

⑨ 日本国特許庁 (J P)

⑩ 特許出願公開

⑫ 公開特許公報 (A)

昭63-5065

⑬ Int. Cl.⁴
C 07 C 93/20
89/00

識別記号

庁内整理番号
7162-4H

⑭ 公開 昭和63年(1988)1月11日

審査請求 未請求 発明の数 2 (全8頁)

⑮ 発明の名称 3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩
及び製造法

⑯ 特 願 昭61-150149

⑰ 出 願 昭61(1986)6月25日

⑱ 発 明 者	森 下	剛 志	兵庫県姫路市飾磨区今在家1044
⑱ 発 明 者	河 村	昌 男	兵庫県明石市東朝霧丘18-10
⑱ 発 明 者	安 久 津	成 一	兵庫県加古川市山手2-24-15
⑱ 発 明 者	福 田	博 介	兵庫県姫路市飾磨区今在家1044
⑱ 発 明 者	畑	啓 之	兵庫県加古川市上荘町国包189-1
⑱ 発 明 者	叶	健 児	兵庫県姫路市飾磨区今在家1044
⑱ 発 明 者	西 森	弘 訓	兵庫県姫路市飾磨区今在家1044
⑲ 出 願 人	製鉄化学工業株式会社		兵庫県加古郡播磨町宮西346番地の1

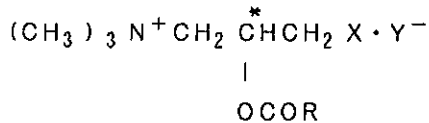
明 細 書

1. 発明の名称

3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピルト
リメチルアンモニウム塩及び製造法

2. 特許請求の範囲

(1) 一 般 式



(式中、Xはハロゲン原子を示し、Yはハ
ロゲン原子または、過ハロゲン酸原子団を
示す。RはC₁~C₇のアルキル基、アラ
ルキル基及びアリール基を示す。)

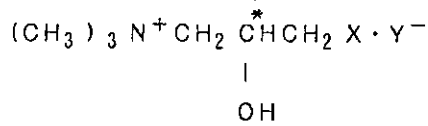
で表わされる3-ハロゲノ-2-アシロキ
シプロピルトリメチルアンモニウム塩。

- (2) X, Yが共に塩素である特許請求の範囲
(1)記載の化合物。
- (3) Xが塩素, Yが臭素である特許請求の範

囲(1)記載の化合物。

- (4) Xが塩素, Yがヨウ素である特許請求の
範囲(1)記載の化合物。
- (5) Xが塩素, Yが過塩素酸アニオンである
特許請求の範囲(1)記載の化合物。
- (6) X, Yが共に臭素である特許請求の範囲
(1)記載の化合物。
- (7) Rがメチル基である特許請求の範囲(1)
記載の化合物。
- (8) Rがn-プロピル基である特許請求の範
囲(1)記載の化合物。
- (9) Rがiso-プロピル基である特許請求の
範囲(1)記載の化合物。
- (10) Rがn-ヘプチル基である特許請求の範
囲(1)記載の化合物。
- (11) Rがフェニル基である特許請求の範囲
(1)記載の化合物。
- (12) Rがベンジル基である特許請求の範囲
(1)記載の化合物。

(13) 一般式



(X, Yの定義は上式と同様である。) で表わされる3-ハロゲノ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩を酸ハライドまたは酸無水物を用いて、溶媒の存在下あるいは不存在下にアシル化することを特徴とする3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩の製造法。

(14) 酸ハライドが塩化アセチル、臭化アセチル、ヨウ化アセチル、塩化ブチリル、塩化イソブチリル、塩化カプリリル、塩化フェニルアセチル、塩化ベンゾイルから成る群より選ばれた一種である特許請求の範囲(13)記載の方法。

の合成中間体として利用し得る3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩及びその製造法に関する。

(従来の技術)

L-カルニチンを得る方法としては例えば、DL-アセチルカルニチンをコリンエステラーゼ等の固定化酵素を用い、D体のみを立体選択的に加水分解して、D-カルニチンとし、残存するL-アセチルカルニチンとD-カルニチンをイオン交換クロマトグラフィーにより分離することにより、L-アセチルカルニチンを単離、加水分解して目的とするL-カルニチンを得る方法が知られている。

(E. P. ドロプシー等, バイオテクノロジー - アンド バイオエンジニアリング

(E. P. Dropsy et al., Biotechnol.

