



ÚŘAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU K PATENTU

252839

(11) (B2)

(51) Int. Cl.⁴

C 07 C 127/22

//A 01 N 47/34

- (22) Přihlášeno 15 03 84
(21) PV 9-86
(32) (31) (33) Právo přednosti od 19 03 83
(P 33 09 987.1) Německá spolková republika
(40) Zveřejněno 12 03 87
(45) Vydáno 15 07 88

SIRRENBURG WILHELM dr., SPROCKHOEVEL, KLAUKE ERICH dr., ODENTHAL,
BECKER BENEDIKT dr., METTMANN, KREHAN INGOMAR dr., KOELN,
STENDEL WILHELM dr., WUPPERTAL (NSR)

(72) Autor vynálezu

(73) Majitel patentu

BAYER AKTIENGESSELLSCHAFT, LEVERKUSEN (NSR)

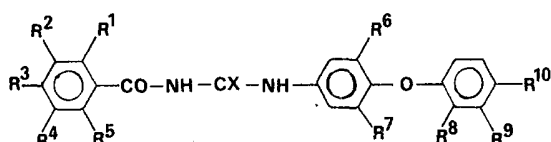
(54) Způsob výroby nových substituovaných 1-fenyl-3-benzoyl(thio)močovín

1

Předložený vynález se týká způsobu výroby nových substituovaných 1-fenyl-3-benzoyl-(thio)močovín, které mají insekticidní a akaricidní účinky a mohou se tudíž používat jako účinné složky insekticidních a akaricidních prostředků při boji proti hmyzu a roztočům.

Bylo již známo, že určité benzoylmočoviny mají insekticidní vlastnosti (srov. například evropský patentový spis č. 0 057 888).

Nyní bylo zjištěno, že nové substituované 1-fenyl-3-benzoyl(thio)močoviny obecného vzorce I



(I),

v němž

X znamená atom síry nebo atom kyslíku,

R¹ znamená atom vodíku, atom halogenu, nitroskupinu nebo zbytek zvolený ze skupiny, která je tvořena alkylovou skupinou s 1 až 6 atomy uhlíku a alkylthio-
skupinou s 1 až 6 atomy uhlíku,

R², R⁴ a R⁵ jsou stejné nebo navzájem rozdílné a znamenají atom vodíku nebo atom halogenu,

- R^3 znamená atom vodíku, atom halogenu nebo nitroskupinu,
- R^6 a R^7 jsou stejné nebo navzájem různé a znamenají atom vodíku, atom halogenu nebo alkylovou skupinu s 1 až 6 atomy uhlíku,
- R^8 a R^9 jsou stejné nebo různé a znamenají atom vodíku nebo atom halogenu a
- R^{10} znamená halogenalkylthioskupinu s 1 až 4 atomy uhlíku nebo halogenalkoxykupinu s 1 až 4 atomy uhlíku a s 1 až 4 atomy halogenu, výhodně chlordinfluormethylthioskupinu, trifluormethylthioskupinu, chlordinfluormethoxyskupinu nebo trifluormethoxyskupinu,

příčemž

- (1) jestliže X znamená kyslík a
- R^2 , R^3 , R^4 , R^6 , R^8 a R^9 znamenají vodík a
- R^7 znamená vodík nebo halogen a
- (a) R^1 a R^5 znamenají oba halogen nebo
- (b) R^1 znamená halogen, nitroskupinu nebo alkylovou skupinu s 1 až 6 atomy uhlíku a
- R^5 znamená vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^{10} znamená vždy halogenalkylthioskupinu s 1 až 4 atomy uhlíku a

příčemž

- (2) jestliže X znamená kyslík nebo síru a
- R^6 znamená chlor a
- R^8 znamená vodík nebo chlor a
- R^9 znamená vodík a
- R^{10} znamená halogenalkylthioskupinu s 1 až 4 atomy uhlíku nebo halogenalkoxykupinu s 1 až 4 atomy uhlíku a
- (a) R^1 a R^3 znamenají halogen a
- R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík nebo
- (b) R^5 a R^3 znamenají halogen a
- R^1 , R^2 a R^4 znamenají vodík nebo
- (c) R^1 a R^4 znamenají halogen a
- R^2 , R^3 a R^5 znamenají vodík nebo

(d) R^2 a R^5 znamenají halogen a

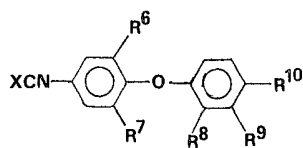
R^1 , R^3 a R^4 znamenají vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^7 znamená vždy vodík nebo alkylovou skupinu s 1 až 6 atomy uhlíku,

mají silné biologické, zejména insekticidní a akaricidní vlastnosti, které je předurčují k použití jako účinné složky insekticidních a akaricidních prostředků.

