



УКРАЇНА

(19) UA (11) 87793 (13) C2  
(51) МПК (2009)  
C07C 309/00  
C07F 1/00

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ  
І НАУКИ УКРАЇНИДЕРЖАВНИЙ ДЕПАРТАМЕНТ  
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ  
ВЛАСНОСТІОПИС  
ДО ПАТЕНТУ НА ВІНАХІД

(54) 3-АМІНО-1,1,1-ТРИФТОРОПРОПАН-2-СУЛЬФОНАТ НАТРІЮ

1

2

(21) а200811544

(22) 25.09.2008

(24) 10.08.2009

(46) 10.08.2009, Бюл.№ 15, 2009 р.

(72) ПУСТОВІТ ЮРІЙ МИТРОФАНОВИЧ, АЛЕКСЕЄНКО АНАТОЛІЙ МИКОЛАЙОВИЧ, СІМУРОВА НАТАЛІЯ ВЯЧЕСЛАВІВНА, ЛУК'ЯНЕНКО СВІТЛАНА МИКОЛАЇВНА, ТРОФИМЧУК СЕРГІЙ АНДРІЙОВИЧ, СИНІЦЯ АНАТОЛІЙ ДАНИЛОВИЧ

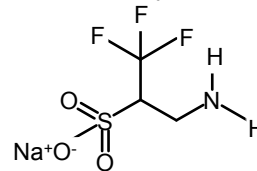
(73) ІНСТИТУТ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ НАН УКРАЇНИ

(56) Jiayi Xu, Shu Xu. A general route to the synthesis of N-protected 1-substituted and 1,2-

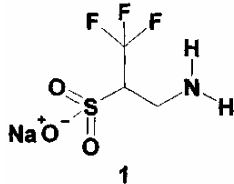
disubstituted taurines // Synthesis. - 2004. - No. 2. - P. 276-282

Gold, M. H. et al. The chemistry of aliphatic nitrosulfonates. II.  $\alpha$ -aminosulphonic acids // J. Org. Chem. - 1951. - No. 16. - P. 1500-1502

(57) 3-Аміно-1,1,1-трифторопропан-2-сульфонат натрію формули



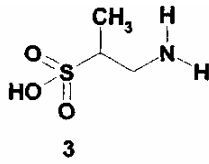
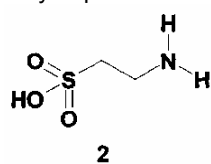
Винахід відноситься до органічної хімії, а саме до нової сполуки формули (1):



Сполука даного типу може знайти застосування як біологічно активна речовина, а також як вихідна для отримання нових фармакологічно важливих похідних.

Вказана сполука, її властивості і застосування в науковій літературі та патентних виданнях не описані.

Із найближчих структурних аналогів добре відома і вивчена [1] 2-аміноетилсульфонова кислота (2) (Taurine) та описано [2,3] синтез 1-амінопропан-2-сульфонової кислоти (3).



Ключова роль природніх амінокислот в хімії життєвих процесів викликає підвищений інтерес до синтезу і біологічної активності їх синтетичних

аналогів. Дані, які стосуються біологічної активності аміноетилсульфонової кислоти (2) (Taurine, Taufonum), свідчать про широку можливість її використання в медичній практиці [1]. Таурин сприяє покращенню енергетичних процесів, має велике значення в обміні жирів, входить в склад парних жовчних кислот. В останній час встановлено, що в мозку таурин виконує роль нейромедіаторної амінокислоти, яка гальмує синаптичну передачу, йому властива антиконвульсантна активність. Характерною особливістю тауріну є здатність стимулювати репаративні процеси при дистрофічних порушеннях сітківки і травматичних ураженнях тканин ока.

Задачею винаходу є пошук нових фторованих похідних аміноетансульфонової кислоти.

Задача досягається синтезом нової сполуки, зокрема натрієвої солі 3-аміно-1,1,1-трифторопропан-2-сульфонової кислоти (1) з комерційно доступного (1E)-3,3,3-трифторо-1-нітропроп-1-ену.

Будова та склад отриманих речовин доказані даними елементного аналізу та спектрами ядерного магнітного резонансу.