Bioeng., 26, 911, 1984))

(発明が解決しようとする問題点)

しかし、Dropsy等の方法では、固定化酵素で光学分割した後、構造及び性質の良く似た

(15) 酸無水物が無水酢酸, 無水酪酸, 無水イソ酪酸, 無水カプリル酸, 無水フェニル酢酸, 無水安息香酸から成る群より選ばれた一種である特許請求の範囲(13)記載の方法。

(16) 溶媒がアセトニトリル, クロロホルム, 酢酸, 酪酸から成る群より選ばれた一種である特許請求の範囲(13)記載の方法。

(17) 3-ハロゲノ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩のハロゲン対イオンを過ハロゲン酸銀で処理して得られた、相当する過ハロゲン酸塩をアシル化する特許請求の範囲(13)記載の方法。

3. 発明の詳細な説明

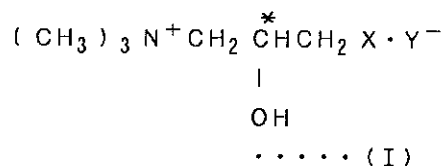
(産業上の利用分野)

本発明は新規な3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩及びその製造法に関する。

更に詳しくは、近年、心臓病の治療薬としてその効果が認められているL-カルニチン

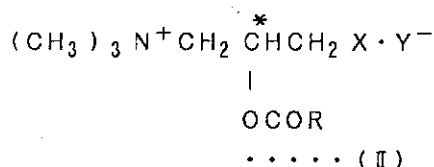
L-アセチルカルニチンとD-カルニチンをイオン交換クロマトグラフィーで分離しているが、これらを完全に分離することは困難であり、この方法を工業的規模で行なうのは実用的ではない。そこで本発明者らは、化学的に安定で、しかも光学対掌体の一方のみを生化学的方法によって分子構造に変化を起こさせ、光学分割するという手法により、L-カルニチン前駆体のみを与えることができるようなDL-カルニチンの中間体を探索した。

その結果、一般式(I)で表わされる3-ハロゲノ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩、



(Xはハロゲン原子を示し、Yはハロゲン

原子または過ハロゲン酸原子団を示す。) をアシル化することにより得られる一般式 (II) で表わされる3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩、



(RはC₁ ~ C₇のアルキル基、アラルキル基及びアリール基を示す。また、X、Yの定義は上式と同様である。) が化学的に安定で、しかも固定化酵素等で光学分割され、構造変化を受けた光学対準体と、受けなかった反対の光学対準体が物理的に容易に分離できることを見出し、本発明に到達した。

すなわち、本発明の要旨は、一般式 (II) で表わされる新規化合物、3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピルトリメチルアンモニウ

ム塩を得ることができる。

本発明の方法に用いるアシル化剤としては、塩化アセチル、臭化アセチル、ヨウ化アセチル、塩化ブチリル、塩化イソブチリル、塩化カプリリル、塩化フェニルアセチル、塩化ベンゾイル等の酸ハライド、または無水酢酸、無水酪酸、無水イソ酪酸、無水カプリル酸、無水フェニル酢酸、無水安息香酸等の酸無水物が挙げられる。酸ハライドを用いて一般式 (I) の化合物のアシル化を行なう場合には、溶媒としては、アセトニトリル、クロロホルムなどの非プロトン性溶媒や各種のカルボン酸を用いることができる。

カルボン酸の場合、アシル化反応に用いる酸ハライドに相当するカルボン酸を使用する方が好ましい。

また、この時、酸ハライドのハロゲン原子は一般式 (I) のアンモニウム塩を構成するアニオンと共通であることが必要である。しかし、炭素数が5以上の酸ハライドを用いて

ム塩及びその製造法を提供することにある。

一般式 (I) で表わすことのできる化合物、例えば、3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩はエビクロルヒドリンとトリメチルアミンのハロゲン化水素酸塩を反応させることにより容易に得られることが知られているが、これを公知の方法でアシル化することにより容易に新規化合物である3-クロロ-2-アシロキシプロピルトリメチルアンモニウム塩を得ることができる。これらの新規化合物を基質として、生化学的に一方の光学対準体のみを立体選択的に加水分解し、クロロホルム、エーテル、酢酸エチルなどを用いて抽出することにより、加水分解されなかった光学活性な一般式 (II) で表わされる化合物と加水分解を受けて光学活性な一般式 (I) で表わされる化合物となったものとを容易に分離することが可能である。前述の方法で光学分割したL-カルニチンの前駆体からは公知の方法で容易にL-カルニ