Předmětem předloženého vynálezu je způsob výroby těchto nových substituovaných 1-fenyl-3-benzoyl(thio)močovin shora uvedeného a definovaného obecného vzorce I, který spočívá v tom, že se substituované fenyl-iso(thio)kyanáty obecného vzorce IV

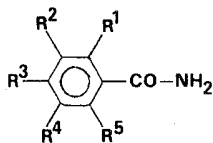


(IV)

v němž

X, R^6 , R^7 , R^8 , R^9 a R^{10} mají shora uvedené významy,

uvádějí v reakci s amidy benzoové kyseliny obecného vzorce V



(V),

v němž

R^1 , R^2 , R^3 , R^4 a R^5 mají shora uvedené významy, popřípadě v přítomnosti katalyzátoru a popřípadě v přítomnosti ředidla.

Alkylové skupiny ve významu symbolu R^1 , R^6 a R^7 a alkylthioskupiny ve významu symbolu R^1 obsahují v alkylové části přímou nebo rozvětvenou alkylovou skupinu s 1 až 6 atomy uhlíku, zejména s 1 až 4 atomy uhlíku.

Jako příklady lze uvést methylovou skupinu, ethylovou skupinu, n-propylovou skupinu, isopropylovou skupinu, n-butylovou skupinu, isobutylovou skupinu, sek.butylovou skupinu, terc.butylovou skupinu, methylthioskupinu, ethylthioskupinu, n-propylthioskupinu, isopropylthioskupinu, n-butylthioskupinu, isobutylthioskupinu, sek.butylthioskupinu a terc.butylthioskupinu.

Halogenalkylthioskupiny a halogenalkoxykupiny ve významu symbolu R^{10} obsahují vždy v alkylové části přímou nebo rozvětvenou alkylovou skupinu s 1 až 4 atomy uhlíku, zejména s 1 až 2 atomy uhlíku a výhodně s 1 až 4 atomy halogenu, přičemž atomy halogenu jsou stejné nebo různé a jako atomy halogenu přicházejí v úvahu výhodně atomy fluoru, chloru, nebo bromu, zejména fluoru.

Jako příklady lze uvést trifluormethylthioskupinu, chlordinfluormethylthioskupinu,

trifluorethylthioskupinu, chlortrifluorethylthioskupinu, tetrafluorethylthioskupinu, tri-fluormethoxyskupinu, difluormethoxyskupinu, tetrafluorethoxyskupinu, chlortrifluorethoxy-skupinu a bromtrifluorethoxyskupinu.

Atom halogenu znamená tam, kde není uvedeno jinak, atom fluoru, chloru, bromu a jodu, výhodně atom fluoru, chloru a bromu.

Symbol X znamená výhodně atom kyslíku.

Postupem podle vynálezu se výhodně připravují sloučeniny obecného vzorce I, v němž

X znamená kyslík nebo síru,

R¹ znamená vodík, fluor, chlor, brom, nitroskupinu, methylovou skupinu, ethylovou skupinu, n-propylovou skupinu, isopropylovou skupinu, n-butylovou skupinu, isobutylovou skupinu, sek.butylovou skupinu, terc.butylovou skupinu, methylthioskupinu, ethylthioskupinu, n-propylthioskupinu, isopropylthioskupinu, n-butylthioskupinu, isobutylthioskupinu, sek.butylthioskupinu nebo terc.butylthioskupinu,

R², R⁴ a R⁵ jsou stejné nebo různé a znamenají vodík, fluor, chlor nebo brom

R³ znamená vodík, fluor, chlor, brom nebo nitroskupinu,

R⁶ a R⁷ jsou stejné nebo různé a znamenají atom vodíku, fluoru, chloru, bromu, methylovou skupinu, ethylovou skupinu, n-propylovou skupinu, isopropylovou skupinu, n-butylovou skupinu, isobutylovou skupinu, sek.butylovou skupinu nebo terc.-butylovou skupinu,

R⁸ a R⁹ jsou stejné nebo různé a znamenají atom vodíku, fluoru, chloru nebo bromu
a

