido para conse-
10 guir la penetración o la impregnación. De acuerdo con este
invento, se prefiere el tratamiento de incorporación a la
tierra antes de la siembra y el tratamiento de pre-emergen-
cia más que el tratamiento foliar (es decir, tratamiento
de las porciones superiores de las plantas) y tratamiento
15 de post-emergencia, respectivamente. Por lo tanto, la fito-
toxicidad por inhibición de la germinación y del crecimiento
es mayor que la fitotoxicidad de contacto. La aplicación de
formulaciones herbicidas a la superficie de la tierra o so-
bre las porciones aéreas de las plantas puede realizarse por
20 cualquiera de los métodos convencionales, v.g. mediante es-
polvoreadores, mediante rociadores mecánicos y manuales, me-
diante espolvoreadores rociadores y mediante cultivadoras.

Para controlar el crecimiento de la maleza, es preferi-
ble aplicar la composición herbicida de esta invención de ma-
25 nera que se distribuyan alrededor de 0,1 a 20 kg, preferi-
blemente de 0,2 a 1 kg, del compuesto de esta invención por
hectárea de terreno a tratar.

En resumen, la Patente de Invención que se solicita de-
berá recaer sobre las siguientes:

30

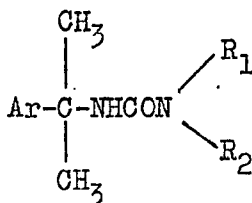
REIVINDICACIONES

1

1. Un procedimiento para la preparacion de nuevos derivados de 3-(2-aril-2-propil)urea de fórmula general

(I)

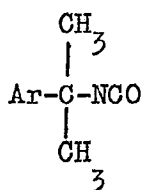
5



10

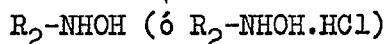
donde Ar es fenilo sustituido con uno o dos átomos de halógeno o grupos trifluormetilo o naftilo; donde R₁ es alcoxi o alqueniloxi y R₂ es alquilo o fenilo opcionalmente sustituido con uno o dos átomos de cloro o grupos metilo, cuyo procedimiento se caracteriza porque consiste en hacer reaccionar un isocianato de fórmula general:

15



donde Ar tiene el significado dado anteriormente con un compuesto de fórmula general:

20



donde R₂ tiene el significado dado anteriormente seguido de reacción de la N-hidroxiurea resultante con un alcoholato sódico y después con un haluro de alquilo o alqueno.

25

2. Un procedimiento según la reivindicación 1, donde los compuestos obtenidos son los siguientes:

- 3-(m-cloro-α, α-dimetilbencil)-l-metoxi-l-fenilurea,
- 3-(m-cloro-α, α-dimetilbencil)-l-etoxi-l-fenilurea,
- 3-(m-cloro-α, α-dimetilbencil)-l-metoxi-l-(m-tolil)urea,
- 3-(3,4-dicloro-α, α-dimetilbencil)-l-metoxi-l-fenilurea.

30

3. Se reivindica por último como objeto sobre el

1

que ha de recaer la Patente de Invención que se solicita:
UN PROCEDIMIENTO PARA LA PREPARACION DE NUEVOS DERIVADOS DE
3-(2-ARIL-2-PROPI)UREA.

5

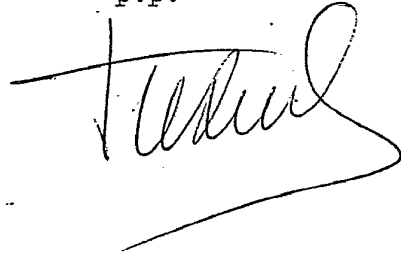
Todo conforme queda descrito y reivindicado en
la presente memoria descriptiva que consta de cien páginas
mecanografiadas.

10

Madrid, 27 de enero 1.978

BERNARDO UNGRIA

P.P.



15

20

25

30