チンを得ることができる。アシル化を行なう場合には、相当するカルボン酸中での一般式 (I) の塩の溶解度が非常に小さくなるので、アシル化反応生成物である一般式 (II) で表わされる化合物の収率は著しく低下する。そのため、溶解度を大きくする手段として、一般式 (I) のアンモニウム塩の対イオンすなわち、塩素、臭素、ヨウ素アニオンを当モル以上の過塩素酸銀、過ヨウ素酸銀等の過ハロゲン酸銀で処理して対イオンを過ハロゲン酸アニオンに置換する方法を用いる。かくすることによって、アセトニトリル、クロロホルム等の非プロトン性溶媒中での一般式 (I) の塩の溶解度が大きくなり、炭素数が5以上の酸ハライドを用いても、容易にアシル化反応が進行し、収率よく一般式 (II) で表わされる化合物が得られる。

アシル化剤の使用量は、酸ハライドを用いる場合、一般式 (I) のアンモニウム塩に対して当モル以上で、大過剰の方が反応の進行は速いが、後処理に手間がかかる等の問題が

特開昭63-5065 (4)

あるので、好ましくは、2倍モル以上10倍モル程度であり、溶媒の量は、一般式(I)のアンモニウム塩の一部を溶解させる程度、及び反応液の粘度が反応の速度を著しく低下させない程度に、添加量を抑えるのがよい。この場合、反応の進行と共に反応混合物は均一となるので、最初から均一にする必要はない。また、反応温度は0℃ないし40℃、好ましくは室温付近で、反応時間はアシル化剤のアルキル基の炭素数が多くなるほど長時間を要するが、1日ないし1週間程度である。

一方、酸無水物によるアシル化反応においては、炭素数4または6の低級酸無水物については溶媒を特に必要としないが、炭素数8以上の酸無水物ではアセトニトリル、クロロホルムなどの非プロトン性溶媒を添加した方がよい。

酸無水物の使用量は、一般式(I)のアンモニウム塩に対して当モル以上、大過剰の方がよいが、好ましくは3倍~20倍モルで、

をエーテルに溶かし、このエーテル層を水で逆抽出すると、水層に一般式(II)で表わされる化合物が移動するので、これを濃縮乾固し、アセトン、アセトニトリルなどの溶媒中で再結晶して精製する。

(実施例)

以下実施例を挙げて本発明をより詳細に説明する。

実施例1

エピクロロヒドリンとトリメチルアミン塩酸塩より調製した塩化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム100g(0.533モル)を塩化アセチル418.6g(5.33モル)と共に溶媒として用いた氷酢酸320ml中に溶解し、室温で3日間放置してアシル化反応を行なった。酢酸及び過剰の塩化アセチルを減圧下留去し、残渣にアセトン500mlを加えて60℃で30分加熱し、溶解した。この溶液へさらにアセトン200mlを加え、-20℃で5時間冷却して得られた結晶をアセトン1500mlで洗浄した後、

溶媒の添加量は酸ハライドの場合と同様、できるだけ抑えた方がよく、反応が当初不均一であっても、更に溶媒を添加する必要はない。反応温度は20℃ないし130℃、好ましくは40℃ないし70℃程度がよく、反応時間は1時間ないし10日程度である。

反応液から一般式(II)の化合物を単離する方法としては、アセトニトリル、クロロホルム、酢酸、酪酸、塩化アセチル、塩化n-ブチリル、無水酢酸などのような低沸点の溶媒もしくはアシル化剤を用いる場合は、減圧下留去して除き、濃縮残渣にアセトン、エーテルなどの溶媒を添加して粗製品を析出させ、アセトン、アセトニトリルなどの溶媒で再結晶して精製する。

また、炭素数5以上の酸及び酸ハライドまたは、炭素数8以上の酸無水物を過剰に含んでいる反応液の場合は、先ず、未反応の一般式(I)のアンモニウム塩を濾別して除き、低沸点の溶媒を減圧下留去した後、濃縮残渣

減圧下乾燥し、融点133℃~134℃の白色結晶70.13gを得た。これをアセトンで更に洗浄、再結晶して精製し、精製品の一部を元素分析、IR-スペクトル、NMR-スペクトルによって分析した。