R¹⁰ znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu,

příčemž

(1) jestliže X znamená kyslík a

R², R³, R⁴, R⁶, R⁸ a R⁹ znamenají vodík a

R⁷ znamená vodík, fluor, chlor nebo brom a

(a) R¹ a R⁵ znamenají oba fluor, chlor nebo/a brom nebo

(b) R¹ znamená fluor, chlor, brom, nitroskupinu nebo shora uvedené alkylové skupiny a

R⁵ znamená vodík,

pak v těchto případech

R¹⁰ znamená vždy trifluormethylthioskupinu a

příčemž

(2) jestliže X znamená kyslík nebo síru a

R^6 znamená chlor a

R^8 znamená vodík nebo chlor a

R^9 znamená vodík a

R^{10} znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu a

(a) R^1 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík nebo

(b) R^5 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^1 , R^2 a R^4 znamenají vodík nebo

(c) R^1 a R^4 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^2 , R^3 a R^5 znamenají vodík nebo

(d) R^2 a R^5 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^1 , R^3 a R^4 znamenají vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^7 znamená vždy atom vodíku nebo shora uvedené alkylové skupiny.

Zvláště výhodně se postupem podle vynálezu připravují sloučeniny obecného vzorce I, v němž

X znamená kyslík,

R^1 znamená vodík, fluor, chlor, brom, nitroskupinu, methylovou skupinu nebo methylthioskupinu,

R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík, fluor, chlor nebo brom,

R^3 znamená vodík, fluor, chlor nebo nitroskupinu,

R^6 a R^7 jsou stejné nebo různé a znamenají vodík, chlor nebo methylovou skupinu,

R^8 a R^9 jsou stejné nebo různé a znamenají vodík, fluor nebo chlor, a

R^{10} znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu,

příčemž

(1) jestliže R^2 , R^3 , R^4 , R^6 , R^8 a R^9 znamenají vodík a

R^7 znamená vodík nebo chlor a

(a) R^1 a R^5 znamenají oba fluor, chlor nebo/a brom nebo

(b) R^1 znamená fluor, chlor, brom, nitroskupinu nebo methylovou skupinu a

R^5 znamená vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^{10} znamená vždy trifluormethylthioskupinu a

příčemž

(2) jestliže R^6 znamená chlor a

R^8 znamená vodík nebo chlor a

R^9 znamená vodík a

R^{10} znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu a

(a) R^1 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a

R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík nebo

(b) R^5 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a

R^1 , R^2 a R^4 znamenají vodík nebo

(c) R^1 a R^4 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a

R^2 , R^3 a R^5 znamenají vodík nebo

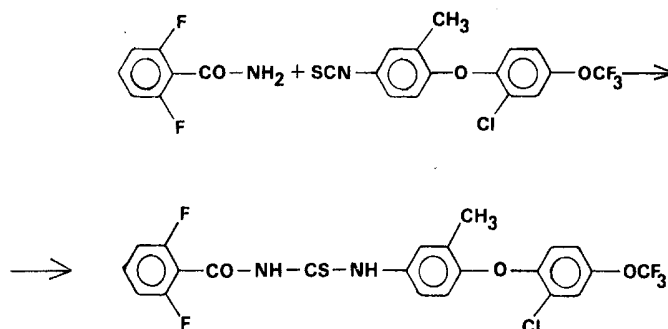
(d) R^2 a R^5 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a

R^1 , R^3 a R^4 znamenají vodík,

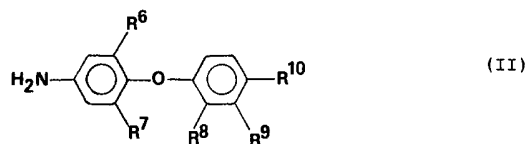
pak v těchto případech zbytek

R^7 znamená vždy vodík nebo methylovou skupinu.

Použije-li se při postupu podle vynálezu jako výchozích látek 4-(2-chlor-4-trifluormethoxyfenyloxy)-3-methylfenylthioisokyanát a 2,6-difluorbenzamid, pak lze průběh reakce znázornit následujícím reakčním schématem:



Substituované fenyl-iso(thio)kvanáty obecného vzorce IV, které se používají jako výchozí látky při postupu podle vynálezu, se mohou získat přeměnou aminoskupiny v substituovaných anilínech obecného vzorce II



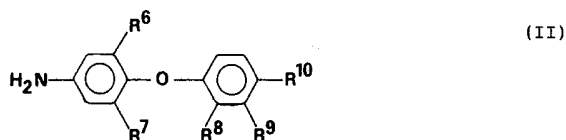
v němž

R^6 , R^7 , R^8 , R^9 a R^{10} mají shora uvedené významy, na isokyanátovou skupinu popřípadě na isothiokyanátovou skupinu, například reakcí s fosgenem popřípadě s thiofosgenem.

