



ÚŘAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU K AUTORSKÉMU OSVEDČENIU

252548

(11)

(B1)

(51) Int. Cl.⁴
C 07 C 87/30

(22) Prihlášené 01 04 86
(21) (PV 2298-86.L)

(40) Zverejnené 15 01 87

(45) Vydané 15 10 88

(75)
Autor vynálezu

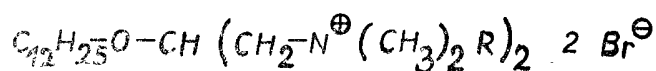
DEVÍNSKY FERDINAND ing. CSc., BRATISLAVA,
MASÁROVÁ LUBOMÍRA PharmDr., PODOLIE, LACKO IVAN ing.,
BRATISLAVA, RAFAJDUSOVÁ MONIKA, SNINA

(54) N,N'-bis(alkyldimetyl)-2-dodecyloxy-1,3-propándiamóniumdibromidy
a spôsob ich prípravy

1

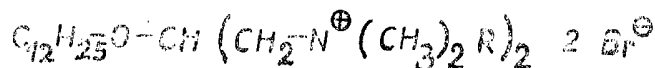
2

Riešenie sa týka N,N'-bis(alkyldimetyl)-2-dodecyloxy-1,3-propándiamóniumdibromidov všeobecného vzorca



kde R znamená lineárny alebo rozvetvený alkylový reťazec s počtom atómov uhlíka 1 až 14 a spôsobu prípravy týchto zlúčenín, ktorý spočíva v reakcii príslušného brómalkánu s N,N'-bisdimetyl-2-dodecyloxy-1,3-propándiamínu v prostredí metylkyanidu pri teplote varu rozpúšťadla počas 12 až 16 hodín. Finálne zlúčeniny majú výrazné povrchovo aktívne vlastnosti a širokospektrálny antimikróbný účinok zahrňujúci gram-pozitívne a gramnegatívne baktérie, kvasinky i riasy. Sú použiteľné ako dezinfekčné látky so súčasným čistiacim účinkom, ako konzervačné činidlá, detergenty, pomocné látky a pod.

Vynález sa týka N,N'-bis(alkyldimetyl)-2-dodecyloxy-1,3-propándiamóniumdibromidov všeobecného vzorca



kde R znamená lineárny alebo rozvetvený alkylový reťazec s počtom atómov uhlíka 1 až 14 a spôsobu prípravy týchto zlúčenín.

Bisamóniové soli tvoria šiestu generáciu antimikróbne účinných organických amóniových zlúčenín a predstavujú pomerne novú skupinu látok, o ktorých je už však známe, že okrem povrchovo aktívnych vlastností vykazujú aj výborné antimikróbne účinky (ak ich molekula obsahuje najmenej jeden dlhý alkylový reťazec). Ich antimikróbny účinok, v porovnaní s klasickými monoamóniovými soľami sa potencuje práve voči relatívne rezistentným gramnegatívnym baktériám, pričom vykazujú aj veľmi vysokú účinnosť voči grampozitívnym baktériám ale aj kvasinkám a riasam. Okrem biocídneho efektu majú aj detergenčný účinok vzhľadom na ich schopnosť výrazne znížiť povrchové napätie na medzifázovom rozhraní kvapalina — plyn.

V chemickej literatúre boli opísané niektoré jednoduché typy bisamóniových solí, zlúčeniny, ktoré sú predmetom vynálezu, sú však látky nové, doteraz v chemickej literatúre neopísané, u ktorých sa zistili doteraz neznáme biologické účinky a fyzikálne vlastnosti.

Spôsob prípravy týchto zlúčenín spočíva v reakcii N,N'-bisdimetyl-2-dodecyloxy-1,3-propándiamínu s brómalkánmi mechanizmom substituenej nukleofilnej bimolekulyvej reakcie v prostredí metylkyanidu pri teplotách varu rozpúšťadla počas 12—16 hodín. Výhodou spôsobu podľa vynálezu oproti známym metódam je, že vznikajú produkty vo vysokom výťažku v niektorých prípadoch sú výťažky kvantitatívne, a veľmi čisté. Vzhľadom na zníženú reaktivitu reaktantov vyplývajúcu z ich štruktúry je pre dosiahnutie vysokých výťažkov esenciálne dodržať stanovenú reakčnú dobu.

