



GRAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU K AUTORSKÉMU OSVEDČENIU

240389
(11) (B1)

(51) Int. Cl.⁴
C 07 C 87/30

(22) Prihlásené 10 09 84
(21) (PV 6788-84)

(40) Zverejnené 13 06 85

(45) Vydané 15 08 87

(75)

Autor vynálezu

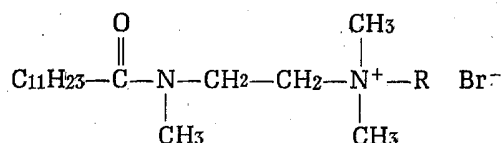
DEVÍNSKY FERDINAND ing. CSc., BRATISLAVA;
MASÁROVÁ LUBOMÍRA PharmDr.; PODOLIE, LACKO IVAN ing.,
BRATISLAVA

(54) N-[2-(dodekanoylmetylamino)etyl]alkyldimetylamóniumbromidy
a spôsob ich prípravy

1

2

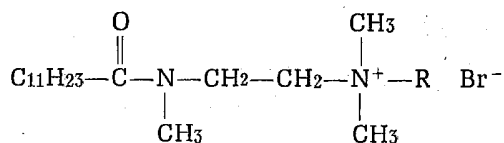
Vynález sa týka N-[2-(dodekanoylmetyl-
amino)etyl]alkyldimetylamóniumbromidov
všeobecného vzorca



kde R znamená lineárny alkylový reťazec
s počtom atómov uhlíka 2 až 14 a spôsobu
prípravy týchto zlúčenín, ktorý spočíva v
reakcii príslušného 1-brómalkánu s N,N',N'-
trimetylaminoetylamidom kyseliny dodeká-
novej v prostredí metylkyanidu pri teplote
varu rozpúšťadla.

Finálne zlúčeniny majú výrazné povrcho-
vo aktívne vlastnosti a antimikróbny účinok
tak na grampozitívne, gramnegatívne bak-
térie ako aj kvasinky. Najúčinnnejšie z nich
sú použiteľné ako dezinficiencia s deter-
genčným účinkom v kozmetike, farmácii atď.
všade tam, kde je možné využiť ich vlast-
nosti tenzidov alebo antimikróbne účinných
látok, resp. v kombinácii oboch týchto
vlastností.

Vynález sa týka N-[2-(dodekanoylmetyl-amino)etyl]alkyldimetylamóniumbromidov všeobecného vzorca



kde R znamená lineárny alkylový reťazec s počtom atómov uhlíka 2 až 14 a spôsobu prípravy týchto zlúčenín.

Dlhoreťazcové alifatické karboxylové kyseliny a ich deriváty predstavujú skupiny zlúčenín, ktoré okrem svojho veľkého biologického významu majú aj priemyselné využitie. Vďaka svojim výborným povrchovo aktívnym vlastnostiam a zanedbateľným nežiadúcim vedľajším účinkom sa s výhodou využívajú, predovšetkým hydroxyalkylamidov so sekundárnou amidovou skupinou, v kozmetike, farmácii a v rôznych priemyselných odvetviach. Z tohoto typu zlúčenín sa najviac používajú deriváty kyseliny dodekánovej, ale sú známe aj zlúčeniny s kratším alebo dlhším alkylovým reťazcom. Tento uhľovodíkový reťazec môže byť nasýtený alebo nenasýtený, prípadne substituovaný.

Menej sú známe a používané amóniové soli omega-aminoalkylamidov karboxylových kyselín s rôzne substituovanou omega-amínoskupinou, ktoré sa používajú najmä vo forme beta-amínov alebo amóniumchloridov. Deriváty terciárnych amidov (s výnimkou bis[hydroxyetyl]zlúčenín) sa používajú len vo veľmi obmedzenej miere.

Zlúčeniny, ktoré sú predmetom vynálezu a ktoré obsahujú vo svojej molekule terciárnu amidovú skupinu a na amóniový dusík naviazaný alkylový reťazec dĺžky 2 až 14 atómov uhlíka neboli doteraz známe. Zistili sa u nich doteraz neznáme účinky na mikroorganizmy, pričom najúčinnnejšie z nich majú vyšší účinok ako bežne používané dezinficiencie typu organických amóniových solí — Ajatín a Septonex. Taktiež sa zistili u všetkých týchto zlúčenín neznáme povrchovo aktívne vlastnosti. V porovnaní so zlúčeninami podobného typu obsahujúcimi vo svojej molekule sekundárnu amidovú skupinu sú tieto zlúčeniny výhodnejšie aj z hľadiska, že u nich, vzhľadom na prítomnosť terciárnej amidovej skupiny, je vylúčená možnosť tvorby N-nitrózamínov (zistených u sekundárnych amidov), zlúčenín s veľmi výrazným kancerogénnym účinkom.

