



ÚŘAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU

K AUTORSKÉMU OSVEDČENIU

216 263

(11) (B1)

(22) Prihlášené 02 01 80

(21) (PV 4-80)

(40) Zverejnené 29 05 81

(45) Vydané 15 05 84

(51) Int. Cl.³

C 07 C 101/02

C 11 D 1/90

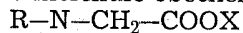
(75)

Autor vynálezu

LŮBKEOVÁ SOŇA prom. farm., MAJER JAROSLAV prof. RNDr. DrSc.,
BRATISLAVA, NOVÁK JAN ing. CSc., RAKOVNÍK

(54) Komplexóny monoamínového typu s hydroxyalkylovou skupinou
v molekule s povrchovoaktívnymi vlastnosťami

Vynález sa týka komplexónov monoamínového typu s hydroxyalkylovou skupinou v molekule obecného vzorca

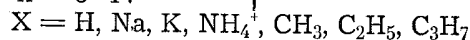
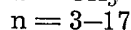
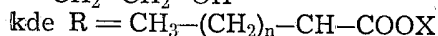


s povrchovoaktívnymi vlastnosťami.

V súčasnosti sú známe 2-amino-(N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) masné kyseliny s uhlíkatým reťazcom do C₃. Tieto látky boli študované viacerými autormi: Djatlova N. M. a kol.: Ž. neorg. chim. 10, 1131 (1965), Schwarzenbach G., Anderegg G., Schneider W., Seen H.: Helv. chim. acta 38, 1147 (1955), Jokl V., Majer J., Mazáčová M.: Chem. zvesti 18, 585 (1964), Chabereck S., Martell A.: J. Am. Chem. Soc. 76, 215 (1954), Majer J., Riečanská E.: Chem. zvesti 22, 15 (1968). Doteraz známe 2-amino-(N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) masné kyseliny nemajú povrchovoaktívne vlastnosti a nemožno ich zaradiť medzi tenzidy. Nevýhody známeho stavu od-

straňujú komplexóny monoamínového typu s hydroxyalkylovou skupinou v molekule, ktoré majú oproti doteraz známym komplexónom povrchovoaktívne vlastnosti pri zachovaní chelatačných vlastností. Látky majú širokú možnosť využitia v praxi.

Podstatou vynálezu sú komplexóny monoamínového typu s hydroxyalkylovou skupinou v molekule obecného vzorca



s povrchovoaktívnymi vlastnosťami.

Prípravené látky sa vyznačujú povrchovoaktívnymi vlastnosťami pri zachovaní chelatačných vlastností. Rozširujú škálu doteraz známych amfotenzidov alkylbetaínového typu a sú široké možnosti ich využitia v praxi.

Príklad 1

2-amino-(N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) laurová kyselina $C_{16}H_{31}NO_5$

2-amino-(N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) laurová kyselina a jej soli bola pripravená spôsobom karboxyalkylácie amínov s halogénkyselinami vo vodnoalkoholickom prostredí pri pH 9 až 11 postupom podľa čs. autorského osvedčenia

Výťažok: 79,5 % teórie.

Totožnosť látky bola potvrdená.

Elementárna analýza:

$C_{16}H_{31}NO_5$

teoret.:

% C = 60,54, % H = 9,84, % N = 4,41

nájdene:

% C = 60,75, % H = 9,96, % N = 4,51

Teplota topenia: 86,5–87 °C

1H – NMR spektrum sodnej soli:

spektrometer Tesla BS 487 A (80 MHz), rozpúšťadlo D_2O , štandard trimetylsilylpropionan sodný – d_4 , δ [ppm]

CH_3 – 0,81 ppm (t, 3H); $-(CH_2)_9$ – 1,37 ppm (m, 18H); $HO-CH_2-CH_2-$ 2,59 ppm (t, 2H); $HO-CH_2-CH_2-$ 3,59 ppm (t, 2H); $HOOC-CH_2-$ 2,96 ppm (s, 2H); $-CH-COOH$ 4,25 ppm (t, 1H).

Povrchová aktivita:

hodnoty povrchového napätia γ [$N/m \cdot 10^{-3}$] vodných roztokov dvojsodnej soli 2-amino-(N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) laurovej kyseliny v závislosti na teplote a koncentrácii.

