

(11) Número de Publicação: **PT 1556385 E**

(51) Classificação Internacional:

C07D 487/08 (2007.10) **C07D 493/08** (2007.10)
C07D 495/08 (2007.10) **C07D 207/34** (2007.10)
C07D 231/14 (2007.10) **C07D 213/78** (2007.10)
C07D 277/56 (2007.10) **C07D 263/34** (2007.10)
C07D 327/06 (2007.10) **A01N 43/36** (2007.10)
A01N 43/32 (2007.10) **A01N 43/50** (2007.10)

(12) **FASCÍCULO DE PATENTE DE INVENÇÃO**

(22) Data de pedido: **2003.10.14**

(30) Prioridade(s): **2002.10.18 GB 0224316**

(43) Data de publicação do pedido: **2005.07.27**

(45) Data e BPI da concessão: **2010.03.10**
112/2010

(73) Titular(es):

SYNGENTA PARTICIPATIONS AG
INTELLECTUAL PROPERTY DEPARTMENT,
SCHWARZWALDALLEE 215 4058 BASEL CH

(72) Inventor(es):

JOSEF EHRENFREUND CH
HANS TOBLER CH
HARALD WALTER CH

(74) Mandatário:

MARIA SILVINA VIEIRA PEREIRA FERREIRA
RUA CASTILHO, N.º 50, 5º - ANDAR 1269-163 LISBOA PT

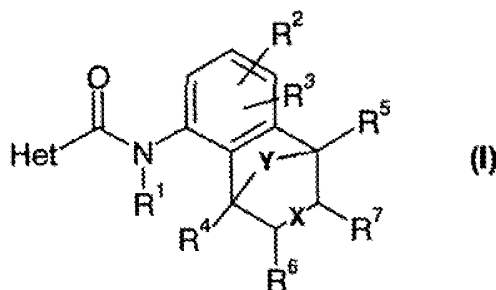
(54) Epígrafe: **DERIVADOS DE HETEROCICLOCARBOXAMIDA**

(57) Resumo:

RESUMO

"DERIVADOS DE HETEROCICLOCARBOXAMIDA"

A invenção relaciona-se com um composto activo fungicidicamente de fórmula (I): em que Het é um anel heterocíclico de 5 ou 6 membros contendo um a três heteroátomos, cada um independentemente seleccionado a partir de oxigénio, azoto e enxofre, na condição de que o anel não seja 1,2,3-triazole, sendo o anel substituído por grupos R^8 , R^9 e R^{10} ; X é uma ligação simples ou dupla; Y é O, S, N(R^{11}) ou $(CR^{12}R^{13})(CR^{14}R^{15})_m(CR^{16}R^{17})_n$; m é 0 ou 1; n é 0 ou 1; e R^1 até R^{17} cada um, independentemente, possui uma gama de valores; para a preparação destes compostos, com novos intermediários utilizados na preparação destes compostos, com composições agroquímicas que compreendem pelo menos um dos novos compostos como componente activo, com a preparação das composições mencionadas e com a utilização dos componentes activos ou composições em agricultura ou horticultura para controlar ou prevenir a infestação de plantas por microorganismos fitopatogénicos, preferencialmente fungos.

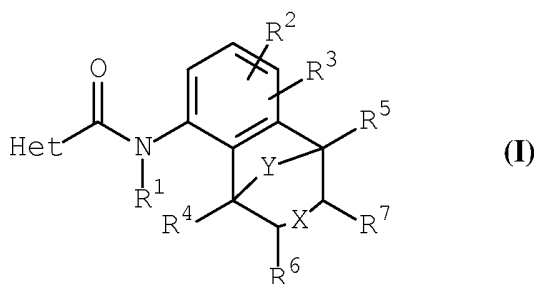


DESCRIÇÃO

"DERIVADOS DE HETEROCICLOCARBOXAMIDA"

A presente invenção relaciona-se com novos derivados de amina tricíclica que possuem actividade microbiocida, em particular actividade fungicida. A invenção também se relaciona com a preparação destes compostos, com novos intermediários utilizados na preparação destes compostos, com composições agroquímicas que compreendem pelo menos um dos novos compostos como componente activo, com a preparação das composições mencionadas e com a utilização dos componentes activos ou composições em agricultura ou horticultura para controlar ou prevenir a infestação de plantas por microorganismos fitopatogénicos, preferencialmente fungos.

A presente invenção providencia compostos de fórmula (I):



em que Het é pirrolilo ou pirazolilo sendo substituído por grupos R^8 , R^9 e R^{10} ;

X é uma ligação simples ou dupla;

Y é $(CR^{12}R^{13})(CR^{14}R^{15})_m(CR^{16}R^{17})_n$;

m é 0 ou 1;

n é 0 ou 1;

R^1 é hidrogénio;

R^2 e R^3 são cada um, independentemente, hidrogénio halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} alcoxi ou C_{1-4} halogenoalcoxi; R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são cada um, independentemente, hidrogénio, halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo, C_{1-4} alcoxi, C_{1-4} halogenoalcoxi, C_{1-4} alquiltio, C_{1-4} halogenoalquiltio, hidroximetilo, C_{1-4} alcoximetilo, $C(O)CH_3$ ou $C(O)OCH_3$;

R^8 , R^9 e R^{10} são cada um, independentemente, hidrogénio, halogéneo, ciano, nitro, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo, C_{1-4} alcoxi(C_{1-4})alcileno ou C_{1-4} halogenoalcoxi(C_{1-4})alcileno, na condição de que pelo menos um de R^8 , R^9 e R^{10} não é hidrogénio;

R^{12} e R^{13} são cada um, independentemente, hidrogénio, halogéneo, C_{1-5} alquilo, C_{1-3} alcoxi, CH_2OH , $CH(O)$, C_{3-6} cicloalquilo, $CH_2O-C(=O)CH_3$, CH_2-C_{3-6} cicloalquilo ou benzilo;

ou R^{12} e R^{13} juntamente com o átomo de carbono ao qual estão ligados formam o grupo $C=O$ ou um anel carbocíclico de 3-5 membros;

ou R^{12} e R^{13} em conjunto formam C_{1-5} alcilideno ou C_{3-6} cicloalcilideno; e

R^{14} , R^{15} , R^{16} e R^{17} são cada um, independentemente, H ou CH_3 .

Halogéneo é fluoro, cloro, bromo ou iodo; preferencialmente fluoro, cloro ou bromo.

Cada unidade alquilo é uma cadeia linear ou ramificada e é, por exemplo, metilo, etilo, *n*-propilo, *n*-butilo, *n*-pentilo, *n*-hexilo, *iso*-propilo, *sec*-butilo, *iso*-butilo, *terc*-butilo, *neo*-pentilo, *n*-heptilo, 1,3-dimetilbutilo, 1,3-dimetilpentilo, 1-metil-3-etil-butilo ou 1,3,3-

trimetilbutilo. Igualmente, cada unidade alcileno é uma cadeia linear ou ramificada.

As unidades halogenoalquilo são unidades alquilo que são substituídas por um ou mais dos mesmos ou diferentes átomos de halogéneo e são, por exemplo, CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F , CCl_3 , CF_3CH_2 , CHF_2CH_2 , CH_2FCH_2 , CH_3CHF ou CH_3CF_2 .

As unidades alcenilo e alcinilo podem estar na forma de cadeias lineares ou ramificadas.

Cada unidade alcenilo, quando adequado, poderá ser de configuração *quer* a(*E*) ou (*Z*).

Um anel carbocíclico de 3-5 membros inclui a anel espiro de três ou cinco membros.

Arilo inclui fenilo, naftilo, antracilo, fluorenilo e indanilo mas é preferencialmente fenilo.

As unidades alcilideno poderão estar na forma de cadeias lineares ou ramificadas. Alcilideno inclui metilideno [$\text{CH}_2=$], etilideno [$\text{CH}_3\text{C}(\text{H})=$], *n*-propilideno, *i*-propilideno [$(\text{CH}_3)_2\text{C}=$], *n*-butilideno, *i*-butilideno, 2-butilideno, *n*-pentilideno, *i*-pentilideno, *neo*-pentilideno, 2-pentilideno, *n*-hexilideno, 2-hexilideno, 3-hexilideno, *i*-hexilideno e *neo*-hexilideno.

Cicloalquilo inclui ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, cicloheptilo e ciclooctilo.

Cicloalcenilo inclui ciclobutenilo, ciclopentenilo, ciclohexenilo e cicloheptenilo.

Cicloalcilideno inclui ciclopropilideno [$c(C_3H_4)=$], ciclobutilideno, ciclopentilideno e ciclohexilideno.

Noutro aspecto da invenção, R^{12} , R^{13} , são cada um, independentemente, hidrogénio, C_{1-4} alquilo ou C_{1-4} alcoxi.

Preferencialmente Y é $(CR^{12}R^{13})$.

Preferencialmente n é 0.

Preferencialmente m é 0.

Preferencialmente é hidrogénio, halogéneo ou C_{1-4} alquilo.

Mais preferencialmente R^2 é hidrogénio ou halogéneo.

Principalmente preferencialmente R^2 é hidrogénio.

Preferencialmente R^3 é hidrogénio ou metilo.

Mais preferencialmente R^3 é hidrogénio.

Preferencialmente R^4 é hidrogénio, C_{1-4} alquilo, halogéneo, C_{1-4} halogenoalquilo C_{1-4} alcoxi, $C(O)CH_3$ ou $C(O)OCH_3$.

Mais preferencialmente R^4 é hidrogénio, C_{1-2} alquilo, halogéneo, CF_3 , metoxi, $C(O)CH_3$ ou $C(O)OCH_3$.

Ainda mais preferencialmente R^4 é hidrogénio, metilo, cloro, CF_3 ou metoxi.

Principalmente preferencialmente R^4 é hidrogénio ou metilo.

Preferencialmente R^5 é hidrogénio, C_{1-4} alquilo, halogéneo, C_{1-4} halogenoalquilo, C_{1-4} alcoxi, $C(O)CH_3$ ou $C(O)OCH_3$.

Mais preferencialmente R^5 é hidrogénio, C_{1-2} alquilo, cloro, CF_3 , metoxi, $C(O)CH_3$ ou $C(O)OCH_3$.

Principalmente preferencialmente R^5 é hidrogénio ou metilo.

Preferencialmente R^6 é hidrogénio, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} alcoxi ou $C(O)CH_3$.

Mais preferencialmente R^6 é hidrogénio, metilo, metoxi ou $C(O)CH_3$.

Principalmente preferencialmente R^6 é hidrogénio ou metilo.

Preferencialmente R^7 é hidrogénio, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} alcoxi ou $C(O)CH_3$.

Mais preferencialmente R^7 é hidrogénio, metilo, metoxi ou $C(O)CH_3$.

Principalmente preferencialmente R^7 é hidrogénio ou metilo.

Preferencialmente R^8 é hidrogénio, halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo ou metoximetileno.

Mais preferencialmente R^8 é hidrogénio, cloro, fluoro, bromo, C_{1-2} alquilo, CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F ou metoximetileno.

Ainda mais preferencialmente R^8 é hidrogénio, cloro, fluoro, C_{1-2} alquilo, CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F ou metoximetileno.

Principalmente preferencialmente R^8 é hidrogénio, cloro, fluoro, metilo, CF_3 , CHF_2 ou CH_2F .

Preferencialmente R^9 é hidrogénio, halogéneo, C_{1-4} alquilo ou C_{1-4} halogenoalquilo ou metoximetileno.

Mais preferencialmente R^9 é hidrogénio, cloro, fluoro, bromo, C_{1-2} alquilo, CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F ou metoximetileno.

Ainda mais preferencialmente R^9 é hidrogénio, cloro, fluoro, C_{1-2} alquilo, CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F ou metoximetileno.

Principalmente preferencialmente R^9 é hidrogénio, cloro, fluoro, metilo, CF_3 , CHF_2 ou CH_2F .

Preferencialmente R^{10} é hidrogénio, halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo, ou metoximetileno.

Mais preferencialmente R^{10} é hidrogénio, cloro, fluoro, bromo C_{1-2} alquilo, CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F ou metoximetileno.

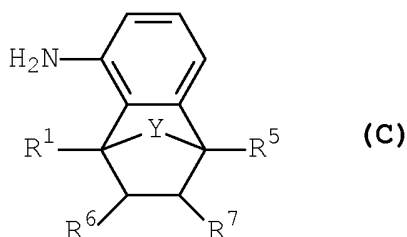
Ainda mais preferencialmente R^{10} é hidrogénio, cloro, fluoro, C_{1-2} alquilo, CF_3 , CF_2Cl , CHF_2 , CH_2F ou metoximetileno.

Principalmente preferencialmente R^{10} é hidrogénio, cloro, fluoro, metilo, CF_3 , CHF_2 ou CH_2F .

Num aspecto da invenção R^{12} , R^{13} , são cada um, independentemente, hidrogénio, C_{1-2} alquilo ou metoxi.

Preferencialmente R^{12} e R^{13} são, independentemente, H, CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $i-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $sec-C_4H_9$, $i-C_4H_9$, $CH(C_2H_5)_2$, CH_2 -ciclopropilo ou ciclopentilo; ou R^{12} e R^{13} juntamente com o átomo de carbono ao qual estão ligados formam um anel carbocíclico de 3 membros ou de 5 membros.

Os compostos de fórmula (C):

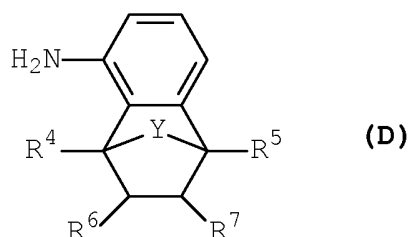


em que Y, R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido acima para um composto de fórmula (I) são úteis como intermediários na preparação de compostos de fórmula (I). Alguns compostos de fórmula (C) são novos mas alguns são já conhecidos.

A presente invenção relaciona-se com um composto de fórmula (C) em que Y é O ou S; e R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são cada um $C(O)OCH_3$; ou Y é $N(R^{11})$ ou $(CR^{12}R^{13})(CR^{14}R^{15})_m(CR^{16}R^{17})_n$; R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , R^{14} , R^{15} , R^{16} , R^{17} , m e n são cada um como definido acima para um composto de fórmula (I); R^{11} é benzilo (no qual o grupo fenilo é opcionalmente substituído com até três substituintes, cada um independentemente seleccionado a partir de halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo e C_{1-4} alcoxi); e R^{12} e R^{13} juntamente com o átomo de carbono ao qual estão ligados formam um anel carbocíclico de 3-5 membros (opcionalmente substituído por até três grupos

metilo e contendo 1 ou 2 heteroátomos cada um independentemente seleccionado a partir de O e N).

Os compostos de fórmula (D):



em que Y, R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido acima para um composto de fórmula (I) são também úteis como intermediários na preparação de compostos de fórmula (I). Alguns compostos de fórmula (D) são novos mas alguns são já conhecidos.

A presente invenção relaciona-se com um composto de fórmula (D) em que Y é O ou S; e R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são cada um $C(O)OCH_3$; ou Y é $N(R^{11})$ ou $(CR^{12}R^{13})(CR^{14}R^{15})_m(CR^{16}R^{17})_n$; R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , R^{14} , R^{15} , R^{16} , R^{17} , m e n são cada um como definido acima para um composto de fórmula (I); R^{11} é benzilo (no qual o grupo fenilo é opcionalmente substituído com até três substituintes, cada um independentemente seleccionado a partir de halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo e C_{1-4} alcoxi); e R^{12} e R^{13} juntamente com o átomo de carbono ao qual estão ligados formam um anel carbocíclico de 3-5 membros (opcionalmente substituído por até três grupos metilo e contendo 1 ou 2 heteroátomos cada um independentemente seleccionado a partir de O e N).

Os compostos de fórmula (I), (C) e (D) poderão existir como diferentes isómeros geométricos ou ópticos ou em formas tautoméricas diferentes. Esta invenção cobre, para a fórmula (1) todos tais isómeros e tautómeros e suas

misturas em todas as proporções assim como formas isotópicas tais como compostos deuterados.

Os compostos nas Tabelas 1 a 29 adiante ilustram compostos da invenção, incluindo os Exemplos de referência.

A Tabela 1 providencia 94 compostos de fórmula (C) em que Y, R⁴, R⁵, R⁶ e R⁷ são como definido na Tabela 1.

