



(11) PI 0907918-1 B1



* B R P I 0 9 0 7 9 1 8 B 1 *

(22) Data do Depósito: 27/03/2009

(45) Data de Concessão: 24/07/2018

República Federativa do Brasil
Ministério da Indústria, Comércio Exterior
e Serviços
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(54) Título: ÁCIDOS SULFOPEROXICARBOXÍLICOS, SUA PREPARAÇÃO E MÉTODOS DE UTILIZAÇÃO COMO AGENTES ALVEJANTES E ANTIMICROBIANOS

(51) Int.Cl.: C07C 309/12; C07C 309/08; C07C 309/05; C07D 303/16; A23L 3/3535; C11D 3/48

(30) Prioridade Unionista: 28/03/2008 US 61/040.444

(73) Titular(es): ECOLAB INC.

(72) Inventor(es): JUNZHONG LI; RICHARD K. STAUB; DAVID D. MCSHERRY; KEITH G. LASCOTTE; STEVEN J. LANGE; FRANK EVERTS

(85) Data do Início da Fase Nacional: 25/08/2010

“ÁCIDOS SULFOPEROXICARBOXÍLICOS, SUA PREPARAÇÃO E MÉTODOS DE UTILIZAÇÃO COMO AGENTES ALVEJANTES E ANTIMICROBIANOS”

CAMPO DA INVENÇÃO

A presente invenção refere-se a novos compostos de ácidos sulfoperoxicarboxílicos, composições e métodos de fabricação e utilização desses compostos.

CONTEXTO

Os ácidos peroxicarboxílicos são conhecidos por serem utilizados como agentes antimicrobianos e alvejantes. No entanto, os ácidos peroxicarboxílicos convencionais possuem desvantagens inerentes no que se refere à estabilidade de armazenamento limitada e à solubilidade em água. Além disso, a maioria dos ácidos peroxicarboxílicos possui um odor desagradável. Deste modo, existe necessidade de composições e compostos de ácido peroxicarboxílico com pouco ou nenhum odor, solúveis em água e com armazenamento estável que também possuam propriedades antimicrobianas e alvejantes.

RESUMO

Em alguns aspectos, a presente invenção refere-se a novos ácidos sulfoperoxicarboxílicos e a seus métodos de fabricação. Os compostos da invenção são estáveis durante o armazenamento, possuem pouco ou nenhum odor e são solúveis em água. Além disso, os compostos da presente invenção podem ser derivados de óleos renováveis, não baseados em petróleo.

Em alguns aspectos, a presente invenção fornece métodos para utilização de seus compostos como agentes alvejantes e/ou antimicrobianos. Em outros, a presente invenção fornece métodos para usar seus compostos como agentes de acoplamento. A presente invenção também fornece métodos para uso dos seus compostos como hidrótopos alvejantes com baixa formação de espuma para lavadoras de túnel e para máquinas de lavar com cárregamento lateral.

Em alguns casos, os compostos e as composições da presente invenção são adequados para uso como alvejantes em baixas temperaturas, por exemplo, cerca de 40 graus Celsius. Em outros, os compostos da presente invenção são adequados para uso como alvejantes de peroxigênio com pH otimizado, em combinação com detergentes alcalinos. A presente invenção também inclui um método para uso dos seus compostos e composições como alvejantes para tecidos, como lã e algodão, que protegem as cores e são tolerantes a tecidos.

BREVE DESCRIÇÃO DAS FIGURAS

A Figura 1 é uma representação gráfica do perfil de estabilidade do ácido peroxicotanoico ao longo do tempo, quando em contato com diferentes soluções de teste.

A Figura 2 é uma representação gráfica da estabilidade de uma composição modelar da presente invenção ao longo do tempo a uma temperatura elevada.

A Figura 3 é uma representação gráfica das capacidades das composições selecionadas da presente invenção de estabilização de ácidos percarboxílicos ao longo do tempo.

A Figura 4 é uma representação gráfica do desempenho alvejante das composições da presente invenção em comparação aos agentes alvejantes disponíveis no mercado.

5 A Figura 5 é uma representação gráfica do perfil de estabilidade do ácido peroxicetanoico em combinação com composições modelares da presente invenção.

A Figura 6 é uma representação gráfica da capacidade de acoplamento de uma composição selecionada da presente invenção.

DESCRÍÇÃO DETALHADA

10 A presente invenção refere-se a ácidos sulfoperoxicarboxílicos com a Fórmula I e a seus métodos de fabricação e utilização. Ao contrário dos ácidos peroxicarboxílicos convencionais, os ácidos sulfoperoxicarboxílicos da presente invenção têm pouco odor, são solúveis em água e estáveis no armazenamento. Os compostos da presente invenção podem ser usados como um pó sólido puro, ou misturados a outros ingredientes funcionais, por 15 exemplo, quelantes, tampões ou outros agentes de limpeza. Eles também podem ser incorporados a fórmulas líquidas. Os compostos e composições da presente invenção têm muitos usos, incluindo, mas não se limitando a, agentes antimicrobianos, alvejantes e de acoplamento.

20 Para que a invenção possa ser compreendida mais facilmente, primeiramente serão definidos determinados termos.

Conforme usados aqui, os termos "porcentagem do peso", "% do peso", "porcentagem por peso", "% por peso" e suas variações se referem à concentração de uma substância à medida que o seu peso é dividido pelo peso total da composição e multiplicado por 100. Entende-se que, conforme usados aqui, os termos "porcentagem", "%" e similares são 25 sinônimos de "porcentagem do peso", "% do peso", etc.

Como usado nesse documento, o termo "cerca de" se refere à variação que pode ocorrer na quantidade numérica, por exemplo, por meio de procedimentos típicos de medição e manuseio de líquidos usados para a fabricação de concentrados ou soluções de uso no mundo real; por erro involuntário nesses procedimentos; por diferenças na fabricação, 30 fonte ou pureza dos ingredientes utilizados para fazer as composições ou executar os métodos; e assim por diante. O termo "cerca de" também abrange quantidades que diferem devido a diferentes condições de equilíbrio para uma composição resultante de determinada mistura inicial. Quer modificadas, ou não, pelo termo "cerca de", as afirmações incluem equivalentes às quantidades.

35 É necessário observar que, conforme usadas nessas especificações e nas afirmações anexas, as formas singulares "um", "uma" e "o", "a" incluem as respectivas formas plurais, a menos que o conteúdo claramente indique o contrário. Assim, por exemplo, a refe-

rência a uma composição que contenha “um composto” inclui uma composição com dois ou mais compostos. Deve-se salientar também que o termo “ou” geralmente é utilizado no sentido de “e/ou” a menos que o conteúdo claramente indique o contrário.

Conforme usadas aqui, as expressões “odor desagradável”, “odor repulsivo” ou “mau cheiro” se referem a um odor penetrante, acre, forte ou a ambiente atmosférico do qual uma pessoa comum se retiraria se fosse capaz. O tom hedônico fornece uma medida do grau em que o odor é agradável ou desagradável. Um “odor desagradável”, “odor repulsivo” ou “mau cheiro” possui um tom hedônico de avaliação como “tão desagradável quanto” ou “mais desagradável que” uma solução de 5% do peso de ácido acético, ácido propiônico, ácido butírico, ou suas misturas.

Conforme usado nesse documento, o termo “micro-organismo” se refere a qualquer organismo não celular ou unicelular (incluindo colonial). Micro-organismos incluem todos os procariotos. Entre eles estão bactérias (incluindo cianobactérias), esporos, liquens, fungos, protozoários, virinos, viroides, vírus, bacteriófagos e algumas algas. Conforme usado aqui, o termo “micrório” é sinônimo de micro-organismo.

A expressão “produto alimentício”, usada aqui, inclui qualquer substância alimentícia que talvez necessite de tratamento com uma composição ou agente antimicrobiano e que é comestível, com ou sem preparação adicional. Os produtos alimentícios incluem carnes (p. ex., carne vermelha e de porco), frutos do mar, aves, produtos agrícolas (por exemplo, frutas e verduras), ovos, ovos vivos, produtos de ovo, alimentos prontos para consumo, trigo, sementes, raízes, tubérculos, folhas, caules, cereais, flores, brotos, temperos ou qualquer combinação desses. O termo “produtos agrícolas” se refere a produtos alimentícios, como frutas, verduras e vegetais ou materiais derivados de vegetais, que normalmente são vendidos crus e, muitas vezes, sem embalagem, e que às vezes podem ser comidos crus.

Como usada aqui, a expressão “vegetal” ou “produto vegetal” inclui qualquer substância vegetal ou derivada de vegetais. Os produtos vegetais incluem, mas não se limitam a, sementes, nozes, caroços, flores de corte, plantas ou culturas cultivadas ou armazenadas em estufa, plantas de interior, e assim por diante. Os produtos vegetais incluem muitos alimentos para animais.

A expressão do “produto de carne”, usada nesse documento, se refere a todos os tipos de carne animal, inclusive carcaça, músculo, gordura, órgãos, pele, ossos, fluidos corporais e componentes semelhantes que formam o animal. A carne animal inclui, mas não se limita a, carne de mamíferos, aves, peixes, répteis, anfíbios, caracóis, moluscos, crustáceos, outras espécies comestíveis, como lagosta, caranguejo, etc., ou outros tipos de frutos do mar. Os tipos de carne animal incluem, por exemplo, a totalidade ou parte da carne animal, isoladamente ou em combinação com outros ingredientes. As formas típicas incluem, por exemplo, carnes processadas, como carnes curadas, produtos seccionados e formados,

produtos picados, produtos cortados em cubos, carne moída e produtos que a incluam, produtos integrais, e assim por diante.

Conforme usado nesse documento, o termo “aves” se refere a todas as formas de qualquer ave mantida, obtida ou domesticada para obtenção de carne ou ovos, incluindo 5 galinha, peru, avestruz, galeto, pombo, galinha d’angola, faisão, codorna, pato, ganso, ema, ou similares e seus ovos. O termo “aves” inclui aves inteiras, seccionadas, processadas, cozidas ou cruas, e abrange todas as formas de carne de aves, seus subprodutos e produtos secundários. A carne de aves inclui músculos, gordura, órgãos, pele, ossos e fluidos corporais e componentes semelhantes que formam o animal. Os tipos de carne animal incluem, por exemplo, a totalidade ou parte da carne animal, isoladamente ou em combinação 10 com outros ingredientes. Os tipos mais comuns incluem, por exemplo, carne de ave processada, como carne curada, produtos seccionados e formados, produtos picados, produtos cortados em cubos e produtos integrais.

Como usada aqui, a expressão “restos de aves” se refere a detritos, resíduos, materiais, sujeira, partes não comestíveis, partes, restos, vísceras, órgãos, fragmentos ou combinações desses materiais e semelhantes removidos de carcaças de aves ou de suas partes durante o processamento e que vão para um sistema de esgoto.

Conforme usada aqui, a expressão “superfície de processamento de alimentos” se refere à superfície de uma ferramenta, máquina, equipamento, estrutura, prédio ou similares, que é empregada como parte de uma atividade de processamento, preparo ou armazenamento de alimentos. Exemplos de superfícies de processamento de alimentos incluem a superfície de equipamentos de processamento ou preparação de alimentos (por exemplo, equipamentos de fatiar, enlatar ou transportar, incluindo calhas), de utensílios de processamento de alimentos (por exemplo, utensílios, louças, equipamento de lavar e copos de bar), 20 e também pisos, paredes ou dispositivos de estruturas nos quais ocorre o processamento de alimentos. As superfícies de processamento de alimentos são encontradas e utilizadas em sistemas de circulação de ar antideterioração de alimentos, higienização de embalagens assépticas, limpadores e desinfetantes de refrigeradores e esfriadouro de alimentos, higienização de equipamentos de lavar, limpeza e higienização de branqueador, materiais de embalagens para alimentos, aditivos de tábua de cortar, higienização da terceira pia, refrigeradores e aquecedores de bebida, águas de refrigeração ou ferventes para carnes, desinfetantes de lavadora automática, géis de higienização, torres de resfriamento, sprays para vestuário antimicrobiano para processamento de alimentos e lubrificantes de preparação de alimentos não aquosos ou com pouca água, óleos e aditivos para enxágue.

35 Como usados aqui, os termos “equipamentos” ou “utensílios” podem se referir a utensílios de alimentação e de cozinha, pratos e outras superfícies duras, como chuveiros, pias, vasos sanitários, banheiras, balcões, janelas, espelhos, veículos de transporte e pisos.

Conforme usado nesse documento, o termo "equipamentos de lavar" se refere a utensílios para lavar, limpar ou enxaguar. Os utensílios também incluem artigos feitos de plástico. Os tipos de plásticos que podem ser limpos com as composições de acordo com a invenção incluem, mas não se limitam a, aqueles que compreendem os polímeros de policarbonato 5 (PC), polímeros de acrilonitrila butadieno estireno (ABS) e polímeros de polissulfona (PS). Outro exemplo de plástico que pode ser limpo com os compostos e composições da invenção inclui politereftalato de etileno (PET).

Como usada aqui, a expressão "correntes de ar" inclui sistemas de circulação de ar antideterioração de alimentos. As correntes de ar também incluem aquelas tipicamente encontradas em hospitais, salas de cirurgia, enfermarias, maternidades, necrotérios e salas de diagnóstico clínico. 10

Conforme usado aqui, o termo "água" inclui águas de processamento ou transporte de alimentos. As águas de processamento ou transporte de alimentos incluem aquelas de transporte de produtos agrícolas (por exemplo, aquelas encontradas em calhas, transporte 15 por tubulações, cortadores, fatiadores, branqueadores, sistemas de retorta, lavadoras e similares), sprays de correia para linhas de transporte de alimentos, recipientes de imersão de botas e mãos, águas de enxágue da terceira pia, e assim por diante. As águas também incluem águas domésticas e recreativas, como piscinas, spas, escorregadores recreativos, toboágua, fontes e similares.

Como usada aqui, a expressão "superfície de serviço de saúde" se refere a uma 20 superfície de um instrumento, dispositivo, carrinho, gaiola, mobília, estrutura, prédio ou similares, utilizada como parte de uma atividade de serviço de saúde. Exemplos de superfícies de serviço de saúde incluem as superfícies de instrumentos ou dispositivos médicos ou odontológicos, de aparelhos eletrônicos utilizados no monitoramento da saúde do paciente e 25 de pisos, paredes ou dispositivos de estruturas nos quais ocorrem os serviços de saúde. As superfícies de serviços de saúde se encontram em hospitais, salas de cirurgia, enfermarias, maternidades, necrotérios e salas de diagnóstico clínico. Essas superfícies podem ser tipificadas como "superfícies duras" (como paredes, pisos, urinóis, etc.), ou superfícies de tecido, por exemplo, superfícies de malha, tecidos e não tecidos (como roupas cirúrgicas, cortinas, 30 roupa de cama, ataduras, etc.), ou equipamentos de assistência ao paciente (como respiradores, equipamentos de diagnóstico, shunts, sondas, cadeiras de rodas, camas, etc.), ou equipamentos cirúrgicos e de diagnóstico. As superfícies de serviço de saúde incluem itens e superfícies utilizados no cuidado à saúde animal.

Conforme usado aqui, o termo "instrumento" se refere aos vários instrumentos ou 35 dispositivos médicos ou odontológicos que podem se beneficiar da limpeza com uma composição de acordo com a presente invenção.

As expressões "instrumento médico", "instrumento odontológico", "dispositivo médi-

co”, “dispositivo odontológico”, “equipamento médico” ou “equipamento odontológico” usadas nesse documento se referem a instrumentos, dispositivos, ferramentas, itens, aparelhos e equipamentos usados na medicina ou odontologia. Esses instrumentos, dispositivos e equipamentos podem ser esterilizados a frio, enxaguados ou lavados e, em seguida, esterilizados com calor ou, de outra forma, ser limpos com uma composição da presente invenção..

5 Esses diversos instrumentos, dispositivos e equipamentos incluem, mas não se limitam a: instrumentos de diagnóstico, bandejas, recipientes, suportes, racks, fórceps, tesouras, lâminas, serras (por exemplo, serras de osso e suas lâminas), hemostatos, facas, cinzéis, fórceps cirúrgicos, limas, pinças, brocas, pontas de brocas, grossas, brocas odontológicas, 10 afastadores, abridores, elevadores, grampos, suportes de agulhas, transportadores, presilhas, ganchos, goivas, curetas, retratores, endireitadores, punções, extratores, curetas, ceratôtomo, espátulas, expressores, trocares, dilatadores, gaiolas, equipamentos de vidro, tubos, cateteres, cânulas, plugues, stents, sondas (por exemplo, endoscópios, estetoscópios e arroscópios) e equipamentos relacionados e similares, ou suas combinações.

15 Conforme usados aqui, objetos ou superfícies “agrícolas” ou “veterinárias” incluem alimentos para animais, estações de fornecimento de água e locais de retenção de animais, acomodações para animais, clínicas veterinárias (p. ex., áreas de cirurgia ou tratamento), áreas cirúrgicas veterinárias, e assim por diante.

20 Como usado aqui, o termo “isento de fósforo” ou “substancialmente isento de fósforo” se refere a uma composição, mistura ou ingrediente que não contém fósforo ou composto que contém fósforo ou ao qual tenha sido adicionado fósforo ou um composto contendo fósforo. Se fósforo ou um composto contendo fósforo estiver presente por contaminação de uma composição, mistura ou ingrediente isento de fósforo, a quantidade de fósforo deve ser inferior a 0,5% do peso. É preferível que a quantidade de fósforo seja inferior a 0,1% do peso, 25 e melhor ainda se for inferior a 0,01% do peso.

Para os propósitos desse pedido de patente, a redução microbiana bem-sucedida é obtida quando as populações microbianas são reduzidas para, no mínimo, cerca de 50%, ou significativamente mais do que o obtido por lavagem com água. Maiores reduções na população microbiana fornecem níveis maiores de proteção.

30 Conforme usado aqui, o termo “desinfetante” refere-se a um agente que reduz o número de contaminantes bacterianos a níveis seguros, conforme determinado por requisitos de saúde pública. Em determinados casos, os desinfetantes para uso nesta invenção fornecerão uma redução de, pelo menos, 99,999% (redução na ordem de 5 logs). Essas reduções podem ser avaliadas usando um procedimento estabelecido em *Germicidal and Detergent Sanitizing Action of Disinfectants*, Official Methods of Analysis of the Association of Official Analytical Chemists, parágrafo 960.09 e seções aplicáveis, 15.^a edição, 1990 (Dirtriz EPA 91-2). De acordo com essa referência, um desinfetante deve fornecer uma redu-

ção de 99,999% (redução na ordem de 5 logs) dentro de 30 segundos à temperatura ambiente, 25 ± 2 °C, contra diversos organismos de ensaio.

Como usado nesse documento, o termo “desinfetante” também se refere a um agente que mata todas as células vegetativas, incluindo os micro-organismos patogênicos 5 mais conhecidos, utilizando o procedimento descrito em *A.O.A.C. Use Dilution Methods, Official Methods of Analysis of the Association of Official Analytical Chemists*, parágrafo 955.14 e seções aplicáveis, 15.ª edição, 1990 (Diretriz EPA 91-2). Segundo esse documento, o termo “desinfecção de alto nível” ou “desinfetante de alto nível” se refere a um composto ou composição que mata praticamente todos os organismos, exceto níveis elevados de 10 esporos bacterianos, e isso é obtido com um germicida químico liberado para comercialização como esterilizante pelo FDA (Food and Drug Administration). Conforme usado aqui, o termo “desinfecção de nível intermediário” ou “desinfetante de nível intermediário” se refere a um composto ou composição que mata microbactérias, a maioria dos vírus e bactérias com um germicida químico registrado como tuberculocida pela EPA (Environmental Protection Agency). Conforme usado nesse documento, o termo “desinfecção de baixo nível” ou “desinfetante de baixo nível” se refere a um composto ou composição que mata alguns vírus 15 e bactérias com um germicida químico registrado como desinfetante hospitalar pela EPA.

Conforme utilizado nessa invenção, o termo “esporicida” se refere a um agente ou processo físico ou químico com a capacidade de causar uma redução superior a 90% (redução na ordem de 1 log) na população de esporos do *Bacillus cereus* ou *Bacillus subtilis* em 20 10 segundos a 60 °C. Em determinados casos, as composições esporicidas da invenção fornecem uma redução superior a 99% (redução na ordem de 2 logs), superior a 99,99% (redução na ordem de 4 logs) ou superior a 99,999% (redução na ordem de 5 logs) nessa população dentro de 10 segundos a 60 °C.