Винахід ілюструється прикладами отримання цільової сполуки - натрієвої солі 3-аміно-1,1,1-трифторопропан-2-сульфонової кислоти (1) (див. Приклад 1 та Приклад 2).

Приклад 1.

(13) C2

(11) 87793

(19) UA

1,1,1-Трифторо-3-нітропропан-2-сульфонат натрію.

До розчину 0,74 г (3,9 ммоль) метабісульфіту натрію в 5 см<sup>3</sup> дистильованої води при перемішуванні і температурі 18-20 °С додавали по краплям розчин 1 г (7,1 ммоль) (1E)-3,3,3 -трифторо-1 -нітропроп-1 -ену в 2 см<sup>3</sup> метанолу. Реакційну суміш перемішували при температурі 20°С на протязі 30 хвилин, після чого відганяли метанол і воду у вакуумі водоструминної помпи при 12 мм рт.ст. і температурі 30°С від продукту реакції, який частково випав під час проведення синтезу. Цільовий продукт екстрагували з твердого залишку абсолютним метанолом (5 разів по 1 см<sup>3</sup>), естракт випарювали у вакуумі водоструминної помпи при 12 мм рт.ст. і температурі 30°С до постійної ваги. Отриману речовину обробляли при кипінні 10 см<sup>3</sup> абсолютного диетилового етеру, продукт відфільтровували і витримували при температурі 30°С у вакуумі водоструминної помпи при 12 мм рт.ст. до постійної ваги. Вихід 1,55 г (89%), т.розкл. 188-190°С.

Знайдено, %: F 23.09, N 5.68, S 12.93.  
C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>F<sub>3</sub>NNaO<sub>5</sub>S. Вирахувано, %: F 23.25, N5.71, S 13.08.

Спектр ЯМР <sup>1</sup>H (DMSO-d<sub>6</sub>, TMC): 4.12 м (1H, CH-CH<sub>2</sub>), 4.93 м (2H, CH-CH<sub>2</sub>).

Спектр ЯМР <sup>19</sup>F (DMSO-d<sub>6</sub>, FCl<sub>3</sub>): - 64.81 д (<sup>3</sup>J<sub>HF</sub>= 9.6 Hz, 3F, CF<sub>3</sub>).

Приклад 2

3-Аміно-1,1,1-трифторпропан-2-сульфонат натрію (1).

Розчин 0.49 г (2 ммоль) 1,1,1-трифторо-3-нітропропан-2-сульфонату натрію у 20 см<sup>3</sup> дистильованої води гідрували у присутності 100 мг каталізатору Адамса (PtO<sub>2</sub>) при атмосферному тиску і температурі 18°С до повного насичення. Каталізатор відфільтровували. Розчин цільової сполуки випарювали, залишок витримували у вакуумі водоструминної помпи при 12 мм рт.ст. і температурі 45°С до постійної ваги, обробляли киплячим абсолютним диетилловим етером на протязі 10 хвилин і твердий продукт відфільтровували. Вихід 0.410 г (95,3%), т.розкл. 220-225°С.

Знайдено, %: F 26.19, N 6.48, S 14.73.  
C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>F<sub>3</sub>NNaO<sub>3</sub>S. Вирахувано, %: F 26.49, N6.51, S 14.90.

Спектр ЯМР <sup>1</sup>H (DMCO-d<sub>6</sub>, TMC): 2.91-3.07 м (2H, CH-CH<sub>2</sub>), 3.19-3.33 м (1H, CH-CH<sub>2</sub>). Спектр ЯМР <sup>19</sup>F (DMCO-d<sub>6</sub>, FCl<sub>3</sub>): -63.65 м (<sup>3</sup>J<sub>HF</sub>= 8.6 Hz, 3F, CF<sub>3</sub>).

Література

1. Лекарственные средства; М.Д. Машковский; 15-е изд., перераб., испр. и доп.- М.: ООО «Издательство Новая Волна», 2005, с.668-669.

2. Jiayi Xu, Shu Xu Synthesis 2004, №2, 276-282.

3. Gold, M.H.; Skebelsky, M; Lang, G.J. J.Org.Chem. 1951, 16, 1500-1502.