Tabela 1. (Exemplos de Referência)

Composto Número	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	Y
1.01	CH ₃	CH ₃	H	H	O
1.02	CH ₃	H	H	H	O
1.03	H	CH ₃	H	H	O
1.04	CH ₃	CH ₃	C(O)CH ₃	H	O
1.05	CH ₃	CH ₃	H	C(O)CH ₃	O
1.06	CH ₃	C(O)CH ₃	H	H	O
1.07	C(O)CH ₃	CH ₃	H	H	O
1.08	C(O)OCH ₃	H	H	H	O
1.09	H	C(O)OCH ₃	H	H	O
1.10	H	H	H	H	O
1.11	CF ₃	CF ₃	H	H	O
1.12	OCH ₃	OCH ₃	H	H	O
1.13	H	H	CH ₃	CH ₃	O
1.14	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	H	H	O
1.15	CH ₃	H	CH ₃	H	O
1.16	H	CH ₃	H	CH ₃	O
1.17	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₂
1.18	H	CH ₃	H	CH ₃	CH ₂
1.19	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₂
1.20	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH(CH ₃)
1.21	H	H	H	H	CH(CH ₃)
1.22	CH ₃	CH ₃	H	H	CH ₂ CH ₂
1.23	H	H	CH ₃	CH ₃	CH ₂ CH ₂
1.24	H	H	H	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂
1.25	H	H	CH ₃	CH ₃	C(CH ₃) ₂
1.26	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	C(CH ₃) ₂
1.27	CH ₃	H	CH ₃	H	C(CH ₃) ₂
1.28	H	CH ₃	H	CH ₃	C(CH ₃) ₂
1.29	H	H	H	H	C(CH ₃) ₂
1.30	CH ₃	CH ₃	H	H	C(CH ₃) ₂
1.31	H	H	H	H	C(OCH ₃) ₂
1.32	H	H	H	H	S

1.33	CH ₃	CH ₃	H	H	S
1.34	H	H	CH ₃	CH ₃	S
1.35	OCH ₃	OCH ₃	H	H	S
1.36	H	CH ₃	H	H	S
1.37	CH ₃	H	H	H	S
1.38	CH ₃	H	CH ₃	H	S
1.39	H	CH ₃	H	CH ₃	S
1.40	H	OCH ₃	H	H	S
1.41	OCH ₃	H	H	H	S
1.42	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	S
1.43	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	S
1.44	H	H	CH ₃	H	S
1.45	H	H	H	CH ₃	S
1.46	H	H	OCH ₃	H	S
1.47	H	H	H	OCH ₃	S
1.48	H	H	H	H	N(CH ₃)
1.49	CH ₃	CH ₃	H	H	N(CH ₃)
1.50	H	H	H	H	N(C ₂ H ₅)
1.51	H	H	H	H	NCH ₂ Ph
1.52	H	H	H	H	NC(O)CH ₃
1.53	H	H	H	H	NC(O)OC(CH ₃) ₃
1.54	H	H	H	H	NH
1.55	H	H	H	H	NC(O)H
1.56	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)H
1.57	CH ₃	CH ₃	H	H	NH
1.58	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)CH ₃
1.58	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)OC(CH ₃) ₃
1.59	CH ₃	CH ₃	H	H	NCH ₂ Ph
1.60	Cl	Cl	H	H	O
1.61	H	H	H	H	NC(O)OCH ₃
1.62	H	H	H	H	NCH ₂ -4-Cl-Ph
1.63	H	H	H	H	NCH ₂ -4-CH ₃ -Ph
1.64	H	H	H	H	NCH ₂ -3-Cl-Ph
1.65	H	H	H	H	NCH ₂ -3-CF ₃ -Ph
1.66	H	H	H	H	NCH ₂ -3-OCH ₃ -Ph
1.67	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)OCH ₃
1.68	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)OC ₂ H ₅
1.69	H	H	H	H	NC(O)OC ₂ H ₅
1.70	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)OCH ₂ CH ₂ Cl
1.71	H	H	H	H	NC(O)OCH ₂ CH ₂ Cl
1.72	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)OC ₄ H ₉ -(n)
1.73	H	H	H	H	NC(O)OC ₄ H ₉ -(n)
1.74	CH ₃	CH ₃	H	H	NC(O)OC ₄ H ₉ -(i)
1.75	H	H	H	H	NC(O)OC ₄ H ₉ -(i)
1.76	H	H	H	H	CH(C ₃ H ₇ -(i)) syn ou anti
1.77	H	H	H	H	CH(C ₃ H ₇ -(n)) syn ou anti
1.78	H	H	H	H	CH(C ₄ H ₉ -(i)) syn ou anti
1.79	H	H	H	H	CH(C ₄ H ₉ -(n)) syn ou anti
1.80	H	H	H	H	C(C ₂ H ₄ -(c))
1.81	H	H	H	H	C(C ₄ H ₈ -(c))
1.82	H	H	H	H	CHCH(C ₂ H ₅) ₂ syn ou anti

1.83	H	H	H	H	CHCH ₂ (C ₃ H ₅ -(c) syn ou anti
1.84	H	H	H	H	CH(C ₅ H ₉ -(c) syn ou anti
1.85	H	H	H	H	CHCH ₂ OAc syn ou anti
1.86	H	H	H	H	CHCHO syn ou anti
1.87	H	H	H	H	CHCH ₂ OH syn ou anti
1.88	H	H	H	H	CHCH ₂ -C ₆ H ₅ syn ou anti
1.89	H	H	H	H	C=O
1.90	H	H	H	H	C(O-C ₃ H ₇ -(n)) ₂
1.91	H	H	H	H	C(O-C ₂ H ₅ -(n)) ₂
1.92	H	H	H	H	CH(C ₂ H ₅) syn ou anti
1.93	H	H	H	H	CF ₂
1.94	H	H	H	H	CH(Cl) syn ou anti

Tabela 2 providencia 111 compostos de fórmula (D) em que Y, R⁴, R⁵, R⁶ e R⁷ são como definido na Tabela 2.

Composto Número	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	Y
2.01	CH ₃	CH ₃	H	H	O
2.02	CH ₃	H	H	H	O
2.03	H	CH ₃	H	H	O
2.04	CH ₃	CH ₃	C(O)CH ₃	H	O
2.05	CH ₃	CH ₃	H	C(O)CH ₃	O
2.06	CH ₃	C(O)CH ₃	H	H	O
2.07	C(O)CH ₃	CH ₃	H	H	O
2.08	C(O)OCH ₃	H	H	H	O
2.09	H	C(O)OCH ₃	H	H	O
2.10	H	H	H	H	O
2.11	CF ₃	CF ₃	H	H	O
2.12	OCH ₃	OCH ₃	H	H	O
2.13	H	H	CH ₃	CH ₃	O
2.14	C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	H	H	O
2.15	CH ₃	H	CH ₃	H	O
2.16	H	H	H	H	CH ₂
2.17	CH ₃	H	CH ₃	H	CH ₂
2.18	H	CH ₃	H	CH ₃	CH ₂
2.19	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₂
2.20	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH(CH ₃) syn ou anti
2.21	H	H	H	H	CH(CH ₃) syn ou anti
2.22	H	H	H	H	CH(C ₂ H ₅) syn ou anti
2.23	H	H	H	H	CH ₂ CH ₂
2.24	CH ₃	CH ₃	H	H	CH ₂ CH ₂
2.25	H	H	CH ₃	CH ₃	CH ₂ CH ₂
2.26	H	H	OCH ₃	H	CH ₂ CH ₂
2.27	H	H	H	OCH ₃	CH ₂ CH ₂
2.28	H	H	H	H	CH ₂ CH ₂ CH ₂
2.29	H	H	CH ₃	CH ₃	C(CH ₃) ₂
2.30	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	C(CH ₃) ₂
2.31	CH ₃	H	CH ₃	H	C(CH ₃) ₂

2.32	H	CH ₃	H	CH ₃	C (CH ₃) ₂
2.33	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	C (CH ₃) (C ₂ H ₅)
2.34	H	H	H	H	C (CH ₃) ₂
2.35	CH ₃	CH ₃	H	H	C (CH ₃) ₂
2.36	H	H	H	H	CH(OCH ₃) syn ou anti
2.37	H	H	H	H	S
2.38	CH ₃	CH ₃	H	H	S
2.39	H	H	CH ₃	CH ₃	S
2.40	OCH ₃	OCH ₃	H	H	S
2.41	H	CH ₃	H	H	S
2.42	CH ₃	H	H	H	S
2.43	CH ₃	H	CH ₃	H	S
2.44	H	CH ₃	H	CH ₃	S
2.45	H	OCH ₃	H	H	S
2.46	OCH ₃	H	H	H	S
2.47	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	S
2.48	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	S
2.49	H	H	CH ₃	H	S
2.50	H	H	H	CH ₃	S
2.51	H	H	OCH ₃	H	S
2.52	H	H	H	OCH ₃	S
2.53	H	H	H	H	N (CH ₃)
2.54	CH ₃	CH ₃	H	H	N (CH ₃)
2.55	H	H	H	H	N (C ₂ H ₅)
2.56	H	H	H	H	NCH ₂ Ph
2.57	H	H	H	H	NC (O) CH ₃
2.58	H	H	H	H	NC (O) OC (CH ₃) ₃
2.59	H	H	H	H	NH
2.60	Cl	Cl	H	H	O
2.61	H	H	H	H	NC (O) H
2.62	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) H
2.63	CH ₃	CH ₃	H	H	NH
2.64	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) H ₃
2.65	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) OC (CH ₃) ₃
2.66	CH ₃	CH ₃	H	H	NCH ₂ Ph
2.67	H	H	H	H	NC (O) OCH ₃
2.68	H	H	H	H	NCH ₂ -4-Cl-Ph
2.69	H	H	H	H	NCH ₂ -4-CH ₃ -Ph
2.70	H	H	H	H	NCH ₂ -3-Cl-Ph
2.71	H	H	H	H	NCH ₂ 3-CF ₃ -Ph
2.72	H	H	H	H	NCH ₂ -3-OCH ₃ -Ph
2.73	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) OCH ₃
2.74	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) OC ₂ H ₅
2.75	H	H	H	H	NC (O) OC ₂ H ₅
2.76	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) OCH ₂ C ₂ Cl
2.77	H	H	H	H	NC (O) OCH ₂ CH ₂ Cl
2.78	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) OC ₄ H ₉ (n)
2.79	H	H	H	H	NC (O) OC ₄ H ₉ - (n)
2.80	CH ₃	CH ₃	H	H	NC (O) OC ₄ H ₉ - (i)
2.81	H	H	H	H	NC (O) OC ₄ H ₉ - (i)
2.82	H	H	H	H	CH (C ₃ H ₇ - (i)) syn ou anti

2.83	H	H	H	H	CH(C ₃ H ₇ -(n)) syn ou anti
2.84	H	H	H	H	CH(C ₄ H ₉ -(i)) syn ou anti
2.85	H	H	H	H	CN(C ₄ H ₉ -(n)) syn ou anti
2.86	H	H	H	H	C(C ₂ H ₄ -(c))
2.87	H	H	H	H	C(C ₄ H ₈ -(c))
2.88	H	H	H	H	CHCH(C ₂ H ₅) ₂ syn ou anti
2.89	H	H	H	H	CHCH ₂ (C ₃ H ₅ (c) syn ou anti
2.90	H	H	H	H	CH(C ₅ H ₉ -(c) syn ou anti
2.91	H	H	H	H	CHCH ₂ OAc syn ou anti
2.92	H	H	H	H	CHCHO syn ou anti
2.93	H	H	H	H	CHCH ₂ OH syn ou anti
2.94	H	H	H	H	CHCH ₂ -C ₆ H ₅ syn ou anti
2.95	H	H	H	H	C=O
2.96	H	H	H	H	C(O-C ₃ H ₇ (n)) ₂
2.97	H	H	H	H	C(O-C ₂ H ₅) ₂
2.98	H	H	H	H	C(O-C ₃ H ₇ -(i)) ₂
2.99	H	H	H	H	C(O-CH ₃) ₂
2.100	H	H	H	H	C(OH)CH ₃ syn ou anti
2.101	H	H	H	H	C(OH)C ₂ H ₅ syn ou anti
2.102	H	H	H	H	
2.103	H	H	H	H	CF ₂
2.104	H	H	H	H	CH(F) syn ou anti
2.105	H	H	H	H	C(CH ₃)(C ₂ H ₅) syn ou anti
2.106	H	H	H	H	C=C(CH ₃)
2.107	H	H	H	H	C=C(C ₂ H ₅) ₂
2.108	H	H	H	H	C=cC ₅ Ha
2.109	H	H	H	H	C=CH(CH ₃)
2.110	H	H	H	H	C=CH(C ₂ H ₅)
2.111	H	H	H	H	C=cC ₃ H ₄

Tabela Z representa a Tabela 3 [quando Z é 3], Tabela 4 [quando Z é 4], Tabela 5 [quando Z é 5], Tabela 6 [quando Z é 6], Tabela 7 [quando Z é 7], Tabela 8 [quando Z é 8], Tabela 9 [quando Z é 9], Tabela 10 [quando Z é 10], Tabela 11 [quando Z é 11], Tabela 12 [quando Z é 12], Tabela 13 [quando Z é 13], Tabela 14 [quando Z é 14], Tabela 15 [quando Z é 15], Tabela 16 [quando Z é 16], Tabela 17 [quando Z é 17], Tabela 18 [quando Z é 18]. Tabela 19 [quando Z é 19], Tabela 20 [quando Z é 20], Tabela 21 [quando Z é 21],

Tabela Z

	Cpo No	R¹	R⁴	R⁵	R⁶	R⁷	X	Y
Referência	Z.001	H	CH ₃	CH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.003	CH=C=CH ₂	CH ₃	CH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.004	C(O)CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.005	H	CH ₃	H	H	H	=	O
Referência	Z.006	H	H	CH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.007	H	CH ₃	CH ₃	C(O)CH ₃	H	=	O
Referência	Z.008	H	CH ₃	CH ₃	H	C(O)CH ₃	=	O
Referência	Z.009	H	CH ₃	C(O)CH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.010	H	C(O)CH ₃	CH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.011	H	COOCH ₃	H	H	H	=	O
Referência	Z.012	H	H	COOCH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.013	H	H	H	H	H	=	O
Referência	Z.014	CH ₂ C=CH	H	H	H	H	=	O
Referência	Z.015	CH=C=CH ₂	H	H	H	H	=	O
Referência	Z.016	COCH ₃	H	H	H	H	=	O
Referência	Z.017	H	CF ₃	CF ₃	H	H	=	O
Referência	Z.018	H	OCH ₃	OCH ₃	H	H	=	O
Referência	Z.019	H	H	H	CH ₃	CH ₃	=	O
Referência	Z.020	H	C ₂ H ₅	C ₂ H ₃	H	H	=	O
Referência	Z.021	H	CH ₃	H	CH ₃	H	=	O
Referência	Z.022	H	H	CH ₃	H	CH ₃	=	O
Referência	Z.023	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.024	CH ₂ C≡CH	CH ₃	CH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.025	CH=C=CH ₂	CH ₃	CH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.026	COCH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.027	H	CH ₃	H	H	H	-	O
Referência	Z.028	H	H	CH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.029	H	CH ₃	CH ₃	C(O)CH ₃	H	-	O
Referência	Z.030	H	CH ₃	CH ₃	H	C(O)CH ₃	-	O
Referência	Z.031	H	CH ₃	C(O)CH ₃	H	H	-	O

Referência	Z.032	H	C(O)CH ₃	CH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.033	H	COOCH ₃	H	H	H	-	O
Referência	Z.034	H	H	COOCH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.035	H	H	H	H	H	-	O
Referência	Z.036	CH ₂ C=CH	H	H	H	H	-	O
Referência	Z.037	CH=C=CH ₂	H	H	H	H	-	O
Referência	Z.038	COCH ₃	H	H	H	H	-	O
Referência	Z.039	H	H	H	H	H	-	O
Referência	Z.040	H	CF ₃	CF ₃	H	H	-	O
Referência	Z.041	H	OCH ₃	OCH ₃	H	H	-	O
Referência	Z.042	H	H	H	CH ₃	CH ₃	-	O
Referência	Z.043	CH ₂ C≡CH	H	H	CH ₃	CH ₃	-	O
Referência	Z.044	CH=C=CH ₂	H	H	CH ₃	CH ₃	-	O
Referência	Z.045	COCH ₃	H	H	CH ₃	CH ₃	-	O
Referência	Z.046	H	C ₂ H ₅	C ₂ H ₃	H	H	-	O
Referência	Z.047	H	CH ₃	H	CH ₃	H	-	O
	Z.048	H	H	H	H	H	-	CH ₃
Referência	Z.049	CH ₂ C≡CH	H	H	H	H	-	CH ₃
Referência	Z.050	CH=C=CH ₂	H	H	H	H	-	CH ₃
Referência	Z.051	COCH ₁	H	H	H	H	-	CH ₃
	Z.052	H	H	H	H	H	=	CH ₃
Referência	Z.053	CH ₂ C≡CH	H	H	H	H	=	CH ₂
Referência	Z.054	CH=C=CH ₂	H	H	H	H	=	CH ₂
Referência	Z.055	COCH ₃	H	H	H	H	=	CH ₂
	Z.056	H	CH ₃	H	CH ₃	H	-	CH ₂
	Z.057	H	CH ₃	H	CH ₃	H	=	CH ₂
	Z.058	H	H	CH ₃	H	CH ₃	-	CH ₂
	Z.059	H	H	CH ₃	H	CH ₃	=	CH ₂
	Z.050	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	=	CH ₂
	Z.061	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH ₂
Referência	Z.062	CH ₂ C≡CH	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH ₂
Referência	Z.063	CH=C=CH ₂	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH ₂
Referência	Z.064	COCH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH ₂
	Z.065	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	=	CH(CH ₃) syn ou anti
	Z.056	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH(CH ₃) syn ou anti
Referência	Z.067	CH ₂ C≡CH	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	CH(CH ₃) syn ou anti

Referência	Z.068	$\text{CH}=\text{C}=\text{CH}_2$	CH_3	CH_3	CH_3	CH_3	-	$\text{CH}(\text{CH}_3)$ syn or anti
Referência	Z.069	COCH_3	CH_3	CH_3	CH_3	CH_3	-	$\text{CH}(\text{CH}_3)$ syn ou anti
	Z.070	H	H	H	H	H	=	$\text{CH}(\text{CH}_3)$ syn ou anti
	Z.071	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{CH}_3)$ syn ou anti
Referência	Z.072	$\text{CH}_2\text{C}=\text{H}$	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{CH}_3)$ syn ou anti
Referência	Z.073	$\text{CH}=\text{C}=\text{H}_2$	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{CH}_3)$ syn ou anti
Referência	Z.074	COCH_3	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{CH}_3)$ syn ou anti
	Z.075	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)$ syn ou anti
	Z.076	H	H	H	H	H	-	CH_2CH_2
Referência	Z.077	$\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CH}$	H	H	H	H	-	CH_2CH_2
Referência	Z.078	$\text{CH}=\text{C}=\text{CH}_2$	H	H	H	H	-	CH_2CH_2
Referência	Z.079	COCH_3	H	H	H	H	-	CH_2CH_2
	Z.082	H	H	H	CH_3	CH_3	=	CH_2CH_2
	Z.083	H	H	H	CH_3	CH_3	-	CH_2CH_2
	Z.084	H	H	H	OCH_3	H	-	CH_2CH_2
	Z.085	H	H	H	H	OCH_3	-	CH_2CH_2
	Z.086	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$
	Z.087	H	H	H	H	H	=	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$
	Z.088	H	H	H	CH_3	CH_3	=	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.089	H	H	H	CH_3	CH_3	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
Referência	Z.090	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	H	H	CH_3	CH_3	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
Referência	Z.091	$\text{CH}=\text{C}=\text{CH}_2$	H	H	CH_3	CH_3	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
Referência	Z.092	COCH_3	H	H	CH_3	CH_3	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.093	H	CH_3	CH_3	CH_3	CH_3	=	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.094	H	CH_3	CH_3	CH_3	CH_3	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.095	H	CH_3	H	CH_3	H	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.096	H	H	CH_3	H	CH	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.097	H	CH_3	H	CH_3	H	=	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.098	H	H	CH_3	H	$_3\text{CH}_3$	=	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.099	H	CH_3	CH_3	CH_3	CH_3	-	$\text{C}(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)$
	Z.100	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
Referência	Z.101	$\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CH}$	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.102	H	H	H	H	H	=	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.103	H	CH_3	CH_3	H	H	-	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.104	H	CH_3	CH_3	H	H	=	$\text{C}(\text{CH}_3)_2$