Príklady ilustrujú ale neobmedzujú všeobecnú metódu prípravy zlúčenín podľa vynálezu a charakterizujú ich vlastnosti a účinky. Okrem výťažkov, teploty topenia, IČ-spektrálnych charakteristík (nujol, ν v cm^{-1}), R_f hodnôt [acetón — HCl ($C_{HCl} = 1$ mol. dm^{-3})], silikagélové platne Silufol, detekcia Dragendorfovým činidlom v Munierovej modifikácii] sa uvádzajú aj agregáč-

centráciou tvorby micel (C_k v mol. dm^{-3}), centráciou tvorby micel (C_k v mol. dm^{-3}), povrchovo aktívne vlastnosti charakterizované maximálnym znížením povrchového napätia pri C_k (γ_{Ck} v m. m^{-1}) ako aj antimikróbna účinnosť charakterizované minimálnou inhibičnou koncentráciou (MIC v $\mu g \cdot cm^{-3}$) voči *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* a *Candida albicans*. V porovnaní s Ajatínom (Benzylododecyldimetylamóniumbromid) používaným v ČSSR ako dezinficiens, sú najúčinnnejšie zlúčeniny, ktoré sú predmetom vynálezu účinnejšie voči *S. aureus* 20krát, *E. coli* 8krát a *C. albicans* 4krát.

Príklad 1

Do 30 cm^3 metylkyanidu sa dá 0,1 mólu N,N'-bisdimetyl-2-dodecyloxy-1,3-propándiamínu a 0,21 mólu brómetánu. Reakčná zmes sa zahrieva 12 hodín pod spätným tokom. Po ochladení a oddestilovaní rozpúšťadla sa produkt prekryštalizuje zo suchého acetónu. Výťažok N,N'-bis(etyldimetyl)-2-dodecyloxy-1,3-propándiamóniumdibromidu je 91 %; t. t. 156 až 158 °C; $R_f = 0,48$; $\nu_{as(C-O-C)} 1093$, $\rho_{CH_2} 717$; $C_k = 1,68 \cdot 10^{-2}$; $\gamma_{Ck} = 45,6$; MIC: 20, 500, 300.

Príklad 2

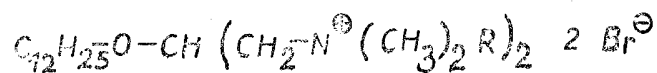
Pracovný postup je ten istý ako v príklade 1 s tým rozdielom, že do reakcie sa namiesto brómetánu použil brómhexán a reakčný čas bol 14 hodín. Výťažok N,N'-bis(hexyldimetyl)-2-dodecyloxy-1,3-propándiamóniumdibromidu je 75 %; t. t. 208—210 stupňov Celsia; $R_f = 0,55$; $\nu_{as(C-O-C)} 1098$, $\rho_{CH_2} 717$; $C_k = 2,06 \cdot 10^{-3}$; $\gamma_{Ck} = 36,2$; MIC: 1, 40, 4.

Príklad 3

Pracovný postup je ten istý ako v príklade 1 s tým rozdielom, že do reakcie sa namiesto brómetánu použil brómtetradekán a reakčný čas bol 16 hodín. Výťažok N,N'-bis(tetradecyldimetyl)-2-dodecyloxy-1,3-propándiamóniumdibromidu je kvantitatívny; t. t. 207—208 °C; $R_f = 0,31$; $\nu_{as(C-O-C)} 1092$, $\rho_{CH_2} 717$; $C_k = 1,54 \cdot 10^{-5}$; $\gamma_{Ck} = 33,4$; MIC: 8 000, —, 1 000.

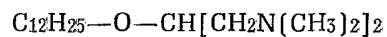
PREDMET VYNÁLEZU

1. N,N'-bis(alkyldimetyl)-2-dodecyloxy-1,3-propándiamóniumdibromidy všeobecného vzorca



kde R znamená lineárny alebo rozvetvený alkylový reťazec s počtom atómov uhlíka 1 až 14.

2. Spôsob prípravy zlúčenín všeobecného vzorca ako v bode 1, vyznačený tým, že sa nechá zreagovať N,N'-bisdimetyl-2-dodecyloxy-1,3-propándiamín vzorca



s brómalkánmi všeobecného vzorca



kde R znamená to isté ako v bode 1 v prostredí metylkyanidu pri teplote varu rozpúšťadla počas 12 až 16 hodín.