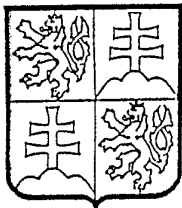


ČESKÁ A SLOVENSKÁ  
FEDERATIVNÍ  
REPUBLIKA  
(19)



FEDERÁLNÍ ÚŘAD  
PRO VYNÁLEZY

# PATENTOVÝ SPIS

(11) Číslo dokumentu :

277114

(21) Číslo přihlášky : 3867-90

(22) Přihlášeno : 06.08.90

(30) Prioritní data :

(13) Druh dokumentu : B6

(51) Int. Cl.<sup>3</sup> :

C 07 C 69/025

//A 01 N 37/02

(40) Zveřejněno : 18.03.92

(47) Uděleno : 30.09.92

(24) Oznámeno udělení ve Věstníku : 18.11.92

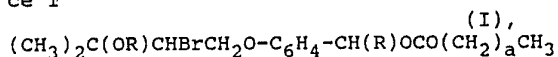
(73) Majitel patentu : Kahovcová Jitka ing. CSc., Praha, CS

(72) Původce vynálezu : Kahovcová Jitka ing. CSc., Praha, CS

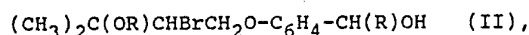
(54) Název vynálezu : 1-/4-(3-Alkoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/-alkylester  
alkanové kyseliny jako biologicky účinná látka a způsob  
jeho přípravy

(57) Anotace :

Nová biologicky účinná látka obecného vzor-  
ce I



kde symbol R značí alkylskupinu s rovným či  
rozvětveným řetězcem s maximálně 4 atomy  
uhlíku, symbol a značí celé číslo v rozmezí  
0 až 16. Její pesticidní účinek byl vyzkou-  
šen na roztočích. Způsob přípravy látek  
obecného vzorce I, spočívá v reakci hydro-  
xysloučeniny obecného vzorce II



kde symbol P má výše uvedený význam s alka-  
novou kyselinou obecného vzorce III



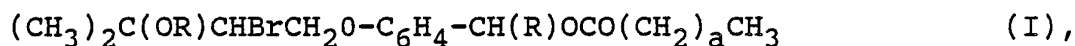
kde symbol a má výše uvedený význam za pří-  
tomnosti katalytického množství 4-dimethyl-  
aminopyridinu a ekvimolárního množství di-  
cyklohexylkarbodiimidu při teplotě 10 až  
20 °C nebo s chloridem či anhydridem alka-  
nové kyseliny za přítomnosti bezvodého  
pyridinu při 20 až 60 °C.

Vynález se týká 1-/4-(3-alkoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/-alkylesteru alkanové kyseliny a způsobu jeho přípravy.

V současné době je známa řada látek imitujících, případně naopak zabraňujících v hmyzím organismu působení jednoho z jeho vlastních, tzv. metamorfózních hormonů. Látky s tímto účinkem, zvané juvenoidy, respektive antijjuvenoidy, způsobují poruchy embryonálního vývoje, překotnost, respektive retardaci až inhibici metamorfózy. (Bowers W. S., Ohta Z., Gleers J. S., Marsella F. A., Science 1967, 193, 542; Kahovcvoá J., Romaňuk M., J. Chem. Eng. Data 1981, 26, 223; Kahovcvoá J., Sláma K., Romaňuk M., AO 248922).

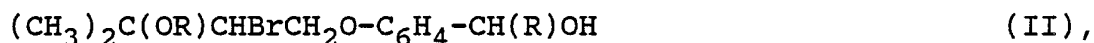
Látky popsané v předmětu vynálezu jsou příkladem alifatickoaromatických sloučenin s vicinální alkoxybromskupinou obsahující v molekule esterovou vazbu, jež mají výše popsané biologické účinky.

Podstatou vynálezu je 1-/4-(3-alkoxy-3-methyl-2-brombutoxy)(fenyl/alkylester alkanové kyseliny obecného vzorce I



kde symbol R značí alkylskupinu s rovným či rozvětveným řetězcem s maximálně 4 atomy uhlíku, symbol a značí celé číslo v rozmezí 0 až 16.

Způsob přípravy 1-/4-(3-alkoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/-alkylesteru alkanové kyseliny se provádí tak, že se nechá reagovat hydroxysloučenina obecného vzorce II



kde symbol R má výše uvedený význam s alkanovou kyselinou obecného vzorce III



kde symbol a má výše uvedený význam za přítomnosti 4-dimethylaminopyridinu a dicyklohexylkarbodiimidu při teplotě 10 až 20 °C nebo s chloridem či anhydridem alkanové kyseliny za přítomnosti bezvodého pyridinu při 20 až 60 °C.

V dalším je vynález blíže objasněn na příkladu provedení, aniž se na tento výlučně omezuje.