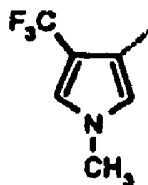
	Z.105	H	H	H	H	H	=	$C(CH_3)_2$
	Z.106	H	H	H	H	H	-	$CH(OCH_3)$ syn ou anti
Referência	Z.107	H	H	H	H	H	=	S
Referência	Z.108	$CH_2C\equiv CH$	H	H	H	H	=	S
Referência	Z.109	$CH=C=CH_2$	H	H	H	H	=	S
Referência	Z.110	$COCH_3$	H	H	H	H	=	S
Referência	Z.111	H	H	H	H	H	-	S
Referência	Z.112	$CH_2C\equiv CH$	H	H	H	H	-	S
Referência	Z.113	$CH=C=CH_2$	H	H	H	H	-	S
Referência	Z.114	$COCH_3$	H	H	H	H	-	S
Referência	Z.115	H	CH_3	CH_3	H	H	=	S
Referência	Z.116	H	CH_3	CH_3	H	H	-	S
Referência	Z.117	$CH_2C\equiv CH$	CH_3	CH_3	H	H	-	S
Referência	Z.118	$CH=C=CH_2$	CH_3	CH_3	H	H	-	S
Referência	Z.119	$COCH_2$	CH_3	CH_3	H	H	-	S
Referência	Z.120	H	H	H	CH_3	CH_3	=	S
Referência	Z.121	H	H	H	CH_3	CH_3	-	S
Referência	Z.122	$CH_2C\equiv CH$	H	H	CH_3	CH_3	-	S
Referência	Z.123	$CH=P=CH_2$	H	H	CH_3	CH_3	-	S
Referência	Z.124	$COCH_3$	H	H	CH_3	CH_3	-	S
Referência	Z.125	H	OCH_3	OCH_3	H	H	=	S
Referência	Z.126	H	OCH_3	OCH_3	H	H	-	S
Referência	Z.127	H	H	CH_3	H	H	=	S
Referência	Z.128	H	H	CH_3	H	H	-	S
Referência	Z.129	H	CH_3	H	H	H	=	S
Referência	Z.130	H	CH_3	H	H	H	-	S
Referência	Z.131	H	CH_3	H	CH_3	H	=	S
Referência	Z.132	H	CH_3	H	CH_3	H	-	S
Referência	Z.133	H	H	CH_3	H	CH_3	=	S
Referência	Z.134	H	H	CH_3	H	CH_3	-	S
Referência	Z.135	H	H	OCH_3	H	H	=	S
Referência	Z.136	H	H	OCH_3	H	H	-	S
Referência	Z.137	H	OCH_3	H	H	H	=	S

Referência	Z.138	H	OCH ₃	H	H	H	-	S
Referência	Z.139	H	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	=	S
Referência	Z.140	H	CH ₃	H	CH ₃	CH ₃	-	S
Referência	Z.141	H	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	=	S
Referência	Z.142	H	H	CH ₃	CH ₃	CH ₃	-	S
Referência	Z.143	H	H	H	CH ₃	H	=	S
Referência	Z.144	H	H	H	CH ₃	H	-	S
Referência	Z.145	H	H	H	H	CH ₃	=	S
Referência	Z.146	H	H	H	H	CH ₃	-	S
Referência	Z.147	H	H	H	OCH ₃	H	=	S
Referência	Z.148	H	H	H	OCH ₃	H	-	S
Referência	Z.149	H	H	H	H	OCH ₃	=	S
Referência	Z.150	H	H	H	H	OCH ₃	-	S
Referência	Z.151	H	H	H	H	H	=	N (CH ₃)
Referência	Z.152	H	H	H	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.153	CH ₂ C≡CH	H	H	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.154	CH=C=CH ₂	H	H	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.155	COCH ₂	H	H	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.156	H	CH ₃	CH ₃	H	H	=	N (CH ₃)
Referência	Z.157	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.158	CH ₂ C=CH	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.159	CH=C=CH ₂	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.160	COCH ₃	CH ₃	CH ₃	H	H	-	N (CH ₃)
Referência	Z.161	H	H	H	H	H	=	N (C ₂ H ₃)
Referência	Z.162	H	H	H	H	H	-	N (C ₂ H ₃)
Referência	Z.163	H	H	H	H	H	=	N (CH ₂ Ph
Referência	Z.164	H	H	H	H	H	-	N (CH ₂ Ph
Referência	Z.165	H	H	H	H	H	=	NC (O) CH ₃
Referência	Z.166	H	H	H	H	H	-	NC (O) CH ₃
Referência	Z.167	H	H	H	H	H	=	(CH ₂) ₃
Referência	Z.168	H	H	H	H	H	-	(CH ₂) ₃
Referência	Z.169	H	H	H	H	H	=	NH
Referência	Z.170	H	H	H	H	H	-	NH
Referência	Z.171	H	H	H	H	H	=	NC (O) H

Referência	Z.172	H	H	H	H	H	-	NC (O) H
Referência	Z.173	H	CH ₃	CH ₃	H	H	=	NCH ₂ Ph
Referência	Z.174	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NCH ₂ Ph
Referência	Z.175	H	CH ₃	CH ₃	H	H	=	NC (O) CH ₃
Referência	Z.176	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) CH ₃
Referência	Z.177	H	CH ₃	CH ₃	H	H	=	NC (O) OC (CH) ₃
Referência	Z.178	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	(CH ₂) ₃
Referência	Z.179	H	CH ₃	CH ₃	H	H	=	NH
Referência	Z.180	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NH
Referência	Z.181	H	CH ₃	CH ₃	H	H	=	NC (O) H
Referência	Z.182	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) H
Referência	Z.184	H	H	H	H	H	-	NCH ₂ -4-Cl-Ph
Referência	Z.185	H	H	H	H	H	-	NCH ₂ -4-CH ₂ -Ph
Referência	Z.186	H	H	H	H	H	-	NCH ₂ -3-Cl-Ph
Referência	Z.187	H	H	H	H	H	-	NCH ₂ -3-CF ₃ -P ₃
Referência	Z.188	H	H	H	H	H	-	NCH ₂ -3-OCH ₂ -Ph
Referência	Z.189	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) OCH ₂
Referência	Z.190	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) OCH ₂
Referência	Z.191	H	H	H	H	H	-	NO (O) OC ₂ H ₃
Referência	Z.192	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) OCH ₂ CH ₂ Cl
Referência	Z.193	H	H	H	H	H	-	NC (O) OCH ₂ CH ₂ Cl
Referência	Z.194	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) OC ₄ H ₄ - (n)
Referência	Z.195	H	H	H	H	H	-	NC (O) OC ₄ H ₅ - (n)
Referência	Z.196	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	C (O) OC ₄ H ₂ - (1)
Referência	Z.197	H	H	H	H	H	-	NC (O) OC ₄ H ₂ - (1)
Referência	Z.198	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) OC ₃ H ₂ - (n)
Referência	Z.199	H	H	H	H	H	-	NC (O) OC ₂ H ₂ - (n)
Referência	Z.200	H	CH ₃	CH ₃	H	H	-	NC (O) OC ₃ H ₂ - (1)
Referência	Z.201	H	H	H	H	H	-	NC (O) OC ₂ H ₂ - (1)
	Z.202	H	H	H	H	H	-	CH (C ₃ H ₃ - (1) syn ou anti
Referência	Z.203	CH ₂ C=CH	H	H	H	H	-	CH (C ₂ H ₂ - (D) sym ou anti
Referência	Z.204	CH=C=CH ₂	H	H	H	H	-	CH (C ₃ H ₃ - (1)) syn ou anti
Referência	Z.205	COCH ₃	H	H	H	H	-	CH (C ₁ H ₂ - (D) syn ou anti
	Z.206	H	H	H	H	H	=	CH (C ₁ H ₂ - (D) syn ou anti

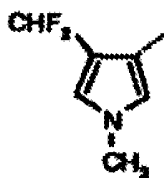
	Z.207	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{C}_3\text{H}_2-(n))$ syn ou anti
	Z.208	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{C}_4\text{H}_9-(i))$ syn ou anti
	Z.209	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{C}_4\text{H}_9(n))$ syn ou anti
	Z.210	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{C}_2\text{H}_4-(c))$
	Z.211	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{C}_4\text{H}_8-(c))$
	Z.212	H	H	H	H	H	-	$\text{CHCH}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$ syn ou anti
	Z.213	H	H	H	H	H	-	$\text{CHCH}_2(\text{C}_3\text{H}_5 (c))$ syn ou anti
	Z.214	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{C}_5\text{H}_9-(c))$ syn ou anti
	Z.215	H	H	H	H	H	-	CHCH_2OAc syn ou anti
	Z.216	H	H	H	H	H	-	CHCHO syn ou anti
	Z.217	H	H	H	H	H	-	CHCH_2OH syn ou anti
	Z.218	H	H	H	H	H	-	$\text{CHCH}_2-\text{C}_6\text{H}_5$ syn ou anti
	Z.219	H	H	H	H	H	-	$\text{C}=\text{O}$
	Z.220	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{O}-\text{C}_3\text{H}_7-(n))_2$
	Z.221	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5)_2$
Referência	Z.222	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{OH})\text{CH}_3$ syn ou anti
Referência	Z.223	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{OH})\text{C}_2\text{H}_5$ syn ou anti
Referência	Z.224	H	H	H	H	H	-	
Referência	Z.225	H	H	H	H	H	-	$\text{CHCH}(\text{Ph})_2$ syn ou anti
	Z.226	H	H	H	H	H	-	CF_2
	Z.227	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{F})$ syn ou anti
	Z.228	H	H	H	H	H	-	$\text{C}(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{CH}_3)$ syn ou anti
	Z.229	H	H	H	H	H	-	$\text{CH}(\text{sec}-\text{C}_4\text{H}_9)$ syn ou anti
	Z.230	H	H	H	H	H	-	$\text{C}=\text{C}(\text{CH}_3)_2$
	Z.231	H	H	H	H	H	-	$\text{C}=\text{C}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$
	Z.232	H	H	H	H	H	-	$\text{C}=\text{CC}_5\text{H}_8$
	Z.233	H	H	H	H	H	-	$\text{C}=\text{CH}(\text{CH}_3)$
	Z.234	H	H	H	H	H	-	$\text{C}=\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)$
	Z.235	H	H	H	H	H	-	$\text{C}=\text{CC}_3\text{H}_4$

Tabela 3 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



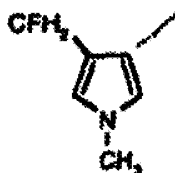
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 3.

Tabela 4 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



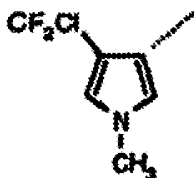
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 4.

Tabela 5 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



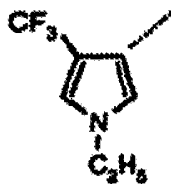
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 5.

A Tabela 6 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



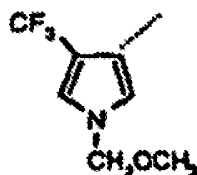
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 6.

A Tabela 7 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



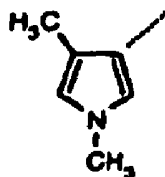
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 7.

A Tabela 8 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



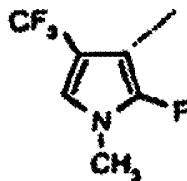
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 8.

A Tabela 9 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



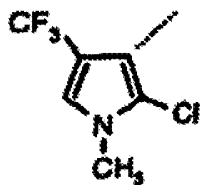
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 9.

A Tabela 10 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



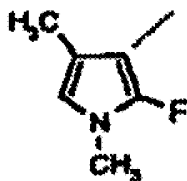
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 10.

A Tabela 11 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



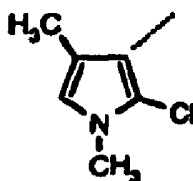
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 11.

A Tabela 12 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



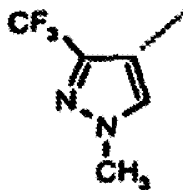
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 12.

A Tabela 13 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



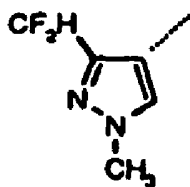
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 13.

A Tabela 14 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



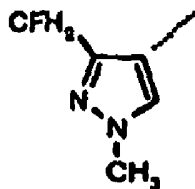
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X , Y , R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 14.

A Tabela 15 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



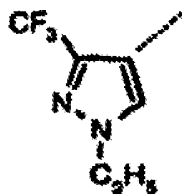
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X , Y , R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 15.

A Tabela 16 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



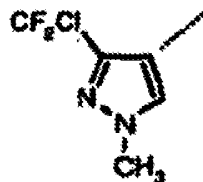
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X , Y , R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 16.

A Tabela 17 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



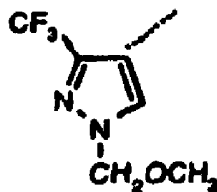
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 17.

A Tabela 18 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



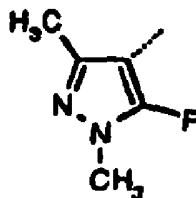
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 18.

A Tabela 19 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



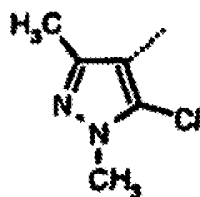
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 19.

A Tabela 20 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



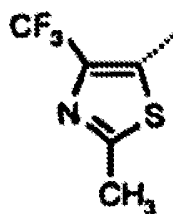
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 20.

A Tabela 21 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



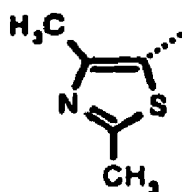
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 21.

A Tabela 22 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



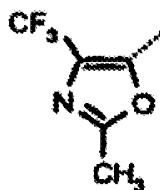
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 22.

A Tabela 23 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



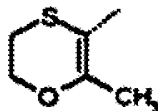
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 23.

A Tabela 24 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



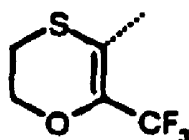
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X , Y , R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 24.

A Tabela 25 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



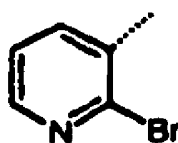
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X , Y , R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 25.

A Tabela 26 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



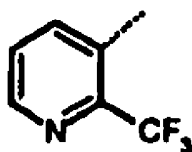
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X , Y , R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 26.

A Tabela 27 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



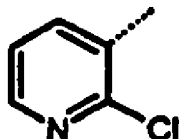
R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X , Y , R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 27.

A Tabela 28 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 28.

A Tabela 29 providencia compostos de fórmula (I) onde Het é



R^2 e R^3 são ambos hidrogénio; e X, Y, R^1 , R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são como definido na Tabela 29.

Ao longo desta descrição, as temperaturas são dadas em graus Célsius; "RMN" significa espectro de ressonância nuclear; EM representa espectro de massa; e "%" é a percentagem em peso, a menos que as correspondentes concentrações sejam indicadas em outras unidades; "syn" refere-se a configuração syn do substituinte relevante com respeito ao anel de benzeno anelado; e "anti" refere-se a uma configuração anti do substituinte relevante com respeito ao anel de benzeno anelado.

As abreviações seguintes são utilizadas ao longo desta descrição:

p.f.= ponto de fusão	p.e.= ponto de ebulição.
s = singuleto	br = largo
d = duplete	dd = dublete ou dubletos
t = tripleto	q = quarteto
m = multiplete	ppm = partes por milhão

A Tabela 30 mostra dados de pontos de fusão seleccionados e RMN seleccionados, todos com $CDCl_3$ como solvente (salvo indicação em contrário; se uma mistura de solventes está presente, é indicado como, por exemplo, $[CDCl_3/d_6-DMSO]$),

(nenhuma tentativa é feita para listar todos os dados que caracterizam em todos os casos) para compostos das Tabelas 1 a 29.