Substituované aniliny obecného vzorce II, které se používají jako výchozí látky, jsou známé nebo/a se dají vyrobit postupy a metodami, které jsou známé z literatury (srov. DE-OS 32 17 619, DE-OS 32 17 620 a evropský patentový spis č. 00 57 588).

Jako příklady sloučenin obecného vzorce IV lze uvést odpovídající isokyanáty popřípadě isothiokyanáty substituovaných anilinů vzorce II, které jsou uvedeny v dále uvedené tabulce 1.

T a b u l k a 1



R^6	R^7	R^8	R^9	R^{10}
H	H	H	H	OCF_3
Cl	H	H	H	OCF_3
Cl	Cl	H	H	OCF_3
H	Cl	Cl	H	OCF_3
H	H	Cl	Cl	OCF_3
Cl	H	H	Cl	OCF_3
H	H	Cl	H	OCF_3
H	H	H	Cl	OCF_3
Cl	Cl	Cl	H	OCF_3
Cl	Cl	H	Cl	OCF_3
Cl	H	Cl	Cl	OCF_3
Cl	Cl	Cl	Cl	OCF_3

pokračování tabulky 1

R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰
CH ₃	H	H	H	OCF ₃
CH ₃	Cl	H	H	OCF ₃
CH ₃	H	Cl	H	OCF ₃
CH ₃	H	H	Cl	OCF ₃
CH ₃	H	Cl	Cl	OCF ₃
CH ₃	Cl	Cl	H	OCF ₃
CH ₃	Cl	H	Cl	OCF ₃
CH ₃	Cl	Cl	Cl	OCF ₃
CH ₃	CH ₃	H	H	OCF ₃
CH ₃	CH ₃	Cl	H	OCF ₃
CH ₃	CH ₃	H	Cl	OCF ₃
CH ₃	CH ₃	Cl	Cl	OCF ₃
H	H	H	H	SCF ₃
Cl	H	H	H	SCF ₃
Cl	Cl	H	H	SCF ₃
H	Cl	Cl	H	SCF ₃
H	H	Cl	Cl	SCF ₃
Cl	H	H	Cl	SCF ₃
Cl	H	Cl	H	SCF ₃
H	H	Cl	H	SCF ₃
H	H	H	Cl	SCF ₃
Cl	Cl	Cl	H	SCF ₃
Cl	Cl	H	Cl	SCF ₃
Cl	H	Cl	Cl	SCF ₃
Cl	Cl	Cl	Cl	SCF ₃
CH ₃	H	H	H	SCF ₃

pokračování tabulky 1

R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰
CH ₃	Cl	H	H	SCF ₃
CH ₃	H	Cl	H	SCF ₃
CH ₃	H	H	Cl	SCF ₃
CH ₃	H	Cl	Cl	SCF ₃
CH ₃	Cl	Cl	H	SCF ₃
CH ₃	Cl	H	Cl	SCF ₃
CH ₃	Cl	Cl	Cl	SCF ₃
CH ₃	CH ₃	H	H	SCF ₃
CH ₃	CH ₃	Cl	H	SCF ₃
CH ₃	CH ₃	H	Cl	SCF ₃
CH ₃	CH ₃	Cl	Cl	SCF ₃

Jako příklady sloučenin obecného vzorce IV lze uvést: 2-fluor-, 2-chlor-, 2-brom-, 2-nitro-, 2-methyl-, 2-methylthio-, 2,6-difluor-, 2,6-dichlor-, 2-chlor-6-fluor-, 2-chlor-4-nitro-, 3,4-difluor-, 3,4-dichlor-, 2,3,6-trichlor-, 4-fluor-, 4-chlor-, 4-brom- a 4-nitrobenzamid.

Sloučeniny obecného vzorce V jsou známými sloučeninami.

Jako ředidla přicházejí pro postup podle vynálezu v úvahu prakticky všechna inertní organická rozpouštědla. K těm náleží zejména alifatické a aromatické popřípadě halogenované uhlovodíky, jako pentan, hexan, heptan, cyklohexan, petrolether, benzin, ligroin, benzen, toluen, xylen, methylenchlorid, ethylenchlorid, chloroform, tetrachlormethan, chlorbenzen a o-dichlorbenzen, ethery, jako diethylether a dibutylether, glykoldimethylethery a diglykoldimethylethery, tetrahydrofuran a dioxan, ketony, jako aceton, methylethylketon, methylisopropylketon a methylisobutylketon, estery, jako methylacetát a ethylacetát, nitrily, jako například acetonitril a propionitril, amidy, jako například dimethylacetamid a N-methylpyrrolidon jakož i tetramethylensulfon.