25 A diferenciação da atividade “cida” ou “estática” dos antimicrobianos, as definições que descrevem o grau de eficácia e os protocolos laboratoriais oficiais para mensuração da eficácia são considerações para a compreensão da relevância de agentes e composições antimicrobianos. As composições antimicrobianas podem causar dois tipos de dano celular microbiano. O primeiro é uma ação letal e irreversível, que resulta na destruição completa 30 das células microbianas ou em sua incapacitação. O segundo tipo de dano celular é reversível, de forma que, se o organismo se livra do agente, pode voltar a multiplicar-se. O primeiro é denominado microbicida e o segundo microbiostático. Um desinfetante é, por definição, um agente que fornece atividade antimicrobiana ou microbicida. Em contraste, um conservante geralmente é descrito como composição inibidora ou microbiostática.

35 Como usado nesse documento, o termo “alquila” ou “grupos alquila” se refere a hidrocarbonetos saturados com um ou mais átomos de carbono, incluindo grupos alquila de cadeia reta (por exemplo, metilo, etilo, propilo, butilo, pentilo, hexilo, heptilo, octilo, nonilo,

decilo, etc.), grupos alquila cíclicos (ou grupos cicloalquila ou alicíclico ou carbocíclico) (por exemplo, ciclopropil, ciclopentil, cicloexil, cicloheptil, ciclo-octil, etc.), grupos alquila de cadeia ramificada (p. ex., isopropil, terc-butil, sec-butil, isobutil, etc.) e grupos alquila substituída (p. ex., grupos cicloalquila de alquila substituída e grupos alquila de cicloalquila substituída).

5 A menos que especificado o contrário, o termo “alquila” inclui “alquilas não substituídas” e “alquilas substituídas”. Conforme esse documento, o termo “alquilas substituídas” se refere a grupos alquila com substitutos no lugar de um ou mais hidrogênios em um ou mais carbonos do hidrocarboneto base. Esses substitutos podem incluir, por exemplo, os grupos alquenilo, alquinilo, halogêneo, hidroxilo, alquilcarboniloxi, arilcarboniloxi, alcoxilcarboniloxi, 10 ariloxi, ariloxicarboniloxi, carboxilato, alquilcarbonil, arilcarbonil, alcoxilcarbonila, aminocarbonil, alquilaminocarbonil, dialquilaminocarbonil, alquitiocarbonil, alcoxil, fosfato, fosfonato, fosfinato, ciano, amino (incluindo alquilamino, dialquilamino, arilamino, diarilamino e alquilariamino), acilamino (incluindo alquilcarbonilamino, arilcarbonilamino, carbamoil e ureído), imino, sulfidril, alquiltio, ariltio, tiocarboxilato, sulfatos, alquilsulfinil, sulfonatos, sulfamoil, sulfonamido, nitro, trifluormetila, ciano, azido, heterocíclicos, alquilaril ou aromáticos (incluindo heteroaromáticos).

15 Em alguns casos, as alquilas substituídas podem incluir um grupo heterocíclico. Como usado aqui, o termo “grupo heterocíclico” inclui estruturas de anel fechado análogas aos grupos carbocíclicos nos quais um ou mais átomos de carbono do anel são elementos diferentes de carbono, por exemplo, nitrogênio, enxofre e oxigênio. Os grupos heterocíclicos podem ser saturados ou insaturados. Exemplos de grupos heterocíclicos incluem, mas não se limitam a, aziridina, óxido de etileno (epóxidos, oxiranas), tiirana (episulfetos), dioxirana, 20 azetidina, oxetana, tietano, dioxetano, ditietano, ditieto, azolidina, pirrolidina, pirrolina, oxolano, diidrofurano e furano.

25 *Compostos da invenção*

A presente invenção relaciona-se, pelo menos em parte, com ácidos sulfoperoxicarboxílicos, suas composições e sua utilização em uma variedade de aplicações de alvejamento, desinfecção e limpeza. Os ácidos sulfoperoxicarboxílicos da presente invenção também são úteis como agentes de acoplamento. Além disso, determinados compostos da 30 presente invenção podem ser derivados de óleos renováveis não baseados em petróleo, por exemplo, óleos de mamona, pinho, soja, canola, oliva, amendoim, sebo, semente de colza e dendê.

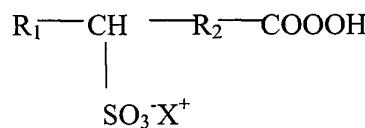
35 Como usado nesse documento, o termo “ácido sulfoperoxicarboxílico” ou “ácido peroxicarboxílico sulfonado” se refere à forma do ácido peroxicarboxílico de um ácido carboxílico sulfonado. Os ácidos sulfoperoxicarboxílicos da presente invenção podem ser usados de forma independente ou combinados a outros ingredientes. Em alguns casos, as composições da presente invenção podem incluir um ou mais dos ácidos sulfoperoxicarboxílicos da

presente invenção.

Os ácidos peroxicarboxílicos (ou percarboxílicos) geralmente possuem a fórmula $R(CO_3H)_n$, em que, por exemplo, R é um grupo alquil, arilalquil, cicloalquil, aromático ou heterocíclico, e n é um, dois ou três, e é nomeado pela prefixação do ácido pai com peroxy. Os ácidos percarboxílicos podem ser criados pela ação direta de equilíbrio catalisado por ácido do peróxido de hidrogênio com o ácido carboxílico, por auto-oxidação de aldeídos ou de cloretos de ácido, e hidretos ou anidridos carboxílicos com peróxido de hidrogênio ou de sódio. O grupo R pode ser saturado ou insaturado, bem como substituído ou não substituído.

As estruturas químicas encontradas nesse documento foram representadas de acordo com os padrões convencionais conhecidos. Assim, nos locais em que um átomo, como um átomo de carbono, parece ser desenhado de uma forma que aparenta possuir valência insatisfieta, supõe-se que essa valência é satisfeita por um átomo de hidrogênio, mesmo que esse átomo não tenha sido necessariamente representado de forma explícita. As estruturas de alguns dos compostos dessa invenção incluem átomos de carbono estereogênicos. É preciso entender que isômeros resultantes dessa assimetria (por exemplo, todos os enantiômeros e diastereômeros) estão incluídos no escopo dessa invenção, a menos que indicado o contrário. Ou seja, a menos que seja determinado o contrário, qualquer centro de carbono quiral pode ser de estereoquímica (R) ou (S). Esses isômeros podem ser obtidos em uma forma substancialmente pura por meio de técnicas de separação clássicas e pela síntese controlada estereoquimicamente. Além disso, os alquenos podem incluir a geometria E ou Z, se for o caso. Além disso, os compostos da presente invenção podem existir nas formas não solvatada e solvatada, com solventes aceitáveis, como água, THF, etanol e similares. Em geral, as formas solvatadas são consideradas equivalentes às não solvatadas para os fins da presente invenção.

Em alguns aspectos, a presente invenção se refere aos ácidos sulfoperoxicarboxílicos com Fórmula I:



(Fórmula I)

Em que R_1 é hidrogênio ou um grupo alquila substituído ou não;

R_2 é um grupo alquila substituído ou não;

X é hidrogênio, um grupo catiônico ou um éster que forma um grupo; sais ou ésteres desses.

Em alguns casos, R_1 é um grupo alquila C_m substituído ou não; X é hidrogênio, um grupo catiônico ou um éster que forma um grupo; R_2 é um grupo alquila C_n substituído ou

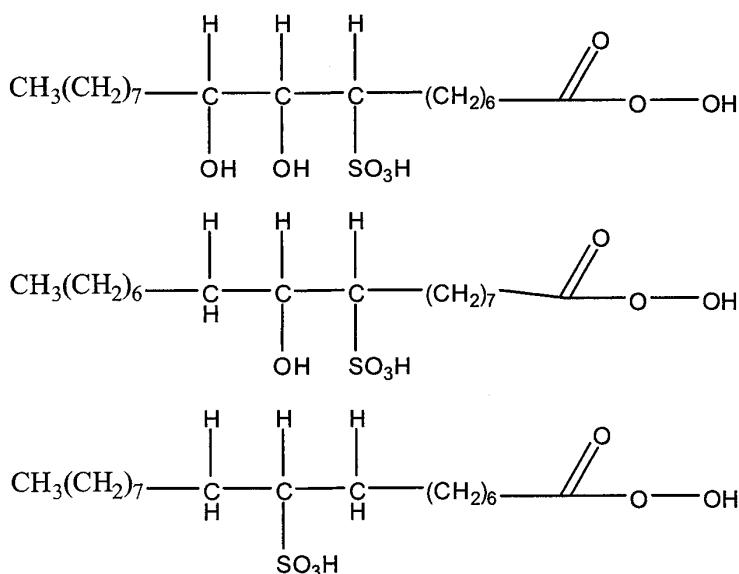
não; m=1 a 10; n = 1 a 10; e m+ n é menor que 18, ou sais, ésteres ou misturas desses.

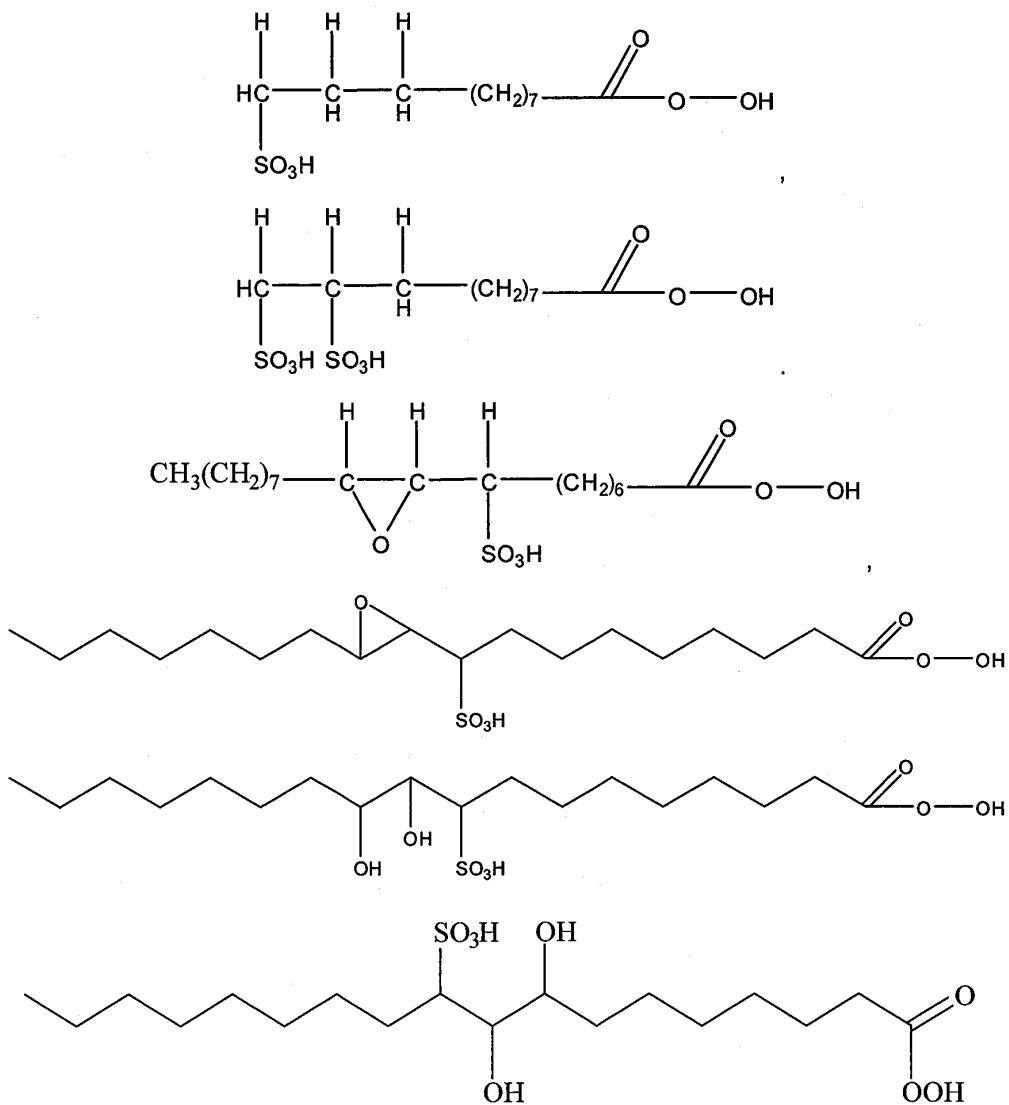
Em outros casos, R₁ é hidrogênio. R₁ também pode ser um grupo alquila substituído ou não. Em certos casos, R₁ é um grupo alquila substituído ou não que não inclui um grupo alquila cíclico. Em outros, R₁ é um grupo alquila substituído. R₁ também pode ser um grupo alquila C₁-C₉ não substituído. Em determinados casos, R₁ é um grupo alquila C₇ ou C₈ não substituído. Em outros, R₁ é um grupo alquila C₈ – C₁₀ substituído. R₁ também pode ser um grupo alquila C₈-C₁₀ substituído por pelo menos 1 ou 2 grupos hidroxilo. Em outros casos, R₁ é um grupo alquila C₁-C₉ substituído. Em outros, R₁ é um grupo alquila C₁-C₉ substituído por pelo menos 1 grupo SO₃H.

R₁ também pode ser um grupo alquila C₉-C₁₀ substituído. Em determinados casos, R₁ é um grupo alquila C₉-C₁₀ substituído em que pelo menos dois dos carbonos no carbono base formam um grupo heterocíclico. Esse grupo heterocíclico pode ser um grupo epóxido em determinados casos.

Em certos casos, R₂ é um grupo alquila C₁ a C₁₀ substituído. Em outros, R₂ é um grupo alquila C₈-C₁₀ substituído. R₂ também pode ser um grupo alquila C₆-C₉ não substituído. Em determinadas situações, R₂ é um grupo alquila C₈ a C₁₀ substituído por pelo menos um grupo hidroxilo. Em outras, R₂ é um grupo alquila C₁₀ substituído por pelo menos dois grupos hidroxilo. R₂ também pode ser um grupo alquila C₈ substituído por pelo menos um grupo SO₃H. R₂ ainda pode ser um grupo C₉ substituído em que, pelo menos dois dos carbonos no carbono base formam um grupo heterocíclico. Esse grupo heterocíclico pode ser um grupo epóxido em determinados casos. Em alguns casos, R₁ é um grupo alquila C₈-C₉ substituído ou não, e R₂ é um grupo alquila C₇-C₈ substituído ou não.

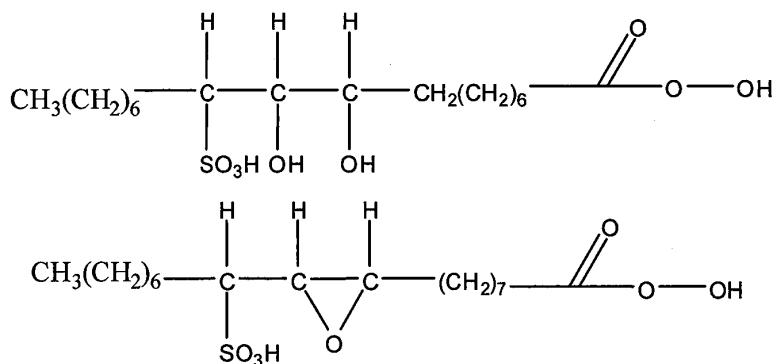
Em outros, o composto da invenção é selecionado em um grupo constituído por:

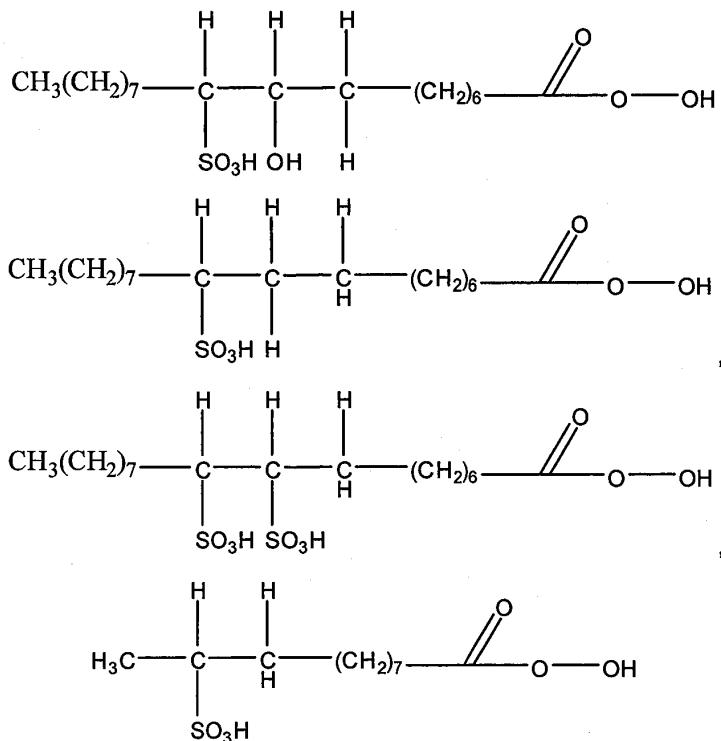




e suas misturas e derivados.

Em outros casos, o composto da invenção é selecionado em um grupo constituído por:





e suas misturas e derivados.

Os compostos da invenção também são apresentados abaixo na Tabela 1.

Tabela 1.

Compostos peroxiácidos sulfonados	
ID	Estrutura/Nome do composto
A	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{OH}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{SO}_3\text{H}}{\text{C}}}-\text{(CH}_2)_7-\text{C=C}-\text{O}-\text{OH}$ Ácido 10-hidróxi-9-sulfooctadecaneperoxoico
B	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7-\overset{\text{H}}{\underset{\text{OH}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{OH}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{SO}_3\text{H}}{\text{C}}}-\text{(CH}_2)_6-\text{C=C}-\text{O}-\text{OH}$ Ácido 9,10-diidróxi-8-sulfooctadecaneperoxoico
C	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{SO}_3\text{H}}{\text{C}}}-\text{(CH}_2)_6-\text{C=C}-\text{O}-\text{OH}$ Ácido 9-sulfooctadecaneperoxoico

D	$ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{HC} & - \text{C} & - \text{C} & - (\text{CH}_2)_7 & & & \text{O} - \text{OH} \\ & & & & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & & & & & \\ \end{array} $ <p>Ácido 11-sulfoundecaneperoxoico</p>
E	$ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{HC} & - \text{C} & - \text{C} & - (\text{CH}_2)_7 & & & \text{O} - \text{OH} \\ & & & & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & \text{SO}_3\text{H} & & & & \\ \end{array} $ <p>Ácido 10,11-dissulfoundecaneperoxoico</p>
F	<p>Ácido 8-(3-octiloxiran-2-il)-8-sulfooctaneperoxoico</p> $ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_7 & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - (\text{CH}_2)_6 & & \text{O} - \text{OH} \\ & & \text{O} & & & & \\ & & & & & & \\ & & & \text{SO}_3\text{H} & & & \\ \end{array} $
G	$ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_6 & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{CH}_2(\text{CH}_2)_6 & & \text{O} - \text{OH} \\ & & & & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & \text{OH} & \text{OH} & & & \\ \end{array} $ <p>Ácido 9,10-diidróxi-11-sulfooctadecaneperoxoico</p>
H	$ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_6 & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - (\text{CH}_2)_7 & & \text{O} - \text{OH} \\ & & & \text{O} & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & & & & & \\ \end{array} $ <p>Ácido 8-(3-octiloxiran-2-il)-8-sulfooctaneperoxoico</p>
I	<p>Ácido 9-hidróxi-10-sulfooctadecaneperoxoico</p> $ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_7 & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - (\text{CH}_2)_6 & & \text{O} - \text{OH} \\ & & & & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & \text{OH} & \text{H} & & & \\ \end{array} $

J	$ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_7 & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -(\text{CH}_2)_6 & \text{C=C} & \text{O} \\ & & & & & & \\ & \text{H} & & \text{H} & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & \text{H} & & & & \\ & & & & & & \\ \text{Ácido 10-sulfooctadecaneperoxoico} \end{array} $
K	$ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_7 & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -(\text{CH}_2)_6 & \text{C=C} & \text{O} \\ & & & & & & \\ & \text{H} & & \text{H} & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & \text{SO}_3\text{H} & & & & \\ & & & & & & \\ \text{Ácido 9,10-dissulfooctadecaneperoxoico} \end{array} $
L	$ \begin{array}{ccccccc} & \text{H} & \text{H} & & & & \\ & & & & & & \\ \text{H}_3\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -(\text{CH}_2)_7 & \text{C=C} & \text{O} \\ & & & & & & \\ & \text{H} & & \text{H} & & & \\ & \text{SO}_3\text{H} & & & & & \\ & & & & & & \\ \text{Ácido 10-sulfoundecaneperoxoico} \end{array} $
M	$ \begin{array}{ccccccc} & & & \text{O} & & & \\ & & & & & & \\ & & & \text{C} & & & \\ & & & & & & \\ & & & \text{SO}_3\text{H} & & & \\ & & & & & & \\ \text{Ácido 9-(3-heptiloxiran-2-il)-9-sulfononaneperoxoico} \end{array} $
N	$ \begin{array}{ccccccc} & & & \text{O} & & & \\ & & & & & & \\ & & & \text{C} & & & \\ & & & & & & \\ & & & \text{OH} & \text{OH} & \text{SO}_3\text{H} & \\ & & & & & & \\ \text{Ácido 10,11-diidróxi-9-sulfooctadecaneperoxoico} \end{array} $
O	$ \begin{array}{ccccccc} & & & \text{SO}_3\text{H} & \text{OH} & & \\ & & & & & & \\ & & & \text{C} & & & \\ & & & & & & \\ & & & \text{OH} & & & \\ & & & & & & \\ \text{Ácido 8,9-diidróxi-10-sulfooctadecaneperoxoico} \end{array} $

Em alguns casos, o material inicial para a preparação dos compostos da presente invenção é um ácido graxo sulfonado. Sem querer ser vinculado a qualquer teoria em particular, acredita-se que o grupo sulfo- é inerte em um ambiente oxidativo. Além disso, acredita-se que a hidrofilidade do grupo sulfo- não é tão afetada pelo pH como em outros substitutos. Em certos casos, os ácidos percarboxílicos sulfonados da presente invenção são formados a partir de ácidos graxos sulfonados disponíveis comercialmente. Em outros, os

compostos da presente invenção são formados a partir de ácidos graxos não sulfonados disponíveis comercialmente, que podem ser sulfonados. Em outras situações, o ácido graxo inicial será sulfonado antes da conversão em ácido peroxicarboxílico. Em outras, o ácido graxo inicial será sulfonado ao mesmo tempo ou após a formação do ácido peroxicarboxílico. Os ácidos graxos sulfonados adequados para uso na formação de compostos da presente invenção incluem, mas não se limitam a, ácido 11-sulfoundecanoico, ácido 10,11-dissulfoundecanoico, ácido oleico sulfonado, ácido linoleico sulfonado, ácido palmitoleico sulfonado e ácido esteárico sulfonado.