Tabela 30

	Composto No.	p.f. (/°C)	Desvios químicos de RMN de próton (CDCl ₃ salvo indicação em contrário)
Referência	1.01	92-96	6,85 e 6,7(dois m, 2 x 2H), 6,47 (t, 1H), ca. 5-3 (br., permutável com D ₂ O, 2H), 2,07 (s, 3H), 1,85 (s, 3H).
Referência	1.10	121-124	7,05 (t, 1H), 6,7 (t, 2H), ca. 5 (br., permutável com D ₂ O, 2H) 2,0 (s, 3H), 1,9 (m, 2H), 1,8 (s, 3H), 1,7 (m, 1H), 1,5 (m, 1 H).
Referência	2.01	92-93	
Referência	2.02	92-93	
Referência	2.03	112-114	
Referência	2.10	75-76	
Referência	2.16	63-64	6,90 (dd (-t), J ₁ =7,3 Hz, J ₂ =8,2 Hz, 1H), 6,65 (d, J=7,3 Hz, 1H), 6,46 (d, J=8,2 Hz, 1H), 3,46 (br., permutável com D ₂ O, 2H), 3,35 (s br., 1H), 3,31 (s br., 1 H), 1,87 (m, 2H), 1,70 (m, 1H), 1,50 (m, 1H), 1,18 (m, 1 H).
Referência	2.23	74-75	6,99 (t, 1H), 6,63 (d sobreposto por um t, 2H), 4,0-3,5 (br, permutável com D ₂ O, 2H), 3,08 (s br., 1H), 2,94 (s br., 1H), 1,76 (m, 4H), 1,40 (m, 4H).
Referência	2.53	139-140	6,97 (t, 1H), 6,69 (d, 1H), 6,51 (d, 1H), 4,12 (s br, 1H), 4,03 (s br, 1H), 3,9-3,1 (br, permutável com D ₂ O, 2H), 2,06 (s, 3H) sobreposto por um m a 2,12-2,05 (2H), 1,26-1,19 (m, 2H).
Referência	2.55	Viscoso	6,95 (t, 1H), 6,68 (d, 1H), 6,51 (d, 1H), 4,26 (d, 1H), 4,18 (d, 1H), 3,56 (br, permutável com D ₂ O, 2H), 2,22 (br d, 2H), 2,10 (br, 2H), 1,22 (m, 2+2H), 1,03 (t, 3H).
Referência	2.58	89-90	6,94 (dd (-t), J ₁ =7,3Hz, J ₂ =7,9Hz, 1H), 6,68 (d, J=1,3Hz, 1H), 6,49 (d, J=7,9Hz, 1H), 5,11 (br, 1H), 5,04 (br, 1H), 3,5-3,0 (br, 2H, permutável com D ₂ O), 2,07 (m, 2H), 1,40 (s, 9H), 1,30 (m, 2H).
Referência	2.59	óleo	6,91 (dd (~t), J ₁ =7,3Hz, J ₂ =7,9Hz, 1H), 6,66 (d, J=7,3Hz, 1H), 6,44 (d, J=7,9Hz, 1H), 4,55 (d, J=~1 Hz, 1H)), 4,48 (d, J=~1Hz, 1H), 4,0-3,0 (br, permutável com D ₂ O, H), 2,02 (m, 2H), 1,25 (m, 2H).
Referência	2.61	176-177	Mistura syn-anti: 8,00 & 7,98 (s, 1H), 6,96 (t, 1H), 6,71 & 6,67 (d, 1H), 6,50

			(d, 1H), 5,55 & 5,48 (s br., 1H), 5,09 & 5,02 (s br, 1H), 4,0-3.0 (br, permutável com D ₂ O, 2H), 2,06 (m, 2H), 1,37-1,47(m, 2H).
Referência	-2.64	110-111	6,96 (t, 1H), 6,58 (d, 1H), 6,47 (d, 1H), 3,79 (br, 2H), 2,29 (s, 3H), 2,01 (s, 6H), 1,98 (m, 2H), 1,54 (m, 1H), 1,32 (m, 1H).
Referência	2.65	94-95	6.96 (t, 1H), 6,59 (d, 1H), 6,47 (d, 1H), ca 3,7 (br, permutável com D ₂ O, 2H), 2,18 (s, 3H), 1,95 (m, 2H), 1,93 (s, 3H), 1,49 (m, 1H), 1,37 (s, 9H), 1,25 (m, 1H).
Referência	2.67	104-105	6,96 (t, 1H), 6,69 (d, 1H), 6,50 (d, 1H), 5,20 (br, 1H), 5,13 (br, 1H), 3,64 (s, 3H), 2,10 (m, 2H), 1,33 (m, 2H).
Referência	2.73	114-115	6,97 (t, 1H), 6,60 (d, 1H), 3,80 (br, 2H), 3,55 (s, 3H), 2,20 (s, 3H), 1,97 (m, 2H), 1,95 (s, 3H), 1,50 (m, 1 H), 1,29 (m, 1 H).
Referência	2.75	viscoso	6,95 (t, 1H), 6,70 (d, 1H), 6.50 (d, 1H), 5,20 (br, 1H), 5,13 (br, 1H), 4,07 (q, 2H), 3,31 (br, 2H), 2,10 (m, 2H), 1,32 (m, 2H), 1,22 (t, 3H).
Referência	2.77	viscoso	6.97 (t, 1H), 6,72 (d, 1H), 6,53 (d, 1H), 5,24 (m, 1H), 5,16 (m, 1H), 4,27 (br, 2H), 3,64 (t, 2H), 3,18 (br, 2H), 2,12 (m, 2H), 1,35(m, 2H).
Referência	2.79	viscoso	6,96 (t, 1H), 6,71 (d, 1H), 6,52 (d 1H), 5.20 (br, 1H), 5,12 (br. 1H), 4,02 (t, 2H), 3,19 (br, 2H), 2,09 (m, 2H), 1,57 (m, 2H), 1,34 (m, 4H), 0,91 (t, 3H).
Referência	2.81	viscoso	6,96 (t,1H), 6,71 (d,1H), 6,52 (d, 1H) , 5,21 (br, 1H), 5,130 (br, 1H), 3,80 (d, 2H), 3,25(br. 2H), 2,10 (m, 2H), 1,88 (m, 1H), 1,33(m, 2H), 0,89(d, 6H).
Referência	2.82 syn:anti= 86:14	cera sólida	Dados para o componente syn: 6,91 (t, 1H), 6,65 (d, 1H), 6,49 (d, 1H), 3,5 (br, 2H), 3,20 (br, 1H), 3,15 (br,1 H), 1,92 (m, 2H), 1,54 (d, 1H, 1,19 (m, 2H), 1,03 (m, 1H), 0,81 (d, 6H).
Referência	2.82 syn:anti= 35:65	óleo	Dados para a mistura syn-anti: 6,94-6,87 (m, 1H); 6,65 (m, 1H), 6,52 e 6,46 (d, 1H), 3,52 (br, 2H), 3,21, 3,16 e 3,14 (três m, 2H), 1,96-1,84 (m, 2H), 1,55 e 1,49 (dois d, 1H), 1,43 e 1,03 (m, 1H), 1,22-1,12 (m, 2H), 0,92 e 0,82 (dois m, 6H).
Referência	2.84 syn:anti = 12:88	viscoso	Dados para o componente anti: 6,89 (t, 1H), 6,64 (d, 1H), 6,48 (d, 1H), ca 4,0-3,75 (br, 2H), 3,03 (br, 1H), 3,00 (br, 1H), 1,96-1,87 (m, 3H), 1,58 (m, 1H), 1,12 (m, 3H), 0,91 (d, 6H).
Referência	2.84 syn:anti =	viscoso	Dados para o componente anti: 6,92 (t,

	82:18		1H), 6,64 (d, 1H), 6,50 (t, 1H), 3,53 (br, 2H), 3,08 (m, 1H), 3,03 (m, 1H), 2,02 (t, 1H), 1,90 (m, 2H), 1,46 (m, 1H), 1,16 (m, 2H), 0,92 (m, 2H), 0,81 (d, 6H).
Referência	2.86	viscoso	6,92 (t, 1H), 6,66 (d, 1H), 6,49 (d, 1H), 3,52 (br, 2H), 2,62 (m, 1H), 2,59 (m, 1H), 2,01 (m, 2H), 1,27 (m, 2H), 0,54 (m, 2H), 0,45 (m, 2H).
Referência	2.88 syn:anti = 46:54	viscoso	Dados para a mistura syn-anti-(1:1): 6,91 e 6,89 (dois t, 1H), 6,63 (d, 1H), 6,48 e 6,46 (dois d, 1H), 3,52 (br, 2H), 3,20, 3,16 e 3,13 (três m, 2H), 1,93, 1,86 (m, 2H), 1,78 e 1,72 (dois d, 1H), 1,45 (m, 1H), 1,37-1,11 (m 6H). 0,85 e 0,76 (dois m, 6H).
Referência	2.89 syn:anti = 84:16	viscoso	Dados para o componente syn: 6,90 (t, 1H), 6,64 (d, 1H), 6,48 (d, 1H), 3,51 (br, 2H); 3,19 (s br., 1H), 3,13 (s br., 1H), 2,08 (t, 1H), 1,94 (m, 2H), 1,20 (m, 2H), 0,97 (m, 1H), 0,90 (m, 1H), 0,57 (1H), 0,35 (m, 2H), 0,13 (m, 2H).
Referência	2.90 syn:anti= 74:26	viscoso	Dados para o componente syn: 6,91 (t, 1H), 6,54 (d, 1H), 6,49 (d, 1H), 3,52 (br, 2H), 3,12 (s br., 1H), 3,08 (s br., 1H), 1,91 (m, 2H), 1,8-1,0 (m, 12H).
Referência	2.94 syn:anti = 74:26	viscoso	dados para o componente syn: 7,28 (m 2H), 7,17 (m, 1H), 7,04 (d, 2H), 6,99 (t, 1H) 6,12 (d, 1H), 6,57 (d, 1M), 3,6 (br, 2H), 3,06 (m, 2H), 2-35 (m, 2H), 2,20 (m, 1H), -1,89 (m, 2H), 1,20 (m, 2H).
Referência	2.106	81-82	6,90 (t, 1H), 6,67 (d, 1H), 6,47 (d, 1H), 3,77 (m, 1H), 3,73 (m, 1H) 3,56 (br, 2H), 1,88 (m, 2H), 1,63 (s, 6H), 1,26 (m, 2H).
Referência	2.107	viscoso	6,89 (t, 1H), 6,65 (d, 1H), 6,46 (d, 1H), 3,76 (m, 1H), 3,72 (m, 1H), 3,56 (br, 2H), 2,12-1,90 (m, 4H), 1,88 (m, 2H), 1,26 (m, 2H). 0,94 (m. 6H).
Referência	3.001	150-154	
Referência	3.002	163-165	
Referência	3.023	129-133 [como uma mistura de isômeros rotacionais]	7,62 (br), 7,44 (d, J-1Hz), 7,32 (d, J-1Hz), 7,2 (m), 7,0 (m), estes sinais são devidos a 6 prótons. Sinais adicionais 3,7 (s, 3H), 1,84 (s, 3H), 1,82 (s, 3H), 2,0-1,5 (m, 4H).
Referência	3.027	sólido amorfo	7,5-7,0 (m) e 6,8 (s br.) correspondente a 5H, 5,7-4,8 (dois conjuntos de sistemas AB, 2H), 4,1 (m, 1H), 3,35 e 3,3 (dois s, correspondentes a 3H), 1,85, 1,75, 1,70 (três s, correspondentes a 6H), 2,0-1,4 (m, 4H).
Referência	3.027	Sólido amorfo	7,60 s br., 1H), 7,34 (s br., 1H), 7,22-7,07 (m, 3H), 7,01 (s br., 1 H). 5,27 (d, 1H), 3,71 (s, 3H), 2,19 (m, 1H), 1,91 (m,

			1H), 1,83 (s, 3H), 1,71 (m, 1H), 1,49 (m, 1H).
Referência	3.028	Sólido amorfo	7,68 (br., 1H), 7,53 (d, 1H), 7,37 (s br., 1H), 7,17 (t, 1H). 7,00 (s br., 1H), 6,96 (d, 1H), 5,39 (d, 1H), 3,70 (s, 3H), 2,25 (m, 1H), 1,83 (s, 3H), 1,83-1,66 (m, 2H), 1,48 (m, 1H).
Referência	3.035	Sólido amorfo	
	3.048	Sólido amorfo	7.85 (d, 1H), 7,72 (br., 1H), 7,48 (s br., 1H), 7,60 (t, 1H). 7,0 (s br., 1H), 9,95 (d, 1H), 3,73 (s, 3H), 3,43 (s br., 1H), 3,37 (s br., 1H). 1,9(m, 2H), 1,75 (m, 1H), 1,55 (m, 1H), 1,2 (m, 2H).
	3.052	136-138	
	3.076	154-155	
Referência	3.152	Sólido amorfo	7,71 (br, 1H), 7,69 (4, 1H), 7,39 (s br., 1H), 7,18 (t, 1H), 7,06 (d, 1H), 6,99 (s br., 1H), 4,30 (s br., 1H), 4,18 (s br., 1H), 3,71 (s, 3H), 2,20 (m, 2H), 2,12 (s, 3H), 1,42-1,21 (m, 2H).
Referência	3.162	Sólido amorfo	7,71 (d, 1H), 7,68 (br, 1H), 7,39 (s br., 1H), 7,17 (t, 1H), 7,05 (d, 1H), 7,01 (s br., 1H), 4,40 (s br., 1H), 4,28 (s br., 1H), 3,72 (s, 3,14), 2,24(br, 2H), 2,17 (br, 2H), 1,37 (t, 1H), 1,25 (t, 1H), 1,04 (t, 3H).
Referência	3.168	Sólido amorfo	7,71 (br, 2H), 7,37 (s br., 1H), 7,14 (t, 1H), 7,05 (d, 1H), 7,00 (s br., 1H), 5,18 (br, 1H), 5,11 (br, 1H), 3,71 (s, 3H), 2,14 (m, 2H), 1,50 (m, 1H), 1,38 (s, 9H), 1,30 (m, 1H).
Referência	3.172	Sólido amorfo	Mistura syn-anti: 8,00 (s, 1H), 7,72 (br, 1H), 7,58 & 7,31 (d, 1 H), 7,38 & 7,36 (s br., 1H), 7,16 (t, 1H), 7,11 & 7,09 (d, 1H), 7.,01 (s br., 1H), 5,61 & 5,53 (s br., 1H), 5,19 & 5,09(s br., 1H), 3,71 (s, 3H), 2,11 (m, 2H), 1,75-1,61 (m, 1H), 1,50-1,39 (m, 1H).
Referência	3.176	231-232	7.48 (br, 1H), 7,22 (t, 1H), 7,09 (br, 1H), 7,06 (d, 1H), 6,96 (s br., 1H), 5,91 (s br., 1H), 3,69 (s, 3H), 2,87 (m, 1H), 2,22 (m, 2H), 1,97 (s, 3H), ca 1,9 (m, 1H), 1,66 (s, 3H), 1,49 (s, 3H).
Referência	3.183	sólido amorfo	7,71 (br, 1H), 7,3 (br d, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,16 (t, 1H), 7,06 (d, 1H), 7,02 (s br., 1H), 5,25 (m, 1H), 5,18 (m, 1H), 3,72 (s, 3H), 3,62 (s, 3H), 2,16 (m, 2H), 1,55 (m, 1H), 1,35 (m, 1H).
Referência	3.189	amorfo	7.65 (br, 1H), 7,31 (d, 1H), 7,30 (s br., 1H), 7,17 (t, 1H), 7,02 (d, 1H), 7,01 (s br., 1H), 3,72 (s, 3H), 3,54 (s, 3H), 2,08 (s, 3H), 1,99 (s, 3H), 1,94 (m, 2H), 1,76 (m, 1H), 1,33 (m, 1H).

Referência	3.191	amorfo	7,72 (br, 1H), 7,64 (d, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,16 (t, 1H), 7,07 (d, 1H), 7,02 (s br., 1H), 5,26 (m, 1H), 5,20 (m, 1H), 4,05 (q, 1H), 3,72 (s, 3H), 2,15 (m, 2H), 1,55 (m, 1H), 1,35 (m, 1H), 1,20 (t, 3H).
Referência	3.193	amorfo	7,72 (br, 1H), 7,60 (d, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,16 (t, 1H), 7,08 (d, 1H), 7,02 (s br., 1H), 5,29 (m, 1H), 5,22 (m, 1H), 4,24 (m, 2H), 3,73 (s, 3H), 3,61 (t, 2H), 2,18 (m, 2H), 1,59 (m, 1H), 1,37 (m, 1H).
Referência	3.195	amorfo	7,72 (br, 1H), 7,65 (d, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,15 (t, 1H), 7,06 (d, 1H), 7,01 (s br. 1H), 5,26 (m, 1H), 5,18 (m, 1H), 4,00 (t, 2H), 3,72 (s, 3H), 2,15 (m, 2H), 1,55 (m, 3H), 1,34 (m, 3H), 0,89 (t, 3H).
Referência	3.197	amorfo	7,72 (br, 1H), 7,66 (d, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,16 (t, H), 7,07 (d, 1H), 7,01 (s br., 1H), 5,27 (m, 1 H), 5,19 (m, 1H), 3,78 (dd, 2H), 3,73 (s, 3H), 2,16 (m, 2H), 1,87 (m, 1H), 1,55 (m, 1H), 1,35 (m, 1H).
	3.202 syn:anti = 90:10	121-125	dados para o componente syn: 7,91 (d, 1H), 7,72 (br, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,10 (t, 1H), 7,00 (s br., 1H), 6,97 (d, 1H), 3,72 (s, 3H), 3,32 (m, 1H), 3,22 (m, 1H), 1,95 (m, 2H), 1,58 (d, 1H), 1,20 (m, 2H), 0,90 (m, 1H), 0,81 (m, 6H).
	3.202 syn:anti = 34:66	amorfo	Dados para a mistura syn-anti: 7,91 e 7,85 (dois d, 1H), 7,72 (br, 1H), 7,37 (m, 1H), 7,12-7,05 (m, 1H), 6,99 (m, 1H), 6,98-6,94 (m, 1H), 3,71 (s, 3H), 3,32, 3,25, 3,22 e 3,19 (quatro m, 2H), 1,96-1,88 (m, 2H), 1,58 e 1,51 (dois d, 1H), 1,44 e 0,98 (dois m, 1H), 1,26-1,12 (m, 2H), 0,91 e 0,81 (dois m, 6H).
	3.208 syn:anti = 10:90	130-131	Dados para o componente anti: 7,85 (d, 1H), 7,70 (br, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,08 (t, 1H), 6,99 (s br., 1H), 6,95 (d, 1H), 3,71 (s, 3H), 3,12 (m, 1H), 3,06 (m, 1H), 2,0-1,9 (m, 3H), 1,6-1,5 (m, 2H), 1,22-1,11 (m, 3H), 0,92 (d, 6H).
	3.208 syn:anti = 85:15	amorfo	dados para o componente syn: 7,92 (d, 1H), 7,70 (br, 1H), 7,38(s br., 1H), 7,11 (t, 1H), 6,99 (s br., 1H), 6,96 (d, 1H), 3,71 (s, 1 H), 3,19(m, 1H), 3,10 (m, 1H), 2,06 (t, 1H), 1,97 (m, 2H), 1,44 (m, 1H), 1,27-1,11 (m, 2H), 0,90 (m, 2H), 0,79 (d, 6H).
	3.210	155-157	7,84 (d, 1H), 7,68 (br, 1H), 7,37 (s br., 1H), 7,11 (t, 1H), 6,98 (d, 1H), 3,71 (s, 3H), 2,69 (m, 1H), 2,65 (m, 1H), 2,09 (m, 2H), 1,33 (m, 1H), 1,32 (m,