Jako katalyzátory se mohou pro postup podle vynálezu používat výhodně terciární aminy, jako triethylamin a 1,4-diazabicyklo[2,2,2]oktan, jakož i organické sloučeniny cínu, jako například dibutylcín-dilaurát.

Reakční teplota se může měnit v širokém rozsahu. Obecně se pracuje při postupu podle vynálezu při teplotách mezi 20 a 200 °C, výhodně mezi 60 a 190 °C.

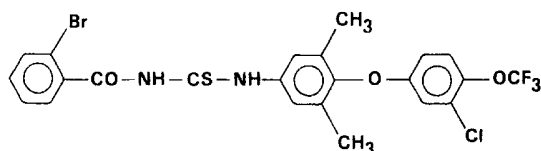
Postup podle vynálezu se obecně provádí při atmosférickém tlaku.

Při provádění postupu podle vynálezu se výchozí látky používají obvykle v přibližně ekvimolárních množstvích. Nadbytek jedné nebo druhé reakční složky nepřináší žádné podstatné výhody.

Zpracování reakčních produktů se daří obvyklými metodami, například odfiltrováním vyloučených produktů nebo rozpuštěním nežádoucích vedlejších produktů z reakční směsi. K charakterizování reakčních produktů slouží teplota tání.

Výrobu sloučenin obecného vzorce I blíže objasňují následující příklady provedení.

Příklad 1

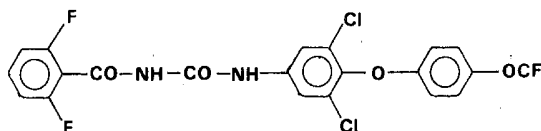


K roztoku 3,32 g (0,01 mol) 3,5-dimethyl-4-(3-chlor-4-trifluormethoxyfenoxy)anilinu v 50 ml absolutního toluenu se při teplotě 60 °C přidá 2,42 g (0,01 mol) 2-brombenzoyliso-thiokyanátu v 10 ml toluenu. Směs se potom míchá 30 minut při reakční teplotě 80 °C a poté se zahustí na objem asi 20 ml. Sraženina se odfiltruje a vysuší se.

Získá se 5,1 g (89 % teorie) 1-(2-brombenzoyl)-3-[3,5-dimethyl-4-(3-chlor-4-trifluor-methoxyfenoxy)fenyl]močoviny o teplotě tání 167 °C.

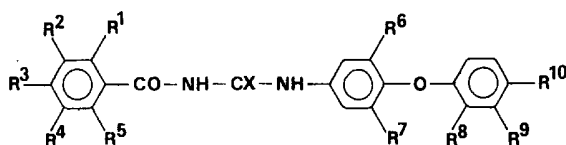
Příklad 2

Analogickým postupem jako je popsán v příkladu 1 se rovněž připraví 1-(2,6-difluor-benzoyl)-3-[3,5-dichlor-4-(4-trifluormethoxyfenoxy)fenyl]močovina vzorce



Teplota tání: 194 °C.

Analogickým způsobem se vyrobí v tabulce 2 shrnuté sloučeniny obecného vzorce I



(I)

Tabulka 2

Příklad číslo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰	X	Teplota tání (°C)
3	Cl	H	H	H	H	Cl	Cl	H	H	OCF ₃	0	194
4	Cl	H	H	H	F	Cl	Cl	H	H	OCF ₃	0	193