Sem querer ser vinculado a qualquer teoria em particular, acredita-se que o perácido formado a partir de certos materiais iniciais de ácidos oleicos sulfonados disponíveis comercialmente inclua uma mistura de compostos da presente invenção. Acredita-se que isso se deve, em parte, à natureza do material inicial de ácido oleico sulfonado. Ou seja, acredita-se que, visto que material inicial de ácido oleico sulfonado é derivado de fontes naturais, ele não é quimicamente puro, isto é, não contém apenas uma forma de ácido oleico sulfonado. Assim, sem uma vinculação a qualquer teoria em particular, acredita-se que o ácido peroleico sulfonado formado (doravante “produto de ácido peroleico sulfonado”) pode incluir uma mistura de compostos A, N, I e O como os componentes principais. Sem uma vinculação a uma teoria em particular, acredita-se que, em alguns casos, o produto de ácido peroleico sulfonado inclui cerca de 20 a 25% do peso do Composto A (ácido 10-hidróxi-9-sulfooctadecaneperoxoico), cerca de 20 a 25% do peso do Composto N (ácido 10,11-diidróxi-9-sulfooctadecaneperoxoico), cerca de 20 a 25% do peso do Composto I (ácido 9-hidróxi-10-sulfooctadecaneperoxoico) e cerca de 20 a 25% do peso do Composto O (ácido 8,9-diidróxi-10-sulfooctadecaneperoxoico). Acredita-se que o restante do produto inclua cerca de 5 a 10% do peso de uma mistura desses compostos.

Os sulfoperoxiácidos podem ser formados usando diversos mecanismos de reação. Por exemplo, em alguns casos, os perácidos são formados pela ação direta de equilíbrio catalisado por ácido do peróxido de hidrogênio com os materiais iniciais.

Em certos casos, os ácidos carboxílicos sulfonados para uso na formação de compostos da presente invenção não são sulfonados na posição α . Verificou-se que ter o grupo sulfonado na posição α do ácido graxo proíbe a oxidação e/ou peridrólise do grupo de ácido carboxílico para formação do ácido peroxicarboxílico correspondente. Sem querer ser vinculado a qualquer teoria em particular, acredita-se que o grupo α -sulfo faz com que o grupo ácido carboxílico do ácido graxo fique eletronicamente deficiente e, portanto, a oxidação e/ou peridrólise e formação do ácido percarboxílico correspondente não ocorre.

35 *Composições de ácido peroxicarboxílico sulfonado*

Em alguns aspectos, a presente invenção se relaciona a composições que incluem um composto de ácido peroxicarboxílico sulfonado, ou suas misturas, da Fórmula I. As com-

posições da presente invenção podem ser usadas como composições de alvejamento para uma variedade de substratos e superfícies, por exemplo, têxteis, superfícies duras. As composições da presente invenção também podem ser usadas como composições desinfetantes ou antimicrobianas. Além disso, os compostos da presente invenção podem ser usados como agentes de acoplamento em composições para diversas aplicações, por exemplo, higienização de contato com alimentos, desinfecção de superfícies duras, desinfecção têxtil. Em alguns casos, as composições que contêm compostos da presente invenção podem ser multiuso. Ou seja, as composições da presente invenção podem, por exemplo, agir como agentes antimicrobianos e alvejantes, ou como agentes de acoplamento e alvejamento.

As composições da presente invenção também demonstram maior estabilidade quando comparadas a composições convencionais com peroxigênio. Em certos casos, as composições da presente invenção são estáveis por pelo menos cerca de 1 ano em temperatura ambiente. Em outros, as composições da presente invenção são estáveis a cerca de 37,8 °C (100 °F) por pelo menos 30 dias. As composições da presente invenção também são estáveis a cerca de 60 °C (140 °F) por pelo menos 30 dias. Por exemplo, o peroxiácido 11-sulfoundecanoico (Composto D) é estável como um sistema de pó a cerca de 60 °C (140 °F) por pelo menos 30 dias.

As composições da presente invenção possuem pouco ou nenhum odor. Por exemplo, em alguns casos, as composições da presente invenção possuem um odor menos desagradável do que 5, 4, 3, 2, ou 1% do peso de ácido acético em água (medido por uma avaliação de tom hedônico). Em outros, as composições da presente invenção não possuem odor detectável pelo usuário.

Em determinadas situações, as composições da presente invenção incluem um perácido sulfonado ou suas misturas, conforme a Fórmula I, e pelo menos um ingrediente adicional. Os ingredientes adicionais adequados para uso com as composições da presente invenção incluem, mas não se limitam a, agentes oxidantes, ácidos carboxílicos, surfactantes, agentes estabilizantes (por exemplo, quelantes de metais) e suas misturas. Os compostos e composições da invenção também podem ser usados em conjunto com agentes de limpeza convencional, por exemplo, detergentes alcalinos.

Em alguns casos, as composições da presente invenção podem ser utilizadas como composição de higienização para itens limpos com uma técnica de limpeza no local (CIP). Essas composições podem incluir um agente oxidante, um agente estabilizador, um acidulante e um surfactante, ou suas misturas, nas seguintes concentrações.

Tabela A — Desinfetante concentrado para CIP por % do peso

Agente oxidante	0.1 - 10	2-8	5-7
Agente estabilizante	0.1-10	0.5-5	1-2
Acidulante	0-50	10-40	20-30

Surfactante	0-50	10-40	25-35
-------------	------	-------	-------

Em outros casos, as composições da presente invenção podem ser usadas como desinfetante têxtil. Essas composições podem incluir agente oxidante, agente estabilizante e um ácido carboxílico nas seguintes concentrações.

Tabela B. — Desinfetante têxtil concentrado por % do peso

Agente oxidante	10-75	25-60	30-50
Agente estabilizante	0.1-10	0.5-5	2-4
Ácido carboxílico	1-40	10-30	20-25

5 Agentes oxidantes

Em alguns aspectos, as composições da presente invenção incluem um composto da Fórmula I. Em certos casos, as composições da presente invenção incluem também pelo menos um agente oxidante. Em outros, as composições da presente invenção são basicamente livres de agente oxidante. Quando presentes, a composição atual pode incluir uma variedade de agentes oxidantes, como o peróxido de hidrogênio. O agente oxidante pode estar presente em quantidade eficaz para converter um ácido carboxílico sulfonado em ácido peroxicarboxílico sulfonado. Em alguns casos, o agente oxidante também pode possuir uma atividade antimicrobiana. Em outros, o agente oxidante está presente em quantidade insuficiente para apresentar atividade antimicrobiana.

10 15 Em certos casos, as composições da presente invenção incluem cerca de 0,001% do peso de agente oxidante para cerca de 99% do peso de agente oxidante. Em outros, as composições da presente invenção incluem cerca de 1% do peso a cerca de 60% do peso de agente oxidante. Em alguns casos, as composições da invenção incluem cerca de 50% do peso a cerca de 80% do peso de agente oxidante. Em outros, as composições da invenção incluem cerca de 15% do peso a cerca de 30% do peso de agente oxidante. Em ainda outros casos, as composições da presente invenção incluem cerca de 25% do peso de agente oxidante. Deve-se entender que todos os intervalos e valores entre eles são abrangidos pela presente invenção.

20 25 30 Exemplos de agentes oxidantes inorgânicos incluem os seguintes tipos de compostos ou fontes desses compostos, ou sais de metal alcalino, incluindo estes tipos de compostos ou formando um aduto com: peróxido de hidrogênio, complexos de peróxido de hidrogênio-ureia ou doadores de peróxido de hidrogênio: grupo 1 (IA): agentes oxidantes, por exemplo, peróxido de lítio, peróxido de sódio; grupo 2 (IIA): agentes oxidantes, por exemplo, peróxido de magnésio, peróxido de cálcio, peróxido de estrôncio, peróxido de bário; grupo 12 (IIB): agentes oxidantes, por exemplo, peróxido de zinco; grupo 13 (IIIA): agentes oxidantes, por exemplo, compostos de boro, como perboratos, por exemplo, hexaídrato de perbo-

rato de sódio da fórmula $\text{Na}_2[\text{B}_2(\text{O}_2)_2(\text{OH})_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (também chamado de tetraidrato de perborato de sódio); tetraidrato de peroxiborato de sódio da fórmula $\text{Na}_2\text{B}_2(\text{O}_2)_2[(\text{OH})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (também chamado de triidrato de perborato de sódio); peroxiborato de sódio da fórmula $\text{Na}_2[\text{B}_2(\text{O}_2)_2(\text{OH})_4]$ (também chamado de monoidrato de perborato de sódio); grupo 14 (IVA):

5 agentes oxidantes, por exemplo, persilicatos e peroxicarbonatos, que também são chamados de percarbonatos, como persilicatos ou peroxicarbonatos de metais alcalinos; grupo 15 (VA): agentes oxidantes, por exemplo, ácido peroxinitroso e seus sais; ácidos peroxifosfóricos e seus sais, por exemplo, perfosfatos; grupo 16 (VIA): agentes oxidantes, por exemplo, ácidos peroxisulfúricos e seus sais, como ácidos peroximonosulfúricos e peroxidissulfúricos
10 e seus sais, como persulfatos, por exemplo, persulfato de sódio; e grupo VIIa: agentes oxidantes, como periodato de sódio e perclorato de potássio. Outros compostos de oxigênio inorgânico ativo podem incluir peróxidos de metais de transição e outros compostos de peroxigênio, e suas misturas. Em alguns casos, as composições da presente invenção usam um ou mais agentes oxidantes inorgânicos listados acima. Os agentes oxidantes inorgânicos
15 apropriados incluem ozônio, peróxido de hidrogênio, aduto de peróxido de hidrogênio, agente oxidante do grupo IIIA ou doadores de peróxido de hidrogênio do grupo de agente oxidante VIA, agente oxidante do grupo VA, agente oxidante do grupo VIIA, ou suas misturas. Exemplos adequados desses agentes oxidantes inorgânicos incluem percarbonato, perborato, persulfato, perfosfato, persilicato, ou suas misturas.

20 **Ácidos carboxílicos e percarboxílicos**

Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem pelo menos um ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção e pelo menos um ácido carboxílico e/ou percarboxílico. Em outros, as composições da presente invenção incluem pelo menos dois, três ou quatro, ou mais, ácidos carboxílicos e/ou percarboxílicos.

25 Em certos casos, o ácido carboxílico para uso com as composições da presente invenção inclui um ácido carboxílico C_1 a C_{22} . Em alguns casos, o ácido carboxílico para uso com as composições da presente invenção é um ácido carboxílico C_5 a C_{11} . Em outros, o ácido carboxílico para uso com as composições da presente invenção é um ácido carboxílico C_1 a C_4 . Exemplos de ácidos carboxílicos adequados incluem, mas não se limitam a, ácido fórmico, acético, propiônico, butanoico, pentanoico, hexanoico, heptanoico, octanoico, 30 nonanoico, decanoico, undecanoico, dodecanoico, bem como seus isômeros ramificados, os ácidos lático, maleico, ascórbico, cítrico, hidroxiacético, neopentanoico, neoheptanoico, neodecanoico, oxálico, malônico, succínico, glutárico, adípico, pimélico, súbrico, e suas misturas. Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem cerca de 0,1% do peso a cerca de 80% do peso de um ácido carboxílico. Em outros, as composições da presente invenção incluem cerca de 1% do peso a cerca de 60% do peso de um ácido carboxílico.
35 Em ainda outros casos, as composições da presente invenção incluem cerca de 20% do

peso, cerca de 30% do peso ou cerca de 40% do peso de um ácido carboxílico. As composições da presente invenção também incluem cerca de 5% do peso a cerca de 10% do peso do ácido acético. Em outros, as composições da presente invenção incluem cerca de 5% do peso a cerca de 10% do peso de ácido octanoico. Em ainda outros casos, as composições da presente invenção incluem uma combinação de ácido octanoico e ácido acético. Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem um composto da Fórmula I e pelo menos um ácido peroxicarboxílico. Os ácidos peroxicarboxílicos úteis nas composições e métodos da presente invenção incluem ácido peroxifórmico, peroxiacético, peroxipropiônico, peroxibutanoico, peroxipentanoico, peroxiexanoico, peroxieptanoico, peroxioctanoico, 10 peroxinonanoico, peroxidecanoico, peroxyundecanoico, peroxidodecanoico ou os peroxyácidos de seus isômeros de cadeia ramificada, ácido peroxilático, peroximaleico, peroxyascórbico, peroxyhidroxiacético, peroxyoxálico, peroxymalônico, peroxysuccínico, peroxyglutárico, peroxyadípico, peroxypimélico e peroxyisúbrico, e suas misturas. Em certos casos, as composições da invenção utilizam uma combinação de diferentes ácidos peroxicarboxílicos. Por exemplo, em alguns casos, as composições incluem um ou mais ácidos peroxicarboxílicos C₁ a C₄ e um ou mais ácidos peroxicarboxílicos C₅ a C₁₁. Em certos casos, o ácido peroxicarboxílico C₁ a C₄ é o ácido peroxiacético e o ácido C₅ a C₁₁ é o ácido peroxioctanoico. Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem o ácido peroxiacético. O ácido peroxiacético (ou peracético) é um ácido peroxicarboxílico com a fórmula: CH₃COOOH. Geralmente, o ácido peroxiacético é um líquido com odor acre em concentrações mais elevadas e é muito solúvel em água, álcool, éter e ácido sulfúrico. O ácido peroxiacético pode ser preparado por quaisquer métodos conhecidos por pessoas qualificadas, incluindo a preparação de acetaldeído e oxigênio na presença de acetato de cobalto. Uma solução de ácido peroxiacético pode ser obtida pela combinação de ácido acético com peróxido de hidrogênio. A solução a 50% de ácido peroxiacético pode ser obtida pela combinação de anidrido acético, peróxido de hidrogênio e ácido sulfúrico. Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem o ácido peroxioctanoico, ácido peroxinonanoico ou ácido peroxieptanoico. Em outros, as composições incluem o ácido peroxioctanoico. O ácido peroxioctanoico (ou peroctanoico) é um ácido peroxicarboxílico com a fórmula, ácido n-peroxioctanoico: CH₃(CH₂)₆COOOH. O ácido peroxioctanoico pode ser um ácido com um grupo alquila de cadeia reta, um ácido com um grupo alquila ramificado ou uma mistura deles. O ácido peroxioctanoico pode ser preparado por quaisquer métodos conhecidos por pessoas qualificadas. Uma solução de ácido peroxioctanoico pode ser obtida pela combinação de ácido octanoico e peróxido de hidrogênio e um hidrótopo, solvente ou veículo.

Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem cerca de 0,1% do peso a cerca de 90% do peso de um ou mais ácidos peroxicarboxílicos. Em outros, as composições da presente invenção incluem cerca de 1% do peso a cerca de 25% do peso de

um ou mais ácidos peroxicarboxílicos. Em ainda outros, as composições da presente invenção incluem cerca de 5% do peso a cerca de 10% do peso de um ou mais ácidos peroxicarboxílicos. As composições da presente invenção também incluem cerca de 1% do peso a cerca de 25% do peso de ácido peroxiacético. Em outras situações, as composições da presente invenção incluem cerca de 0,1% do peso a cerca de 10% do peso de ácido peroxicetanoico. Em outras, as composições da presente invenção incluem uma mistura de cerca de 5% do peso de ácido peroxiacético e cerca de 1,5% do peso de ácido peroxioctanoico.

Surfactantes

Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem um surfactante. Os surfactantes adequados para uso com as composições da presente invenção incluem, mas não se limitam a, surfactantes não iônicos, surfactantes aniónicos e surfactantes zwittrionicos. Em certos casos, as composições da presente invenção incluem cerca de 10% do peso a cerca de 50% do peso de um surfactante. Em outros, as composições da presente invenção incluem cerca de 15% do peso a cerca de 30% de um surfactante. As composições da presente invenção também podem incluir cerca de 25% do peso de um surfactante. Em certos casos, as composições da presente invenção incluem cerca de 100 ppm a cerca de 1.000 ppm de um surfactante.

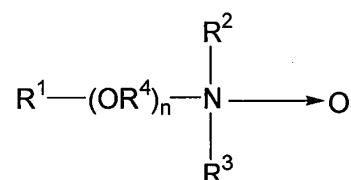
Surfactantes não iônicos

Os surfactantes não iônicos adequados para uso com as composições da presente invenção incluem surfactantes alcoxilados. Os surfactantes alcoxilados apropriados incluem copolímeros EO/PO, copolímeros tampados EO/PO, alcoxilatos de álcool, alcoxilatos de álcool tampados e suas misturas ou similares. Os surfactantes alcoxilados apropriados para uso como solventes incluem copolímeros em bloco EO/PO, como os surfactantes Pluronic e Pluronic reverso; alcoxilatos de álcool, como Dehypon LS-54 (R-(EO)₅(PO)₄) e Dehypon LS-36 (R-(EO)₃(PO)₆); e alcoxilatos de álcool tampados, como Plurafac LF221 e Tegoten EC11; suas misturas ou similares.

Surfactantes não iônicos semipolares

O tipo semipolar de agentes ativos de superfície não iônica é uma outra classe de surfactantes não iônicos úteis em composições da presente invenção. Os surfactantes não iônicos semipolares incluem os óxidos de aminas, óxidos de fosfina, sulfóxidos e seus derivados alcoxilados.

Os óxidos de aminas são óxidos de aminas terciárias correspondentes à fórmula geral:



Em que a seta é uma representação convencional de uma ligação semipolar; e R¹, R² e R³ podem ser alifáticos, aromáticos, heterocíclicos, alicíclicos ou suas combinações. Geralmente, para óxidos de aminas de interesse detergente, R¹ é um radical alquila entre cerca de 8 a 24 átomos de carbono; R² e R³ são alquila ou hidroxialquila de 1 a 3 átomos de carbono, ou suas misturas. R² e R³ podem ser ligados entre si, por exemplo, através de um átomo de oxigênio ou nitrogênio, para formar uma estrutura em anel, R⁴ é um grupo hidroxialquíleno ou alquíleno que contém 2 a 3 átomos de carbono e n varia de 0 a 20. Um óxido de amina pode ser gerado a partir da amina correspondente e de um agente oxidante, como o peróxido de hidrogênio.