			1H), 0,49 (m, 4H).
	3.212	amorfo	Dados para a mistura syn-anti: 7,92 e 7,85 (dois d, 1H), 7,72 (br, 1H), 7,38 (m, 1H), 7,13-7,06 (m, 1H), 7,00 (m, 1H), 6,96 (m, 1H), 3,72 (s, 3H), 3,32, 3,25, 3,22 e 3,19 (quatro m, 2H), 1,92 (m, 2H), 1,82 e 1,72 (dois d, 1H), 1,43 (m, 1H), 1,35-1,05 (m, 6H), 0,84 e 0,73 (dois t, 6H).
	3.213 syn: anti = 95:05	115-117	dados para o componente syn: 7,90 (d, 1H), 7,71 (br, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,10 (t, 1H), 6,99 (s br., 1H), 6,96 (d, 1H), 3,71 (s, 3H), 3,31 (m, 1H), 3,18 (m, 1H), 2,12 (t, 1H), 1,98 (m, 2H), 1,28-1,14 (m, 3H), 1,0-0,78 (m, 2H), 0,55 (m, 1H), 0,34 (m, 2H), 0,16 (m, 2H).
	3.214 syn:anti = 74:26	amorfo	dados para o componente syn: 7,93 (d, 1H), 7,72 (br, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,11 (t, 1H), 7,00 (s br., 1H), 6,95 (d, 1H), 3,71 (s, 3H), 3,24 (m, 1H), 3,14 (m, 1H), 1,94 (m, 2H), 1,8-0,88 (m, 12H).
	3.218 syn:anti = 92:08	143-146	dados para o componente syn: 7,96 (d, 1H), 7,70 (br, 1H), 7,37 (s br., 1H), 7,30-6,95 (m, 8H), 3,72 (s, 3H), 3,18 (m, 1H), 3,12 (m, 1H), 2,37-2,07 (m, 3H), 1,93 (m, 2H), 1,25 (m, 2H).
	3.230	amorfo	7,82 (d, 1H), 7,75 (br, 1H), 7,39 (s br., 1H), 7,08 (t, 1H), 7,01 (s br., 1H), 6,98 (d, 1H), 3,83 (m, 1H), 3,78 (m, 1H), 3,72 (s, 3H), 1,90 (m, 2H), 1,61 (s, 6H), 1,35-1,21 (m, 2H).
	3.231	amorfo	7,81 (d, 1H), 7,75 (br, 1H), 7,38 (s br., 1H), 7,08 (t, 1H), 7,00 (s br., 1H), 6,97 (d, 1H), 3,85 (m, 1H), 3,77 (m, 1H), 3,72 (s, 3H), 2,1-1,9 (m, 6H), 1,38-1,21 (m, 2H), 0,93 (m, 6H).
	4.048	óleo viscoso	7,87 (br, 1H), 7,80 (d, 1H), 7,27 (m, 1H), 7,07 (t, 1H), 6,96 (d, 1H), 6,95 (t, J=56 Hz, 1H), 6,87 (m, 1H), 3,68 (s, 3H), 3,47 (s br., 1H), 3,36 (s br., 1H), 1,90 (m, 2H), 1,74 (m, 1H), 1,50 (m, 1H), 1,16-1,24 (m, 2H).
	8.048	óleo viscoso	7,83 (d br, 1H), 7,76 (br, 1H), 7,55 (br s, 1H), 7,12 (s br., 1H), 7,09 (t, 1H), 6,98 (d, 1H), 5,19 (s, 2H), 3,45 (s br., 1H), 3,37 (s br., 1H), 3,32 (s, 3H), 1,92 (m, 2H), 1,77 (m, 1H), 1,52 (m, 1H), 1,22 (m, 2H).
	11,048	óleo viscoso	7,90 (d br, 1H), 7,73 (br, 1H), 7,09 (t, 1H), 7,04 (s br., 1H), 6,98 (d, 1H), 3,68 (s, 3H), 3,43 (s br., 1H), 3,38 (s br., 1H), 1,90 (m, 2H), 1,77 (m, 1H), 1,52 (m, 1H), 1,24 (m, 2H).

Referência	14.002	148-151	
Referência	14.023	152-166	
Referência	14.024	148-150	
Referência	14.027	182-184	
Referência	14.028	sólido amorfo	8,04 (s, 1H), 7,66 (br., 1H), 7,45 (d, 1H), 7,19 (t, 1H) 6,99 (d, 1H), 5,37 (d, 1H), 3,98 (s, 3H), 2,25 (m, 1H), 1,83 (s, 3H), 1,83-1,65 (m, 2H), 1,47 (m, 1H).
Referência	14.035	144-146	
	14.048	sólido amorfo	8,05 (s, 1H, 7,8 (d, 1H), 7,7 (s br., 1H), 7,6 (t, 1H), 7,0 (d, 1H), 3,98 (s, 3H), 3,43 (s br., 1H), 3,39 (s br., 1H), 1,9 (m, 2H), 1,75 (m, 1H), 1,54 (m, 1H), 1,2 (m, 2H).
	14.052	121-122	
	14.076	127-130	
Referência	14.152	sólido amorfo	8,09 (s, 1H), 7,75 (br, 1H), 7,62 (d, 1H), 7,19 (t, 1H), 7,09 (d, 1H), 4,30 (br, 1H), 4,20 (s br., 1H), 3,98 (s, 3H), 2,2-2,1 (m, 2H), 2,11 (s br., 3H), 1,4-1,2 (m, 2H).
Referência	14.162	142-147	8,09 (s, 1H); 7,74 (br, 1H), 7,63 (d, 1H), 7,19 (t, 1H), 7,08 (d, 1H), 4,40 (s br., 1H), 4,31 (s br., 1H), 4,00 (s, 3H), 2,26 (br, 2H), 2,15 (br, 2H), 1,38 (t, 18), 1,26 (t, 1H), 1,05 (t, 3H).
Referência	14.168	sólido amorfo	8,94 (s, 1H), 7,72 (br, 1H), 7,60 (d, 1H), 7,16 (t, 1H), 7,08 (d, 1 H), 5,15 (br, 1H), 5,12 (br, 1H), 3,99 (s, 3H), 2,13 (m, 2H), 1,49 (m, 1H), 1,38 (s, 9H), 1,32 (m, 1H).
Referência	14.172	123-124	Mistura syn-anti; DMSO: 9,97 (s, 1H), 8,45 & 8,43 (br, 1H), 7,87 (s br., 1H), 7,21 & 7,12 (d, 1H), 7,06 (m, 2H), 5,42 & 5,29 (br, 1H), 5,24 (m, 1H), 3,88 (s, 3H), 1,87 (m, 2H), 1,45 & 1,39 (m, 1H), 1,21 (m, 1 H).
Referência	14.176	232-233	8,12 (br, 1H), 7,23 (t, 1H), 7,09-7,05 (m, 2H), 5,93 (s, 1H), 3,97 (s, 3H), 2,90 (m, 1H), 2,32-2,20 (m, 2H), 1,97 (s, 3H). 1,90 (m, 1H), 1,67 (s, 3H), 1,48 (s, 3H).
Referência	14.178	148-150	7,98 (br, 1H), 7,67 (br, 1H), 7,30 (d, 1H), 7,19 (t, 1H), 7,04 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 2,05 (s, 3H), 1,97 (s, 3H) sobreposto por um m (2,00-1,89, 2H), 1,68 (m, 1H), 1,35 (s, 9H), 1,31 (m, 1H).
Referência	14.183	sólido amorfo	8,05 (s, 1H), 7,74 (br, 1H), 7,53 (d, 1H), 7,17 (t, 1H), 7,10 (d, 1H), 5,23 (m, 1H), 5,19 (m, 1H), 4,00 (s, 3H), 3,62 (s, 3H), 2,14 (m, 2H), 1,55 (m, 1H), 1,35

			(1H) .
Referência	14.189	amorfo	7,99 (s br., 1H), 7,68 (br, 1H), 7,28 (d, 1H), 7,19 (t, 1H), 7,06 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,54 (s, 3H), 2,06 (s, 3H), 2,02-1,91 (m, 2H), 1,72 (m, 1H), 1,35 (m, 1H) .
Referência	14.191	amorfo	8,05 (s, 1H), 7,75 (br, 1H), 7,55 (d, 1H), 7,17 (t, 1H), 7,11 (d, 1H), 5,23 (m, 1H), 5,20 (m, 1H), 4,05 (q, 2H), 4,00 (s, 3H), 2,15 (m, 2H), 1,54 (m, 1H), 1,35 (m, 1H), 1,20 (t, 3H) .
Referência	14.193	amorfo	8,05 (s, 1H), 7,72 (br, 1H), 7,52 (d, 1H), 7,18 (t, 1H), 7,12 (d, 1H), 5,27 (m, 1H), 5,23 (m, 1H), 4,24 (m, 2H), 4,00 (s, 3H), 3,61 (t, 2H), 2,19 (m, 2H), 1,58 (m, 1 H), 1,38 (m, 1 H) .
Referência	14.195	amorfo	8,05 (s, 1H), 7,75 (br, 1H), 7,55 (d, 1H), 7,17 (t, 1H), 7,10 (d, 1 H), 5,23 (m, 1H), 5,20 (m, 1H), 4,00 (s, 3H), 4,00 (t, 2H), 2,15 (m, 2H), 1,55 (m, 3H), 1,35 (m, 3H), 0,89 (t, 3H) .
Referência	14.197	amorfo	8,05 (s, 1H), 7,77 (br, 1H), 7,55 (d, 1H), 5,24 (m, 1H), 5,20 (m, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,78 (dd, 2H), 2,17 (m, 2H), 1,86 (m, 1H), 1,55 (m, 1H), 1,36 (m, 1H), 0,87 (d, 6H) .
	14.202 syn:anti=90:10	145-150	dados para o componente: 8,06 (s, 1H), 7,84 (d, 1H), 7,70 (br, 1H), 7,12 (t, 1H), 7,01 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,29 (m, 1H), 3,23 (m, 1H), 1,96 (m, 2H), 1,60 (d, 1H), 1,20 (m, 2H), 0,96 (m, 1H), 0,80 (m, 6H) .
	14.202 syn:anti=28:72	amorfo	Dados para a mistura syn-anti: 8,05 (br, 1H), 7,83 e 7,78 (dois d, 1H), 7,70 (br, 1H), 7,14-7,07 (m, 1H), 7,01-6,98 (m, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,30 e 3,21 (dois m, 2H), 1,97-1,90 (m, 2H), 1,60 e 1,51 (dois d, 1H), 1,43 e 0,98 (dois m, 1H), 1,26-1,12 (m, 2H), 0,91 e 0,82 (dois m, 6H) .
	14.208 syn:anti=10:90	132-133	Dados para o componente anti: 8,04 (s, 1H), 1,17 (d, 1H), 7,68 (br, 1H), 7,09 (t, 1H), 6,99 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,08 (m, 2H), 2,0-1,91 (m, 3H), 1,63-1,55 (m, 2H), 1,22-1,10 (m, 3H), 0,91 (d, 6H) .
	14.208 syn:anti=85:15	130-133	dados para o componente syn: 8,05 (s br., 1H), 7,84 (d, 1H), 7,68 (br, 1H), 7,12 (t, 1H), 7,00 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,16 (m, 1H), 3,12 (m, 1H), 2,10 (t, 1H), 1,97 (m, 2H), 1,44 (m, 1H), 1,22 (m, 2H), 0,91 (m, 2H), 0,80 (d, 6H) .
	14.210	151-153	8,04 (br, 1H), 7,76 (d, 1H), 7,65 (br, 1H), 7,12 (t, 1H), 7,02 (d, 1H), 3,98 (s, 3H), 2,66 (m, 2H), 2,10 (m, 2H), 1,29 (m,

			2H), 0,49 (m, 4H).
	14.212 syn:anti=48:52	amorfo	Dados para a mistura syn-anti: 8,05 (br, 1H), 7,84 e 7,78 (dois d, 1H), 7,69 (br, 1H), 7,14-7,08 (m, 1H), 6,99 (m, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,29, 3,24 e 3,20 (três m, 2H), 1,95 (m, 2H), 1,83 e 1,74 (dois d, 1H), 1,44 (m, 1H), 1,35-1,11 (m, 6H), 0,85 e 0,74 (dois t, 6H).
	14.213 syn:anti=90:10	amorfo	dados para o componente syn: 8,05 (s, 1H), 7,83 (d, 1H), 7,70 (br, 1H), 7,12 (t, 1H), 7,00 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,29 (m, 1H), 3,20 (m, 1H), 2,14 (t, 1H), 2,00 (m, 2H), 1,16 (m, 2H), 1,02-0,78 (m, 2H), 0,55 (m, 1H), 0,35 (m, 2H), -016 (m, 2H).
	14.214 syt:anti=74:26	amorfo	dados para o componente: 8,05 (s, 1H), 7,85 (d, 1H), 7,69 (br, 1H), 7,12 (t, 1H), 7,00 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,21 (m, 1H), 3,16 (m, 1H), 1,96 (m, 2H), 1,80-0,09 (m, 12 H).
	14.218 syn:anti=78:22	amorfo	dados para o componente syn: 8,05 (s, 1H), 7,89 (d, 1H), 7,68 (br, 1H), 7,30-6,92 (m, 7H), 4,00 (s, 3H), 3,14 (m, 2H), 2,60-2,10 (m, 3H), 1,94 (m, 2H), 1,29-1,15 (m, 2H).
	14.230	183-187	8,06 (s br, 1H), 7,74 (d, sobreposto por br, 2H), 7,09 (t, 1H), 7,02 (d, 1H), 4,00 (s, 3H), 3,83 (m, 1H), 3,80 (m, 1H), 1,92 (m, 2H), 1,62 (s, 6H), 1,35-1,11 (m, 2H).
	14.231	amorfo	8,05 (s br, 1H), 7,73 (d, sobreposto por br, 2H), 7,09 (t, 1H), 7,01 (d, 1H), 3,99 (s, 3H), 3,82 (m, 1H), 3,79 (m, 1H), 2,1-1,95 (m, 4H), 1,92 (m, 2H), 1,38-1,23 (m, 2H), 0,93 (m, 6H).
Referência	15.013	139-140	
Referência	15.023	sólido amorfo	7,99 (s, 1H), 7,93 (br., 1H), 7,22-7,16 (m, 2H), 7,03 (d, 1H). 6.88 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,93 (s, 3H), 1,90 (m, 2H), 1,82 (s, 3H), 1,80 (s, 3H), 1,55 (m, 2H).
Referência	15.027	168-169	
Referência	15.028	145-147	
Referência	15.035	136-139	
	15.048	132-134	8,11 (br., 1H), 8,03 (s, 1H), 7,83 (d, 1H), 7,08 (t, 1H), 6,98 (d, 1H), 5,88 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,93 (s, 3H), 3,49 (s br., 1H), 3,37 (s br., 1H), 1,91 (m, 2H), 1,74 (m, 1H), 1,51 (m, 1H), 1,22 (m, 2H).
Referência	15.049	107-108	
Referência	15.050	115-117	
	15.052	118-122	
	15.076	148-150	
	15.086	sólido amorfo	8,00 (s, 1H), 7,97 (br, 1H), 7,64 (d,

			1H), 7,15 (t, 1H), 6,94 (d, 1H), 5,86 (t, $J_{\text{HF}}=54,3\text{Hz}$, 1H), 3,92 (s, 3H), 3,25 (s br., 1H), 3,03 (s br., 1H), 1,94 (d, 2H), 1,8-1,6 (m, 8H).
Referência	15.152	141-147 (dec.)	8,07 (br, 1H), 8,05 (s, 1H), 7,76 (d, 1H), 7,18 (t, 1H), 7,06 (d, 1 H), 6,87 (t, $J_{\text{HF}}=54,2\text{Hz}$, 1H), 4,26 (s br, 1H), 4,12 (s br, 1H), 3,95 (s, 3H), 2,16 (m, 2H), 2,07 (s, 3H), 1,37-1,19 (m, 2H).
Referência	15.162	sólido amorfo	8,17 (br, 1H), 8,09 (s, 1H), 7,72 (d, 1H), 7,20 (t, 1H), 7,07 (d, 1 H), 6,90 (t, $J_{\text{HF}}=54,2\text{Hz}$, 1H), 4,56 (s br, 1H), 4,38 (s br, 1H), 3,96 (s, 3H), 2,32 (br, 2H), 2,23 (br, 2H), 1,42 (t, 1H), 1,30 (t, 1H), 1,08 (t, 3H).
Referência	15.168	viscoso	8.12 (br, 1H), 8,04 (s, 1H), 7,72 (d, 1H), 7,15 (t, 1H), 7,06 (d, 1H), 8,89 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 5,22 (br, 1H), 5,11 (br, 1H), 3,05 (s, 3H), 2,12 (m, 2H), 1,53-1,24 (m, 2H), 1,37 (s,9H).
Referência	15.172	sólido amorfo	Mistura syn-anti: 8,22 & 8,16 (br, 1H), 8,06 (s br, 1H), 8,00 (s, 1H), 7,58 & 7,42 (d, 1H), 7,17 (t, 1H), 7,10 (d, 1H), 6,93 & 6,91 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 5,64 & 5,53 (s br, 1H), 5,21 & 5,10 (s br, 1H), 3,95 (s, 3H), 2,10 (m, 2H), 1,63 (m, 1H), 1,43 (m, 1H).
Referência	15.176	223-224	
Referência	15.183	sólido amorfo	8,13 (br, 1H), 8,05 (s, 1H), 7,65 (d, 1H), 7,17 (t, 1H), 7,08 (d, 1H), 6,91 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 5,29 (s br, 1H), 5,19 (s br, 1H), 3,96 (s, 3H), 3,62 (s, 3H), 2,15 (m, 2H), 1,53 (m, 1H), 1,35 (m, 1H).
Referência	15.189	amorfo	7.95(br, 2H), 7.25(d, 1 H), 7.19(t, 1 H), 7.06(d,1 H), 6.94(t, $J_{\text{HF}}= 54\text{Hz}$, 1 H), 3.94(s, 3H), 3.54(s, 3H), 2.07 (s, 3H), 1.99(s. 3H), 1.98(m, 2H), 1.72(m. 1 H), 1.35(m, 1 H).
Referência	15.191	amorfo	8,15 (br, 1H). 8,05 (s, 1H), 7,66 (d, 1H), 7,17 (t, 1H), 7,08 (d, 1H), 6,91 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 5,30 (m, 1H), 5,20 (m, 1H), 4,05 (q, 2H), 3,95 (s, 3H), 2,14 (m, 2H), 1,52 (m, 1H), 1,35 (m, 1H), 1,20 (t, 3H).
Referência	15.193	amorfo	8,12 (br, 1H), 8,05 (s, 1H), 7,64 (d, 1H), 7,18 (t, 1H), 7,09 (d, 1H), 6,91 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 5,32 (m, 1H), 5,23 (m, 1H), 4,24 (m, 2H), 3,96 (s, 3H), 3,61 (t, 2H), 2,18 (m, 2H), 1,55 (m, 1H), 1,37 (m, 1H).
Referência	15.195	amorfo	8,13 (br, 1H), 8,05 (s, 1H), 7,67 (d, 1H), 7,16 (t, 1H), 7,07 (d, 1 H), 6,91 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 5,29 (m, 1H), 5,18 (m, 1H), 4,01 (t, 2H), 3,95 (s, 3H), 2,16 (m,