pokračování tabulky 2

Příklad číslo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰	X	Teplota tání (°C)
5	Br	H	H	H	H	Cl	Cl	H	H	SCF ₃	O	199
6	Cl	H	H	H	H	Cl	Cl	H	H	SCF ₃	O	198
7	F	H	H	H	F	Cl	Cl	H	H	SCF ₃	O	215
8	Cl	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	H	SCF ₃	O	226
9	Cl	H	H	H	F	Cl	Cl	H	H	SCF ₃	O	226
10	F	H	H	H	F	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	167
11	Cl	H	H	H	F	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	154
12	Cl	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	178
13	F	H	H	H	F	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	S	170
14	Br	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	S	151
15	Cl	H	H	H	F	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	S	182
16	NO ₂	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	202
17	SCH ₃	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	181
18	H	H	Cl	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	232
19	Cl	H	NO ₂	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	230
20	H	Cl	Cl	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	128
21	Br	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	171
22	CH ₃	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	188
23	Cl	H	H	H	Cl	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	203
24	CH ₃	H	H	H	H	Cl	Cl	H	H	OCF ₃	O	206
25	Br	H	H	H	H	Cl	Cl	H	H	OCF ₃	O	200
26	Cl	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	H	OCF ₃	S	194
27	Cl	H	H	H	F	Cl	Cl	H	H	OCF ₃	S	152
28	F	H	H	H	F	Cl	Cl	H	H	OCF ₃	S	145
29	Cl	H	H	H	Cl	H	H	H	H	OCF ₃	S	154
30	F	H	H	H	F	H	H	H	H	OCF ₃	S	139

pokračování tabulky 2

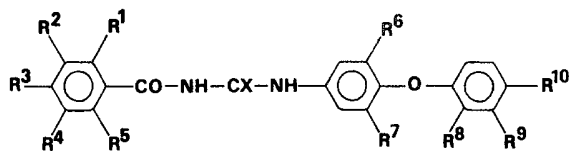
Příklad číslo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰	X	Teplota tání (°C)
31	Cl	H	H	H	F	Cl	H	H	H	OCF ₃	S	121
32	Cl	H	H	H	H	H	H	Cl	H	OCF ₃	O	154
33	F	H	H	H	F	H	H	Cl	H	OCF ₃	O	162
34	Br	H	H	H	H	H	H	Cl	H	OCF ₃	O	167
35	Cl	H	H	H	Cl	H	H	Cl	H	OCF ₃	S	156
36	Cl	H	H	H	F	H	H	Cl	H	OCF ₃	S	148
37	Cl	H	H	H	H	Cl	H	Cl	H	OCF ₃	O	151
38	F	H	H	H	F	Cl	H	Cl	H	OCF ₃	O	156
39	Cl	H	H	H	Cl	Cl	H	Cl	H	OCF ₃	S	143
40	Cl	H	H	H	Cl	Cl	H	Cl	H	OCF ₃	O	188
41	Cl	H	H	H	H	Cl	Cl	H	Cl	OCF ₃	O	200
42	Cl	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	SCF ₃	O	207
43	F	H	H	H	F	Cl	Cl	Cl	H	SCF ₃	O	216
44	F	H	H	H	F	Cl	Cl	H	Cl	OCF ₃	O	196
45	Cl	H	H	H	F	Cl	Cl	Cl	H	SCF ₃	S	166
46	CH ₃	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	SCF ₃	O	207
47	Cl	H	H	H	F	Cl	Cl	H	Cl	OCF ₃	S	161
48	Br	H	H	H	H	Cl	Cl	H	Cl	OCF ₃	S	154
49	Br	H	H	H	H	Cl	Cl	Cl	H	SCF ₃	O	204
50	Br	H	H	H	H	Cl	Cl	H	Cl	OCF ₃	O	180
51	CH ₃	H	H	H	H	Cl	Cl	H	Cl	OCF ₃	O	207
52	Cl	H	H	H	Cl	Cl	Cl	Cl	H	SCF ₃	O	205
53	Cl	H	H	H	Cl	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	220
54	Cl	H	H	H	Cl	CH ₃	CH ₃	H	Cl	OCF ₃	O	191-192
55	Cl	H	H	H	H	CH ₃	CH ₃	H	Cl	OCF ₃	O	174-175
56	Cl	H	H	H	F	CH ₃	CH ₃	H	Cl	OCF ₃	O	172-173

pokračování tabulky 2

Příklad číslo	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	R ⁹	R ¹⁰	X	Teplota tání (°C)
57	F	H	H	H	F	CH ₃	CH ₃	H	Cl	OCF ₃	O	182-183
58	Cl	H	H	H	H	CH ₃	CH ₃	Cl	H	OCF ₃	O	200-206
59	Cl	H	H	H	H	CH ₃	CH ₃	H	H	SCF ₃	O	201
60	Cl	H	H	H	F	CH ₃	CH ₃	Cl	H	OCF ₃	O	151
61	F	H	H	H	F	CH ₃	CH ₃	H	H	SCF ₃	O	200
62	F	F	F	F	F	Cl	Cl	Cl	H	OCF ₃	O	196
63	F	H	H	H	F	CH ₃	CH ₃	Cl	H	OCF ₃	O	149
64	Cl	H	H	H	F	CH ₃	CH ₃	Cl	H	OCF ₃	S	155
65	F	H	H	H	F	CH ₃	CH ₃	Cl	H	OCF ₃	S	133