Surfactantes funcionais de óxidos de amina solúveis em água são selecionados a partir de óxidos de amina octilo, decilo, dodecilo, óxido de amina de coco, de sebo ou alquil di (alquila inferior). Seus exemplos concretos são os seguintes óxidos: de octildimetilamina, nonildimetilamina, decildimetilamina, undecildimetilamina, dodecildimetilamina, de amina isododecildimetil, tridecildimetilamina, tetradecildimetilamina, pentadecildimetilamina, hexadecildimetilamina, heptadecildimetilamina, octadecildimetilamina, dodecildipropilamina, tetradecildipropilamina, hexadecildipropilamina, tetradecildibutilamina, octadecildibutilamina, bis(2-hidroxietil) dodecilamina, bis(2-hidroxietil)-3-dodecóxi-1-hidroxipropilamina, dimetil-(2-hidroxidodecil)amina, 3,6,9-trioctadecildimetilamina e 3-dodecóxi-2-hidroxipropildi-(2-hidroxietil)amina.

20 *Surfactantes aniônicos*

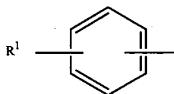
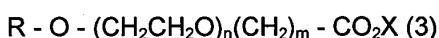
Os surfactantes aniônicos sulfatados e adequados para uso nas composições presentes incluem sulfatos de alquil éter, sulfatos de alquila primários e secundários e retos e ramificados, etoxisulfatos de alquila, sulfatos de glicerol oleil graxos, sulfatos de éter óxido de etileno fenol alquila, sulfatos de glucamina C₅-C₁₇ acil-N-(C₁ -C₄ alquila) e -N-(C₁-C₂ hidroxialkila) e sulfatos de alquil polissacarídeos, como sulfatos de alquilpoliglicosídeo, e similares. Também estão incluídos os sulfatos de alquila, sulfatos de éter poli(etileneoxi) alquila e sulfatos poli(etileneoxi) aromáticos, como sulfatos ou produtos de condensação de óxido de etileno e nonilfenol (normalmente com 1 a 6 grupos oxietileno por molécula).

Os surfactantes aniônicos sulfonados adequados para uso nas composições presentes também incluem sulfonatos de alquila, sulfonatos de alquila primário e secundário e retos e ramificados, e sulfonatos aromáticos com ou sem substitutos.

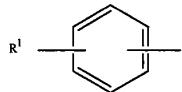
Os surfactantes aniônicos carboxilatos adequados para uso nas composições presentes incluem ácidos carboxílicos (e seus sais), como ácidos alcanoicos (e alcanoatos), ácidos éster carboxílicos (por exemplo, succinatos de alquila), ácidos éter carboxílicos, e similares. Esses carboxilatos incluem carboxilatos de etóxi alquila, carboxilatos de etóxi arila alquila, surfactantes e sabões de policarboxilato polietoxi alquila (como carboxil alquila). Os carboxilatos secundários úteis nas composições presentes incluem aqueles que contêm

uma unidade carboxila ligada a um carbono secundário. O carbono secundário pode estar em uma estrutura em anel, como no ácido benzoico p-octila ou como em carboxilatos de cicloexil de alquila substituída. Os surfactantes carboxilatos secundários geralmente não contêm ligações de éter ou éster, nem mesmo grupo hidroxilo. Além disso, eles normalmente não possuem átomos de nitrogênio no grupo principal (porção anfifílica). Surfactantes e sabões secundários apropriados geralmente contêm de 11 a 13 átomos de carbono, embora possam estar presentes mais átomos de carbonos (por exemplo, até 16). Carboxilatos apropriados também incluem ácidos acilamino (e seus sais), como acilgluamatos, peptídeos acila, sarcosinatos (por exemplo, sarcosinatos N-acila), tauratos (por exemplo, tauratos N-acila e amidas de ácidos graxos de tauridometil), e similares.

Surfactantes aniónicos apropriados incluem carboxilatos etóxi alquila ou alquilarila da seguinte fórmula:



Em que R é um grupo alquila C₈ a C₂₂ ou alquila C₄-C₁₆; n é um número inteiro de 1 a 20; m é um número inteiro de 1 a 3; e X é um contraíon, como hidrogênio, sódio, potássio, lítio, amônio ou um sal de amina, como monietanolamina, dietanolamina ou trietanolamina. Em alguns casos, n é um número inteiro de 4 a 10 e m é 1. Em outros, R é um grupo alquila C₈-C₁₆. Há ainda outros casos em que R é um grupo alquila C₁₂-C₁₄, n é 4 e m é 1.



Em outros casos, R é e R¹ é um grupo alquila C₆-C₁₂. Em outros, R¹ é um grupo alquila C₉, n é 10 e m é 1.

Esses carboxilatos etóxi alquila e alquilarila estão disponíveis comercialmente. Esses carboxilatos etóxi normalmente estão disponíveis como formas ácidas, que podem ser facilmente convertidas para uma forma aniónica ou de sal. Os carboxilatos disponíveis comercialmente incluem Neodox 23-4, um ácido carboxílico (4) polietóxi alquila C₁₂₋₁₃ (Shell Chemical) e Emcol CNP-110, um ácido carboxílico (10) polietóxi alquilarila C₉ (Witco Chemical). Os carboxilatos também estão disponíveis por meio da Clariant, como o produto Sandopan® DTC, um ácido carboxílico (7) polietóxi alquila C₁₃.

Surfactantes anfóteros

Os surfactantes anfóteros, ou anfolíticos, contêm tanto um grupo básico quanto um grupo hidrofílico ácido, além de um grupo hidrofóbico orgânico. Essas entidades iônicas podem ser qualquer um dos grupos aniónicos e catiônicos descritos nesse documento para outros tipos de surfactantes. Um grupo de nitrogênio básico e de carboxilato ácido são os grupos funcionais típicos empregados como grupos hidrofílicos básicos e ácidos. Em alguns

surfactantes, a carga negativa é fornecida através de sulfonato, sulfato, fosfonato ou fosfato.

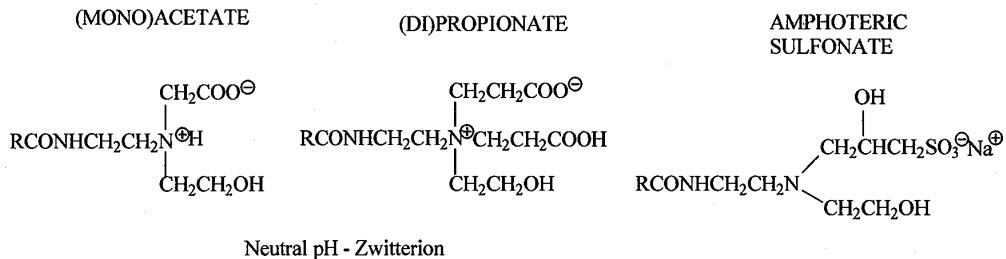
Os surfactantes anfóteros podem ser genericamente descritos como derivados de aminas secundárias e terciárias alifáticas, em que o radical alifático pode ser de cadeia reta ou ramificada e um dos substitutos alifáticos contém cerca de 8 a 18 átomos de carbono e

- 5 um contém um grupo de solubilização em água aniónica, por exemplo, carbóxi, sulfo, sulfato, fosfato, ou fosfona. Os surfactantes anfóteros são subdivididos em duas classes principais conhecidas por pessoas qualificadas nessa área e descritos em "Surfactant Encyclopedia" *Cosmetics & Toiletries*, Vol. 104 (2) 69-71 (1989). A primeira classe inclui derivados de etilenodiamina acil/dialquila (como derivados de 2-alquila hidroxietil imidazolina) e seus sais.
- 10 A segunda categoria inclui os ácidos N-alquilamino e seus sais. Alguns surfactantes anfóteros podem ser colocados em ambas as classes.

Os surfactantes anfóteros podem ser sintetizados por métodos conhecidos pelas pessoas qualificadas. Por exemplo, 2-alquila hidroxietil imidazolina é sintetizada pela condensação e fechamento em anel de uma longa cadeia de ácido carboxílico (ou um derivado)

- 15 com etilenodiamina dialquila. Os surfactantes anfóteros comerciais são derivados por hidrólise subsequente e abertura do anel de imidazolina por alquilação, por exemplo, com ácido cloroacético ou acetato de etila. Durante a alquilação, um ou dois grupos carbóxi-alquila reagem para formar uma amina terciária e uma ligação de éter com diferentes agentes alquilantes produzindo diferentes aminas terciárias.

- 20 Derivados de imidazol de cadeia longa com aplicação na presente invenção geralmente possuem a fórmula geral:



Neutral pH - Zwitterion

Em que R é um grupo hidrofóbico acíclico com cerca de 8 a 18 átomos de carbono e M é um cátion para neutralizar a carga do ânion, geralmente de sódio. Anfóteros derivados de imidazolina conhecidos comercialmente e que podem ser usados nas composições presentes incluem, por exemplo: Cocoanfopropionato, Cocoanfocarbóxi-propionato, Cocoanfoglicinato, Cocoanfocarbóxi-glicinato, Cocoanfopropil-sulfonato e ácido Cocoanfocarbóxi-propiônico. Os ácidos anfocarboxílicos podem ser produzidos a partir de imidazolinas graxas nas quais a funcionalidade de ácido dicarboxílico do ácido anfodicarboxílico é um ácido diacético e/ou dipropiônico.

- 30 Os compostos carboximetilados (glicinatos) descritos acima são frequentemente chamados de betaínas. As betaínas são uma classe especial de anfóteros discutida abaixo,

na seção intitulada "Surfactante zwitteriônicos".

Ácidos N-alquilamino de cadeia longa são facilmente preparados por uma reação de RNH_2 , na qual alquila de cadeia reta ou ramificada $\text{R}=\text{C}_8\text{-C}_{18}$, aminas graxas com ácidos carboxílicos halogenados. A alquilação dos grupos aminos primários de um aminoácido resulta em aminas secundárias e terciárias. Os substitutos de alquila podem ter grupos aminos adicionais que fornecem mais de um centro de nitrogênio reativo. A maioria dos ácidos N-alquilamina comerciais são derivados de alquila de beta-alanina ou de beta-N(2-carboxietil) alanina. Exemplos de anfólitos de ácido N-alquilamino comercial com aplicação nessa invenção incluem dipropionatos beta-amino alquila, $\text{RN}(\text{C}_2\text{H}_4\text{COOM})_2$ e $\text{RNHC}_2\text{H}_4\text{COOM}$. Em certos casos, R pode ser um grupo hidrofóbico acíclico que contém cerca de 8 a 18 átomos de carbono e M é um cátion para neutralizar a carga do ânion.

Os surfactantes anfóteros adequados incluem aqueles derivados de produtos de coco, como óleo ou ácidos graxos de coco. Outros surfactantes derivados de coco adequados incluem como parte de sua estrutura um grupo de etilenodiamina, um grupo de alcanolamida, um grupo de aminoácidos, por exemplo, glicina, ou uma combinação deles, e um substituto alifático de cerca de 8 a 18 átomos de carbono (por exemplo, 12). Esse surfactante também pode ser considerado um ácido alquil anfodicarboxílico. Esses surfactantes anfóteros podem incluir estruturas químicas representadas como: $\text{C}_{12}\text{-alquila-C(O)-NH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-N}^+(\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-CO}_2\text{Na})_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ ou $\text{C}_{12}\text{-alquila-C(O)-N(H)-CH}_2\text{-CH}_2\text{-N}^+(\text{CH}_2\text{-CO}_2\text{Na})_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$. O dipropionato cocoanfo dissódico é um surfactante anfotérico adequado e comercialmente disponível com a marca Miranol™ FBS da Rhodia Inc., Cranbury, N.J, EUA. Outro surfactante anfótero derivado de coco e adequado com nome químico de diacetato cocoanfo dissódico é vendido com a marca Mirataine™ JCHA, também da Rhodia Inc., Cranbury, N.J., EUA.

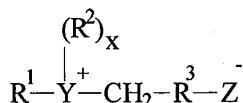
Uma listagem típica das classes anfóteras, e espécies desses surfactantes, é fornecida na patente dos EUA N.º 3.929.678 emitida para Laughlin and Heuring em 30 de dezembro de 1975. Outros exemplos são fornecidos em "Surface Active Agents and Detergents" (Vol. I e II de Schwartz, Perry e Berch).

Surfactantes zwitteriônicos

Os surfactantes zwitteriônicos podem ser encarados como um subconjunto dos surfactantes anfóteros e podem incluir uma carga aniônica. Os surfactantes zwitteriônicos podem ser descritos de forma genérica como derivados de aminas secundárias e terciárias, derivados de aminas secundárias e terciárias heterocíclicas ou derivados de compostos de amônio quaternário, fosfônio quaternário ou sulfônio terciário. Normalmente, um surfactante zwitteriônico inclui um amônio quaternário com carga positiva ou, em alguns casos, um íon sulfônio ou fosfônio, um grupo carboxila com carga negativa e um grupo alquila. Os zwitteriônicos geralmente contêm grupos catiônicos e aniônicos que ionizam em nível quase idênti-

co à região isoelétrica da molécula e que podem desenvolver forte atração no sal interno entre os centros de carga positiva-negativa. Exemplos de tais surfactantes zwitteriônicos sintéticos incluem derivados de amônio quaternário alifático, compostos de fosfônio e sulfônio nos quais os radicais alifáticos podem ser de cadeia reta ou ramificada e nos quais um dos substitutos alifáticos contém de 8 a 18 átomos de carbono e um contém um grupo de solubilização em água aniónica, por exemplo, carboxila, sulfonato, sulfato, fosfato ou fosfonato. Os surfactantes de betaína e sultaína são exemplos de surfactantes zwitteriônicos para uso nesse documento.

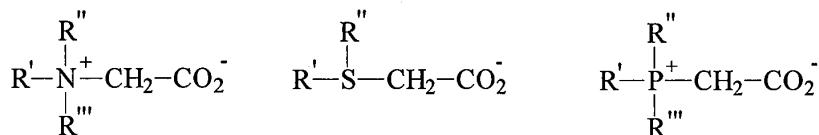
A fórmula geral desses compostos é:



Em que R^1 contém um radical alquila, alquenila ou hidroxialquila de 8 a 18 átomos de carbono e 0 a 10 grupos de óxido de etíleno e 0 a 1 grupo de glicerila, Y é selecionado do grupo que consiste em átomos de nitrogênio, fósforo e enxofre, R^2 é um grupo alquila ou alquila monoidróxi que contém de 1 a 3 átomos de carbono, x é 1 quando Y é um átomo de enxofre e 2 quando Y é um átomo de nitrogênio ou fósforo, R^3 é um alquíleno ou hidroxialquíleno de 1 a 4 átomos de carbono e Z é um radical selecionado a partir do grupo composto dos grupos de carboxilato, sulfonato, sulfato, fosfonato e fosfato.

Exemplos de surfactantes zwitteriônicos com estruturas listadas acima: 4-[N,N-di(2-hidroxietil)-N-octadecilamônio]-butano-1-carboxilato; 5-[S-3-hidroxipropil-S-hexadecilsulfônio]-3-hidroxipentano-1-sulfato; 3-[P,P-dietil-P-3,6,9-trioxatetracosanefosfônio]-2-hidroxipropano-1-fosfato; 3-[N,N-dipropil-N-3-dodecôxi-2-hidroxipropil-amônio]-propano-1-fosfonato; 3-(N,N-dimetil-N-hexadecilamônio)-propano-1-sulfonato; 3-(N,N-dimetil-N-hexadecilamônio)-2-hidroxi-propano-1-sulfonato; 4-[N,N-di(2(2-hidroxietil)-N(2-hidroxidodecil)amônio]-butano-1-carboxilato; 3-[S-etyl-S-(3-dodecôxi-2-hidroxipropil)sulfônio]-propano-1-fosfato; 3-[P,P-dimetil-P-dodecifosfônio]-propano-1-fosfonato; e S[N,N-di(3-hidroxipropil)-N-hexadecilamônio]-2-hidróxi-pentano-1-sulfato. Os grupos alquila contidos nos referidos surfactantes detergentes podem ser retos ou ramificados, saturados ou insaturados.

O surfactante zwitteriônico adequado para uso nas composições presentes inclui uma betaína de estrutura geral:



Essas betaínas surfactantes normalmente não apresentam fortes características a-

niônicas ou catiônicas em pH extremo nem demonstram reduzida solubilidade em água em sua faixa isoelétrica. Ao contrário dos sais de amônio quaternários "externos", as betáinas são compatíveis com aniónicos. Exemplos de betáinas adequadas incluem betáina acilamidopropildimetil de coco; betáina hexadecil dimetil; acilamidopropilbetaína C₁₂₋₁₄; betáina acilamidoexildietil C₈₋₁₄; acilmetilamidodietilamônio-1-carboxibutano 4-C₁₄₋₁₆; acilamidodimetilbetaína C₁₆₋₁₈; acilamidopentanedietilbetaína C₁₂₋₁₆; e acilmetilamidodimetilbetaína C₁₂₋₁₆.

As sultaínas úteis na presente invenção incluem os compostos com fórmula (R(R¹)₂N⁺R²SO³⁻, nos quais R é um grupo hidrocarbonado C₆-C₁₈, cada R¹ em geral é uma alquila C₁-C₃ independente, por exemplo, metila, e R² é um grupo hidrocarbonado C₁-C₆, como um grupo alquileno ou hidroxialqueleno C₁-C₃.

Uma listagem típica de classes zwitteriônicas, e espécies desses surfactantes, é fornecida na patente dos EUA N.º 3.929.678 emitida para Laughlin and Heuring em 30 de dezembro de 1975. Outros exemplos são fornecidos em "Surface Active Agents and Detergents" (Vol. I e II de Schwartz, Perry e Berch).

Em determinado caso, as composições da presente invenção incluem uma betáina. Por exemplo, as composições podem incluir a betáina cocoamidopropil.

Outros ingredientes adicionais

Em alguns casos, as composições da presente invenção podem incluir outros ingredientes adicionais. Os ingredientes adicionais adequados para uso com as composições da presente invenção incluem, mas não se limitam a, acidulantes, agentes estabilizadores, por exemplo, agentes quelantes ou sequestrantes, tampões, detergentes, agentes umectantes, agentes antiespuma, espessantes, agentes espumantes, agentes de solidificação, agentes de aprimoramento estético (isto é, corantes, odores ou perfumes) e outros agentes de limpeza. Esses ingredientes adicionais podem ser pré-formulados com as composições da invenção ou adicionados ao sistema antes, depois ou basicamente de forma simultânea à adição das composições da presente invenção. Além disso, as composições podem ser usadas em conjunto com um ou mais agentes de limpeza convencionais, por exemplo, um detergente alcalino.

Acidulantes

Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem um acidulante. O acidulante pode agir como catalisador para a conversão de ácido carboxílico em ácido peroxicarboxílico. O acidulante pode ser eficaz em formar uma composição de concentrado com pH de cerca de 1 ou menos. O acidulante pode ser eficaz para formar uma composição de uso com pH de cerca de 5 ou menos, cerca de 4 ou menos, cerca de 3 ou menos, cerca de 2 ou menos, ou similar. Em certos casos, um acidulante pode ser usado para diminuir o pH de uma solução de limpeza alcalina para um pH de cerca de 10 ou menos, cerca de 9 ou menos, cerca de 8 ou menos, cerca de 7 ou menos, cerca de 6 ou menos. Em outros, o aci-

dulante inclui um ácido inorgânico. Ácidos inorgânicos apropriados incluem, mas não se limitam a, ácido sulfúrico, bissulfato de sódio, ácido fosfórico, ácido nítrico e ácido clorídrico. Em outros, o acidulante inclui um ácido orgânico. Ácidos orgânicos apropriados incluem, mas não se limitam a, ácido metano sulfônico, ácido etano sulfônico, ácido propano sulfônico, 5 ácido butano sulfônico, ácido xileno sulfônico, ácido benzeno sulfônico, ácido fórmico, ácido acético, ácidos mono, di, ou tri-halocarboxílicos, ácido picolínico, ácido dipicolínico, e suas misturas. Em alguns casos, as composições da presente invenção contêm pouco ou nenhum ácido baseado em fósforo.

10 Em alguns casos, o acidulante selecionado também pode funcionar como um agente estabilizador. Dessa forma, as composições da presente invenção podem estar basicamente isentas de um agente estabilizador adicional.

15 Em certos casos, a composição presente inclui cerca de 0,5 a cerca de 80 % do peso de acidulante, cerca de 1 a 50% do peso, cerca de 5 a 30% do peso de acidulante ou cerca de 7 a 14% do peso de acidulante. É preciso entender que todos os valores e intervalos entre eles são abrangidos pelas composições da presente invenção.