			2H), 1,53 (m, 3H), 1,33 (m, 3H), 0,88 (t, 3H).
Referência	15.197	amorfo	8,14 (br, 1H), 8,05 (s, 1H), 7,69 (d, 1H), 7,15 (t, 1H), 7,08 (d, 1H), 6,91 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 5,30 (m, 1H), 5,20 (m, 1H), 3,96 (s, 3H), 3,79 (dd, 2H), 2,16 (m, 2H), 1,86 (m, 1H), 1,53 (m, 1H), 1,35 (m, 1H), 0,87 (d, 6H).
	15.202 syn:anti = 90:10	110-112	dados para o componente syn: 8,10 (br, 1H), 8,05 (s br, 1H), 7,92 (d, 1H), 7,11 (t, 1H), 6,98 (d, 1H), 6,87 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,95 (s, 3H), 3,37 (m, 1H), 3,22 (m, 1H), 1,95 (m, 2H), 1,58 (d, 1H), 1,19 (m, 2H), 0,98 (m, 1H), 0,81 (m, 6H).
	15.202 syn:anti = 35:65	amorfo	Dados para a mistura syn-anti: 8,09 (br, 1H), 8,04 (br, 1H), 7,91 e 7,84 (dois d, 1H), 7,13-7,06 (m, 1H), 7,02-6,96 (m, 1H), 6,88 e 6,87 (dois t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,95 (s, 3H), 3,38, 3,30, 3,23 e 3,20 (quatro m, 2H), 1,96-1,89 (m, 2H), 1,58 e 1,50 (dois d, 1H), 1,44 e 0,97 (dois m, 1H), 1,20-1,12 (m, 2H), 0,91 e 0,82 (dois m, 6H).
	15.208 syn:anti = 12:88	viscoso	Dados para o componente anti: 8,07 (br, 1H), 8,03 (s br, 1H), 7,84 (d, 1H), 7,08 (t, 1H), 6,97 (d, 1H), 6,88 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,94 (s, 3H), 3,17 (m, 1H), 3,07 (m, 1H), 1,93 (m, 3H), 1,59 (m, 1H), 1,28-1,12 (m, 4H), 0,91 (d, 6H).
	15.208 syn:anti = 93:7	117-119	dados para o componente syn: 8,08 (br, 1H), 8,04 (s br, 1H), 7,91 (d, 1H), 7,12 (t, 1H), 6,98 (d, 1H), 6,87 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,94 (s, 3H), 3,25 (m, 1H), 3,11 (m, 1H), 2,07 (t, 1H), 1,96 (m, 2H), 1,45 (m, 1H), 1,19 (m, 2H), 0,89 (m, 2H), 0,80 (d, 6H).
	15.210	158-160	8,04 (br, 2H), 7,84 (d, 1H), 7,12 (t, 1H), 7,00 (d, 1H), 6,86 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,94 (s, 3H), 2,74 (m, 1H), 2,66 (m, 1H), 2,11 (m, 2H), 1,33 (m, 1H), 1,26 (m, 1H), 0,48 (m, 4H).
	15.212 syn:anti = 46:54	amorfo	dados para a mistura syn-anti: 8,09 (br, 1H), 8,04 (s br, 1H), 7,92 e 7,85 (dois d, 1H), 7,13-7,07 (m, 1H), 6,98 (m, 1H), 6,88 e 6,87 (dois t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,95 (s, 3H), 3,37, 3,31, 3,23 e 3,20 (quatro m, 2H), 1,95 (m, 2H), 1,82 e 1,73 (dois d, 1H), 1,46 (m, 1H), 1,37-1,10 (m, 6H), 0,85 e 0,74 (dois t, 6H).
	15.213 syn:anti = 90:10	131-135	dados para o componente syn: 8,08 (br, 1H), 8,04 (s, 1H), 7,90 (d, 1H), 7,11 (t, 1H), 6,98 (d, 1H), 6,87 (t, $J_{\text{HF}}=54\text{Hz}$, 1H), 3,95 (s, 3H), 3,37 (m, 1H), 3,19 (m, 1H),

			2,13 (t, 1H), 1,98 (m, 2H), 1,24 (m, 2H), 1,1-0,78 (m, 2H), 0,55 (m, 1H), 0,35 (m, 2H), -0,16 (m, 2H).
	15.214 syn:anti = 74:26	amorfo	dados para o componente syn: 8,09 (br, 1H), 8,04 (s, 1H), 7,92 (d, 1H), 7,12 (t, 1H), 6,98 (d, 1H), 6,87 (t, J _{HF} =54Hz, 1H), 3,95 (s, 3H), 3,29 (m, 1H), 3,15 (m, 1H), 1,95 (m, 2H), 1,80-0,90 (m, 12H).
	15.218 syn:anti = 74:26	amorfo	dados para o componente syn: 8,08 (br, 1H), 8,05 (s, 1H), 7,96 (d, 1H), 7,3-6,9 (m, 7H), 6,85 (t, J _{HF} =54Hz, 1H), 3,96 (s, 3H), 3,23 (m, 1H), 3,13 (m, 1H), 2,4-2,07 (m, 3H), 1,95 (m, 2H), 1,3-1,1 (m, 2H).
	15.230	amorfo	8,15 (br, 1H), 8,05 (s br, 1H), 7,83 (d, 1H), 7,09 (t, 1H), 7,00 (d, 1H), 6,90 (t, J _{HF} =54Hz, 1H), 3,94 (s, 3H), 3,92 (m, 1H), 3,80 (m, 1H), 1,91 (m, 2H), 1,61 (s, 6H), 1,35-1,22 (m, 2H).
	15.231	amorfo	8,13 (br, 1H), 8,04 (s br, 1H), 7,82 (d, 1H), 7,09 (t, 1H), 6,99 (d, 1H), 6,90 (t, J _{HF} =54Hz, 1H), 3,94 (s, 3H), 3,91 (m, 1H), 3,78 (m, 1H), 2,1-1,95 (m, 4H), 1,91 (m, 2H), 1,39-1,21 (m, 2H), 0,93 (m, 6H).
	16.048	sólido amorfo	8,16 (d br, 1H), 7,98 (s br, 1H), 7,85 (d, 1H), 7,10 (t, 1H), 6,99 (d, 1H), 5,72 (sinal AB, 1H), 5,59 (sinal AB, 1H), 3,94 (s, 3H), 3,47 (s br, 1H), 3,38 (s br, 1H), 1,91 (m, 2H), 1,76 (m, 1H), 1,52 (m, 1H), 1,23 (m, 2H).
	16.076	viscoso	8,13 (br, 1H), 7,95 (s br, 1H), 7,70 (d, 1H), 7,19 (t, 1H), 7,02 (d, 1H), 5,64 (d, J _{HF} =48,7Hz, 2H), 3,92 (s, 3H), 3,15 (s br, 1H), 3,02 (s br, 1H), 1,77 (d, 4H), 1,39 (d, 4H).
Referência	21.023	161-165	
	20.048	132-133	
	21.048	136-138	
Referência	22.048	óleo viscoso	7,78 (br, 1H), 7,68 (d, 1H), 7,12-7,03 (m, 2H), 3,39 (s br., 2H), 2,76 (s, 3H), 1,92 (m, 2H), 1,76 (m, 1H), 1,53 (m, 1H), 1,20 (m, 2H).
Referência	23.048	óleo viscoso	7,60 (br d, 1H), 7,38 (br, 1H), 7,10 (t, 1H), 7,03 (d, 1H), 3,39 (m, 2H), 2,76 (s, 3H), 1,93 (m, 2H), 1,78 (m, 1H), 1,55 (m, 1H), 1,23 (m, 2H).
Referência	24.048	óleo viscoso	7,85 (br., 1H), 7,72 (d, 1H), 7,12-7,02 (m, 2H), 3,43 (s br., 1H), 3,40 (s br., 1H), 2,63 (s, 3H), 1,93 (m, 2H), 1,78 (m, 1H), 1,55 (m, 1H), 1,23 (m, 2H).
Referência	29.048	158-160	
Referência	29.052	151-152	
Referência	29.202 syn:anti	146-147	dados para o componente syn: 8,53 (m,

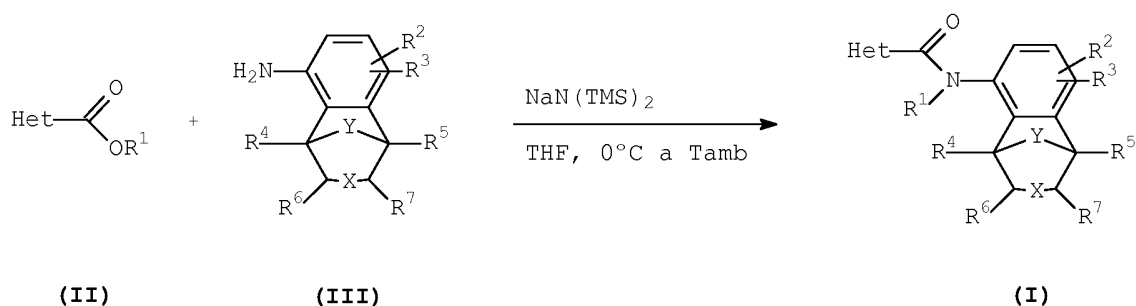
	= 90:10		1H), 8,29 (d, 1H), 8,17 (br, 1H), 7,82 (d, 1H), 7,42 (d, 1H), 7,15 (t, 1H), 7,05 (d, 1H), 3,37 (m, 1H), 3,26 (m, 1H), 1,98 (m, 2H), 1,62 (d, 1H), 1,24 (m, 2H), 0,97 (m, 1H), 0,82 (d, 6H).
Referência	29.202 syn:anti = 34:66	amorfo	Dados para a mistura syn-anti: 8,53 (m, 1H), 8,27 (m, 1H), 8,15 (br, 1H), 7,82-7,77 (m, 1H), 7,42 (m, 1H), 7,17-7,10 (m, 1H), 7,06-7,02 (m, 1H), 3,38, 3,30, 3,26 e 3,23 (quatro m, 2H), 1,99-1,90 (m, 2H), 1,62 e 1,54 (dois d, 1H), 1,46 e 0,99 (dois m, 1H), 1,30-1,10 (m, 2H), 0,91 e 0,83 (dois m, 6H).
Referência	29.208 syn:anti = 82:18	amorfo	
Referência	29.213 syn:anti = 90:10	amorfo	dados para o componente syn: 8,52 (m, 1H), 8,29 (d, 1H), 8,20 (br, 1H), 7,81 (d, 1H), 7,43 (d, 1H), 7,15 (t, 1H), 7,04 (d, 1H), 3,36 (m, 1H), 3,23 (m, 1H), 2,16 (t, 1H), 2,00 (m, 2H), 1,29 (m, 3H), 0,98 (m, 1H), 0,86 (m, 1H), 0,57 (m, 1H), 0,35 (m, 2H), -0,15 (m, 2H).
Referência	29.208 syn:anti = 15:85	amorfo	Dados para o componente anti: 8,52 (m, 1H), 8,28 (d, 1H), 8,16 (br, 1H), 7,78 (d, 1H), 7,41 (d, 1H), 7,12 (t, 1H), 7,02 (d, 1H), 3,17 (m, 1H), 3,10 (m, 1H), 1,96 (m, 3H), 1,59 (m, 1H), 1,26-1,1 (m, 4H), 0,91 (d, 6H).
Referência	29.212 syn:anti = 47:53	amorfo	Dados para a mistura syn-anti: 8,52 (m, 1H), 8,26 (m, 1H), 8,15 (br, 1H), 7,83 e 7,78 (dois d, 1H), 7,42 (m, 1H), 7,17-7,10 (m, 1H), 7,04 (m, 1H), 3,37, 3,30, 3,27 e 3,23 (quatro m, 2H), 1,95 (m, 2H), 1,86 e 1,77 (dois d, 1H), 1,45 (m, 1H), 1,38-1,10 (m, 6H), 0,85 e 0,74 (dois t, 6H).
Referência	29.214 syn:anti = 74:26	amorfo	dados para o componente syn: 8,52 (m, 1H), 8,29 (d, 1H), 8,16 (br, 1H), 7,83 (d, 1H), 7,43 (d, 1H), 7,16 (t, 1H), 7,05 (d, 1H), 3,30 (m, 1H), 3,19 (m, 1H), 1,98 (m, 2H), 1,80-0,8 (m, 12H).
Referência	29.218 syn:anti = 88:12	amorfo	
Referência	29.230	amorfo	8,53 (m, 1H), 8,29 (d, 1H), 8,17 (br, 1H), 7,71 (d, 1H), 7,43 (m, 1H), 7,13 (t, 1H), 7,06 (d, 1H), 3,91 (m, 1H), 3,82 (m, 1H), 1,93 (m, 2H), 1,63 (s, 6H), 1,40-1,23 (m, 2H).
Referência	29.231	amorfo	8,53 (m, 1H), 8,26 (d, 1H), 8,16 (br, 1H), 7,73 (d, 1H), 7,43 (m, 1H), 7,13 (t, 1H), 7,05 (d, 1H), 3,91 (m, 1H), 3,81 (m, 1H), 2,1-1,89 (m, 6H), 1,40-1,23 (m, 2H),

			0,93 (m. 6H).
--	--	--	---------------

Os compostos de acordo com a fórmula (I) poderão ser preparados de acordo com os esquemas reaccionais seguintes.

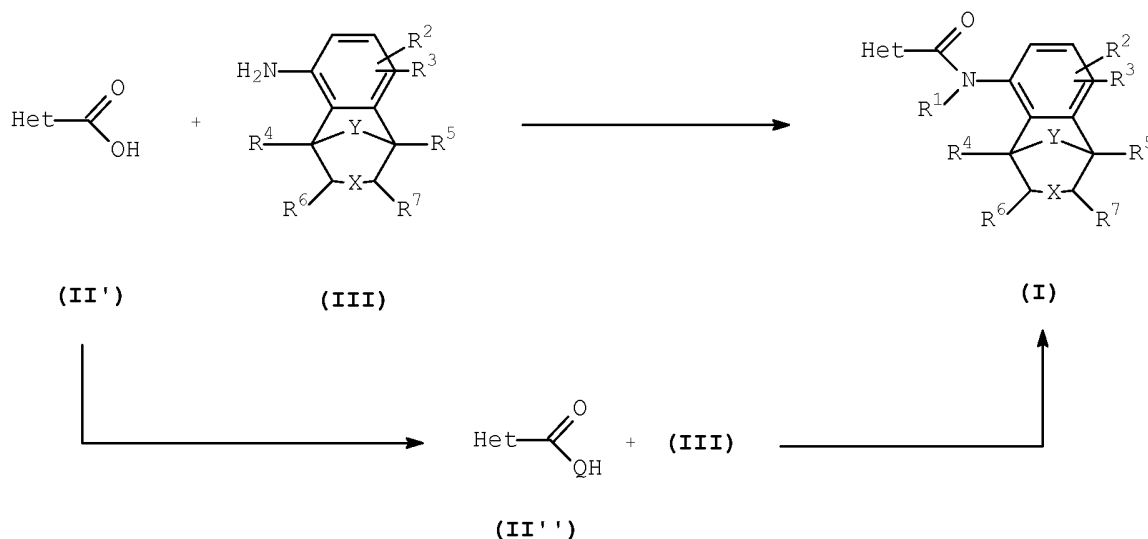
Preparação de um composto de fórmula (I)

Esquema 1



Um composto de fórmula (I) [em que R^1 é hidrogénio; e Het, R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , X e Y são como definido acima para um composto de fórmula (I)] poderá ser sintetizado por reacção de um composto de (II) [em que Het é como definido acima para um composto de fórmula (I) e R^1 é C_{1-5} alquilo] com uma anilina de fórmula (III) [em que R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , X e Y são como definido acima para um composto de fórmula (I)] na presença de $NaN(TMS)_2$ a $-10\text{ }^\circ\text{C}$ até à temperatura ambiente, preferencialmente em THF seco, como descrito por J. Wang *et al.*, Synlett, 2001, 1485.

Esquema 2



Alternativamente, um composto de fórmula (I) [em que R^1 é hidrogénio; e Het , R^3 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , X e Y são como definido acima para um composto de fórmula (I)] poderá ser preparado através da reacção de um composto de fórmula (II') [em que Het é como definido acima para um composto de fórmula (I)] com uma anilina de fórmula (III) [em que R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , X e Y são como definido acima para um composto de fórmula (I)] na presença de um agente de activação [tal como BOP-Cl] e dois equivalentes de uma base [tal como trietilamina] ou através da reacção de um composto de fórmula (II'') [em que Het é como definido acima para um composto de fórmula (I); e Q é Cl, F ou Br] que é obtido a partir do composto de fórmula (II') por tratamento com um agente de halogenação tal como cloreto de tionilo, cloreto de oxalilo, fosgénio, SF_4 , DAST, Desoxofluor ou brometo de tionilo, com uma anilina de fórmula (III) [em que R^2 , R^3 , R^4 , R^5 , R^6 , R^7 , X e Y são como definido acima para um composto de fórmula (I)] na presença de um equivalente de base [tal como NEt_3 , NaHCO_3 , KHCO_3 , Na_2CO_3 ou K_2CO_3] num solvente [tal como diclorometano, acetato de etilo ou DMF] preferencialmente a -10 até 30 °C.

