



GRAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU K AUTORSKÉMU OSVEDČENIU

263578
(11) (B1)

(51) Int. Cl.⁴
C 07 D 277/68

{22} Prihlášené 30 10 87
{21} {PV 7785-87.C}

{40} Zverejnené 16 09 88

{45} Vydané 15 07 89

(75)
Autor vynálezu

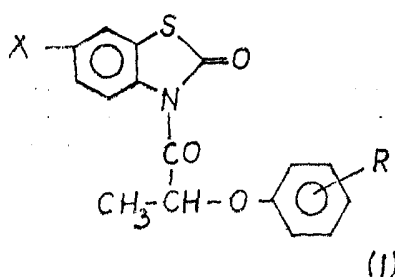
LÁCOVÁ MARGITA doc. RNDr. CSc., SIDÓOVÁ EVA ing. CSc.,
VARKONDA ŠTEFAN RNDr. CSc., HÝBLOVÁ OLGA prom. biol.,
HENSELOVÁ MÁRIA RNDr. CSc., KONEČNÝ VÁCLAV RNDr. CSc.,
BRATISLAVA

(54) 6-x-3-aryloxy(metyl)acetyl-2-benzotiazolinóny

1

2

Riešenie vynálezu sa týka 6-X-3-aryloxy-
(metyl)acetyl-2-benzotiazolinónov všeobec-
ného vzorca I



v ktorom

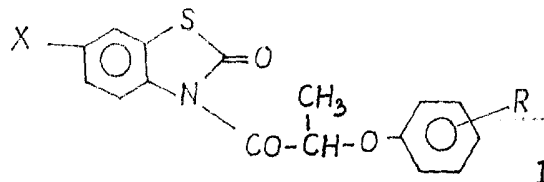
X je H, Br; R je H, CH₃, jeden alebo dva a-
tómy chlóru. Spôsob výroby 6-X-3-aryloxy-
(metyl)acetyl-2-benzotiazolinónov všeobecné-
ho vzorca I je založený na acylácii 2-benzo-
tiazolinónu alebo jeho bróm derivátu chlo-
ridmi kyselín ALFA-aryloxypropionových za
prítomnosti bázy pri teplote 40 až 70 °C.
Zlúčeniny sa vyznačujú herbicídnu účin-
nosťou.

Vynález sa týka 6-X-3-aryloxy(metyl)acetyl-2-benzotiazolinónov a spôsobu ich prípravy. Tieto zlúčeniny majú herbicídne účinky.

Za zlúčenín benzotiazolu sú známe pesticídne prípravky ako napr. benzotiazuron a metabenzotiazuron využívané v poľnohospodárskej praxi. Aj 3-halogénalkyl, 3-alkyl alebo 3-acetyl deriváty 2-benzotiazolinónu sa vyznačujú širokým spektrom účinku a to najmä herbicídnym, morforegulačným a fun-

gicídnym účinkom (D'Amico, J. J.: Eur. Pat. Appl. 2 932; D'Amico, J. J.: USA pat. 4 187 098, D'Amico, J. J.: USA pat. 576 512, Neda, I.: Jap. pat. 92 956 (1979); Jap. pat. 105 605 (1980) Čs. pat. 172 118 (1974); Lácová M., Sidlová E., Konečný V.: Čs. aut. osv. 246 247 (1986). Pritom je známe, že východiskový 2-benzotiazolinón a jeho 6-bróm derivát je biologicky neúčinný.

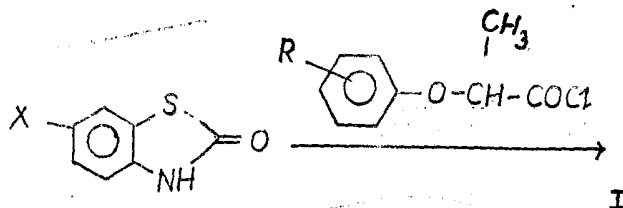
Teraz sa zistili 6-X-3-aryloxy(metyl)acetyl-2-benzotiazolinóny všeobecného vzorca I



v ktorom X znamená vodík alebo bróm a R je vodík, metyl alebo 1 až 2 atómy chlóru.

Súčasne bol zistený spôsob prípravy zlúčenín všeobecného vzorca I acyláciou 2-

-benzotiazolinónu chloridmi kyselín α -aryloxypropionových s výhodou pri teplote 40 až 70 °C v prítomnosti bázy, čo možno znázorniť schémou:



v ktorej substituenty X a R majú už uvedený význam.

U zlúčenín podľa všeobecného vzorca I boli súčasne zistené herbicídne účinky, napríklad 6-bróm-3-[2-metyl-4-chlórfenoxy(metyl)acetyl-2-benzotiazolinón pri preemergentnej aplikácii v dávke 5 kg/ha 100 % inhiboval rast v skleníkových podmienkach a modelových rastlín *Panicum miliaceum*, *Lepidium sativum* a *Sinapis alba*, pri postemergentnej aplikácii v dávke 2,5 kg/ha 100 % inhiboval rast *Lepidium sativum* a *Sinapis alba* a na 80 % inhiboval rast *Fagopyrum vulgare*.