Agentes estabilizadores

20 Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem um ou mais agentes estabilizadores. Os agentes estabilizadores podem ser usados, por exemplo, para estabilizar o perácido e peróxido de hidrogênio e evitar a oxidação prematura desse componente na composição da invenção.

Em certos casos, pode ser usado um agente estabilizador ácido. Dessa forma, em alguns casos, as composições da presente invenção podem estar basicamente isentas de um acidulante adicional.

25 Agentes estabilizantes adequados incluem, por exemplo, agentes quelantes ou sequestrantes. Os sequestrantes adequados incluem, mas não se limitam a, compostos quelantes orgânicos que sequestram íons metálicos da solução, especialmente íons de metais de transição. Esses sequestrantes incluem agentes complexantes aminoácidos ou ácidos hidroxipolifosfônicos (em forma de ácido ou de sal solúvel), ácidos carboxílicos (por exemplo, policarboxilato polimérico), ácidos hidroxicarboxílicos, ácidos aminocarboxílicos ou ácidos carboxílicos heterocíclicos, como, ácido piridina-2,6-dicarboxílico (ácido dipicolínico).

30 Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem o ácido dipicolínico como agente estabilizador. As composições que incluem o ácido dipicolínico podem ser formuladas para possuírem pouco ou nenhum fósforo. Também foi observado que a inclusão de ácido dipicolínico em uma composição da presente invenção ajuda a obter a estabilidade de fase das composições, em comparação com outros agentes estabilizadores convencionais, como o ácido 1-hidroxietilideno-1,1-difosfônico ($\text{CH}_3\text{C}(\text{PO}_3\text{H}_2)_2\text{OH}$) (HEDP).

35 Em outros casos, o sequestrante pode ser ou incluir ácido fosfônico ou sal fosfona-

to. Ácidos fosfônicos e sais fosfonatos apropriados incluem HEDP; ácido etilenodiaminotetrametilenofosfônico (EDTMP); ácido dietilenotriaminopentametilenofosfônico (DTPMP), ácido cicloexano-1,2-tetrametileno fosfônico; ácido amino[tri(metilenofosfônico)]; ácido (etilenodiamina[tetrametilenofosfônico]); ácido 2-fosfonobutano-1,2,4-tricarboxílico, ou seus sais, 5 como sais de metais alcalinos, de amônio ou de amina alquiloila, incluindo sais mono, di ou tetraetanolamina; ácido picolínico, dipicolínico ou suas misturas. Em alguns casos, fosfonatos orgânicos, como HEDP, estão incluídos nas composições da presente invenção.

Agentes quelantes de aditivos alimentares disponíveis comercialmente incluem fosfonatos vendido sob o nome comercial DEQUEST® incluindo, por exemplo, o ácido 10 1-hidroxietilideno-1,1-difosfônico, disponibilizado pela Monsanto Industrial Chemicals Co., St. Louis, MO, EUA, como DEQUEST® 2010; ácido amino(tri(metilenofosfônico)), (N[CH₂PO₃H₂]₃), disponibilizado pela Monsanto como DEQUEST® 2000; ácido etilenodiamina[tetra(metilenofosfônico)] disponibilizado pela Monsanto como DEQUEST® 2041; e ácido 15 2-fosfonobutano-1,2,4-tricarboxílico, disponibilizado pela Mobay Chemical Corporation, Inorganic Chemicals Division, Pittsburgh, PA, EUA, como Bayhibit AM.

O sequestrante pode ser ou incluir um tipo de ácido aminocarboxílico. Os sequestrantes do tipo de ácido aminocarboxílico adequados incluem os ácidos ou seus sais de metais alcalinos, como aminoacetatos e seus sais. Os aminocarboxilatos adequados incluem os ácidos N-hidroxietilaminodiacético; hidroxietilenodiaminotetracético, nitrilotriáctico (NTA), 20 etilenodiaminotetracético (EDTA), N-hidroxietiletenodiaminotriáctico (HEDTA); dietilenotriaminopentacético (DTPA) e alanina-N,N-diacético, e seus similares e misturas.

O sequestrante pode ser ou incluir um policarboxilato. Policarboxilatos apropriados incluem, por exemplo, o ácido poliacrílico, copolímero maleico/olefina, copolímero acrílico/maleico, ácido polimetacrílico, copolímeros de ácido acrílico-metacrílico, poliacrilamida hidrolisada, polimetacrilamida hidrolisada, copolímeros de poliamida-metacrilamida hidrolisada, poliacrilonitrila hidrolisada, polimetacrilonitrila hidrolisada, copolímeros de acrilonitrila-metacrilonitrila hidrolisada, ácido polimaleico, ácido polifumárico, copolímeros de ácido acrílico e itacônico, policarboxilato fosfino, suas formas ácidas ou em sal, misturas e similares.

Em certos casos, a presente composição inclui cerca de 0,01 a 10% do peso de 30 agente estabilizador, cerca de 0,4 a 4% do peso de agente estabilizador, cerca de 0,6 a 3% do peso de agente estabilizador, cerca de 1 a 2% do peso de agente estabilizador. Deve-se entender que todos os valores e intervalos entre eles são abrangidos pela presente invenção.

Agentes umectantes ou antiespuma

35 Os agentes umectantes e antiespuma também são úteis nas composições da invenção. Os agentes umectantes funcionam para aumentar o contato com a superfície ou a atividade de penetração da composição antimicrobiana da invenção. Os agentes umectan-

tes que podem ser utilizados na composição da invenção incluem os componentes conhecidos por aumentar a atividade superficial da composição da invenção.

Geralmente, os antiespumantes que podem ser utilizados de acordo com a invenção incluem sílica e silicones; ácidos ou ésteres alifáticos; alcoóis; sulfatos ou sulfonatos; 5 aminas ou amidas; compostos halogenados, como fluorocloroidrocarbonos; óleos vegetais, ceras, óleos minerais, bem como seus derivados sulfonados ou sulfatados; ácidos graxos e/ou seus sabões, como álcalis, sabões de metais alcalino-terrosos; e ésteres fosfatos e fosfatos, como difosfatos alcalinos e alquila, e tributilfosfatos, entre outros; e suas misturas.

Em alguns casos, as composições da presente invenção podem incluir agentes antiespumantes ou antiespuma, de qualidade alimentar, devido à aplicação do método da invenção. Para esse fim, um dos agentes antiespumantes mais eficazes inclui os silicones. Os silicones, como dimetilsilicone, polissiloxanoglicol, polissiloxanometilfenol, silanos tetralquil ou trialquila, antiespumas de sílica hidrofóbica e suas misturas podem ser usados em aplicações antiespumantes. Os antiespumas comerciais comumente disponíveis incluem silicones como Ardefoam®, da Armour Industrial Chemical Company, que é um silicone ligado a uma emulsão orgânica; Foam Kill® ou Kresseo®, disponibilizados pela Krusble Chemical Company, que são antiespumas do tipo de silicone e não silicone, bem como ésteres de silicone; e o Anti-Foam A® e DC-200, da Dow Corning Corporation, que são silicones de qualidade alimentar, entre outros. Esses antiespumas podem estar presentes em uma variação de concentração de cerca de 0,01% a 20% do peso, de cerca de 0,01% a 5% do peso 20 ou de cerca de 0,01% a 1% do peso.

Agentes espessantes ou gelificantes

As composições da presente invenção podem incluir quaisquer variedades de espessantes conhecidos. Os espessantes adequados incluem gomas naturais, como a goma xantana, goma guar ou outras gomas de mucilagem vegetal; espessantes baseados em polissacarídeo, como alginatos, amidos e polímeros celulósicos (por exemplo, carboximetilcelulose); espessantes poliacrilatos; e espessantes hidrocoloides, como pectina. Em determinados casos, o espessante não deixa resíduos contaminantes na superfície do objeto. Por exemplo, os agentes espessantes ou gelificantes podem ser compatíveis com alimentos ou 30 outros produtos sensíveis em áreas de contato. Geralmente, a concentração do espessante empregado nas presentes composições ou métodos será ditada pela viscosidade desejada na composição final. Contudo, como diretriz geral, a viscosidade do espessante na presente composição varia de cerca de 0,1% a 5% do peso, de cerca de 0,1% a 1,0% do peso ou de cerca de 0,1% a 0,5% do peso.

35 Agente de solidificação

As presentes composições podem incluir um agente de solidificação, que pode participar na manutenção das composições em forma sólida. Em alguns casos, o agente de

solidificação pode formar e/ou manter a composição como sólido. Em outros, o agente de solidificação pode solidificar a composição sem prejudicar de forma inaceitável a eventual liberação do ácido peroxicarboxílico sulfonado. O agente de solidificação pode incluir, por exemplo, um composto sólido orgânico ou inorgânico com característica inerte e neutra ou que faça uma contribuição funcional, estabilizadora ou purificadora para a presente composição. Os agentes de solidificação adequados incluem polietilenoglicol sólido (PEG), polipropilenoglicol sólido, copolímero em bloco EO/PO sólido, amida, ureia (também conhecida como carbamida), surfactante não iônico (que pode ser empregado com acoplador), surfactante aniónico, amido que foi tornado solúvel em água (por exemplo, através de um processo de tratamento ácido ou alcalino), celulose que foi tornada solúvel em água, agente, éter poli(maleico anidrido/metil vinil) inorgânico, ácido polimetacrílico, outros materiais geralmente funcionais ou inertes com alto ponto de fusão, suas misturas e similares;

Agentes de solidificação de glicol adequados incluem polietilenoglicol sólido ou polipropilenoglicol sólido, que podem, por exemplo, ter um peso molecular de aproximadamente 1.400 a cerca de 30.000. Em certos casos, o agente de solidificação inclui ou é um PEG sólido, por exemplo, PEG 1.500 a PEG 20.000. Em outros, o PEG inclui PEG 1.450, PEG 3.350, PEG 4.500, PEG 8.000, PEG 20.000, e similares. Polietilenoglicóis sólidos e adequados são disponibilizados comercialmente pela Union Carbide com o nome comercial de CARBOWAX.

Agentes de solidificação de amida adequados incluem monoetanolamida esteárica, dietanolamida láurica, dietanolamida esteárica, monoetanolamida esteárica, cocodietilenamida, uma alquilamida, suas misturas e similares. Em certos casos, a presente composição pode incluir glicol (por exemplo, PEG) e amida.

Agentes de solidificação de surfactantes não iônicos apropriados incluem etoxilato de nonilfenol, etoxilato de álcool de alquila linear, copolímero em bloco de óxido de etileno/propileno, suas misturas e similares. Os copolímeros em bloco de óxido de etileno/propileno apropriados incluem aqueles vendidos sob a marca Pluronic (como, Pluronic 108 e Pluronic F68) disponibilizados comercialmente pela BASF Corporation. Em alguns casos, o surfactante não iônico pode ser selecionado para ser sólido à temperatura ambiente ou à temperatura na qual a composição será armazenada ou usada. Em outros, o surfactante não iônico pode ser selecionado para possuir solubilidade reduzida em água em combinação com o agente de acoplamento. Os acopladores adequados que podem ser empregados com o agente de solidificação de surfactante não iônico incluem propilenoglicol, polietilenoglicol e suas misturas ou similares.

Os agentes de solidificação de surfactante aniónico apropriados incluem sulfonato de alquilbenzeno linear, sulfato de álcool, éter sulfato de álcool, sulfonato de alfa olefina, suas misturas e similares. Em determinadas situações, o agente de solidificação de surfac-

tante aniónico é ou inclui sulfonato de alquilbenzeno linear. Em outras, o surfactante aniónico pode ser selecionado para ser sólido à temperatura ambiente ou à temperatura na qual a composição será armazenada ou usada.

Agentes de solidificação inorgânicos adequados incluem sal de fosfato (por exemplo, fosfato de metal alcalino), sal de sulfato (por exemplo, sulfato de magnésio, sulfato de sódio ou bissulfato de sódio), sal de acetato (por exemplo, acetato de sódio anidro), boratos (por exemplo, borato de sódio), silicatos (por exemplo, as formas precipitadas ou vaporizadas (por exemplo, Sipernat 50®, disponibilizado pela Degussa), sal carbonato (por exemplo, carbonato de cálcio ou carbonato hidratado), outros compostos hidratáveis conhecidos, suas misturas e similares. Em um caso, o agente de solidificação inorgânico pode incluir compostos fosfonatos orgânicos e sal carbonato, como uma composição de forma E.

Em certos casos, as composições da presente invenção podem incluir qualquer agente ou combinação de agentes que forneçam um grau necessário de solidificação e solubilidade em água e que podem ser incluídos nas presentes composições. Em outros casos, o aumento da concentração do agente de solidificação na presente composição pode tender a aumentar a dureza da composição. A diminuição da concentração do agente de solidificação também pode tender a diminuir ou suavizar a composição concentrada.

Em determinadas situações, o agente de solidificação pode incluir qualquer composto orgânico ou inorgânico que fornece uma característica sólida e/ou controla a característica solúvel da composição atual, por exemplo, quando colocado em ambiente aquoso. Por exemplo, um agente de solidificação pode proporcionar distribuição controlada se tiver maior solubilidade em água em comparação aos outros ingredientes da composição. A ureia pode ser um desses agentes de solidificação. Outro exemplo: para sistemas que se beneficiariam de menor solubilidade aquosa ou taxa mais lenta de dissolução, um agente de endurecimento orgânico não iônico ou de amida pode ser apropriado.

Em alguns casos, as composições da presente invenção podem incluir um agente de solidificação que permita processamento ou fabricação conveniente da presente composição. Por exemplo, o agente de solidificação pode ser selecionado para formar uma composição que pode endurecer em forma sólida em temperaturas ambiente de cerca de 30 a 50 °C após a mistura cessar e a mistura ser dispensada do sistema de mistura, em cerca de 1 minuto a 3 horas, ou cerca de 2 minutos a 2 horas, ou cerca de 5 minutos a 1 hora.

As composições da presente invenção podem incluir agente de solidificação em qualquer quantidade eficaz. A quantidade de agente de solidificação incluída na presente composição pode variar de acordo com o tipo de composição, seus ingredientes, sua utilização prevista, a quantidade de solução de distribuição aplicada à composição sólida ao longo do tempo durante o uso, a temperatura da solução de distribuição, a dureza da solução de distribuição, o tamanho físico da composição sólida, a concentração dos outros ingredientes,

a concentração do agente de limpeza na composição e outros fatores semelhantes. As quantidades adequadas podem incluir cerca de 1 a 99% do peso, cerca de 1,5 a 85% do peso, cerca de 2 a 80% do peso, cerca de 10 a 45% do peso, cerca de 15% a 40% do peso, cerca de 20% a 30% do peso, cerca de 30% a 70%, cerca de 40% a 60%, até 50% do peso, 5 cerca de 40% a 50%.

Veículo

Em alguns casos, as composições da presente invenção incluem um veículo. O veículo fornece um meio que se dissolve, suspende ou transporta os outros componentes da composição. Por exemplo, o veículo pode fornecer um meio de solubilização, suspensão ou 10 produção de um ácido peroxicarboxílico sulfonado e para formação de uma mistura balanceada. O veículo também pode funcionar para entregar e umedecer a composição da invenção em um objeto. Para esse fim, o veículo pode conter qualquer componente ou componentes que possam facilitar essas funções.

Em certos casos, o veículo inclui principalmente água, que pode promover a solubilidade e funcionar como meio de reação e equilíbrio. O veículo pode incluir ou ser principalmente um solvente orgânico, como simples álcoois de alquila, como, etanol, isopropanol, n-propanol, álcool benzílico, e similares. Os polióis também são veículos úteis, incluindo glicerol, sorbitol e similares.

Os veículos adequados incluem éteres de glicol. Os éteres de glicol adequados incluem éter n-butílico de dietilenoglicol, éter n-propílico de dietilenoglicol, éter etílico de dietilenoglicol, éter metílico de dietilenoglicol, éter t-butílico de dietilenoglicol, éter n-butílico de dipropilenoglicol, éter metílico de dipropilenoglicol, éter etílico de dipropilenoglicol, éter propílico de dipropilenoglicol, éter terc-butílico de dipropilenoglicol, éter butílico de etilenoglicol, éter propílico de etilenoglicol, éter etílico de etilenoglicol, éter metílico de etilenoglicol, acetato 20 éter metílico de etilenoglicol, éter n-butílico de propilenoglicol, éter etílico de propilenoglicol, éter metílico de propilenoglicol, éter n-propílico de propilenoglicol, éter metílico de tripropilenoglicol e éter n-butílico de tripropilenoglicol, éter fenílico de etilenoglicol (disponível comercialmente como DOWANOL EPH™ da Dow Chemical Co.), éter fenílico de propilenoglicol (disponível comercialmente como DOWANOL PPH™ da Dow Chemical Co.), e similares 25 ou suas misturas. Outros éteres de glicol adequados que estão disponíveis comercialmente (todos são disponibilizados pela Union Carbide Corp.) incluem Butoxyethyl PROPASOL™, acetato Butyl CARBITOL™, Butyl CARBITOL™, acetato Butyl CELLOSOLVE™, Butyl CELLOSOLVE™, Butyl DIPROPASOL™, Butyl PROPASOL™, CARBITOL™ PM-600, CARBITOL™ Low Gravity, acetato CELLOSOLVE™, CELLOSOLVE™, Ester EEP™, FILMER 30 IBT™, Hexyl CARBITOL™, Hexyl CELLOSOLVE™, Methyl CARBITOL™, acetato Methyl CELLOSOLVE™, Methyl CELLOSOLVE™, Methyl DIPROPASOL™, acetato Methyl PROPASOL™, Methyl PROPASOL™, Propyl CARBITOL™, Propyl CELLOSOLVE™, Propyl 35

DIPROPASOL™ e Propyl PROPASOL™.

Em alguns casos, o veículo compõe uma grande parte da composição da invenção e pode ser o equilíbrio da composição além do ácido peroxicarboxílico sulfonado, agente oxidante, ingredientes adicionais, e assim por diante. A concentração e o tipo do veículo dependerão da natureza da composição como um todo, do ambiente de armazenamento e do método de aplicação, incluindo a concentração do ácido peroxicarboxílico sulfonado, entre outros fatores. Deve ser observado que o veículo deve ser escolhido e usado em uma concentração que não iniba a eficácia do ácido peroxicarboxílico sulfonado na composição da invenção para o uso pretendido, por exemplo, alvejamento, higienização, desinfecção.

Em certos casos, a presente composição inclui cerca de 5 a 90% do peso do veículo, cerca de 10 a 80% do peso do veículo, cerca de 20 a 60% do peso do veículo ou cerca de 30 a 40% do peso do veículo. Deve-se entender que todos os valores e intervalos entre eles são abrangidos pela presente invenção.

Composições de uso

As composições da presente invenção incluem composições de concentrado e de uso. Uma composição de concentrado pode ser diluída em água, por exemplo, para formar uma composição de uso. Em um caso, uma composição de concentrado pode ser diluída em solução de uso antes da aplicação em um objeto. Por razões de economia, pode-se comercializar o concentrado e o usuário final pode diluí-lo em água ou em diluente aquoso, transformando-o em uma solução de uso.

O nível de componentes ativos na composição do concentrado depende do fator de diluição desejado e da atividade pretendida do composto de ácido peroxicarboxílico sulfonado. Geralmente, uma diluição de cerca de 1 onça fluida (29,6 ml) em cerca de 37,8 l (10 galões) de água a cerca de 10 onças fluidas (296 ml) para cerca de 3,7 l (1 galão) de água é utilizada para composições aquosas da presente invenção. Em alguns casos, é possível utilizar diluições de uso maior caso puderem ser empregadas temperatura de uso elevada (superior a 25 °C) ou tempo de exposição prolongado (mais de 30 segundos). No local de uso típico, o concentrado é diluído com uma proporção maior de água usando água da torneira ou de serviço normalmente disponível, misturando os materiais a uma razão de diluição de cerca de 88,7 ml (3 onças) a 1.183 ml (40 onças) de concentrado por 378 l (100 galões) de água.

Em alguns casos, quando usadas em aplicação de lavanderia, as composições concentradas podem ser diluídas na proporção de diluição de cerca de 0,1 g/l para cerca de 100 g/l de concentrado para diluente, cerca de 0,5 g/l para cerca de 10,0 g/l de concentrado para diluente, cerca de 1,0 g/l para cerca de 4,0 g/l de concentrado para diluente ou cerca de 1,0 g/l para cerca de 2,0 g/l de concentrado para diluente.