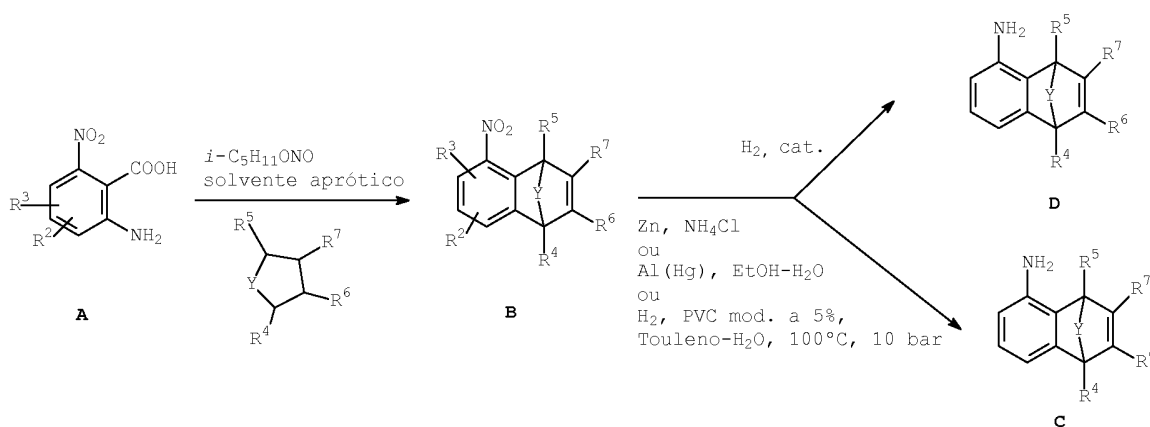
Materiais de Partida

Os ácidos e ésteres heterocíclicos [isto é, os compostos de fórmula (II') ou (II)] são geralmente conhecidos da literatura ou poderão ser sintetizados de acordo com métodos conhecidos. Os aminobenzonorbonenos orto-substituídos (incluindo homólogos) de fórmula (C) ou (D) (esquema 4) poderão ser conseguidos através de adição de *Diels-Alder* de um benzino gerado *in situ* [por exemplo partindo de um ácido 6-nitroantranílico de fórmula (A), como descrito por L. Paquette *et al.*, J. Amer. Chem. Soc. 99,3734 (1977) ou a partir de outros precursores adequados (ver H. Pellissier *et al.*, Tetrahedron, 59,701 (2003)] a um 1,4-dieno cíclico de 5-7 membros para originar um nitro-benzonorbonadieno de fórmula (B) de acordo com ou por analogia com L. Paquette *et al.*, J. Amer. Chem. Soc. 99, 3734 (1977), D. Gravel *et al.*, Can. J. Chem. 69, 1193 (1991), J.R. Malpass *et al.*, Tetrahedron, 48, 861 (1992), D.E. Lewis *et al.*, Synthetic Communications, 23, 993 (1993), R.N. Warrenner *et al.*, Molecules, 6, 353 (2001), R.N. Warrenner *et al.*, Molecules, 6,194 (2001) ou I. Fleming *et al.*, J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1, 2645 (1998). Os solventes apróticos adequados para este passo incluem acetato de etilo, diclorometano, acetona, THF e dimetoxietano. As temperaturas reacionais variam desde a temperatura ambiente até 100 °C, preferencialmente 40 - 80 °C.

A redução selectiva subsequente do grupo nitro num composto de fórmula (B) para originar um amino-benzonorbornadieno de fórmula (C) requer condições moderadas [por exemplo, quer zinco metálico na presença de cloreto de amónio, ou

amalgama de alumínio]. Ambos os métodos funcionam em solventes próticos tais como etanol, água ou suas misturas. Alternativamente um composto de fórmula (C) poderá também ser obtido a partir de um composto de fórmula (B) por redução catalítica com hidrogénio com um catalisador de 5 % de Pt/C modificado a pressão elevada (~10 bar) e temperatura elevada (~100 °C) em tolueno - água. A redução catalítica sob condições padrão (por exemplo 5 % de Pd/C ou 5 % de Ra/Ni ou 5 % de Rh/C) num solvente [tal como metanol, etanol, THF ou acetato de etilo] reduz ambos o grupo nitro- e a ligação dupla para prover um benzonorborneno de fórmula (D). As condições reaccionais preferidas são a temperatura ambiente e a pressão normal.

Esquema 4



Alguns dos compostos de fórmulas (B), (C) e (D) são descritos na literatura [ver, por exemplo, L. A. Paquette *et al.*, J. Amer. Chem Soc. 99, 3734 (1977); D. Gravel *et al.*, Canad. J. Chem. 69, 1193 (1991); T. Nishiyama *et al.*, Rikagaku-hen, 28, 37 (2000); H. Plieninger *et al.*, Chem. Ber. 109, 2121 (1976); e A. J. Kirby *et al.*, J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 1997, 1081].

Novos materiais de partida de fórmulas (C) ou (D) poderão ser sintetizados por analogia com o esquema 4 ou de acordo com a literatura citada acima.

Surpreendentemente, foi agora descoberto que os novos compostos de fórmula (I) possuem, para fins práticos, um espectro muito vantajoso de actividades para proteger as plantas contra doenças que são provocadas por fungos assim como por bactérias e vírus.

Os compostos de fórmula (I) podem ser utilizados no sector agrícola e áreas relacionadas de utilização como componentes activos para controlar as pestes de plantas. Os novos compostos são notáveis devido à actividade excelente a reduzidas taxas de aplicação, por serem bem tolerados por plantas e por serem ambientalmente seguros. Possuem propriedades curativas, preventivas e sistémicas muito úteis e são utilizados para proteger numerosas plantas cultivadas. Os compostos de fórmula I podem ser utilizados para inibir ou destruir as pestes que ocorrem em plantas ou partes de plantas (frutos, flores, folhas, estames, tubérculos, raízes) de diferente culturas de plantas úteis, enquanto que ao mesmo tempo protegem também aquelas partes das plantas que crescem mais tarde e.g. a partir de microorganismos fitopatogénicos.

É também possível utilizar os compostos de fórmula (I) como agentes curativos para o tratamento de material de propagação na planta, em particular de sementes (frutos, tubérculos, grãos) e multiplicação por estacas (e.g. arroz), para a protecção contra infecções fúngicas assim como contra fungos fitopatogénicos que ocorrem no solo.

Além disso os compostos de acordo com a presente invenção poderão ser utilizados para controlar os fungos em áreas relacionadas, por exemplo na protecção de materiais técnicos, incluindo madeira armazenagem de alimentos, em gestão de higiene, etc.

Os compostos de fórmula (I) são, por exemplo, efectivos contra os fungos fitopatogénicos das classes seguintes: Fungi imperfecti (e.g. Podridão cinzenta, Pyricularia, Helminthosporium, Fusarium, Septoria, Cercospora e Alternaria) e Basidiomycetes (e.g. Rhizoctonia, Hemileia, Puccinia). Adicionalmente, são também efectivos contra as classes Ascomycetes (e.g. Venturia e Erysiphe, Podosphaera, Monilinia, Uncinula) e das classes Oomycetes (e.g. Phytophthora, Pythium, Plasmopara). Foi observada uma actividade excelente contra oídio (Erysiphe spp.). Além disso, os novos compostos de fórmula I são efectivos contra bactérias e vírus fitopatogénicos (e.g. contra Xanthomonas spp, Pseudomonas spp, Erwinia amylovora assim como contra o vírus do mosaico do tabaco).

No âmbito da presente invenção, as culturas alvo a ser protegidas compreendem tipicamente as seguintes espécies de plantas: cereal (trigo, cevada, centeio, aveia, arroz, milho, sorgo e espécies relacionadas); beterraba (beterraba sacarina e beterraba forrageira); batatas, drupas e frutos doces (maçãs, peras, ameixas, pêssegos, amêndoas, cerejas, morangos, framboesas e amoras); plantas leguminosas (feijões, lentilhas, ervilhas, grãos de soja); plantas oleosas (colza, mostarda, papoila, azeitonas, girassóis, coco, plantas de óleo de rícino, grãos de cacau, amendoim); plantas de pepino (abóboras, pepino, melões); plantas de fibra (algodão, linho, cânhamo, juta); frutos citrinos

(laranjas, limões, toranja, tangerinas); vegetais (espinafre, alface, espargos, couves, cenouras, cebolas, tomates, batatas, pimentão); lauráceas (abacate, canela, cânfora) ou plantas tais como tabaco, nozes, café, beringelas, cana de açúcar, chá, pimenta, vinha, lúpulo, bananas e plantas de borracha natural, assim como ornamentais.

Os compostos de fórmula (I) são utilizados na forma não modificada ou, preferencialmente, juntamente com os adjuvantes convencionalmente empregues na técnica de formulação. Para este fim são convenientemente formulados de um modo conhecido em concentrados emulsionáveis, pastas revestíveis, soluções directamente aspersíveis ou diluíveis, emulsões diluídas, pós molháveis, pós solúveis, poeiras, granulados, e também encapsulações e.g. em substâncias poliméricas. Como com o tipo das composições, os métodos de aplicação, tais como aspersão, atomização, polvilhamento, espalhamento, revestimento ou vazamento, são escolhidos de acordo com os objectivos pretendidos e as circunstâncias prevalecentes. As composições poderão também conter adjuvantes adicionais tais como estabilizantes, anti-espumas, reguladores de viscosidade, aglutinantes ou agentes de adesividade assim como fertilizantes, doadores de micronutrientes ou outras formulações para se obterem efeitos especiais.

Os veículos e adjuvantes adequados podem ser sólidos ou líquidos e são substâncias úteis na tecnologia de formulação, e.g. substâncias minerais naturais ou regeneradas, solventes, dispersantes, agentes de humificação, agentes de adesividade, espessantes,

aglutinantes ou fertilizantes. Tais veículos são por exemplo descritos em WO97/33890.

Os compostos de fórmula (I) são normalmente utilizados na forma de composições e podem ser aplicados à área de cultura ou planta a serem tratadas, simultaneamente ou em sucessão com compostos adicionais. Estes compostos adicionais podem ser e.g. fertilizantes ou micronutrientes doadores ou outras preparações que influenciam o crescimento de plantas. Podem também ser herbicidas selectivos assim como insecticidas, fungicidas, bactericidas, nematocidas, moluscicidas ou misturas de várias destas preparações, se desejado juntamente com veículos adicionais, tensioactivos ou adjuvantes promotores de aplicação usualmente empregues na técnica de formulação.

Os compostos de fórmula (I) podem ser misturados com outros fungicidas, resultando nalguns casos em actividades sinérgicas inesperadas. Os componentes de mistura que são particularmente preferidos são azoles, tais como azaconazole, BAY 14120, bitertanol, bromuconazole, ciproconazole, difenoconazole, diniconazole, epoxiconazole, fenbuconazole, fluquinconazole, flusilazole, flutriafol, hexaconazole, imazalilo, imibenconazole, ipconazole, metconazole, miclobutanilo, pefurazoato, penconazole, pirifenox, procloraz, propiconazole, simeconazole, tebuconazole, tetraconazole, triadimefão, triadimenol, triflumizole, triticonazole; pirimidinilo carbinole, tal como ancimidol, fenarimol, nuarimol; 2-amino-pirimidinas, tais como bupirimato, dimetirimol, etirimol; morfolinas, tais como dodemorfe, fenpropidina, fenpropimorfe, espiroxamina, tridemorfe; anilinopirimidinas, tais como ciprodinilo, mepanipirim, pirimetanilo; pirroles, tais como

fenpiclonilo, fludioxonilo; fenilamidas, tais como benalaxilo, furalaxilo, metalaxilo, R-metalaxilo, ofurace, oxadixilo; benzimidazoles, tais como benomilo, carbendazim, debacarb, fuberidazole, tiabendazole; dicarboximidas, tais como clozolinato, diclozolina, iprodiona, miclozolina, procimidona, vinclozolina; carboxamidas, tais como carboxina, fenfuram, flutolanilo, mepronilo, oxicarboxina, tifluzamida; guanidinas, tais como guazatina, dodina, iminoctadina; estrobilurinas, tais como azoxistrobina, cresoxim-metilo, metominostrobin, SSF-129, trifloxistrobina, picoxistrobina, BAS 500F (nome proposto piraclostrobina), BAS 520; ditiocarbamatos, tais como ferbam, mancozebe, maneb, metirame, propinebe, tirame, zinebe, zirame; N-halogenometiltiotetrahidroftalimidas, tal como captafol, captan, diclofluanida, fluoromidas, folpet, tolifluanida; compostos de Cu, tais como mistura de Bordeaux, hidróxido de cobre, oxicloreto de cobre, sulfato de cobre, óxido cuproso, mancozebe, oxina-cobre; derivados de nitrofenol, tal como dinocap, nitrofenol-isopropilo; organo-p-derivados, tais como edifenfos, iprobenfos, isoprotiolano, fosdifenol, pirazofos, tolclofos-metilo; vários outros, tal como acibenzolar-S-metilo, anilazina, benthiavalicarb, blastidicid-S, quinometionato, cloroneb, clorotalonilo, ciflufenamida, cimoxanilo, diclona, diclomezina, diclorano, dietofencarbe, dimetomorfe, SYP-LI90 (nome proposto: flumorf), ditianão, etaboxame, etridiazole, famoxadona, fenamidona, fenoxanilo, fentin, ferimzona, fluazinam, flusulfamida, fenhexamida, fosetil-alumínio, himexazol, iprovalicarbe, IKF-916 (ciazofamida), casugamicina, metassulfocarbe, metrafenona, nicobifen, pencycurão, ftalido, polyoxinas, probenazole, propamocarbe, piroquilão, quinoxifeno, quintozeno, enxofre, triazoxida, triciclazole, triforina, validamicina, zoxamida (RH7281).

Um método preferido de aplicar um composto de fórmula (I), ou uma composição agroquímica que contém pelo menos um dos referidos compostos, é a aplicação foliar. A frequência de aplicação e a taxa de aplicação irá depender do risco de infestação pelo patógeno correspondente. No entanto, os compostos de fórmula I podem também penetrar uma planta através das raízes através do solo (acção sistémica) por humedificação do local da planta com uma formulação líquida, ou por aplicação dos compostos na forma sólida ao solo, por exemplo na forma granular (aplicação no solo). Em culturas de arroz em água tais granulados podem ser aplicados ao campo de arroz inundado. Os compostos de fórmula I poderão também ser aplicados a sementes (revestimento) através da impregnação das sementes ou tubérculos quer com uma formulação líquida do fungicida ou do seu revestimento com uma formulação sólida.

A formulação [que é, uma composição contendo o composto de fórmula (I)] e, se desejado, um adjuvante sólido ou líquido, é preparada de um modo conhecido, tipicamente através da mistura íntima e/ou moagem do composto com extensores, por exemplo solventes, veículos sólidos e, opcionalmente, compostos de superfície activa (tensioactivos).

As formulações agroquímicas irão usualmente conter desde 0,1 até 99 % em peso, preferencialmente desde 0,1 até 95 em peso, do composto de fórmula I, 99,9 até 1 % em peso, preferencialmente 99,8 até 5 % em peso, de um adjuvante sólido ou líquido, e desde 0 até 25 % em peso, preferencialmente desde 0,1 até 25 % em peso, de um tensioactivo.

As taxas de aplicação vantajosas são normalmente desde 5 g até 2 kg de componente activo (a.i.) por hectare (ha), preferencialmente desde 10 g até 1 kg a.i./ha, principalmente preferencialmente desde 20 g até 600 g a.i./ha. Quando utilizado como agente de humidificação de semente, as dosagens convenientes são desde 10 mg até 1 g de substância activa por kg de sementes.

Enquanto que é preferido formular produtos comerciais como concentrados, o utilizador final irá normalmente usar formulações diluídas.

Os Exemplos não limitativos seguintes ilustram a invenção descrita acima em mais detalhe.

EXEMPLO 1 (Exemplo de Referência)

Este Exemplo ilustra a preparação do Composto No. 2.01.

Uma solução de 1,4-dimetil-5-nitro-1,4-dihidro-1,4-epoxinaftaleno (5,49 g; 25,27 mmol) (ver T. Nishiyama *et al.*, Rikagaku-hen, 28, 37-43 (2000)) em THF (55 mL) foi hidrogenada na presença de RaNi (1,1 g) à temperatura ambiente. A absorção de hidrogénio foi de 2,23 litros (97 %) após 18 horas. Após remoção por filtração do catalisador o filtrado foi evaporado e tomado em éter, lavado com uma solução aquosa de NaHCO₃ e seco (NaSO₄) para originar 4,60 g de produto bruto como um óleo. A trituração com hexano e um vestígio de éter originou um total de 4,51 g (94 %) de produto cristalino avermelhado.

EXEMPLO 2 (Exemplo de Referência)

Este Exemplo ilustra a preparação do Composto No. 1.01.

A 1,4-dimetil-5-nitro-1,4-dihidro-1,4-epoxinaftaleno (4,22 g; 19,43 mmol) (ver Exemplo 1) em etanol (60 mL) foi adicionada uma solução de cloreto de amônio (2,08 g) em água (5,2 mL) a 47 °C. Sob agitação vigorosa, foi adicionado zinco em pó (9,10 g; 0,14 mol) em porções durante um período de 5 minutos. A suspensão foi aquecida a refluxo durante 5 horas seguida por filtração através de Hyflo™ para originar um filtrado amarelo transparente. Após evaporação o produto bruto rendeu 4,57 g de um óleo viscoso. A cromatografia em coluna em sílica gel em acetato de etilo - hexano (1:4) originou 1,24 g (34 %) do produto desejado como cristais acastanhados.

EXEMPLO 3 (Exemplo de Referência)

Este Exemplo ilustra a preparação do Composto No. 2.16.

Uma solução de 5-nitrobenzonorbornadieno (L.A. Paquette *et al.*, J. Amer. Chem. Soc. 99, 3734 (1977)) (2,52 g; 13,46 mmol) em metanol (100 mL) foi hidrogenada na presença de 5 % Pd/C (0,5 g) à temperatura ambiente. A absorção de H₂ foi de 1,14 litros (95 %) após 11 minutos. A solução foi separada do catalisador por filtração e evaporada para originar o produto puro (1,86 g; 87 %) como um óleo amarelo, que solidificou por repouso à temperatura ambiente (p.f. 63 - 64 °C).

EXEMPLO 4 (Exemplo de Referência)

Este Exemplo ilustra a preparação do Composto No. 3.023.

Uma solução de ácido 1-metil-4-trifluorometil-1H-pirrole-3-carboxílico (1,02 g; 5,3 mmol) e uma quantidade catalítica de DMF (3 gotas) em diclorometano (20 mL) foi sujeito a reacção sob arrefecimento em gelo inicial com cloreto de oxalilo (0,805 g; 1,2 eq.) durante 2 horas. Durante 15 minutos, a mistura reaccional foi em seguida adicionada gota a gota a uma solução de 1,8-dimetil-11-oxa-triciclo [6.2.1.0*2,7*]undeca-2,4,6-trien-3-ilamina (Composto No. 2,01; ver preparação acima) (1,0 g; 5,284 mmol) e trietilamina (1,07 g; 10,57 mmol) em 20 mL de diclorometano sob arrefecimento (3 - 7 °C) com agitação subsequente à temperatura ambiente durante 3¼ horas. A mistura reaccional foi em seguida colocada em água gelada e extraída com diclorometano para originar 2,26 g de produto bruto. A purificação em sílica gel em acetato de etilo - hexano (1:1) seguida por trituração com éter - hexano providenciou um sólido (1,14 g; 59 %) como uma mistura de isómeros.