PŘEDMĚT VYNÁLEZU

1. Způsob výroby nových substituovaných 1-fenyl-3-benzoyl(thio)močovin obecného vzorce I



(I),

v němž

X znamená atom síry nebo atom kyslíku,

R¹ znamená atom vodíku, atom halogenu, nitroskupinu nebo zbytek ze skupiny tvořené alkylovou skupinou s 1 až 6 atomy uhlíku a alkylthioskupinou s 1 až 6 atomy uhlíku,R², R⁴ a R⁵ jsou stejné nebo navzájem rozdílné a znamenají atom vodíku nebo atom halogenu,R³ znamená atom vodíku, atom halogenu nebo nitroskupinu,R⁶ a R⁷ jsou stejné nebo navzájem různé a znamenají atom vodíku, atom halogenu nebo alkylovou skupinu s 1 až 6 atomy uhlíku,

R^8 a R^9 jsou stejné nebo navzájem různé a znamenají atom vodíku nebo atom halogenu
a

R^{10} znamená halogenalkylthioskupinu s 1 až 4 atomy uhlíku nebo halogenalkoxyskupinu
s 1 až 4 atomy uhlíku a s 1 až 4 atomy halogenu,

příčemž

(1) jestliže X znamená kyslík a

R^2 , R^3 , R^4 , R^6 , R^8 a R^9 znamenají vodík a

R^7 znamená vodík nebo halogen a

(a) R^1 a R^5 znamenají oba halogen nebo

(b) R^1 znamená halogen, nitroskupinu nebo alkylovou skupinu s 1 až 6 atomy
uhlíku a

R^5 znamená vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^{10} znamená vždy halogenalkylthioskupinu s 1 až 4 atomy uhlíku a

příčemž

(2) jestliže X znamená kyslík nebo síru a

R^6 znamená chlor a

R^8 znamená vodík nebo chlor a

R^9 znamená vodík a

R^{10} znamená halogenalkylthioskupinu s 1 až 4 atomy uhlíku nebo halogenalkoxy-
skupinu s 1 až 4 atomy uhlíku a

(a) R^1 a R^3 znamenají halogen a

R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík nebo

(b) R^5 a R^3 znamenají halogen a

R^1 , R^2 a R^4 znamenají vodík nebo

(c) R^1 a R^4 znamenají halogen a

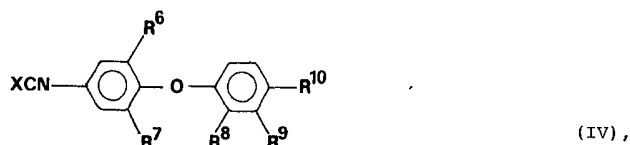
R^2 , R^3 a R^5 znamenají vodík nebo

(d) R^2 a R^5 znamenají halogen a

R^1 , R^3 a R^4 znamenají vodík,

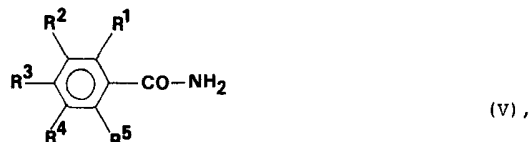
pak v těchto případech zbytek

R^7 znamená vždy vodík nebo alkylovou skupinu s 1 až 6 atomy uhlíku, vyznačující se tím, že se substituované fenylo(thio)kyanáty obecného vzorce IV



v němž

X, R^6 , R^7 , R^8 , R^9 a R^{10} mají shora uvedený význam, uvádějí v reakci s amidy benzoové kyseliny obecného vzorce V



v němž

R^1 , R^2 , R^3 , R^4 a R^5 mají shora uvedený význam,

popřípadě v přítomnosti katalyzátoru a popřípadě v přítomnosti ředidla.