Em outros casos, uma composição de uso pode incluir cerca de 0,01 a 10% do pe-

so de uma composição concentrada e cerca de 90 a 99,99% do peso de diluente; ou cerca de 0,1 a 1% do peso de uma composição concentrada e cerca de 99 a 99,9% do peso de diluente.

As quantidades de um ingrediente em uma composição de uso podem ser calculadas a partir das quantidades listadas acima para composições concentradas e esses fatores de diluição. Em certos casos, por exemplo, quando usadas em aplicação de lavanderia, as composições concentradas da presente invenção são diluídas de tal forma que o ácido sulfoperoxicarboxílico está presente de cerca de 20 ppm a 80 ppm. Em outros, as composições concentradas da presente invenção são diluídas de tal forma que o ácido sulfoperoxicarboxílico esteja presente a cerca de 20, 40, 60, 80, 500, 1.000 ou 10.000 ppm a 20.000 ppm. Deve-se entender que todos os valores e intervalos entre eles são abrangidos pela presente invenção.

Métodos que empregam compostos e composições de ácido sulfoperoxicarboxílico

Em alguns aspectos, a presente invenção inclui métodos de uso de compostos e composições de ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção. Em determinados casos, esses métodos empregam a atividade antimicrobiana e/ou alvejante do ácido sulfoperoxicarboxílico. Por exemplo, a invenção inclui um método para reduzir a população microbiana, um para reduzir a população de um micro-organismo na pele, um para tratar uma doença de pele, um para reduzir o odor e/ou um método de alvejamento. Esses métodos podem operar em um artigo, superfície, corpo ou fluxo de água ou gás, ou similar, entrando em contato com o artigo, superfície, corpo ou fluxo por meio de um composto ou composição de ácido sulfoperoxicarboxílico da invenção. Entrar em contato pode incluir qualquer um dos vários métodos de aplicação de um composto ou composição da invenção, como pulverização de compostos ou composições, imersão do item nos compostos ou composições, tratamento com espuma ou gel dos compostos ou composição, ou uma combinação desses.

Em alguns aspectos, uma composição da presente invenção inclui uma quantidade de ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção eficaz para matar uma ou mais das bactérias patogênicas de transmissão alimentar associadas a um produto alimentício, incluindo, mas não limitado a, *Salmonella typhimurium*, *Salmonella javiana*, *Campylobacter jejuni*, *Listeria monocytogenes* e *Escherichia coli* O157:H7, leveduras e mofo. Em certos casos, as composições da presente invenção incluem uma quantidade de ácido sulfoperoxicarboxílico eficaz para matar uma ou mais das bactérias patogênicas associadas à superfície e ambientes de serviços de saúde, incluindo, mas não se limitado a, *Salmonella typhimurium*, *Staphylococcus aureus*, *Staphylococcus aureus* resistente à meticilina, *Salmonella choleraesurus*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli*, micobactérias, leveduras e mofo. Os compostos e composições da presente invenção têm atividade contra uma ampla variedade de micro-organismos, como bactérias gram positivas (por exemplo, *Listeria monocytogenes* ou *Sta-*

phylococcus aureus) e gram negativas (por exemplo, *Escherichia coli* ou *Pseudomonas aeruginosa*), leveduras, mofos, esporos de bactérias, vírus, etc. Os compostos e composições da presente invenção, conforme descritos acima, podem ser usados contra uma ampla variedade de patógenos humanos. Os presentes compostos e composições podem matar uma grande variedade de micro-organismos em superfícies de processamento de alimentos, superfícies de produtos alimentícios, água usada para lavar ou processar produtos alimentícios, superfícies ou ambientes de serviços de saúde.

Os compostos da invenção podem ser usados para uma variedade de aplicações domésticas ou industriais, como, para reduzir as populações microbiana ou viral em uma superfície, objeto, corpo ou fluxo de água. Os compostos podem ser aplicados em diversas áreas, incluindo cozinhas, banheiros, fábricas, hospitais, consultórios odontológicos e fábricas de alimentos, e podem ser aplicados em inúmeras superfícies duras ou macias com topografia suave, irregular ou porosa. As superfícies duras apropriadas incluem, por exemplo, superfícies arquitetônicas (pisos, paredes, janelas, pias, mesas, balcões e placas de aviso); utensílios usados na alimentação; instrumentos e dispositivos médicos ou cirúrgicos com superfície dura; e embalagens de superfície dura. Essas superfícies duras podem ser compostas por vários materiais, incluindo, por exemplo, cerâmica, metal, vidro, madeira ou plástico rígido. As superfícies macias apropriadas incluem, por exemplo, papel; meios filtrantes; lençóis e roupas hospitalares e cirúrgicas; instrumentos e dispositivos médicos ou cirúrgicos com superfície macia; e embalagens de superfície macia. Essas superfícies macias podem ser compostas por vários materiais, incluindo, papel, fibra, tecidos ou não tecidos, plásticos macios e elastômeros. Os compostos da invenção também podem ser aplicados a superfícies macias, como alimentos e pele (p. ex., as mãos). Os presentes compostos podem ser empregados como desinfetante ambiental com ou sem formação de espuma.

Os compostos e composições da invenção podem ser incluídos em produtos como esterilizantes, desinfetantes, conservantes, desodorantes, antissépticos, fungicidas, germicidas, esporicidas, virucidas, detergentes, alvejantes, limpadores de superfícies duras, sabonetes, desinfetantes de mãos sem água e paramentação pré ou pós-cirúrgica.

Os compostos também podem ser usados em produtos veterinários, como tratamentos de pele de mamíferos, ou em produtos para higienização ou desinfecção dos recintos de animais, currais, estações de fornecimento de água e áreas de tratamento veterinário, como mesas de exame e salas de operação. Os presentes compostos podem ser empregados em lava-pés antimicrobiano para animais ou pessoas. Os compostos da presente invenção também podem ser empregados como imersão antimicrobiana para úbere.

Em alguns aspectos, os compostos da presente invenção podem ser utilizados para a redução da população de micro-organismos patogênicos, como patógenos humanos, animais e similares. Os compostos apresentam atividade contra patógenos que incluem fungos,

- mofos, bactérias, esporos e vírus, por exemplo, *S. aureus*, *E. coli*, *Streptococci*, *Legionella*, *Pseudomonas aeruginosa*, micobactérias, tuberculose, bacteriófagos ou similares. Esses patógenos podem causar uma variedade de doenças e distúrbios, incluindo mastite e outras doenças de mamíferos de ordenha, tuberculose e similares. Os compostos da presente invenção podem reduzir a população de micro-organismos na pele ou outras superfícies externas ou mucosas de animais. Além disso, os presentes compostos podem matar micro-organismos patogênicos que se espalham por transferência de água, ar ou substrato de superfície. Os compostos precisam apenas ser aplicados à pele, outras superfícies externas ou mucosas de um animal, água, ar ou superfície.
- 10 Em alguns casos, os compostos e composições da presente invenção podem ser usados para reduzir a população dos príons em uma superfície. Os príons são partículas infecciosas proteicas isentas de ácido nucleico. Os príons são conhecidos por causar diversas doenças cerebrais, incluindo kuru, doença de Creutzfeldt-Jakob, doença de Gerstmann-Straussler-Scheinker e insônia familiar fatal em humanos; scrapie em ovinos; encefalopatia 15 espongiforme bovina (doença da vaca louca) em bovinos; encefalopatia transmissível da marta em martas; doença de emaciação crônica em cervos e alces; e encefalopatia espongiforme felina em gatos. Essas doenças resultam em sintomas que incluem demência, ataxia, distúrbios comportamentais, vertigem, movimentos involuntários e morte. Os príons podem ser transmitidos principalmente através da exposição ao tecido e tecido cerebral infectado, 20 tecido da medula espinhal, tecido pituitário e tecido ocular. Em alguns casos, os compostos e composições da presente invenção podem ser usados para reduzir a população de príons de acordo com o método descrito na patente dos EUA N.º 7470655, cujo conteúdo foi integralmente anexado aqui para referência.

Os compostos antimicrobianos também podem ser usados em alimentos e espécies 25 vegetais para reduzir as populações microbianas superficiais; em locais de fabricação ou processamento que manuseiam alimentos e espécies vegetais; ou no tratamento de águas de processo ao redor desses locais. Por exemplo, os compostos podem ser usados em linhas de transporte de alimentos (como sprays de correia); recipientes de imersão de botas e mãos; instalações de armazenamento de alimentos; sistemas de circulação de ar antideterioração; equipamentos de refrigeração e resfriamento; refrigeradores e aquecedores de bebida; branqueadores, tábuas de cortar, áreas de terceira pia e dispositivos para resfriar ou escaldar carnes. Os compostos da invenção podem ser usados para tratar águas de transporte de produtos agrícolas, como aqueles encontrados em calhas, transporte por tubulações, cortadores, fatiadores, branqueadores, sistemas de retorta, lavadoras e similares. Gêneros alimentícios específicos que podem ser tratados com os compostos da invenção incluem ovos, carnes, sementes, folhas, frutas e legumes. As superfícies vegetais específicas 30 incluem folhas, raízes, sementes, cascas, talos, caules, tubérculos, caules subterrâneos, 35

frutas e similares colhidos e em crescimento. Os compostos também podem ser usados para tratar carcaças de animais para reduzir os níveis microbianos patogênicos ou não.

Os compostos antimicrobianos também podem ser usados para tratamento de águas residuais, nas quais tanto sua função antimicrobiana como suas propriedades oxidantes podem ser utilizadas. Além das questões microbianas em torno das águas residuais, elas muitas vezes são ricas em compostos malcheirosos de enxofre reduzido, nitrogênio ou fósforo. Um oxidante forte, como a presente invenção, converte esses compostos de forma eficiente para seus derivados inodoros, por exemplo, sulfatos, fosfatos e óxidos de aminas. Essas mesmas propriedades são muito úteis na indústria de papel e celulose, em que a propriedade de alvejamento também é de grande utilidade.

Em alguns aspectos, os compostos da presente invenção podem ser utilizados para epoxidações. A indústria de polímeros é uma grande consumidora de perácidos, especialmente o ácido peroxiacético, mas o ácido peroxiacético de equilíbrio normal também inclui alguns resíduos fortemente ácidos que são problemáticos para os derivados de epóxido.

Portanto, um isolado perácido estável é, em potencial, de grande utilidade nesse setor.

Em alguns aspectos, os compostos e composições da presente invenção são úteis para a limpeza ou higienização de recipientes, instalações de processamento ou equipamento nos setores de serviços de alimentação ou processamento de alimentos. Os compostos e as composições têm valor especial para uso em materiais e equipamentos de embalagem de alimentos e especialmente em embalagens assépticas a frio ou a quente. Exemplos de instalações de processamento nas quais o composto da invenção pode ser empregado incluem lacticínios da linha de leite, sistema de cervejaria contínua, linhas de processamento de alimentos, como sistemas de bombeamento de alimentos e linhas de bebidas, etc. Os utensílios de serviço de alimentação podem ser desinfetados com o composto da invenção.

Por exemplo, os compostos também podem ser usados em máquinas de lavar louça, máquinas de lavar louça a baixas temperaturas, louças, lavadoras de garrafas, resfriadores de garrafas, aquecedores, lavadoras de terceira pia, áreas de corte (por exemplo, facas, fatiadores, cortadores e serras) e lavadoras de ovos. As superfícies tratáveis específicas incluem embalagens, como caixas, garrafas, películas e resinas; louças, como copos, pratos, utensílios, potes e panelas; máquinas de lavar louça e máquinas de lavar louça a baixas temperaturas; superfícies expostas da área de preparação de alimentos, como pias, balcões, mesas, pisos e paredes; equipamentos de processamento, como tanques, tonéis, linhas, bombas e mangueiras (por exemplo, equipamentos de processamento de leite, queijo, sorvete e outros lacticínios); e veículos de transporte. Os recipientes incluem garrafas de vidro, sacos de filme de PVC ou poliolefina, latas, poliéster, garrafas PEN ou PET de vários volumes (100 ml a 2 litros, etc), recipientes de leite de 3,7 l (1 galão), caixas de papel para suco ou leite, etc.

Os compostos e composições também podem ser usados em outros equipamentos

industriais e em outros fluxos de processos industriais, como aquecedores, torres de resfriamento, caldeiras, águas de retorta, águas de enxágue, águas de lavagem de embalagens assépticas e similares. Os compostos podem ser usados para tratar micróbios e odores em águas recreativas, como piscinas, spas, escorregadores, toboágua, fontes e similares.

5 Um filtro que contenha o composto pode reduzir a população de micro-organismos no ar e em líquidos. Esse filtro pode remover patógenos transportados pela água e pelo ar, como a *Legionella*.

Os presentes compostos podem ser empregados para reduzir a população de micróbios, moscas das frutas ou outras larvas de insetos em um dreno ou outra superfície.

10 Os compostos da presente invenção também podem ser utilizados por equipamentos de processamento de alimentos por imersão na solução de uso, mergulhando o equipamento por tempo suficiente para higienizar o equipamento, limpando ou drenando o excesso de solução para fora do equipamento. O composto também pode ser empregado na pulverização ou limpeza de superfícies de processamento de alimentos com a solução de uso, 15 mantendo as superfícies úmidas por tempo suficiente para higienizá-las e removendo o excesso de solução por limpeza, drenagem vertical, aspiração, etc.

Os compostos da presente invenção também podem ser utilizados em um método de higienização de superfícies duras, como equipamentos de tipo institucional, utensílios, pratos, equipamentos ou instrumentos de serviço de saúde e outras superfícies duras.

20 Os compostos antimicrobianos podem ser aplicados a micróbios ou a superfícies sujas ou limpas usando diversos métodos. Esses métodos podem operar sobre um objeto, superfície, corpo ou fluxo de água ou gás, ou similar, colocando o objeto, superfície, corpo ou fluxo em contato com um composto da invenção. O contato pode incluir qualquer um dos inúmeros métodos de aplicação de composto, como pulverização do composto, imersão do 25 objeto no composto, tratamento do objeto com composto em forma de espuma ou gel ou uma combinação desses.

Um concentrado ou concentração de uso de um composto da presente invenção pode ser aplicado ou colocado em contato com um objeto por qualquer método convencional ou aparelhos de aplicação de composto antimicrobiano ou de limpeza em um objeto. Por 30 exemplo, é possível limpar, pulverizar, cobrir com espuma e/ou imergir o objeto no composto, ou em uma solução de uso dele. O composto pode ser pulverizado, aplicado em forma de espuma ou passado na superfície; pode-se fazer o composto fluir sobre a superfície ou esta pode ser mergulhada no composto. O contato pode ser manual ou por máquina. Superfícies de processamento de alimentos, produtos alimentícios, águas de processamento ou 35 transporte de alimentos e similares podem ser tratados com compostos estabilizados em forma de líquido, espuma, gel, aerosol, gás, cera, sólido ou pó, de acordo com a invenção, ou com soluções desses compostos.

Aplicações em lavanderia

Em alguns aspectos, os compostos também podem ser empregados na higienização de itens, como tecidos, que foram contaminados. Os itens são colocados em contato com os compostos da invenção em temperaturas de uso na faixa de cerca de 4 °C a 80 °C, 5 por um período eficaz para a higienização, desinfecção e/ou esterilização deles. Em alguns casos, os compostos da presente invenção podem ser usados para clarear e/ou higienizar itens a uma temperatura de cerca de 30 °C a 50 °C ou cerca de 40 °C. Em certos casos, os compostos da presente invenção podem ser injetados na água de lavagem ou enxágue de uma lavadora de roupas e colocados em contato com o tecido contaminado por tempo suficiente para higienizá-lo. Em outros casos, o tecido contaminado é colocado em contato com os compostos e composições da presente invenção por cerca de 5 a 30 minutos. O excesso 10 da solução pode ser removido por enxágue ou centrifugação do tecido.

Em alguns aspectos, os compostos da presente invenção podem ser usados como um agente alvejante para branquear, clarear ou remover manchas de um substrato, por exemplo, superfície dura ou tecido. Os compostos da presente invenção podem ser usados para clarear ou remover manchas de qualquer têxtil convencional, incluindo, mas não se limitado a, algodão, misturas de algodão e poliéster, lã e poliéster. Os compostos da presente invenção também são tolerantes a têxteis, ou seja, eles não irão degradar de maneira substancial o tecido ao qual são aplicados. Os compostos da presente invenção podem ser usados para remover uma variedade de manchas de diversas fontes, incluindo, mas não se limitado a, batom, pigmento/sebo, pigmento/lanolina, ferrugem, azeite de oliva, óleo mineral, óleo do motor, sangue, maquiagem, vinho tinto, chá, ketchup e suas combinações.

Em alguns casos, os compostos da presente invenção podem ser usados como agente alvejante ácido e com pouco odor. Em certos casos, os compostos da presente invenção podem ser usados como agente alvejante com pouco odor em pH neutro, ou seja, cerca de 7. Em outros, os compostos da presente invenção podem ser usados em pH alcalino, como 8, 9 ou 10. Os compostos da presente invenção também podem ser usados como um produto completo: ácido, alvejante e esterilizante.

Os compostos e composições da presente invenção podem ser usados isoladamente para tratar itens, como têxteis, ou podem ser usados em conjunto com detergentes convencionais adequados para os itens a serem tratados. Os compostos e composições da invenção podem ser usados com detergentes convencionais de diversas maneiras, por exemplo, podem ser formulados com um detergente convencional. Em outros casos, os compostos e composições da invenção podem ser usados para tratar o artigo como aditivo separado do detergente convencional. Quando usados como um aditivo separado, os compostos e composições da presente invenção podem entrar em contato com o artigo a ser tratado em qualquer momento. Por exemplo, os compostos e composições da invenção podem

entrar em contato com o artigo antes, depois ou basicamente de forma simultânea ao contato dos itens com o detergente selecionado.

Em alguns casos, quando usado como agente alvejante e/ou de higienização/desinfecção em aplicações de lavanderia, um composto ou mistura de compostos da presente invenção estará presente em uma composição de cerca de 5 ppm a 1.000 ppm. Em outros, quando usado como agente alvejante e/ou de higienização/desinfecção em aplicações de lavanderia, um composto ou mistura de compostos da presente invenção estará presente em uma composição de cerca de 25 ppm a 100 ppm. Em outras situações, quando usado como agente alvejante e/ou de higienização/desinfecção em aplicações de lavanderia, um composto ou mistura de compostos da presente invenção estará presente em uma composição de cerca de 20, 40, 60 ou 80 ppm. Em outras, um próprio composto ou mistura de compostos da presente invenção será usado como agente alvejante, ou seja, o composto ou mistura de compostos estará presente em uma composição em cerca de 100% do peso.

Limpeza no local

Outras aplicações de limpeza em superfície dura para os compostos da presente invenção incluem sistemas de limpeza no local (CIP), sistemas de limpeza fora do local (COP), descontaminadores de máquinas de lavar, esterilizadores, máquinas de lavar produtos têxteis, sistemas de ultra e nanofiltragem e filtros de ar internos. Os sistemas COP podem incluir sistemas facilmente acessíveis, incluindo tanques de lavagem, recipientes de imersão, baldes de esfregões, tanques de retenção, pias de higienização, lavadoras de peças de veículos, sistemas e lavadoras em lote não contínuos, e similares. Os sistemas CIP incluem os componentes internos de tanques, linhas, bombas e outros equipamentos de processamento geralmente utilizados para processar fluxos de produtos líquidos, como bebidas, leite e sucos.

Em geral, a limpeza real do sistema ou de outra superfície no local (ou seja, a remoção de vísceras indesejadas encontradas neles) é realizada com um material diferente, como um detergente formulado que é aplicado com água aquecida. Após essa etapa de limpeza, a composição instantânea deve ser aplicada ou introduzida no sistema em uma concentração da solução de uso em água não aquecida, à temperatura ambiente. O CIP geralmente emprega vazões da ordem de cerca de 40 a 600 litros por minuto, de temperaturas ambiente até cerca de 70 °C e tempos de contato de pelo menos cerca de 10 segundos, por exemplo, cerca de 30 ou 120 segundos. A presente composição pode permanecer em uma solução em água fria (por exemplo, 4 °C/40 °F.) ou aquecida (por exemplo, 60 °C/140 °F). Embora normalmente não seja necessário aquecer a solução aquosa de uso da presente composição, em algumas circunstâncias o aquecimento pode ser desejável para melhorar sua ação. Esses materiais são úteis em qualquer temperatura concebível.