Spôsob prípravy zlúčenín podľa vynálezu spočíva v reakcii N,N',N'-trimetylamino-etylamiidu kyseliny dodekánovej s príslušným 1-brómalkánom v metylkyanide pri teplote varu rozpúšťadla. Spôsob podľa vynálezu má v porovnaní s inými metódami prípravy organických amóniových solí (napríklad za použitia vody, metanolu, etanolu ako reakčného média) tú výhodu, že sa za-

bráni vzniku vedľajších produktov (vznikajúcich napríklad hydrolytickými alebo preesterifikačnými reakciami) a vznikajú finálne zlúčeniny vo vysokých výťažkoch a vysokej čistoty.

Príklady ilustrujú metódu prípravy vybraných zlúčenín podľa vynálezu. Okrem výťažku, teploty topenia, R_F -hodnoty (zistené na silikagély v sústave acetón : 1 M HCl 1 : 1, detekcia Dragendorfovým činidlom v Munierovej modifikácii), IČ-spektrálnych charakteristík (namerané v nujolovej suspenzii, v cm^{-1}), je uvedená aj ich kritická koncentrácia tvorby micel C_k (v mol. dm^{-3}), maximálne zníženie povrchového napätia pri C_k (γ_{C_k} , v $\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$), ako aj antimikróbna aktivita voči *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* a *Candida albicans* vyjadrená ako minimálna inhibičná koncentrácia MIC v $\mu\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$.

Príklad 1

V 30 cm^3 metylkyanidu sa rozpustí 0,1 mólu N,N',N'-trimetylaminoetylamiidu kyseliny dodekánovej, pridá sa 0,11 mólu 1-brómetánu a zahrieva sa pri teplote varu rozpúšťadla. Po odparení rozpúšťadla kryštalizuje do konštantnej teploty topenia. Získa sa N-[2-(dodekanoylmetylamino)etyl]etyl-dimetylamóniumbromid vo výťažku 99 %;

t. t. 74 až 75 °C;

$R_F = 0,52$;

IČ: ν_{NCH_3} 2 725,

$\nu_{\text{C=O}}$ 1 640,

$\delta_{(\text{CH}_3\text{N,C})\text{rocking}}$ 1 187, 1 019,

ρ_{CH_2} 716;

$C_k = 9,1 \cdot 10^{-3}$;

$\gamma_{C_k} = 43,2$;

MIC: 50, 200, 80.

Príklad 2

Pracovný postup je ten istý ako v príklade 1 s tým rozdielom, že do reakcie sa namiesto 1-brómetánu použil 1-brómoktán. Vznikol N-[2-(dodekanoylmetylamino)etyl]oktyldimetylamóniumbromid vo výťažku 85 %;

t. t. 76 až 78 °C;

$R_F = 0,70$;

IČ: ν_{NCH_3} 2 728,

$\nu_{\text{C=O}}$ 1 640,

$\delta_{\text{CH}_3\text{N,C}}\text{rocking}$ 1 199, 1 019,

ρ_{CH_2} 723;

$C_k = 1,3 \cdot 10^{-3}$;

$\gamma_{C_k} = 33,9$;

MIC: 1, 30, 6.

Príklad 3

Pracovný postup je zhodný s postupom uvedenom v príklade 1 s tým rozdielom, že do reakcie sa namiesto 1-brómetánu použil ako alkylačné činidlo 1-brómtetradekán. Vznikol N-[2-(dodekanoylmetylamíno)-etyl]tetradecyldimetylamóniumbromid vo výťažku 92 %;

t. t. 88 až 90 °C;

$R_F = 0,63$;

IC: ν_{NCH_3} 2 727,

C=O 1 634,

$\delta_{\text{CH}_3\text{N,C}}\text{rocking}$ 1 193, 1 016,

ρ_{CH_2} 721;

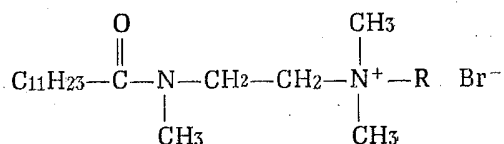
$C_k = 1,3 \cdot 10^{-4}$;

$\gamma_{C_k} = 27,5$;

MIC: 500, > 1 000, 80.

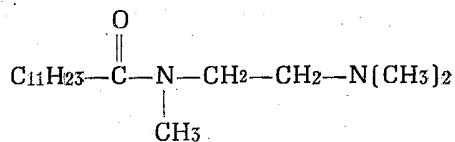
PREDMET VYNÁLEZU

1. N-[dodekanoylmetylamíno)etyl]-alkyldimetylamóniumbromidy všeobecného vzorca



kde R znamená alkylový reťazec s počtom atómov uhlíka 2 až 14.

2. Spôsob prípravy zlúčenín všeobecného vzorca ako v bode 1, vyznačený tým, že sa nechá zreagovať N,N',N'-trimetylamínoetyl-amid kyseliny dodekánovej vzorca



s 1-brómalkánom všeobecného vzorca



kde R má ten istý význam ako v bode 1, v metylkyanidu pri teplote rozpúšťadla.