



ÚŘAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU K AUTORSKÉMU OSVEDČENÍU

239427

(11) (B1)

(22) Prihlášené 07 05 84
(21) PV 3333-84

(51) Int. Cl.⁴
C 07 D 417/06

(40) Zverejnené 13 06 85

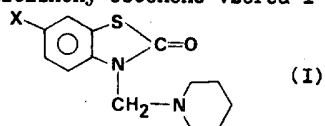
(45) Vydané 16 04 87

(75)
Autor vynálezu

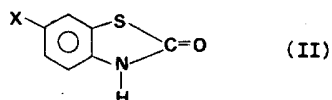
GVOZDIAKOVÁ ANNA doc. RNDr. CSc.; ZEMANOVÁ MÁRIA doc. RNDr. CSc.,
BRATISLAVA

(54) 3-piperidinometylén-6-X-2-benzotiazolinón a spôsob ho prípravy

Vynálezom sú 3-piperidinometylén-6-X-
-2-benzotiazolinóny obecného vzorca I



kde X znamená vodík, bróm alebo nitrosku-
pinu, ktoré sa získavajú reakciou medzi
6-X-2-benzotiazolinónom obecného vzorca II



kde X znamená vodík, bróm alebo nitrosku-
pinu, s formaldehydom obecného vzorca III



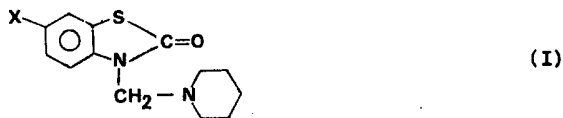
a piperidínom obecného vzorca IV



Pripravené zlúčeniny sú antifungálne účinné
látky.

Predmetom vynálezu sú 3-piperidinometylén-6-X-2-benzotiazolinony a spôsob ich prípravy. V literatúre doteraz neboli popísané látky, ktoré ovplyvňujú rozmnožovanie kvasinkového mikroorganizmu *Candida albicans* CCY 29-3-91.

Teraz sme zistili, že nové 3-piperidinometylén-6-X-2-benzotiazilóny obecného vzorca I



kde X znamená vodík, bróm alebo nitroskupinu, javia protikvasinkovitý účinok.

Tieto zlúčeniny sa pripravujú spôsobom, ktorý spočíva v reakcii 6-X-2-benzotiazolónu s formaldehydom a piperidínom. Reakcie sa uskutočňujú v prostredí etanolu pri 70 až 76 °C za dobu 3 až 4 hodín.

Účinok látky podľa vynálezu možno využiť v zmesiach s inými známymi účinnými látkami.

Nasledujúce príklady bližšie osvetľujú, ale nijako neobmedzujú prípravu a vlastnosti zlúčenín podľa vynálezu.

Pr í k l a d 1

3-piperidinometylén-2-benzotiazolinón

K 7,5 g (0,05 mólu) 2-benzotiazolónu sa prileje 25 ml etanolu, potom sa prisype 2 g (0,005 mólu) paraformaldehydu a nakoniec 4,2 g (0,05 mólu) piperidínu. Získaný čirý roztok sa pod spätným chladičom na vodnom kúpeli zahrieva do varu 3 až 4 hodiny. Po ochladení reakčná zmes sa vyleje do ľadovej vody. Vylúčená biela látka po odsatí sa kryštalizuje z benzénu. Vo výťažku 78 %-nom sa získa pripravovaná zlúčenina o teplote topenia 78 až 79 °C.

S

Sum. vzorec: $C_{13}H_{16}N_2SO$ M.h. 248,32

Analýza:

Vyp: 62,88 % C, 6,49 % H, 11,28 % N, 12,91 % S,
zist: 62,74 % C, 6,46 % H, 11,20 % N, 12,87 % S.

Pr í k l a d 2

3-piperidinometylén-6-brom-2-benzotiazolinón

K 11,5 g (0,05 mólu) 6-bróm-2-benzotiazolónu sa prileje 25 ml etanolu, potom prisype 2 g (0,055 mólu) paraformaldehydu a 4,2 g (0,05 mólu) piperidínu. Reakčná zmes sa zahrieva 3 až 4 hodiny do varu. Po ochladení z reakčného prostredia sa vylúči biela kryštalická látka, ktorá bola prekryštalizovaná z acetónu, vo výťažku 81 % o teplote topenia 132 až 134 °C.

Sum. vzorec: $C_{13}H_{15}N_2SOBr$ M.h. 327,21

Analýza:

Vyp.: 47,41 % C, 4,59 % H, 8,50 % N, 9,73 % S,
zist.: 47,39 % C, 4,46 % H, 8,45 % N, 9,65 % S.

Pr í k l a d 3

3-piperidinometylén-6-nitro-2-benzotiazolinón

K 9,5 g (0,05 mólu) 6-nitro-2-benzotiazolónu sa prileje 25 ml etanolu, potom sa prisype 2 g (0,055 mólu) paraformaldehydu. Reakčná zmes sa zohrieva 3 až 4 hodiny do varu. Vylúčené žlté kryštáliky kryštalizujú zo zmesi benzén-petroléter v pomere 3:1. Vo výťažku 72 % sa získa pripravovaná zlúčenina o teplote topenia 129 až 131 °C.

Sum. vzorec: $C_{13}H_{15}N_3SO_3$ M.h. 293,32

Analýza:

Vyp.: 53,33 % C, 5,15 % H, 14,32 % N, 10,93 % S,
zist.: 53,26 % C, 4,96 % H, 14,28 % N, 10,86 % S.

Antifungálna účinnosť syntetizovaných zlúčenín podľa vynálezu

Zlúč. podľa príkl.	Candida albicans	
	ED ₅₀	ED ₁₀₀
	mol.l ⁻¹	mol.l ⁻¹
1	50×10^{-5}	10×10^{-4}
2	63×10^{-6}	13×10^{-5}
3	33×10^{-5}	23×10^{-4}

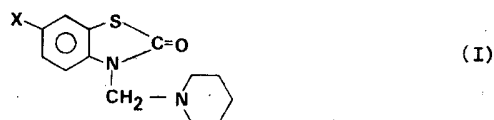
Kontrola

2-merkaptobenzotiazol 15×10^{-5} 75×10^{-5}

Hodnoty ED₅₀ a ED₁₀₀ sú koncentrácie látky, ktoré inhibujú 50 a 100 % rozmnožovanie kvasinkovitého mikroorganizmu Candida albicans CCY 29-3-91 v tekutej kultivačnej pôde Vita na 5.deň statickej kultivácie pro 28 °C.

P R E D M E T V Y N Á L E Z U

1. 3-piperidinometylén-6-X-2-benzotiazolinón obecného vzorca I



kde X znamená vodík, brom alebo nitroskupinu.

2. Spôsob prípravy 3-piperidinometylén-6-X-2-benzotiazolinonu obecného vzorca I, kde X má vyššie uvedený význam, podľa bodu 1. význačný tým, že sa nechá reagovať 6-X-2-benzotiazolón obecného vzorca II

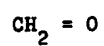


kde X znamená vodík, brom alebo nitroskupinu,

239427

4

s formaldehydom vzorca III



(III)

a piperidínom vzorca IV



(IV)

v prostredí etanolu.