元素分析 $C_8H_{17}NO_2$
 計算値(%) C: 41.73 H: 7.45 N: 6.09
 実測値(%) C: 41.4 H: 7.4 N: 6.0
 IR-スペクトル(KBr法) ν_{max} (cm^{-1})
 3000~2925 (ν_{CH}), 1738 (ν_{CO}),
 1365 (δ_{CH}), 1240 ~ 1230, 1190, 1040,
 925, 685 (ν_{CCl})

NMR-スペクトル
 δ (CD_3OD/TMS) ppm
 2.16 (3H, s), 3.23 (9H, s), 3.81 ~
 4.05 (4H, m), 5.55 (1H, m)
 以上の結果から前記の白色結晶(70.13g)は塩化3-クロロ-2-アセトキシプロピルト

リメチルアンモニウムであることを確認した。
(収率57%)

実施例2~6

エピクロルヒドリンとトリメチルアミン塩酸塩、臭化水素酸塩、ヨウ化水素酸塩より調製した種々の一般式(I)で表わされる化合物に実施例1と同じ方法でアシル化反応を行ない、対応する一般式(II)で表わされる化合物を得た。それらを表1に示す。

また、それらについて行なった、元素分析、IR-スペクトル、NMR-スペクトルの分析結果をまとめて表2に示す。

表 1

実施例番号	一般式(I)の化合物	アシル化剤	溶媒	一般式(II)の化合物	融点(°C)	収率(%)
2	臭化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム	臭化アセチル	氷酢酸	臭化3-クロロ-2-アセトキシプロピルトリメチルアンモニウム	140~142	65
3	ヨウ化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム	ヨウ化アセチル	氷酢酸	ヨウ化3-クロロ-2-アセトキシプロピルトリメチルアンモニウム	146~149	42
4*	臭化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム	臭化n-プロピル	n-酪酸	臭化3-クロロ-2-n-プロピルオキシプロピルトリメチルアンモニウム	96~98	62

実施例番号	一般式(I)の化合物	アシル化剤	溶媒	一般式(II)の化合物	融点(°C)	収率(%)
5***	臭化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム	臭化イソプロピル	n-酪酸	臭化3-クロロ-2-イソプロピルオキシプロピルトリメチルアンモニウム	87~89	66
6	臭化3-プロモ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム	臭化アセチル	氷酢酸	臭化3-プロモ-2-アセトキシプロピルトリメチルアンモニウム	153~155	67

* 臭化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウム 50 g (0.267 モル) と臭化n-プロピル 283.9 g (2.67モル) をn-酪酸 374ml中に溶解。

*** 臭化イソプロピルを 283.9 g (2.67モル) を使用した以外は実施例4と同様。

表 2

実施例番号	示性式	元素分析(%)			IR-スペクトル (KBr法) ν_{max} (cm ⁻¹)	NMR-スペクトル δ (CD ₃ OD/TMS)ppm
		C	H	N		
2	C ₈ H ₁₇ NBrClO ₂	(計算値) 34.99 (実測値) 34.6	6.24 6.2	5.10 5.3	3000~2920 (ν_{C-H}), 1735 ($\nu_{C=O}$), 1365 (ν_{C-O}), 1240-1230, 1195, 1045, 925, 655 (ν_{C-Cl})	2.15 (3H, s), 3.23 (9H, s), 3.80-4.05 (4H, m), 5.55 (1H, m)
3	C ₈ H ₁₇ NCI ₂ O ₂	(計算値) 28.88 (実測値) 29.7	5.33 5.2	4.38 4.1	3000~2920 (ν_{C-H}), 1735 ($\nu_{C=O}$), 1365 (ν_{C-O}), 1240-1230, 1190, 1045, 925, 655 (ν_{C-Cl})	2.16 (3H, s), 3.22 (9H, s), 3.81-4.05 (4H, m), 5.55 (1H, m)
4	C ₁₀ H ₂₁ NCI ₂ O ₂	(計算値) 46.39 (実測値) 46.3	8.15 8.0	5.44 5.1	2950 (ν_{C-H}), 1735 ($\nu_{C=O}$), 1190, 1090, 675 (ν_{C-Cl})	0.98 (3H, t), 1.76 (2H, m), 2.46 (2H, t), 3.22 (9H, s), 3.70-4.10 (4H, m), 5.60 (1H, m)