2. Způsob podle bodu 1, vyznačující se tím, že se jako výchozí látky použijí odpovídající sloučeniny obecného vzorce IV a V, za vzniku sloučenin obecného vzorce I, v němž

X znamená kyslík nebo síru,

R^1 znamená vodík, fluor, chlor, brom, nitroskupinu, methylovou skupinu, ethylovou skupinu, n-propylovou skupinu, isopropylovou skupinu, n-butylovou skupinu, isobutylovou skupinu, sek.butylovou skupinu, terc.butylovou skupinu, methylthioskupinu, ethylthioskupinu, n-propylthioskupinu, isopropylthioskupinu, n-butylthioskupinu, isobutylthioskupinu, sek.butylthioskupinu nebo terc.butylthioskupinu,

R^2 , R^4 a R^5 jsou stejné nebo různé a znamenají vodík, fluor, chlor nebo brom,

R^3 znamená vodík, fluor, chlor, brom nebo nitroskupinu,

R^6 a R^7 jsou stejné nebo různé a znamenají atom vodíku, fluoru, chloru, bromu, methylovou skupinu, ethylovou skupinu, n-propylovou skupinu, isopropylovou skupinu, n-butylovou skupinu, isobutylovou skupinu, sek.butylovou skupinu nebo terc.butylovou skupinu,

R^8 a R^9 jsou stejné nebo různé a znamenají atom vodíku, fluoru, chloru nebo bromu

R^{10} znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu,

přičemž

(1) jestliže X znamená kyslík a

R^2 , R^3 , R^4 , R^6 , R^8 a R^9 znamenají vodík a

R^7 znamená vodík, fluor, chlor nebo brom a

(a) R^1 a R^5 znamenají oba fluor, chlor nebo/a brom nebo

(b) R^1 znamená fluor, chlor, brom, nitroskupinu nebo shora uvedené alkylové skupiny a

R^5 znamená vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^{10} znamená vždy trifluormethylthioskupinu a

příčemž

(A) jestliže X znamená kyslík nebo síru a

R^6 znamená chlor a

R^8 znamená vodík nebo chlor a

R^9 znamená vodík a

R^{10} znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu a

(a) R^1 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík nebo

(b) R^5 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^1 , R^2 a R^4 znamenají vodík nebo

(c) R^1 a R^4 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^2 , R^3 a R^5 znamenají vodík nebo

(d) R^2 a R^5 znamenají fluor, chlor nebo brom a

R^1 , R^3 a R^4 znamenají vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^7 znamená vždy vodík nebo shora uvedené alkylové skupiny.

3. Způsob podle bodu 1 a 2, vyznačující se tím, že se jako výchozí látky použijí odpovídající sloučeniny obecného vzorce IV a V, za vzniku sloučenin obecného vzorce I, v němž X znamená kyslík a ostatní substituenty mají významy uvedené v bodě 1 nebo 2.

4. Způsob podle bodu 1, vyznačující se tím, že se jako výchozí látky použijí odpovídající sloučeniny obecného vzorce IV a V, za vzniku sloučenin obecného vzorce I, v němž

X znamená kyslík,

- R^1 znamená vodík, fluor, chlor, brom, nitroskupinu, methylovou skupinu nebo methylthioskupinu,
- R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík, fluor, chlor nebo brom,
- R^3 znamená vodík, fluor, chlor nebo nitroskupinu,
- R^6 a R^7 jsou stejné nebo různé a znamenají vodík, chlor nebo methylovou skupinu,
- R^8 a R^9 jsou stejné nebo různé a znamenají vodík, fluor nebo chlor a
- R^{10} znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu,

příčemž

- (1) jestliže R^2 , R^3 , R^4 , R^6 , R^8 a R^9 znamenají vodík a
- R^7 znamená vodík nebo chlor a
- (a) R^1 a R^5 znamenají oba fluor, chlor nebo/a brom nebo
- (b) R^1 znamená fluor, chlor, brom, nitroskupinu nebo methylovou skupinu a
- R^5 znamená atom vodíku,

pak v těchto případech zbytek

R^{10} znamená vždy trifluormethylthioskupinu a

příčemž

- (2) jestliže R^6 znamená chlor a
- R^8 znamená vodík nebo chlor a
- R^9 znamená vodík a
- R^{10} znamená trifluormethylthioskupinu nebo trifluormethoxyskupinu a
- (a) R^1 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a
- R^2 , R^4 a R^5 znamenají vodík nebo
- (b) R^5 a R^3 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a
- R^1 , R^2 a R^4 znamenají vodík nebo
- (c) R^1 a R^4 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a
- R^2 , R^3 a R^5 znamenají vodík nebo
- (d) R^2 a R^5 znamenají fluor, chlor nebo/a brom a
- R^1 , R^3 a R^4 znamenají vodík,

pak v těchto případech zbytek

R^7 znamená vždy vodík nebo methylovou skupinu.