Nasledujúce príklady ilustrujú, ale neobmedzujú predmet vynálezu.

Príklad 1

Spôsob prípravy 6-X-3-aryloxy(metyl)acetyl-2-benzotiazolinónov

Do roztoku 2-benzotiazolinónu, resp. 6-bróm-2-benzotiazolinónu (50 mmólov) v dimetylformamide, resp. v acetóne, resp. v ich zmesi (20 cm³) sa pridá chlorid kyseliny α -aryloxypropionovej (60 mmólov) a mieša sa asi 10 minút. Potom sa prikvapká pyridín alebo trietylamin (60 mmólov) a mieša sa pri teplote 40 až 70 °C asi 1 hodinu. Po ochladení sa acetón môže oddestilovať, destilačný zvyšok sa vyleje do vody, zneutralizuje (NaHCO₃, Na₂CO₃ a pod.). Vylúčená zrazenina sa odsaje a prekryštalizuje z etanolu, resp. zo zmesi etanol-dimetylformamid, alebo etanoldimetylsulfoxid.

Podľa príkladu 1 boli pripravené nasledujúce zlúčeniny:

a) 3-[4-chlórfenoxy(metyl)acetyl]-2-benzotiazolinón, teplota topenia 108 až 111 °C.

Analýza pre $C_{16}H_{12}ClNO_3S$, $M = 333,8$.

Vypočítané:

57,57 % C, 3,62 % H, 10,62 % Cl,
4,20 % N, 9,61 % S;

Zistené:

57,84 % C, 3,42 % H, 10,46 % Cl,
4,18 % N, 9,33 % S.

b) 3-[2-metyl-4-chlórfenoxy(metyl)acetyl]-2-benzotiazolinón, teplota topenia 90 až 91 °C.

Analýza pre $C_{17}H_{14}ClNO_3S$, $M = 347,8$.

Vypočítané:

58,88 % C, 3,47 % H, 10,19 % Cl,
4,04 % N, 9,24 % S;

Zistené:

58,61 % C, 3,36 % H, 9,98 % Cl,
4,18 % N, 9,59 % S.

c) 3-[2,4-dichlórfenoxy(metyl)acetyl]-2-benzotiazolinón, teplota topenia 84 až 86 °C.

Analýza pre $C_{16}H_{11}Cl_2NO_3S$, $M = 368,2$.

Vypočítané:

50,86 % C, 2,56 % H, 19,25 % Cl,
3,95 % N, 9,05 % S;

Zistené:

51,05 % C, 2,38 % H, 19,08 % Cl,
4,16 % N, 9,24 % S.

d) 6-bróm-3-[2-metyl-4-chlórfenoxy(metyl)acetyl]-2-benzotiazolinón, teplota topenia 179 až 180 °C.

Analýza pre $C_{17}H_{13}BrClNO_3S$, $M = 436,7$:

Vypočítané:

47,85 % C, 3,06 % H, 18,79 % Br,
8,30 % Cl, 3,29 % N, 7,51 % S;

Zistené:

47,61 % C, 3,22 % H, 19,30 % Br,
8,94 % Cl, 3,44 % N, 7,55 % S.

e) 6-bróm-3-[2,4-dichlórfenoxy(metyl)acetyl]-2-benzotiazolinón, teplota topenia 225 až 227 °C.

Analýza pre $C_{16}H_{10}BrCl_2NO_3S$, $M = 447,0$:

Vypočítané:

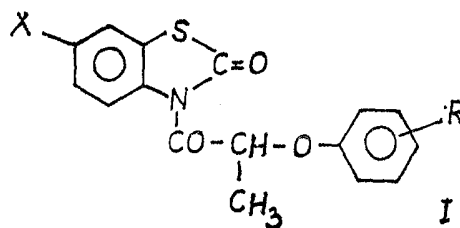
42,99 % C, 2,25 % H, 17,87 % Br,
15,86 % Cl, 3,13 % N, 7,17 % S;

Zistené:

42,84 % C, 2,41 % H, 17,52 % Br,
16,15 % Cl, 3,12 % N, 7,35 % S.

PREDMET VYNÁLEZU

1. 6-X-3-aryloxy(metyl)acetyl-2-benzotiazolinóny všeobecného vzorca I



v ktorom X znamená vodík alebo bróm a R znamená vodík, metyl, 1 alebo 2 atómy chlóru.

2. Spôsob prípravy 6-X-3-aryloxy(metyl)acetyl-2-benzotiazolinónov všeobecného

vzorca I vyznačujúci sa tým, že 2-benzotiazolinón, resp. 6-bróm-2-benzotiazolinón sa acyluje chloridmi kyselín α -aryloxypropionových, za prítomnosti bázy pri teplote 30 až 70 °C.