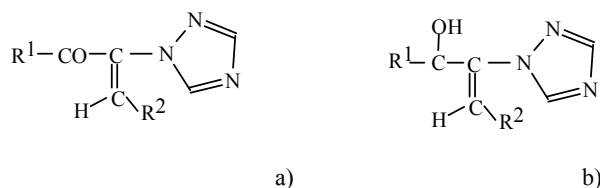


Descriere:

Obiectul invenției îl constituie un compus nou biologic activ - 3-(piridil-4)-2-(1,2,4-triazol-1-il)-1-(2,4-diclorfenil)propen-2-ol (I) și procedeul de obținere a lui.

Este deja cunoscut că la condensarea triazolilpinacolinilor sau a triazolilacetofenonelor cu aldehidele alifatiche, aciclice și aromatice se obțin așa-numiții N-viniltriazoli (formula a), ce manifestă proprietăți fungicide bine pronunțate [1, 2].

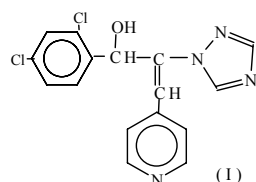


în care R¹ este terț-butil, fenil, 2-clorfenil sau 4-clorfenil
R² - alchil, alchenil, ciclohexil, fenil și fenoxifenil.

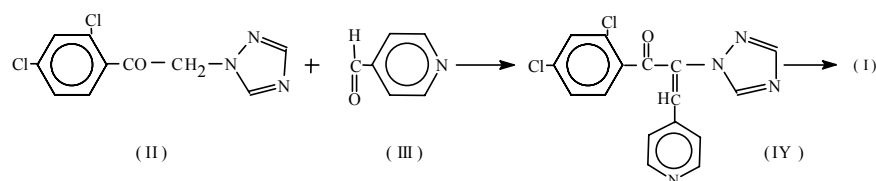
Activitatea fiziologică a N-viniltriazolilor (a) crește la transformarea lor în alcoolii corespunzători (formula b), prin reducerea grupei cetonice [3].

Problema tehnică pe care o rezolvă prezenta invenție este extinderea gamei de substanțe biologic active cu proprietăți fungicide.

În calitate de reprezentant al clasei date de compuși se propune 3-(piridil-4)-2-(1,2,4-triazol-1-il)-1-(2,4-diclorfenil)propen-2-olul (I) și procedeul de obținere a lui.



Procedeul de obținere a compusului (I) se bazează pe interacțiunea 2,4-diclorfenil-(1,2,4-triazol-1-il)metil)etonă (II) [4] cu 4-piridinaldehida (III) în prezența piperidinei. Reacția decurge la fierbere în benzen cu eliminarea azeotropă a apei formate din mediul reacției.



Cetona α,β -nesaturată (IV), obținută în acest mod, se reduce cu borohidruza de sodiu obținându-se compusul propus (I). Compusul (I) este identificat din punct de vedere chimic, prezintă o substanță cristalină, structura căreia a fost determinată în baza datelor analizei elementelor și a spectrelor IR (vezi exemplul).

Compusul (I) manifestă proprietăți fungicide cu efect toxic neînsemnat: LD₅₀ pentru șobolani reprezintă 1645 ± 238 mg /kilocorp.

Invenția se ilustrează prin următorul exemplu.

Exemplu. Sinteza 3-(piridil-4)-2-(1,2,4-triazol-1-il)-1-(2,4-diclorfenil)propen-2-olului (I).

a) Sinteza 3-(piridil-4)-2-(1,2,4-triazol-1-il)-1-(2,4-diclorfenil)propen-2-olului (IV).

Soluția conținând 2,56 g (0,01 moli) cetonă (II), 1,17 g (0,011 moli) 4-piridincarbaldhidă (III), 0,2 g piperidină și 0,3 mL acid acetic în 100 mL benzen, se fierbe timp de 4 ore cu eliminarea din mediul de reacție a apei obținute în rezultatul condensării. Amestecul reactant se răcește până la temperatura camerei, se spală cu apă (4 x 50 mL), stratul de benzen se separă și se usucă cu sulfat de sodiu anhidru. Benzenul se evaporă, iar reziduul obținut prezintă enona (IV).

S-au eliminat 3,2 g (92,7%), ulei galben, p.t. al picratului 152...158°C (din etanol absolut).

Analiza elementelor:

Găsit, %: C 55,88, H 3,04, N 16,07, Cl 20,0.

Calculat pentru C₁₆H₁₀Cl₂N₄O, %: C 55,67; H 2,92, N 16,23, Cl 20,54.

Spectrul IR: 1140 (C-N¹), 1590, 1572, 1620 (C=C și C=N), 1720 cm⁻¹ (C=O).

b) Sinteza compusului (I).

La soluția formată din 3,46 g (0,01 moli) cetonă (IV) în 100 mL etanol, răcită până la temperatura de 5°C, se adaugă cu porțiuni mici 0,38 g (0,01 moli) borohidruza de sodiu. Amestecul reactant se menține la temperatura camerei 10 ore, dizolvantul se evaporă până la 1/4 din volumul inițial.

Restul obținut se tratează la început cu acid clorhidric 10%, apoi cu soluție 20% de bicarbonat de sodiu și se extrage cu acetat de etil. Extractul se spală cu apă, se usucă cu sulfat de sodiu anhidru, iar dizolvantul se evaporă la sec. Se obțin 3,1g compus (I) (89,5%); p.t. 78...85°C.

Găsit, %: C 55,10, H 3,62, N 16,33, Cl 19,83

Calculat pentru $C_{16}H_{12}Cl_2N_4O$, %: C 55,34, H 3,49, N 16,14, Cl 20,42.

Spectrul IR: 1140 (C-N¹), 1550...1580 (C=C și C=N) , 3590 cm⁻¹(OH).