Um método de higienizar instalações de processamento fixas no local inclui as se-

quintas etapas. A solução de uso da invenção é introduzida nas instalações de processo a uma temperatura na faixa de 4 °C a 60 °C. Após a introdução da solução de uso, ela é mantida em um recipiente ou aplicada por todo o sistema por tempo suficiente para higienizar as instalações de processamento (por exemplo, para matar micro-organismos indesejáveis).

- 5 Após as superfícies serem higienizadas através da presente composição, a solução de uso é drenada. Após a conclusão da etapa de higienização, o sistema pode opcionalmente ser enxaguado com outros materiais, como água potável. A composição pode ser aplicada nas instalações de processamento por 10 minutos ou menos.

O presente método pode incluir o fornecimento da presente composição pelo fornecimento de ar para limpeza no local ou outras superfícies, como aquelas dentro de tubos e tanques. Esse método de fornecimento de ar pode reduzir o volume necessário da solução.

Contato de um produto alimentício com compostos de ácido sulfoperoxicarboxílico

Em alguns aspectos, a presente invenção fornece métodos para colocar em contato um produto alimentício com um composto ou composição de ácido sulfoperoxicarboxílico empregando qualquer método ou aparelho adequado para a aplicação desse composto ou composição. Por exemplo, em alguns casos, o produto alimentício é colocado em contato com um composto da presente invenção por meio de pulverização, imersão ou tratamento em forma de espuma ou gel. O contato com um spray, espuma, gel ou através de imersão pode ser realizado de diversas maneiras conhecidas por pessoas qualificadas para aplicar agentes antimicrobianos em alimentos. O contato com o produto alimentício pode ocorrer em qualquer local no qual o produto possa ser encontrado, como campo, local ou fábrica de processamento, veículo, armazém, loja, restaurante ou casa. Esses mesmos métodos também podem ser adaptados para aplicar os compostos da presente invenção a outros objetos.

25 Os presentes métodos exigem um tempo mínimo de contato do composto com o produto alimentício para a ocorrência de efeito antimicrobiano significativo. O tempo de contato pode variar de acordo com a concentração, método de aplicação e temperatura do composto de uso, e de acordo com a quantidade de sujeira e micro-organismos no produto alimentício, tipo de agente antimicrobiano ou similares. O tempo de exposição pode ser de, 30 pelo menos, 5 a 15 segundos. Em alguns casos, o tempo de exposição é de cerca de 15 a 30 segundos. Em outros, o tempo de exposição é de, pelo menos, cerca de 30 segundos.

Em determinadas situações, o método de lavagem do produto alimentício emprega um spray de pressão que inclui um composto da presente invenção. Durante a aplicação da solução de spray sobre o produto alimentício, a superfície desse pode ser movida com ação mecânica, por exemplo, agitada, esfregada, escovada, etc. Essa agitação pode acontecer através de uma esfregação física do produto alimentício, pela ação da solução de spray sob pressão, através de sonicação ou outros métodos. A agitação aumenta a eficácia da solução

de spray em matar micro-organismos, um motivo para isso é pode ser uma melhor exposição à solução nas fendas ou pequenas colônias que contêm micro-organismos. Para aumentar a eficácia, antes da aplicação a solução de spray também pode ser aquecida a uma temperatura de cerca de 15 a 20 °C, por exemplo, cerca de 20 a 60 °C. O composto estabilizado 5 do spray pode ser deixado no produto alimentício por tempo suficiente para reduzir adequadamente a população de micro-organismos e, em seguida, ser enxaguado, drenado ou evaporado do produto.

A aplicação do material por pulverização pode ser realizada utilizando uma vareta para pulverização manual, um pulverizador automático de produtos alimentícios que se desloca ao longo de uma linha de produção utilizando vários cabeçotes de pulverização para garantir contato completo ou por outro aparelho de pulverização. Uma aplicação automática 10 de pulverização envolve o uso de uma cabine de pulverização. A cabine de pulverização basicamente limita o composto pulverizado ao interior da cabine. A linha de produção move o produto alimentício pela entrada da cabine de pulverização na qual o alimento é pulverizado 15 em todas as suas superfícies externas com sprays encontrados dentro da cabine. Depois de que o produto alimentício é totalmente coberto pelo material, esse material é drenado para dentro da cabine. Então, o produto alimentício pode sair da cabine. A cabine de pulverização pode incluir jatos de vapor usados para aplicar os compostos estabilizados da invenção. Eses jatos de vapor podem ser usados em combinação com a água de resfriamento 20 para garantir que o tratamento que alcança a superfície do produto alimentício esteja abaixo de 65 °C, por exemplo, abaixo de 60 °C. A temperatura do spray sobre o produto alimentar é importante para garantir que este não seja substancialmente alterado (cozido) pela temperatura do spray. O padrão de pulverização pode ser praticamente qualquer padrão útil.

A imersão de um produto alimentício em um composto líquido estabilizado da presente 25 invenção pode ser obtida por uma variedade de métodos conhecidos por pessoas qualificadas. Por exemplo, o produto alimentício pode ser colocado em um tanque ou banheira com o composto estabilizado. Como opção, os produtos alimentícios podem ser transportados ou processados em uma calha com o composto estabilizado. A solução de lavagem pode ser agitada para aumentar sua eficácia e a velocidade em que ela reduz os 30 micro-organismos que acompanham o produto alimentício. A agitação pode ser obtida por métodos convencionais, incluindo ultrassom, aeração via borbulhamento de ar através da solução, métodos mecânicos, como peneiras, pás, escovas, jatos de líquido movidos por bomba ou combinações desses métodos. A solução de lavagem pode ser aquecida para aumentar sua eficácia ao matar micro-organismos. Depois que o produto alimentício foi 35 imerso por tempo suficiente para obter o efeito antimicrobiano desejado, ele pode ser removido da banheira ou calha e o composto estabilizado pode ser enxaguado, drenado ou evaporado do produto alimentício.

Em outros casos, um produto alimentar pode ser tratado com uma versão em espuma do composto da presente invenção. A espuma pode ser preparada pela mistura de surfactantes de espuma com a solução de lavagem no momento do uso. Os surfactantes de espuma podem ser de natureza não iônica, aniônica ou catiônica. Exemplos de tipos úteis de surfactante incluem, mas não se limitam aos seguintes: etoxilatos de álcool, carboxilato de etoxilato de álcool, óxidos de amina, alquilsulfatos, alquiletersulfato, sulfonatos, incluindo, por exemplo, alquilarilsulfonatos, compostos de amônio quaternário, alquilsarcosinas, betaina e alquilamidas. Normalmente, o surfactante de espuma é misturado com a solução de lavagem no momento do uso. Os níveis de solução de uso dos agentes formadores de espuma são de cerca de 50 ppm a cerca de 2,0% do peso. No momento do uso, pode-se injetar ar comprimido na mistura e, em seguida, aplicá-la à superfície do produto alimentício por meio de um dispositivo de aplicação de espuma, como um espumante de tanque ou de aspiração instalado na parede.

Em alguns casos, o produto alimentício pode ser tratado com uma versão do composto da presente invenção em forma espessada ou gelificada. No estado espessado ou gelificado, a solução de lavagem permanece em contato com a superfície do produto alimentício por períodos mais longos, aumentando assim sua eficácia antimicrobiana. A solução espessada ou gelificada também adere a superfícies verticais. O composto ou a solução de lavagem pode ser espessado ou gelificado utilizando tecnologias existentes, como: goma xantana, espessantes poliméricos, espessantes celulósicos ou similares. Sistemas de formação de micela em haste, como óxidos de amina e contraíons aniônicos, também podem ser usados. Os agentes de formação espessantes ou gel podem ser usados no produto concentrado ou em misturas com a solução de lavagem, no momento do uso. Os níveis de uso típicos dos agentes espessantes ou de gel variam de cerca de 100 ppm a cerca de 10% do peso.

Métodos de processamento de bebidas, alimentos e produtos farmacêuticos

Os compostos de ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção podem ser usados na fabricação de bebidas, alimentos e produtos farmacêuticos, incluindo suco de fruta, laticínios, bebidas de malte, produtos à base de soja, iogurtes, alimentos para bebês, produtos de água engarrafada, chás, remédios para tosse, medicamentos e refrigerantes. Os compostos da presente invenção podem ser usados para higienizar, desinfetar, agir como um esporicida ou esterilizar garrafas, bombas, linhas, tanques e equipamentos de mistura utilizados na fabricação de tais bebidas. Além disso, os compostos antimicrobianos de ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção podem ser usados em operações de enchimento assépticas a frio nas quais o interior do alimento, bebida ou do recipiente farmacêutico é higienizado ou esterilizado antes do enchimento. Nessas operações, um recipiente pode ser colocado em contato com o composto de ácido sulfoperoxicarboxílico desinfetante,

usando, normalmente, um dispositivo de pulverização, imersão ou enchimento para colocar o interior do recipiente em contato com o composto de ácido sulfoperoxicarboxílico, por um período suficiente para reduzir as populações de micro-organismos dentro do recipiente. Pode-se então esvaziar o recipiente retirando a quantidade de desinfetante ou esterilizante

5 utilizado. Após o esvaziamento, o recipiente pode ser enxaguado com água potável ou esterilizado e esvaziado novamente. Depois do enxágue, o recipiente pode ser cheio com a bebida, alimento ou produto farmacêutico. O recipiente pode ser então vedado, tampado ou fechado e, em seguida, embalado para remessa e venda final. O recipiente vedado pode ser colocado em autoclave ou retorta para matar ainda mais micro-organismos.

10 Na manufatura de alimentos, bebidas ou produtos farmacêuticos, os micro-organismos fúngicos do gênero *Chaetomium* ou *Arthrinium*, e esporos ou bactérias do gênero *Bacillus spp* podem ser um grande problema nos processos de engarrafamento, especialmente em processos de engarrafamento asséptico a frio. Os compostos de ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção podem ser usados com a finalidade de controlar ou 15 reduzir significativamente (redução de mais de $5\log_{10}$) o número de micro-organismos *Chaetomium*, *Arthrinium* ou *Bacillus* nas linhas de engarrafamento de bebida, alimentos ou produtos farmacêuticos usando técnicas de engarrafamento asséptico a frio.

20 Nessas técnicas, é possível encher latas metálicas de alumínio ou aço, garrafas ou recipientes de vidro, garrafas de plástico (PET, PBT ou PEN) ou similares, usando técnicas de enchimento asséptico a frio. Nesses processos, os materiais de ácido sulfoperoxicarboxílico da invenção podem ser usados para higienizar o interior de recipientes de bebidas antes 25 do enchimento com a bebida com ou sem gás. Bebidas com gás típicas nessa aplicação incluem, mas não se limitam a, bebidas de cola, de frutas, ginger ale, root beer, chá gelado (que podem ser sem gás) e outras bebidas comuns consideradas refrigerantes. Os materiais de ácido sulfoperoxicarboxílico da invenção podem ser usados para higienizar os tanques, linhas, bombas e outros equipamentos utilizados para a fabricação e armazenamento do material de refrigerantes e também utilizado no engarrafamento ou em recipientes das bebidas. Em determinado caso, os materiais desinfetantes de ácido sulfoperoxicarboxílico são úteis para matar bactérias, fungos e micro-organismos fúngicos que podem estar presentes 30 nas superfícies dos equipamentos de produção e nos recipientes de bebidas.

Os compostos de ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção podem matar de forma eficaz micro-organismos (por exemplo, redução $> 1 \log_{10}$ até cerca de $5 \log_{10}$ em 30 segundos) a partir de um nível de concentração de, pelo menos, cerca de 50 ppm, por exemplo, cerca de 150, 500 ou 1.000 ppm de um composto de ácido sulfoperoxicarboxílico. 35 Em determinado caso, o composto de ácido sulfoperoxicarboxílico, exceto água, estaria presente em uma concentração de cerca de 0,001 a 1% do peso, por exemplo, cerca de 0,01 a 0,15% do peso ou cerca de 0,05 a 0,1% do peso.

Todas as formas de ácido, sal, base e outras formas iônicas e não iônicas dos compostos descritos são incluídas como compostos da invenção. Por exemplo, se um composto é mostrado como um ácido nesse documento, as formas de sal do composto também são incluídas. Da mesma forma, se um composto é mostrado como um sal, as formas de 5 ácido e/ou base também são incluídas.

Pessoas qualificadas nessa área reconhecerão ou serão capazes de determinar pelo uso de, no máximo, uma experimentação de rotina, vários equivalentes aos procedimentos, casos, afirmações e exemplos específicos descritos nesse documento. Esses equivalentes são considerados como dentro do escopo da invenção e são abrangidos pelas afirmações anexadas nesse documento. O conteúdo de todas as referências, patentes e pedidos de patentes citados ao longo desse requerimento estão incorporados no documento para referência. A invenção é ilustrada adicionalmente pelos seguintes exemplos, que não devem ser interpretados como limitantes.

EXEMPLOS

15 Alguns dos exemplos a seguir foram executados usando um produto de ácido peroleico sulfonado. Sem querer ser vinculado a qualquer teoria em particular, acredita-se que o perácido formado a partir de um material inicial de ácido oleico sulfonado disponível comercialmente inclua uma mistura de compostos da presente invenção. Acredita-se que isso se deve, em parte, à natureza do material inicial de ácido oleico sulfonado. Ou seja, acredita-se 20 que, visto que material inicial de ácido oleico sulfonado é derivado de fontes naturais, ele não é quimicamente puro, isto é, não contém apenas uma forma de ácido oleico sulfonado. Assim, sem querer ser vinculado a qualquer teoria em particular, acredita-se que o ácido peroleico sulfonado (doravante denominado "produto de ácido peroleico sulfonado") utilizado nesses exemplos incluiu uma mistura de cerca de 20 a 25% do peso do Composto A (ácido 25 10-hidróxi-9-sulfooctadecaneperoxoico), cerca de 20 a 25% do peso do Composto N (ácido 10,11-diidróxi-9-sulfooctadecaneperoxoico), cerca de 20 a 25% do peso do Composto I (ácido 9-hidróxi-10-sulfooctadecaneperoxoico) e cerca de 20 a 25% do peso do Composto O (ácido 8,9-diidróxi-10-sulfooctadecaneperoxoico). Acredita-se que o restante da composição do perácido inclui cerca de 5 a cerca de 10% do peso de uma mistura desses compostos.

30 *Exemplo 1 – Uso de um ácido sulfoxidocarboxílico como acoplador em condições de aplicação de desinfecção de alto nível*

Os experimentos de estabilidade do ácido peroxioctanoico (POOA) foram realizados sob condições de desinfecção de alto nível (HLD) para avaliar a estabilidade de uma composição da presente invenção que incluiu um produto de ácido peroleico sulfonado em 35 comparação com desinfetantes conhecidos e disponíveis comercialmente.

O Octave FS®, um produto que contém ácido peroxioctanoico, disponibilizado comercialmente pela Ecolab Inc., foi testado em comparação com as Fórmulas A, B e C, e

suas misturas. A Fórmula A era uma mistura de: 2,5% do peso de Dequest 2010 (disponibilizado comercialmente pela thermPhos), grau perácido; 61% do peso de peróxido de hidrogênio (35%); 2,50% do peso de ácido sulfúrico (98%); 6,0% do peso de ácido octanoico; 19% do peso de Hostapur SAS (40%) (disponibilizado comercialmente pela Clariant); e 5 9,00% do peso de SXS-40 (disponibilizado comercialmente pela Stepan Company). A Fórmula B era uma mistura de cerca de 20% do peso do produto de ácido peroleico sulfonado, cerca de 10% de ácido peroctanoico, cerca de 15% do peso de ácido octanoico e cerca de 0,5% do peso de peróxido de hidrogênio. A Fórmula C era uma mistura de cerca de 25% do 10 peso do produto de ácido peroleico sulfonado e cerca de 0,50% do peso de peróxido de hidrogênio. As misturas das fórmulas A, B e C também foram testadas. As soluções de teste foram diluídas com água DI para compor uma solução com cerca de 1.000 ppm de POOA presente em pH de cerca de 6,5. A tabela abaixo mostra as cinco soluções testadas e a quantidade de produto de ácido peroleico sulfonado, POOA e peróxido de hidrogênio disponíveis, em ppm, em cada uma das soluções testadas.

15 *Tabela 2.*

	Composição da solução de teste				
	#1	#2	#3	#4	#5
Octave FS® (% do peso)	10.00	0	0	0	0
Fórmula A (% do peso)	0	4.2	0	0	0
Fórmula B (% do peso)	0	0	0.88	0.55	0.33
Fórmula C (% do peso)	0	0	0.22	0.55	0.77
Peso final, com adição de água DI (g)	100	100	100	100	100
Produto de ácido peroleico sulfonado (ppm)	0	0	2318	2459	2554
POOA (ppm)	1000	1000	800	500	300
H ₂ O ₂	8050	8928	55	55	55

As amostras foram armazenadas a 40 °C e a quantidade de POOA presente foi medida por cromatografia líquida de alto desempenho nos momentos selecionados. A tabela a seguir mostra os resultados da análise de HPLC nas amostras em diversos momentos.

Tabela 3.

	Solução de teste				
	1	2	3	4	5
Tempo (horas)	POOA (ppm)	POOA (ppm)	POOA (ppm)	POOA (ppm)	POOA (ppm)
0	490	870	700	470	290
6	310	730	590	400	250

24	0	120	350	240	150
48	0	10	240	160	100
72	0	0	180	130	80
9 dias	0	0	20	0	0

Esses resultados também estão representados graficamente na Figura 1. Como se pode observar na tabela acima, e na Figura 1, as soluções de teste, incluindo um composto da presente invenção, ou seja, soluções de teste 3, 4 e 5, perderam menos POOA ao longo das primeiras 24 horas em comparação com as outras duas soluções de teste. Mesmo depois de 48 horas, uma maior quantidade de POOA permaneceu nas soluções de teste que incluíam um composto da presente invenção em comparação com as outras soluções testadas. Para cada uma das soluções de teste que incluía um composto da presente invenção, foi demonstrado que a perda de POOA nas soluções não foi linear, e que a taxa de decomposição de POOA foi drasticamente reduzida em proporções mais elevadas do produto de ácido peroleico sulfonado para POOA.

Outro estudo de estabilidade foi realizado para avaliar a estabilidade de uma composição da presente invenção em uma temperatura elevada, ou seja, 37,7 °C (100 °F). Foi usada uma solução que incluía cerca de 2% do peso do produto de ácido peroleico sulfonado e cerca de 55% do peso de H₂O₂, entre outros ingredientes. A quantidade do produto de ácido peroleico sulfonado e H₂O₂ foi medida ao longo de 48 dias. Os resultados são mostrados na Figura 2. Como pode ser visto nessa figura, o composto perácido, o produto de ácido peroleico sulfonado manteve sua atividade ao longo do ensaio, mesmo nessa temperatura acelerada.

Foi realizado um outro estudo de estabilidade para avaliar a estabilidade do ácido peroxyoctanoico quando em contato com um composto da presente invenção, ou seja, o produto de ácido peroleico sulfonado, em condições ambiente. Para esse estudo, o pH estava constantemente em torno de 6 a 6,5. Foram testadas três fórmulas diferentes para esse estudo: A Fórmula D incluía cerca de 5 gramas de uma mistura do produto de ácido peroleico sulfonado, ácido peroxyoctanoico, peróxido de hidrogênio e sulfato cumeno de sódio, entre outros ingredientes; a Fórmula E incluía cerca de 0,5 g de uma mistura do produto de ácido peroleico sulfonado e ácido peroxyoctanoico; e a Fórmula F incluía Octave®, disponibilizado comercialmente pela Ecolab Inc. A quantidade de ácido peroxyoctanoico ativo disponível em vários momentos ao longo de 15 dias foi medida. Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

30 *Tabela 4.*

	Fórmula D	Fórmula E	Fórmula F
Tempo (dias)	POOA (ppm)	POOA (ppm)	POOA (ppm)
0	590	640	570

1	550	590	500
4	470	480	360
6	420	400	240
8	410	360	160
11	360	270	70
14	310	230	30

5 Esse resultado também está representado graficamente na Figura 3. Como pode ser observado nessa tabela, e na figura, as fórmulas que incluíam um composto da presente invenção, ou seja, Fórmulas D e E, mantiveram um nível maior de POOA ao longo de 15 dias. Assim, sem querer se vincular a qualquer teoria em particular, acredita-se que a adição de uma composição que inclua os compostos da presente invenção atua para estabilizar outros ácidos percarboxílicos presentes na composição.