EXEMPLO 5 (Exemplo de Referência)

Este Exemplo ilustra a preparação do Composto No.3.024.

Uma suspensão de NaH (0,107 g: dispersão em óleo a 60 %, ~2,7 mmol) em DMF (5 mL) foi sujeita a reacção com uma solução de (1,8-dimetil-11-oxa-triciclo[6.2.1.0*2,7*]undeca-2,4,6-trien-3-il)-amida do ácido 1-metil-4-trifluorometil-1H-pirrole-3-carboxílico (Composto No. 3.023; ver preparação acima) (0,65 g; 1,784 mmol) em 5 mL de DMF a 10 - 15 °C durante 30 minutos. Foi adicionado 3-bromo-1-propino (0,276 g; 2,32 mmol) e a mistura foi sujeita a reacção adicionalmente durante a noite à temperatura ambiente. Após processamento aquoso com

água gelada e acetato de etilo e purificação em sílica gel foram obtidas 0,36 g (50 %) do produto desejado como uma mistura de isómeros.

EXEMPLOS DE FORMULAÇÃO PARA OS COMPOSTOS DE FÓRMULA (I)

Os procedimentos de trabalho para preparar formulações dos compostos de fórmula I tais como Concentrados Emulsionáveis, Soluções, Grânulos, Poeiras e Pós Molháveis são descritos em WO97/33890.

EXEMPLOS BIOLÓGICOS: ACÇÕES FUNGICIDAS

Exemplo B-1: Acção contra Puccinia recondita / trigo (ferrugem castanha no trigo)

As plantas de trigo cv. Arina com idade de 1 semana são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Um dia após a aplicação, as plantas de trigo são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (1×10^5 uredosporos/ mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 2 dias a 20 °C e 95 % de humidade relativa as plantas são mantidas numa estufa durante 8 dias a 20 °C e 60 % de humidade relativa. A incidência de doença é avaliada 10 dias após a inoculação.

A infestação é prevenida virtualmente completamente (0 - 5 % de infestação) com cada um dos Compostos 3.048, 14.048, 29.048, 15.048, 20.048, 3.028, 22.048, 21.048, 15.023, 15.027, 15.028, 3.035, 14.035, 15.035, 15.052, 14.210, 15.210, 14.202 e 15.202.

Exemplo B-2: Acção contra *Podosphaera leucotricha* / maçã (Míldio pulverulento da maçã)

As plântulas de maçãs cv. McIntosh com idade de 5 semanas são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Um dia após a aplicação, as plantas de macieira são inoculadas por agitação das plantas infectadas com míldio pulverulento da maçã em cima das plantas de teste. Após um período de incubação de 12 dias a 22 °C e 60 % de humidade relativa sob um regime de luz de 14/10 horas (luz/escuro) é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 3.048, 14.048, 15.048, 22.048, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.023 exhibe uma forte eficácia (< 20 % de infestação).

Exemplo B-3: Acção contra *Venturia inaequalis* / maçã (Sarna da maçã)

As plântulas de maçãs cv. McIntosh com idade de 4 semanas são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Um dia após a aplicação, as plantas de macieira são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (4×10^5 conídios/mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 4 dias a 21 °C e 95 % de humidade relativa as plantas são colocadas numa estufa durante 4 dias a 21 °C e 60 % de humidade relativa. Após outro período de incubação de 4 dias a 21 °C e 95 % de humidade relativa é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 3.048, 14.048, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.048 exibe uma forte eficácia (< 20 % de infestação).

Exemplo B-4: Acção contra Erysife graminis / cevada (Míldio pulverulento da cevada)

As plantas de cevada cv. Regina com idade de 1 semana são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Um dia após a aplicação, as plantas de cevada são inoculadas por agitação das plantas infectadas em cima das plantas de teste. Após um período de incubação de 6 dias numa estufa a 20 °C / 18 °C (dia/noite) e 60 % de humidade relativa é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 3.023, 14.023, 3.048, 14.048, 15.048, 3.027, 3.028, 15.023, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.027 exibe uma forte eficácia (<20 % de infestação).

Exemplo B-5: Acção contra Podridão cinzenta cinérea / uva (Podridão cinzenta em uvas)

As plântulas de uva cv. Gutedel com idade de 5 semanas são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Dois dias após a aplicação, as videiras são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (1×10^6 conídios/ mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 4 dias numa estufa a 21°C e 95 % de humidade relativa é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 14.048, 15.048, 3.028, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.027 exhibe boa actividade neste teste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-6: Acção contra Podridão cinzenta cinérea / tomate (Podridão cinzenta em tomates)

As tomateiras cv. Roter Gnom com a idade de 4 semanas são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Dois dias após a aplicação, as tomateiras são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (1×10^5 conídios/ mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 4 dias numa câmara de crescimento a 20°C e 95 % de humidade relativa é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 3.048, 3.052, 14.052, 15.048, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.023 exhibe boa eficácia (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-7: Acção contra Septoria nodorum / trigo (Manchas na folha de Septoria em trigo)

As plantas de trigo cv. Arina com a idade de 1 semana são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Um dia após a aplicação, as plantas de trigo são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (5×10^5 conídios / mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 1 dia a 20 °C e 95 % de humidade relativa as plantas são mantidas numa estufa durante 10 dias a 20 °C e 60 % de humidade relativa. A incidência de doença é avaliada 10 dias após a inoculação.

Cada um dos compostos 3.002, 3.048, 14.048, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.048 exibe boa actividade neste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-8: Acção contra Helminthosporium teres / cevada
(mancha reticular na cevada)

As plantas de cevada cv. Regina com idade de 1 semana são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Dois dias após a aplicação, as plantas de cevada são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (3×10^4 conídios / mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 4 dias numa estufa a 20 °C e 95 % de humidade relativa é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 3.023, 14.023, 3.048, 14.048, 15.048, 3.027, 15.023, 15.027, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.028 exibe boa actividade neste teste (< 20 % de incidência de doença).

Exemplo B-9: Acção contra Alternaria solani / tomate
(Ferrugem precoce em tomates)

As tomateiras cv. Roter Gnom com a idade de 4 semanas são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Dois dias após a aplicação, as tomateiras são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (2×10^5 conídios/ mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 3 dias numa câmara de crescimento a 20°C e 95 % de humidade relativa é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 3.023, 14.023, 3.048, 14.048, 14.210, 15.210, 14.202, 15.202 e 15.048 exibe boa actividade neste teste (< 20 % de incidência de doença).

Exemplo B-10: Acção contra Uncinula necator/uva (Míldio pulverulento nas uvas)

As plântulas de uva cv. Gutedel com idade de 5 semanas são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Um dia após a aplicação, as videiras são inoculadas por agitação das plantas infectadas com míldio pulverulento em cima das plantas de teste. Após um período de incubação de 7 dias a 26 °C e 60 % de humidade relativa sob um regime de luz 14/10 horas (luz/escuro) é avaliada a incidência de doença.

Cada um dos compostos 14.048, 15.048, 14.028 e 15.023 exibe boa actividade neste teste (< 20 de incidência de doença).

Exemplo B-11: Acção Sistémica contra Erysiphe graminis / cevada (Míldio pulverulento da cevada) (Teste de Bolsa)

O composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) é aplicado no interior de uma bolsa que foi previamente equipada com um papel de filtro. Após a aplicação as sementes de cevada (cv. Express) são semeadas na prega superior do papel de filtro. As bolsas preparadas são em seguida incubadas a 23 °C/ 18 °C (dia/noite) e 80 % de humidade relativa. Uma semana após a sementeira as plantas de cevada foram inoculadas por agitação das plantas infectadas com míldio pulverulento em cima das plantas de teste. Após um período de incubação período de 6 dias é

avaliada a incidência de doença. A eficácia de cada composto de teste é utilizada como um indicador para a actividade sistémica.

Cada um dos compostos 14.024, 3.002, 3.048, 29.048, 3.027, 22.048, 21.048, 15.023, 15.027, 15.028 e 15.035 exhibe boa actividade neste teste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-12: Acção contra Fusarium culmorum / trigo
(ferrugem por furasium no trigo) (Teste de Bolsa)

Uma suspensão de conídios de *F. culmorum* (7×10^5 conídios / mL) é misturada com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo). A mistura é aplicada no interior de uma bolsa que foi previamente equipada com um papel de filtro. Após a aplicação as sementes de trigo (cv. Orestis) são semeadas na prega superior do papel de filtro. As bolsas preparadas são em seguida 11 dias a ca. 10 - 18° C e 100% de humidade relativa com um período de luz diária de 14 horas. A estimativa é feita através da avaliação do grau de ocorrência de doença na forma de lesões castanhas nas raízes.

Cada um dos compostos 14.024, 15.048, 20.048, 14.027, 24.048 e 3.035 exhibe boa actividade neste teste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-13: Acção contra Gaeumannomyces graminis / trigo
(podridão da raiz de trigo) (Teste de Bolsa)

Uma quantidade definida de micélio de *G. graminis* é misturado com água. O composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) é adicionado à suspensão de micélio.

A mistura é aplicada no interior de uma bolsa que foi previamente equipada com um papel de filtro. Após a aplicação as sementes de trigo (cv. Orestis) são semeadas na prega superior do papel de filtro. As bolsas preparadas são em seguida incubadas durante 14 dias a 18 °C / 16 °C (dia/noite) e 80 % de humidade relativa com um período de luz diário de 14 horas. A estimativa é feita através da avaliação do grau de acastanhamento da raiz.

Cada um dos compostos 15.048, 20.048, 21.048, 15.028 e 15.052 exhibe boa actividade neste teste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-14: Acção contra Puccinia recondita / trigo
(ferrugem castanha no trigo) (Teste de Bolsa)

O composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) é aplicado no interior de uma bolsa que foi previamente equipada com um papel de filtro. Após a aplicação as sementes de trigo (cv. Arina) são semeadas na prega superior do papel de filtro. As bolsas preparadas são em seguida incubadas a 23 °C / 18 °C (dia/noite) e 80 % de humidade relativa. Uma semana após a sementeira, as plantas de trigo foram inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (1×10^5 uredosporos /mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 1 dia a 23 °C e 95 % de humidade relativa as plantas foram mantidas durante 9 dias a 20 °C / 18 °C (dia/noite) e 80 % de humidade relativa. A incidência de doença foi avaliada 10 dias após a inoculação. A eficácia de cada composto de teste é utilizada como um indicador para a actividade sistémica.

Cada um dos compostos 14.024, 3.002, 14.002, 15.048, 20.048, 3.027, 22.048, 15.023, 15.027, 15.028, 3.035, 14.035 e 15.035 exibe boa actividade neste teste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-15: Acção contra Rhizoctonia solani / arroz
(queima da bainha do arroz) (Teste de Bolsa)

Uma quantidade definida de micélio de *R. solani* é misturada com água. O composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) é adicionado à suspensão de micélio. A mistura é aplicada no interior de uma bolsa que foi previamente equipada com um papel de filtro. Após a aplicação as sementes de arroz (cv. Koshihikari) são semeadas na prega superior do papel de filtro. As bolsas preparadas são em seguida incubadas durante 10 dias a 23 °C / 21 °C (dia/noite) e 100 % de humidade relativa com um período de luz diário de 14 horas. A estimativa é feita através da avaliação do grau de ocorrência de doença na forma de lesões castanhas nas raízes.

Cada um dos compostos 3.048, 14.048, 29.048, 3.052, 29.052, 14.052, 15.048, 20.048, 3.027, 14.028, 22.048, 21.048, 4.048, 15.023, 3.035, 14.035 e 15.035 exibe boa actividade neste teste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-16: Acção contra Septoria nodorum / trigo
(Manchas na folha de Septoria em trigo) (Teste de Bolsa)

O composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) é aplicado numa bolsa que foi previamente equipada com um papel de filtro. Após a aplicação, as sementes de trigo (cv. Arina) foram semeadas na prega superior do papel de

filtro. As bolsas preparadas foram em seguida incubadas a 23 °C / 18 °C (dia/noite) e 80 % de humidade relativa. Uma semana após a sementeira, as plantas de trigo foram inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (5×10^5 conídios /mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 1 dia a 23 °C e 95 % de humidade relativa as plantas foram mantidas durante 9 dias a 20 °C / 18 °C (dia/noite) e 80 % de humidade relativa. A incidência de doença foi avaliada 8 dias após a inoculação. A eficácia de cada composto de teste é utilizada como um indicador para a actividade sistémica.

Cada um dos compostos 3.048, 29.048, 15.048, 14.027, 15.023 e 15.027 exhibe boa actividade neste teste (< 50 % de incidência de doença).

Exemplo B-17: Acção contra Septoria tritici / trigo
(Manchas na folha de Septoria em trigo)

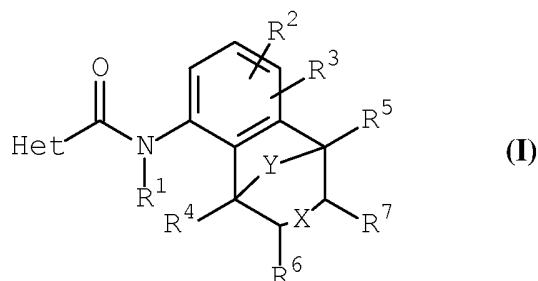
As plantas trigo cv. Ribe com a idade de 2 semanas são tratadas com o composto de teste formulado (0,02 % de componente activo) numa câmara de aspersão. Um dia após a aplicação, as plantas de trigo são inoculadas por aspersão de uma suspensão de esporos (10×10^5 conídios / mL) nas plantas de teste. Após um período de incubação de 1 dia a 23 °C e 95 % de humidade relativa, as plantas são mantidas durante 16 dias numa estufa a 23 °C e 60 % de humidade relativa. A incidência de doença é avaliada 18 dias após a inoculação.

Cada um dos compostos 14.202 ou 14.210 exhibe boa actividade neste teste (< 20 % de incidência de doença).

Lisboa, 4 de Junho de 2010

REIVINDICAÇÕES

1. Um composto de fórmula (I):



em que Het é pirrolilo ou pirazolilo sendo substituído por grupos R^8 , R^9 e R^{10} ;

X é uma ligação simples ou dupla;

Y é $(CR^{12}R^{13})(CR^{14}R^{15})_m(CR^{16}R^{17})_n$;

m é 0 ou 1;

n é 0 ou 1;

R^1 é hidrogénio;

R^2 e R^3 são cada um, independentemente, hidrogénio halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} alcoxi ou C_{1-4} halogenoalcoxi; R^4 , R^5 , R^6 e R^7 são cada um, independentemente, hidrogénio, halogéneo, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo, C_{1-4} alcoxi, C_{1-4} halogenoalcoxi, C_{1-4} alquiltio, C_{1-4} halogenoalquiltio, hidroximetilo, C_{1-4} alcoximetilo, $C(O)CH_3$ ou $C(O)OCH_3$;

R^8 , R^9 e R^{10} são cada um, independentemente, hidrogénio, halogéneo, ciano, nitro, C_{1-4} alquilo, C_{1-4} halogenoalquilo, C_{1-4} alcoxi(C_{1-4})alcileno ou C_{1-4} halogenoalcoxi(C_{1-4})alcileno, na condição de que pelo menos um de R^8 , R^9 e R^{10} não é hidrogénio;

R^{12} e R^{13} são cada um, independentemente, hidrogénio, halogéneo, C_{1-5} alquilo, C_{1-3} alcoxi, CH_2OH , $CH(O)$, C_{3-6} cicloalquilo, $CH_2O-C(=O)CH_3$, CH_2-C_{3-6} cicloalquilo ou benzilo;

ou R^{12} e R^{13} juntamente com o átomo de carbono ao qual estão ligados formam o grupo $C=O$ ou um anel carbocíclico de 3-5 membros;

ou R^{12} e R^{13} em conjunto formam C_{1-5} alcilideno ou C_{3-6} cicloalcilideno; e

R^{14} , R^{15} , R^{16} e R^{17} são cada um, independentemente, H ou CH_3 .

2. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 em que X é uma simples ligação.

3. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 em que R^8 , R^9 e R^{10} são cada um, independentemente, hidrogénio, cloro, fluoro, metilo, CF_3 , CHF_2 ou CH_2F , na condição de que pelo menos um de R^8 , R^9 e R^{10} não seja hidrogénio.

4. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 em que n é 0 e m é 0.

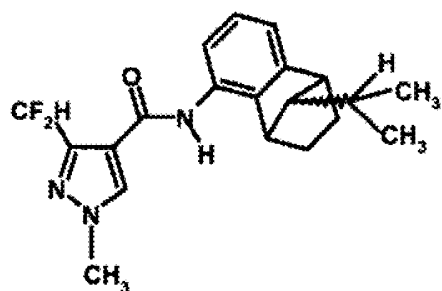
5. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 4 em que R^{12} e R^{13} são cada um, independentemente, hidrogénio, C_{1-4} alquilo ou C_{1-4} alcoxi.

6. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 em que R^2 é hidrogénio, halogéneo ou C_{1-4} alquilo.

7. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 em que R^3 é hidrogénio ou metilo.

8. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 em que Het é pirazolilo.

9. (9-Isopropil-1,2,3,4-tetrahidro-1,4-metano-naftalen-5-il)-amida do ácido 3-difluorometil-1-metil-1H-pirazole-4-carboxílico possuindo a fórmula:



10. Um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 em que Het é pirrolilo.

11. Uma composição para controlar microorganismos e prevenir ataque e infestação de plantas com eles, em que o componente activo é um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 juntamente com um veículo adequado.

12. Um método de controlar ou prevenir a infestação de plantas cultivadas por microorganismos fitopatogénicos por aplicação foliar ou ao solo de um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1.

13. Um método de controlar ou prevenir a infestação de plantas de arroz cultivadas em água por microorganismos fitopatogénicos através da aplicação de um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 ao campo de arroz inundado.

14. Um método de controlar ou prevenir a infestação de plantas cultivadas por microorganismos fitopatogénicos através da aplicação de um composto de fórmula (I) como reivindicado na reivindicação 1 às suas sementes.

Lisboa, 4 de Junho de 2010