実施例	示性式	元素分析 (%)			IR-スペクトル (KBr 法) ν_{\max} (cm^{-1})	NMR-スペクトル δ ($\text{CD}_3\text{OD}/\text{TMS}$)ppm
		C	H	N		
5	$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{NCl}_2\text{O}_2$	(計算値) 46.59 (実測値) 47.1	8.15 8.2	5.44 5.2	2955 (ν_{CH}), 1732 (ν_{CO}), 1185, 1150, 660 (ν_{CCl})	1.20 (9H, d), 2.65 (1H, m), 3.22 (9H, s), 3.82-4.10 (4H, m), 5.55 (1H, m)
6	$\text{C}_8\text{H}_{17}\text{NB}_2\text{O}_2$	(計算値) 50.12 (実測値) 50.3	5.37 5.4	4.39 4.2	3000-2925 (ν_{CH}), 1740 (ν_{CO}), 1365 (δ_{CH}), 1240-1230, 1040, 565 ($\nu_{\text{C-Br}}$)	2.15 (3H, s), 3.23 (9H, s), 3.80-4.07 (4H, m), 5.58 (1H, m)

3050~3000 (ν_{CH}), 1720 (ν_{CO}), 1270,
1120~1060 ($\text{C}\delta\text{O}_4$), 720, 620

NMR-スペクトル

δ ($\text{CD}_3\text{OD}/\text{TMS}$)ppm
3.29 (9H, s), 3.80 ~ 4.28 (4H, m), 5.88
(1H, m), 7.47 ~ 7.75 (2H, m), 8.06 ~
8.12 (2H, m)

以上の結果から前記の白色結晶 (8.2 g) は、
過塩素酸3-クロロ-2-ベンゾキシプロピルト
リメチルアンモニウムであることを確認した。
(収率86%)

実施例8

アシル化剤として塩化n-カプリルを用い
る以外は、実施例7と同じ方法でアシル化反応
を行ない、過塩素酸3-クロロ-2-n-カプ
リロキシプロピルトリメチルアンモニウムを
収率67%で得た。(融点118℃~120℃) 精製
品の分析結果は以下のとおりである。

実施例7

塩化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルト
リメチルアンモニウム5g (0.0267モル) をア
セトニトリル100 mlに懸濁し、過塩素酸銀6.63
g (0.0294モル) を加えて室温で10分間攪拌し、
析出した塩化銀を濾過して除いた後、アシル化
剤として塩化ベンゾイル8.20g (0.0587モル)
を加えて引続き、室温で7日間攪拌した。溶媒
のアセトニトリルを減圧下留去し、残渣にエー
テル50mlを加えて室温で4日間放置して固化さ
せ、その固体をエーテル200 mlで洗浄し、乾燥
して融点108℃~110℃の白色固体8.2gを得
た。これをエーテルで洗浄、再結晶して精製し、
元素分析、IR-スペクトル、NMR-スペク
トルにより、分析した。

元素分析 $\text{C}_{13}\text{H}_{19}\text{NCl}_2\text{O}_6$

計算値(%) C: 43.87 H: 5.34 N: 3.93

実測値(%) C: 43.6 H: 5.1 N: 3.7

IR-スペクトル (KBr 法) ν_{\max} (cm^{-1})

元素分析 $\text{C}_{14}\text{H}_{29}\text{NCl}_2\text{O}_6$

分析値(%) C: 44.50 H: 7.68 N: 3.71

実測値(%) C: 44.2 H: 7.4 N: 3.5

IR-スペクトル (KBr 法) ν_{\max} (cm^{-1})
2930 (ν_{CH}), 1750 (ν_{CO}), 1185, 1120 ~ 1080
($\text{C}\delta\text{O}_4$), 630

NMR-スペクトル

δ ($\text{CD}_3\text{OD}/\text{TMS}$)ppm
0.90 (3H, m), 1.32 (8H, bs),
1.63 (2H, m), 2.46 (2H, t),
3.23 (9H, s), 3.65 ~ 4.30 (4H, m),
5.56 (1H, m)

実施例9

塩化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルト
リメチルアンモニウム41.45g (0.221モル)
とアシル化剤として用いた無水安息香酸500g
(2.21モル) をアセトニトリル1000ml中に混合
し、60℃で2.5時間加熱して溶解し、室温で
3日間放置した。減圧下に、アセトニトリルを
留去した残渣に水500mlを加えて、可溶成分を

