



20 III 1977
CONCEDIDA
PATENTE DE INVENCION

11	NUMERO	452.257	10	A1
21	FECHA DE PRESENTACION	22 SET. 1976		

452,257

30	PRIORIDADES:	32	FECHA	33	PAIS
31	NUMERO				

47	FECHA DE PUBLICIDAD	51	CLASIFICACION INTERNACIONAL	62	PATENTE DE LA QUE ES DIVISIONARIA
		C07D;AG1K			

64	TITULO DE LA INVENCION
"PROCEDIMIENTO DE OBTENCION DE LA 1-(5'-OXOHEXIL)-3,7-DIMETILXANTINA"	

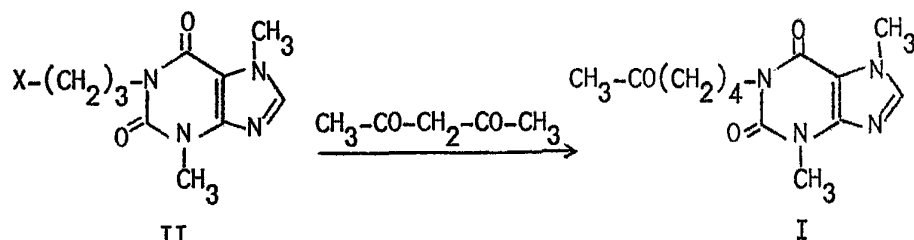
71	SOLICITANTE (S)
FERRER INTERNACIONAL, S. A.	

DOMICILIO DEL SOLICITANTE	
Gran Vía Carlos III, 94 - BARCELONA	

72	INVENTOR (ES)
D. Carlos Ferrer Salat y Dr. Juan Colomé Riera	

73	TITULAR (ES)

74	REPRESENTANTE
PASCUAL CIVANTO CANTO	



5 El rendimiento y la facilidad de reacción dependen en gran parte del halo-derivado empleado; así, la reaccionabilidad es: 1-(3-yodopropil)-3,7-dimetilxantina > 1-(3-bromopropil)-3,7-dimetilxantina > 1-(3-cloropropil)-3,7-dimetilxantina.

10 A título ilustrativo no limitativo dentro de la esencia de la invención, se describen varios ejemplos del camino a seguir para la obtención del compuesto descrito según las líneas del procedimiento preconizado, industrializable naturalmente, empleando cantidades mayores a las expuestas, guardando los criterios adecuados de proporcionabilidad.

15 EJEMPLO 1: (Obtención de la 1-(5'-oxohexil)-3,7-dimetilxantina (I) a partir de la 1-(3-bromopropil)-3,7-dimetilxantina (II, X = Br)).

20 a) se disuelven 3,31 g de 1-(3-bromopropil)-3,7-dimetilxantina (II, X = Br) y 1,21 g de acetyl-acetona en 15 ml de etanol absoluto y se añaden 1,52 g de carbonato potásico anhidro. La mezcla se refluje con fuerte agitación durante 16 h, hasta desaparición del derivado halogenado en la mezcla de reacción (puede seguirse el curso de la reacción por cromatografía de capa fina). Se evapora el etanol y el residuo se toma en agua: cloroformo; la solución orgánica se lava con agua hasta neutralidad y se seca. Evaporado

25

el cloroformo, el residuo seco se cristaliza de acetato de etilo, rindiendo 1,28 g de cristales de 1-(5'-oxohexil)-3,7-dimetilxantina (I) de p.f. = 102-3°C. (Rendimiento: 42%).

5 b) Se disuelven 1,39 g de acetyl-acetonato sódico en 15 ml de etanol absoluto, acompañándose de un ligero calentamiento y se añaden 3,01 g de 1-(3-bromopropil)-3,7-dimetilxantina (II, X = Br). La mezcla se refluxe durante 15-16 h. Siguiendo la misma metódica operatoria que en el Ejemplo la, se obtienen 1,37 g de cristales de 1-(5'-oxohexil)-3,7-dimetilxantina (I) de p.f. = 102-103°C. (Rendimiento: 45%).

10 EJEMPLO 2: (Obtención de la 1-(5'-oxohexil)-3,7-dimetilxantina

(I) a partir de la 1-(3-yodopropil)-3,7-dimetilxantina (II, X = I)).

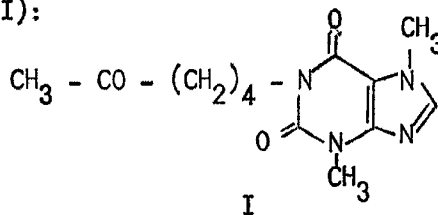
15 A una disolución caliente de 1,42 g de acetyl-acetonato sódico en 15 ml de etanol absoluto, se añaden 3,55 g de 1-(3-yodopropil)-3,7-dimetilxantina (II, X = I). La mezcla se refluxe durante 16 horas. Siguiendo la misma metódica operatoria que en los anteriores ejemplos, se obtienen 2,0 g de cristales de 1-(5'-oxohexil)-3,7-dimetilxantina (I) de p.f. = 102-3°C. (Rendimiento: 70%).

20 Descrita la esencialidad de la invención de modo suficiente como para poder ser llevada a la práctica por técnico en la materia, se recaba hacer extensivo el privilegio que se solicita a las variaciones de detalle que no alteren a la esencia de la invención resumida en sus detalles de novedad en las siguientes reivindicaciones que extractan, resumen y complementan a la memoria que antecede.

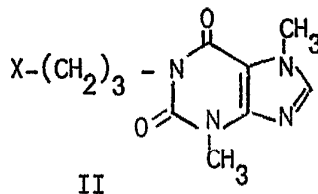
25

REIVINDICACIONES

1ª) - Procedimiento de obtención de la 1-(5'-oxohexil)-3,7-dimetilxantina (I):



caracterizado por hacer reaccionar acetil-acetona o su sal de Na, K ó Tl con una 1-(3-halopropil)-3,7-dimetilxantina (II):



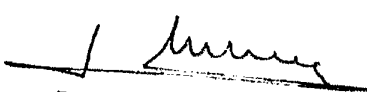
donde X puede ser Cl, Br ó I, siendo el medio más adecuado el constituido por solventes polares próticos como los alcoholes alifáticos de bajo peso molecular, preferentemente a la temperatura de ebullición del medio de reacción, seguido de aislamiento del producto por eliminación del disolvente y purificación según los métodos ordinarios de la Química Orgánica.

2ª) - PROCEDIMIENTO DE OBTENCION DE LA 1-(5'-OXOHEXIL)-3,7-DIMETILXANTINA.

Todo ello tal y como ha quedado descrito y reivindicado en la presente memoria que consta de cuatro hojas mecanografiadas y foliadas por una sola cara.

Barcelona, 22 SET. 1976
FERRER INTERNACIONAL, S.A.
pa.

PASCUAL CIVANTO
P. P.


Firmado: Jaime Juncosa Miró