Koncentr. g/l	25 °C	40 °C	60 °C	80 °C
0,006	46,65	52,60	64,31	59,13
0,012	61,83	63,54	64,50	61,99
0,025	60,87	62,83	64,55	63,44
0,05	64,59	64,39	61,87	58,84
0,1	60,87	57,61	57,71	56,92
0,2	65,11	67,19	64,64	60,67
0,5	69,73	65,24	64,84	60,91
1,0	60,11	64,30	61,92	56,28
2,0	64,68	64,25	56,89	56,68
5,0	59,78	57,71	55,80	48,00
10,0	53,92	51,55	48,86	44,90

Chelatačné vlastnosti 2-amino-(N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) laurovej kyseliny

Kovový ión	Analýza %		Che- lát	Výťažok chelátu %
	teoretické	nájdene		
Fe^{3+}	C	51,90	51,80	1:1 93,2
	H	7,62	7,97	
	N	3,78	3,55	
	Fe	15,08	15,18 ⁺	
Cu^{2+}	C	50,71	50,45	1:1 92,1
	H	7,71	7,73	
	N	3,69	3,57	
	Cu	16,76	16,58 ⁺	
La^{3+}	C	42,39	42,05	1:1 95,8
	H	6,23	6,15	
	N	3,09	3,00	
	La	30,65	30,87 ⁺	

* Obsah kovu stanovený rádionuklidovou röntgenflorescenčnou analýzou; zdroj $^{241}Am/Ag$, energia 22,2 keV a 60 keV; detekcia polovodičový Si/Li detektor. K stanoveniu sa využila selekcia charakteristického žiarenia $K_{\alpha 1}$.

Príklad 2

2-amino (N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) stearová kyselina $C_{22}H_{43}NO_5$

2-amino (N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) stearová kyselina a jej soli bola pripravená spôsobom karboxyalkylácie amínov s halogénkyselinami vo vodnoalkalickom prostredí pri pH 9 až 11 postupom podľa čs. autorského osvedčenia č. (PV 3-80).

Výťažok: 81,8 % teórie.

Totožnosť látky bola potvrdená.

Elementárna analýza:

$C_{22}H_{43}NO_5$

teoret.:

% C = 65,80, % H = 10,80, % N = 3,48

nájdene:

% C = 66,12, % H = 11,00, % N = 3,47

Teplota topenia: 114–115 °C

1H – NMR spektrum sodnej soli:

spektrometer Tesla BS 487 A (80 MHz), rozpúšťadlo D_2O , štandard trimetylsilylpropionan sodný – d_4 , δ [ppm]

CH_3 – 0,85 ppm (t, 3H); $-(CH_2)_{15}$ – 1,35 ppm (m, 30H); $HO-CH_2-CH_2-$ 2,66 ppm (t, 2H); $HO-CH_2-CH_2-$ 3,61 ppm (t, 2H); $HOOC-CH_2-$ 3,05 ppm (s, 2H); $HOOC-CH-$ 4,21 ppm (t, 1H).

Povrchová aktivita:

hodnoty povrchového napätia γ [$N/m \cdot 10^{-3}$] vodných roztokov dvojsodnej soli 2-amino-(N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) stearovej kyseliny v závislosti na teplote a koncentrácii.

Koncentr.

g/l	25 °C	40 °C	60 °C	80 °C
0,006	52,45	62,26	64,55	60,19
0,012	53,59	62,78	64,36	60,30
0,025	44,60	56,48	61,63	62,69
0,05	46,74	52,40	53,40	53,31
0,1	48,74	45,87	48,96	44,20
0,2	47,50	44,30	44,88	41,48
0,5	47,84	49,75	40,70	38,99
1,0	41,65	34,91	36,65	34,12
2,0	43,88	41,65	43,83	36,08

Pri koncentráciách 5 g/l a 10 g/l látka nebola rozpustná pri teplotách merania.

Chelatačné vlastnosti 2-amino- (N-2-hydroxyetyl-N-karboxymetyl) stearovej kyseliny:

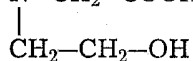
Kovový ión	Analýza %		Che- lát	Výta- žok chelátu %
	teoretické	nájdene		
Fe ³⁺	C	58,15	1:1	93,5
	H	8,87		
	N	3,08		
	Fe	12,29		
Cu ²⁺	C	57,06	1:1	98,7
	H	8,92		
	N	3,02		
	Cu	13,72		
La ³⁺	C	49,16	1:1	94,7
	H	7,50		
	N	2,61		
	La	25,85		

* Obsah kovu stanovený rádionuklidovou röntgenflorescenčnou analýzou; zdroj ²⁴¹Am/Ag, energia 22,2 keV a 60 keV; detekcia polovodičový Si/Li detektor. K stanoveniu sa využila selekcia charakteristického žiarenia K_{α1}.

Komplexóny monoamínového typu s hydroxyalkylovou skupinou v molekule s povrchovoaktívnymi vlastnosťami možno použiť ako analytické komplexotvorné činidlá, ako antioxidanty a stabilizátory masť a emulzií vo farmácii a kozmetike, ďalej ako suroviny pre výrobu detergentov.

PREDMET VYNÁLEZU

Komplexóny monoamínového typu s hydroxyalkylovou skupinou v molekule obecného vzorca



kde $\text{R} = \text{CH}_3-(\text{CH}_2)_n-\text{CH}-\text{COOX}$

$n = 3-17$

$\text{X} = \text{H}, \text{Na}, \text{K}, \text{NH}_4^+, \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_3\text{H}_7$

s povrchovoaktívnymi vlastnosťami.