溶解させ、固形分を濾別し、濾液をエーテル 900mlで抽出し、安息香酸を除いた後、水層を減圧下蒸留した。蒸留残渣にアセトン30mlを加えて溶解し、更に減圧下濃縮して得られた固形物をエーテルで洗浄し、乾燥して融点156℃~158℃の白色結晶45.8gを得た。これをアセトニトリル中で再結晶し、精製したものを元素分析、IR-スペクトル、NMR-スペクトルにより分析した。分析結果は以下のとおりである。

元素分析 $C_{13}H_{19}NC\ell_2O_2$

計算値(%) C: 53.50 H: 6.52 N: 4.80

実測値(%) C: 53.3 H: 6.3 N: 4.6

IR-スペクトル (KBr法) ν_{max} (cm^{-1})

3010 (ν_{CH}), 1720 (ν_{CO}), 1270, 1100, 725

NMR-スペクトル

δ (CD_3OD/TMS) ppm

3.33 (9H, s), 3.82 ~ 4.30 (4H, m),

5.88 (1H, m), 7.48 ~ 7.73 (2H, m),

8.06~8.23 (2H, m)

以上の結果から前記の白色結晶(45.8g)は

7.33 (5H, s)

実施例 11

塩化3-クロロ-2-ヒドロキシプロピトリメチルアンモニウム34.7g (0.185モル)と無水n-カプリル酸508.0g (1.881モル)をアセトニトリル1300mlに混合し、60℃で3日間攪拌し、その後、反応液中の不溶分を濾別した後、濾液中のアセトニトリルを減圧下留去し濃縮した。再度析出してきた不溶分を濾別し、濾液にエーテル700mlを加えて、均一溶液とした。その溶液を水で逆抽出して、エーテル層を分離し、水層を減圧下濃縮してアセトン100mlを加えた。アセトン不溶分を濾別し、可溶分を減圧下濃縮してアセトンを除いた後、エーテル200mlを加えて結晶化させ、これを濾過、乾燥して融点78℃~80℃の白色結晶12.4gを得た。これをアセトンより再結晶して精製したものを、元素分析、IR-スペクトル、NMR-スペクトルにより分析した。

塩化3-クロロ-2-ベンソキシプロピトリメチルアンモニウムであることを確認した。

(収率71%)

実施例 10

アシル化剤として無水フェニル酢酸を用いる以外は実施例9と同様にして、塩化3-クロロ-2-フェニルアセトキシプロピトリメチルアンモニウムを収率45%で得た。(融点124℃~126℃)

精製品の分析結果は以下のとおりである。

元素分析 $C_{14}H_{21}NC\ell_2O_2$

計算値(%) C: 54.91 H: 6.91 N: 4.57

実測値(%) C: 54.7 H: 7.1 N: 4.4

IR-スペクトル (KBr法) ν_{max} (cm^{-1})

3020~3000 (ν_{CH}), 1730 (ν_{CO}), 1250, 1160,

710, 690

NMR-スペクトル

δ (CD_3OD/TMS) ppm

3.24 (9H, s), 3.65 (2H, s),

3.80~4.15 (4H, m), 5.65 (1H, m),

元素分析 $C_{14}H_{29}NC\ell_2O_2$

計算値(%) C: 53.58 H: 9.25 N: 4.46

実測値(%) C: 53.3 H: 9.0 N: 4.3

IR-スペクトル (KBr法) ν_{max} (cm^{-1})

2930 (ν_{CH}), 1750 (ν_{CO}), 1185, 1100, 1050,

635

NMR-スペクトル

δ (CD_3OD/TMS) ppm

0.88 (3H, m), 1.30 (8H, bs),

1.63 (2H, m), 2.43 (2H, t),

3.20 (9H, s), 3.62 ~ 4.10 (4H, m),

5.56 (1H, m)

以上の結果から前記の白色結晶(12.4g)は、塩化3-クロロ-2-n-カプリリロキシプロピトリメチルアンモニウムであることを確認した。(収率21%)

(発明の効果)

本発明の新規な3-ハロゲノ-2-アシロキシプロピトリメチルアンモニウム塩は、心臓病の治療薬として最近その効果が認めら

れているL-カルニチンの合成中間体として
有用な化合物である。

本発明の新規化合物を用いることによって、
L-カルニチンの前駆体を従来法より簡単な
方法で選択率よく得ることができるため、今
後、L-カルニチンの工業的製造法の確立に
大いに寄与するものである。

出願人 製鉄化学工業株式会社

代表者 増田裕治