#### Příklad

0,15 g (1 mmol) kyseliny dekanové, 0,35 g (1,1 mmol) 1-/4-(3-methoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/-1-propanolu, 0,2 mg (1 mmol) dicyklohexylkarbodiimidu a 0,01 g (0,1 mmol) N.N-dimethylaminopyridinu bylo rozpuštěno a mícháno v 10 ml bezvodého diethyléteru při 15 až 20 °C po dobu 2 hodin. Po zředění reakční směsi diethyléterem a filtrací byla éterická vrstva postupně promyta 5%ním vodným roztokem kyseliny chlorovodíkové a vodou, vysušena a odpařena. Odparek poskytl po dělení na sloupci silikagelu (eluční činidlo petroléter obsahující až 20 obj.%

diethyléteru) 0,36 g (70 %) produktu reakce.

1-/4-(3-Methoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/-1-propanol: MS analýza:  $C_{15}H_{23}BrO_3$  (330/332,  $M^+$ ), 312/4 ( $C_{15}H_{21}BrO_2, M^+ - H_2O$ ), 301/3 ( $C_{13}H_{18}BrO_3, M^+ - C_2H_5$ )

NMR analýza ( $^{13}C, CDCl_3, 200MHz$ ): 10.15 ( $\underline{CH_3CH_2}$ ), 22.18, 23.76 ( $(\underline{CH_3})_2$ ), 31.76 ( $\underline{CH_3CH_2}$ ), 49.90 ( $\underline{CHBr}$ ), 58.88 ( $\underline{OCH_3}$ ), 69.80 ( $\underline{CH_2O}$ ), 75.55 ( $\underline{CHOH}$ ), 76.20 ( $(\underline{CH_3})_2C$ ), 114.70, 127.21, 137.33, 157.65 (aromatika)

1-/4-(3-Methoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/-1-propylester kyseliny dekanové:

Elementární analýza pro  $C_{25}H_{41}BrO_4$  (484,58): 61,95%, 8,50%H.

NMR analýza ( $^{13}C, CDCl_3, 200MHz$ ): 9.98 ( $\underline{CH_3CH_2}$ ), 22.17, 23.77 ( $(\underline{CH_3})_2C$ ), 31.84 ( $\underline{CH_3CH_2}$ ), 49.91 ( $\underline{CHBr}$ ), 58.82 ( $\underline{OCH_3}$ ), 76.22 ( $(\underline{CH_3})_2C$ ), 76.75 ( $\underline{CHO}$ ), 114.60, 127.96, 133.40, 157.82 (aromatika), 173.23 ( $\underline{OCO}$ ), 14.09 ( $\underline{CH_3CH_2CH_2}$ ), 22.64 ( $\underline{CH_3CH_2CH_2}$ ), 29.39 ( $\underline{CH_3CH_2CH_2}$ ), 29.16 ( $(\underline{CH_3(CH_2)_2CH_2})$ ), 29.23 ( $\underline{CH_3(CH_2)_3CH_2CH_2}$ ), 29.10 ( $\underline{CH_3(CH_2)_5CH_2}$ ), 25.00 ( $\underline{CH_3(CH_2)_6CH_2}$ ), 34.63 ( $\underline{OCOCH_2}$ ).

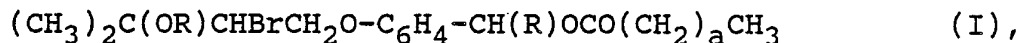
Biologický účinek byl zkoušen na roztoči *Tetranychus urticae*, škůdci na chmelnicích, v sadech a sklenicích (kontaktní aplikace acetonového roztoku na fazolích, disky listů  $\phi$  15 mm, 25 až 27 °C). Během pokusu byla sledována akaricidní aktivita (48 hodin). (Viz Tabulka).

Tabulka. Akaricidní účinek na *Tetranychus urticae* (chov Plzeň)

| Látka                                                                        | aktivní koncentrace, obj% | akaricidní aktivita % |
|------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|-----------------------|
| 1-/4-(3-methoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/-1-propylester kyseliny dekanové | 0,001                     | 70                    |
|                                                                              | 0,01                      | 70                    |
|                                                                              | 0,1                       | 100                   |
| fenbutatin-oxid                                                              | 0,002                     | 50                    |

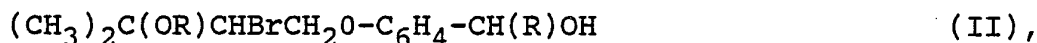
## P A T E N T O V É   N Á R O K Y

1. 1-/4-(3-Alkoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/alkylester alkanové kyseliny obecného vzorce I

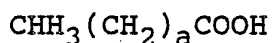


kde symbol R značí alkylskupinu s rovným či rozvětveným řetězcem s maximálně 4 atomy uhlíku, symbol a značí celé číslo v rozmezí 0 až 16.

2. Způsob přípravy 1-/4-(3-alkoxy-3-methyl-2-brombutoxy)fenyl/alkylesteru alkanové kyseliny obecného vzorce I, vyznačený tím, že hydroxysloučenina obecného vzorce II



kde symbol R má výše uvedený význam raguje s alkanovou kyselinou obecného vzorce III (III),



kde symbol a má výše uvedený význam za přítomnosti katalytického množství 4-dimethylaminopyridinu a ekvimolárního množství dicyklohexylkarbodiimidu při teplotě 10 až 20 °C nebo s chloridem či anhydridem alkanové kyseliny za přítomnosti bezvodého pyridinu při 20 až 60 °C.

---

Konec dokumentu

---