Exemplo 2 – Uso de um ácido sulfoperoxicarboxílico como agente alvejante

10 A utilização de um composto da presente invenção como agente alvejante foi avaliada. A capacidade de remoção de mancha da composição de limpeza foi determinada pela lavagem com amostras de tecido manchadas artificialmente. As amostras manchadas foram compradas de um fabricante ou distribuidor (por exemplo, Test Fabrics, Inc., West Pittston, Pa., EUA). Os tipos de mancha, como azeite de oliva, sebo, maquiagem e vinho, são característicos de manchas naturais encontradas em aplicações de lavanderia.

15 As amostras manchadas foram lavadas com a composição de limpeza em um dispositivo como o Terg-o-tometer (United States Testing Co., Hoboken, N.J., EUA). O Terg-o-tometer é um dispositivo de lavagem para uso em laboratório composto por vários potes que ficam em um único banho de água a temperatura constante controlada, com agitadores suspensos e controle de tempo e velocidade. Os parâmetros do teste de lavagem incluem: temperatura de lavagem, duração da lavagem, pH, agitação mecânica, dose de composição de 20 limpeza, dureza da água, fórmula de lavagem e relação pano/líquido. Após concluir os tempos de exposição adequados, as amostras de tecido foram removidas. As químicas do teste foram imediatamente descarregadas e as amostras foram enxaguadas com água sintética fria com dureza 5 até 5 ciclos de enchimento e enxágue serem concluídos. Então, as amostras foram colocadas em uma superfície plana e secas durante a noite sobre toalhas de algodão-políester branco antes de serem realizadas leituras de refletância utilizando um espetrofotômetro, como o Hunter ColorQuest XE (refletância).

25 Para determinar a porcentagem (%) de remoção da mancha (SR), por exemplo, a capacidade de alvejamento, a refletância da amostra de tecido foi medida em um espetrofotômetro. O "valor L" é uma leitura direta fornecida pelo espetrofotômetro. L geralmente é um indicativo de amplo espectro de refletância visível, em que um valor de 100% seria o

branco absoluto. A porcentagem de remoção da mancha é calculada pela diferença entre o valor de luminosidade (L) inicial (antes da lavagem) e o valor final de L (após a lavagem):

$$SR = ((L_{final} - L_{inicial}) / (96 - L_{inicial})) \times 100\%$$

Foi realizado um teste de alvejante que comparou uma composição que incluía um 5 produto de ácido peroleico sulfonado com as seguintes composições de alvejamento/limpeza disponíveis comercialmente: Ozonit® e Oxysan®, disponibilizados pela Ecolab Inc. Ozonit® representa um produto com 4,5% de ácido peroxiacético enquanto Oxysan® representa um produto com 0,6% de ácido peroctanoico. A Fórmula A era uma composição que incluía cerca de 2% do peso do produto de ácido peroleico sulfonado, cerca de 5% 10 do peso de ácido peroxiacético e cerca de 1,5% do peso de ácido peroctanoico. A Fórmula A foi usada na concentração de 1.200 ppm e tratada posteriormente em dois dos três casos com ácido acético adicional para produzir soluções de teste com pH reduzido. Ozonit® foi usado na concentração de 2.000 ppm. Oxysan® foi testado em concentrações de 1.272 e 15 2.545 ppm. Todas as soluções de lavagem foram tratadas adicionalmente com Detergent MP® e TurboCharge II ®, ambos disponibilizados pela Ecolab Inc., e usados a 500 e 750 ppm, respectivamente. A temperatura do banho/lavagem foi mantida a 37,7 °C (100 °F). O Detergent MP® e TurboCharge II fornecem uma base detergente acumuladora alcalina comum. Os resultados do teste de alvejamento são mostrados na tabela abaixo.

Tabela 5.

	Remoção de mancha (%) de algodão			Conc. de alvejante	
Tipo de alvejante	Chá	Vinho tinto	Ketchup	(mg/l)	pH
Ozonit ®	29	59	27	2000	9.50
Oxysan®	21	66	19	1272	8.00
1X Oxysan®	33	69	27	2545	8.00
Fórmula A, pH 8,0	37	73	38	1000	8.00
Fórmula A, pH 8,5	38	72	41	1000	8.50
Fórmula A, pH 9,0	34	69	36	1000	9.00

20 Como pode ser observado nessa tabela, as composições da Fórmula A atingiram maior percentual de remoção de manchas do que as soluções disponíveis comercialmente testadas em todos os níveis de pH testados, em especial nos casos de ketchup, que representa uma mancha hidrofóbica.

25 A Fórmula A também foi testada usando um teste completo de alvejamento de ciclo de lavagem. O teste foi realizado com uma lavadora comercial de 15 kg (35 lb) com carregamento lateral (*UniMac UX35PVXR*). Folhas de teste pré-manchadas com painéis múltiplos

- (Ecomon N.º 1 & Ecomon N.º 4 incluíam 14 painéis manchados que podiam ser alvejados e 12 painéis manchados com pigmento que não podiam ser alvejados) foram adicionadas à máquina de lavar vazia antes de iniciar um programa de lavagem de 20 minutos (normalmente a 40 °C). As substâncias químicas foram adicionadas em uma sequência escalonada
- 5 de 30 segundos pelos copos de distribuição suspensos depois de a máquina ser cheia com 48 l de água sintética macia de dureza 5. A química inicial foi adicionada com o produto detergente alcalino (cerca de 84 g de Turboemulsion, disponibilizado comercialmente pela Ecolab Inc.). Então, a química de alvejamento foi adicionada a aproximadamente 30 segundos após a mistura de surfactante cáustico e foi iniciado um ciclo de lavagem de 20 minutos.
- 10 Após o ciclo de lavagem, a máquina foi drenada e 3 ciclos de enxágue foram executados. As folhas foram retiradas e secas naturalmente a 21 °C (70 °F) durante a noite antes da medição da refletância de cada painel de amostra com um espectrofotômetro Hunter Color-Quest XE (refletância) (filtro UV "IN"). Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

Tabela 6.

	Valores de refletância L					⁵ Remoção da mancha, %	
	Amostra inicial manchada	³ Apenas <i>Turboemulsion</i>	TE + ⁶ Fórmula A	TE + ⁴ Ozonit	TE + Fórmula A	TE + Ozonit	
<i>Manchas que podem ser alvejadas</i>							
Chá em AL	80.64	80.67	91.62	88.94	71.48	54.01	
Chá em POL/AL	80.43	79.24	91.17	88.28	68.96	50.40	
Vinho tinto em AL	73.66	85.94	93.03	92.06	86.72	82.36	
Vinho tinto em POL/AL, antigo	73.82	82.98	91.71	90.67	80.67	75.97	
Café em AL	78.92	90.72	93.10	92.70	83.04	80.70	
Café em POL/AL	79.77	92.27	93.62	93.28	85.34	83.26	
Suco de groseira preta em AL	64.40	88.37	93.54	92.82	92.22	89.94	
Suco de groseira preta em POL/AL	63.57	85.02	93.30	92.07	91.68	87.89	
Sangue em AL	46.25	89.51	90.60	91.48	89.14	90.91	

IEC 456, antigo						
Sangue em AL	49.36	93.06	93.81	93.88	95.30	95.45
IEC 456, recente						
San-gue/Leite/Tinta em AL	45.26	61.00	51.10	51.89	11.51	13.06
Cacau em AL	75.22	83.76	83.47	83.27	39.72	38.74
IEC 456, recente						
San-gue/Leite/Ferrugem em AL	58.87	86.37	69.87	70.54	29.62	31.44
Ovo/Ferrugem em AL	62.87	76.36	76.09	75.81	39.89	39.05
média / 14	66.65	83.95	86.15	85.55	68.95	65.23
<i>Manchas que não podem ser alvejadas</i>						
Pigmento/Lanolina em AL	71.98	80.90	78.63	80.55	27.70	35.68
Pigmento/Lanolina em POL/AL	66.65	82.38	73.28	81.72	22.60	51.35
Pigmento/Sebo em AL	73.19	87.70	84.02	86.76	47.49	59.48
Pigmento/Sebo em POL/AL	70.64	87.97	77.82	86.74	28.33	63.49
Ferrugem/Azeite de oliva em AL	47.93	69.90	62.45	64.87	30.21	35.23
Ferrugem/Azeite de oliva em POL/AL	40.77	62.89	56.23	58.57	27.99	32.23
Ferrugem/Óleo mineral em AL	59.76	72.35	68.93	71.80	25.30	33.21
Ferrugem/Óleo mineral em POL/AL	55.62	80.15	73.89	78.78	45.25	57.36

Óleo de motor usado em AL	65.91	73.06	70.99	71.77	16.89	19.47
Óleo de motor usado em POL/AL	61.10	68.27	64.08	66.01	8.53	14.08
Maquiagem em AL	84.81	90.06	89.50	90.14	41.94	47.63
Maquiagem em POL/AL	85.16	92.57	91.91	92.14	62.24	64.42
média / 12	70.85	86.01	81.49	84.62	32.04	42.80

Observações: 3. Turbo Usona é uma emulsão completa, comercialmente disponível, de quelantes de metal alcalino emulsificados com uma mistura de surfactantes feita pela Ecolab, Inc. e foi utilizado neste teste a 1750ppm. 4. Ozonit Super é um desinfetante/alvejante de ácido peracético e peróxido de hidrogênio utilizado na concentração de 2000ppm. Ozonit é uma mistura de ácido peracético e peróxido de hidrogênio feito pela Ecolab, Inc.. 5 A porcentagem de Remoção da mancha foi calculada utilizando-se a seguinte fórmula: $SR = ((L_{final}-L_{incial})/(96-L_{incial})) \times 100\%$ CO: Algodão; POL/AL: mistura de poliéster e algodão

Como pode ser observado nessa tabela, a Fórmula A, em média, fornece um alvejamento superior ao Ozonit®. Embora a superioridade nas manchas que podem ser alvejadas seja de apenas 3,7 pontos (5,4%), no caso das manchas que mais resistentes à remoção na lavagem, como chá, a diferença foi de até 17 pontos (24%) a mais.

Outro teste completo de lavagem foi conduzido usando um ciclo de lavagem (máquina de lavar de tamanho normal com carregamento lateral), mas em vez de amostras manchadas individuais, esse teste utilizou folhas com painéis múltiplos combinando 14 amostras manchadas e que podem ser alvejadas (Ecomon 4) e uma segunda folha que combinou 12 amostras manchadas com pigmento/hidrocarboneto que não podem ser alvejadas (Ecomon 1). Esses painéis são feitos por encomenda para Ecolab pela wfk Testgewebe GmbH de Bruggen, Alemanha. Esse extenso teste de alvejamento utilizou um experimento de design que variou as concentrações, às vezes simultaneamente, com as temperaturas, etc. Após a conclusão do tempo de lavagem especificado, todas as folhas Ecomon foram completamente enxaguadas, secas e sua refletividade à luz de amplo espectro foi medida, novamente com filtragem de UV para remoção de possíveis interferências de efeitos de brilho óptico. Ao contrário dos dados do "tergotometer", a porcentagem de remoção de manchas não foi calculada, mas foi medida diretamente a partir do instrumento de refletância (Minolta CM-2610d Spektrophotometer). Um valor "Y", representando refletividade de amplo

espectro, foi relatado. Quanto maior o valor "Y", mais branco o material e, portanto, maior o clareamento ou remoção de mancha.

Nesse teste, a Fórmula A foi comparada a Ozonit®, Ozonit Super® (um produto com 15% de ácido peroxiacético disponibilizado pela Ecolab) e Oxysan®, que foram combinados de várias maneiras com os seguintes agentes de limpeza de acúmulo alcalino disponíveis comercialmente: Triplex Emulsion®, disponibilizado pela Ecolab Inc.; Turbo Usona®, disponibilizado pela Ecolab Inc.; Ozonit Super®, disponibilizado pela Ecolab Inc.; e Oxysan®, disponibilizado pela Ecolab Inc. Os resultados são exibidos nas tabelas abaixo.

Tabela 7. Resultados do alvejamento

Procedimento	Chá em AL	Chá em POL/AL	Vinho tinto em AL, antigo	Vinho tinto em POL/AL, antigo	Café em AL	Café em POL/AL	Suco de groselha preta em AL	Suco de groselha preta em POL/AL	Média
1,5 ml/l de 2Triplex Emulsion + 1 ml/l de Fórmula A Condi- ções: 15' 40°C	72.7	70.0	75.4	74.6	80.2	84.6	82.5	84.1	78.0
1,5 ml/l de Triplex Emulsion + 2 ml/l de Fórmula A Condi- ções: 15' 40°C	80.6	79.6	82.5	80.5	83.5	86.0	85.5	86.1	83.0
1,5 ml/l de Triplex Emulsion + 2,5ml/l de Fórmula A Condi- ções: 20'	82.6	83.1	84.3	80.9	84.3	86.0	86.2	86.3	84.2

40°C									
1,5 ml/l de <i>Triplex</i> <i>Emulsion</i> + 1 ml/l de <i>Ozonit</i> <i>Super</i> Condi- ções: 10' 70□	78.5	79.0	82.2	82.1	84.8	86.2	86.7	86.5	83.3
4 ml/l ³ <i>Turbo</i> <i>Usona</i> + 2 ml/l ⁴ <i>Ozonit</i> <i>Perfor-</i> <i>mance</i> Condi- ções: 20' 40□	80.8	80.5	81.5	79.0	81.1	84.2	82.0	80.8	81.2
4 ml/l <i>Tur-</i> <i>bo Usona</i> + 4 ml/l ⁵ <i>Oxysan</i> Condi- ções: 20' 40□	79.2	77.9	78.9	76.3	79.9	83.3	77.6	75.9	78.6
4 ml/l de <i>Turbo U-</i> <i>sona</i> + 2 ml/l de <i>Fórmula A</i> Condi- ções: 15' 40□	82.2	81.7	82.1	80.5	82.6	85.2	82.6	82.6	82.4
LSD	1.8	3	1.9	2.4	1.1	0.8	1.7	1.8	1.9

Tabela 8. Resultados do alvejamento

	1,5 ml/l de 2Triplex Emulsion + 1 ml/l de Fórmula A Condições: 15' 40□	1,5 ml/l de Triplex E-Emulsion + 2,5ml/l de Fórmula A Condições: 15' 40□	1,5 ml/l de Triplex E-Emulsion + 2,5ml/l de Fórmula A Condições: 20' 40□	4 ml/l de Turbo Usona + 2 ml/l de Ozonit Super Condições: 10' 70□	3Turbo Usona + 2 ml/l de Ozonit Performance Condições: 10' 20' 40□	4 ml/l de Turbo Usona + 2 ml/l de Ozonit Performance Condições: 20' 40□	4 ml/l de Turbo Usona + 2 ml/l de Ozonit Performance Condições: 20' 40□	LSD
Pigmento/ Lanolina em AL	54.3	55.6	56.8	67.3	57.5	56.6	54.8	6.1
Pigmento/ Lanolina em POL/AL	53.4	51.4	48.8	60.6	46.1	44.9	46.2	5.8
Pigmento/ Sebo em AL	68.3	59.7	59.6	67.5	60.1	58.0	60.9	6.7
Pigmento/ Sebo em POL/AL	66.0	54.2	54.7	73.4	53.2	50.5	54.3	6.3
Ferrugem/Azeite de oliva em AL	47.7	42.5	32.2	46.9	24.7	25.1	24.3	7.8
Ferrugem/Azeite de	33.8	28.5	24.2	38.4	15.7	14.4	13.0	9.6

oliva em POL/AL								
Ferru- gem/Óle o mineral em AL	36.9	34.3	36.0	34.0	33.4	30.6	30.6	4.5
Ferru- gem/Óle o mineral em POL/AL	42.4	43.9	35.8	46.6	31.0	32.7	37.7	8.2
Óleo de motor usado em AL	42.7	43.9	42.6	46.0	44.0	44.9	46.3	2.6
Óleo de motor usado em POL/AL	37.7	34.7	33.7	36.4	32.2	33.5	33.8	1.6
Maquia- gem em AL	75.3	74.1	75.7	84.1	73.3	72.4	73.5	4
Maquia- gem em POL/AL	79.8	77.9	76.8	86.6	75.7	74.0	76.9	3.8
Batom em AL	87.6	87.4	87.3	87.7	85.9	86.9	87.3	1.4
Batom em POL/AL								3.047 0618
Média	53.2	50.1	48.1	57.3	45.6	44.8	46.0	5.6

Observações:

1. O valor Y se refere ao valor de refletância calculado pelo espectrofotômetro Minolta CM-2610d. É muito similar ao valor L calculado pelos espectrofotômetros do Hunter Lab.
2. *Triplex Emulsion* é uma emulsão completa, comercialmente disponível, de quelantes de metal alcalino emulsificados com uma mistura de surfactantes feita pela Ecolab, Inc. (Europa).
3. *Turbo Usona* é uma emulsão completa, comercialmente disponível, de quelantes de metal alcalino emulsificados com uma mistura de surfactantes feita pela Ecolab, Inc. (Europa).

4. Ozonit Super é um desinfetante/alvejante de ácido peracético e peróxido de hidrogênio feito pela Ecolab, Inc. (Europa).

5. Oxysan é um desinfetante/alvejante de ácido peracético e peróxido de hidrogênio e que também contém ácido peroxyoctanoico, feito pela Ecolab, Inc. (Europa).

AL: Algodão

POL/AL: mistura de poliéster e algodão

Como pode ser observado nesses resultados, no geral as amostras lavadas com composições da presente invenção, ou seja, com a Fórmula A, conseguiram alvejamento similar em comparação com os agentes alvejantes disponíveis no mercado.

Exemplo 3 – Uso de um ácido sulfoperoxicarboxílico como agente alvejante

5 Um teste de clareamento foi realizado comparando uma composição que incluía um ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção, ou seja, ácido 11-sulfoundecaneperoxoico (Composto D), com as seguintes composições de alvejamento/limpeza disponíveis comercialmente: Tsunami 100®, disponibilizado pela Ecolab Inc.; O-
10 xonia Active®, disponibilizado pela Ecolab Inc.; peróxido de hidrogênio (35%); e PAP-70®, disponibilizado pela Solvay. Esses produtos químicos foram utilizados no estado em que se encontravam, exceto por ajustes de pH para pH 8 usando bicarbonato de sódio e para pH 12 através da adição de hidróxido de sódio em água dura de dureza 5.

15 Amostras de tecido manchadas com chá, sangue ou vinho foram utilizadas neste exemplo. As amostras manchadas foram lavadas utilizando o mesmo procedimento experimental descrito anteriormente no Exemplo 2. No entanto, para esse exemplo, as amostras manchadas foram lavadas por 10 minutos a 48 °C (120 °F). O pH da solução de lavagem para todas as amostras foi de cerca de 9. A porcentagem de remoção de mancha (SR) foi determinada de acordo com o método descrito acima no Exemplo 2. A tabela a seguir mostra os resultados desse estudo.

20

Tabela 9.

Remoção de manchas de chá						
Tipo de alvejante	pH	Temp. (F)	Tempo de lavagem (min)	%SR	Solução de uso do alvejante mg/l	Solução de uso com oxigênio disponível (ppm)
Composição, incluindo composto D	9	120	10	37	1350	56
Tsunami 100®	9	120	10	34	770	56
Oxonia Acti-	9	120	10	27	410	56

ve®						
H ₂ O ₂ (35%)	9	120	10	24	340	56
PAP-70	9	120	10	63	1386	56
Água (controle)	9	120	10	11	0	56
Remoção de manchas de sangue						
Tipo de alve-jante	pH	Temp. (F)	Tempo de lava-gem (min)	%SR	Solução de uso do alve-jante mg/l	Solução de uso com oxigênio disponível (ppm)
Composição, incluindo composto D	9	120	10	90	1350	56
Tsunami 100®	9	120	10	81	770	56
Oxonix Acti-ve®	9	120	10	80	410	56
H ₂ O ₂ (35%)	9	120	10	82	340	56
PAP-70	9	120	10	88	1386	56
Água (controle)	9	120	10	36	0	0
Remoção de manchas de vinho tinto						
Tipo de alve-jante	pH	Temp. (F)	Tempo de lava-gem (min)	%SR	Solução de uso do alve-jante mg/l	Solução de uso com oxigênio disponível (ppm)
Composição, incluindo composto D	9	120	10	62	1350	56
Tsunami 100®	9	120	10	57	770	56
Oxonix Acti-ve®	9	120	10	41	410	56

H ₂ O ₂ (35%)	9	120	10	45	340	56
PAP-70	9	120	10	74	1386	56
Água (controle)	9	120	10	36	0	56

Como pode ser observado nessa tabela, com relação a manchas de chá, a composição PAP-70® obteve a maior remoção de mancha. Depois dela, a composição com um composto da presente invenção obteve a mais alta porcentagem de remoção de mancha. Com relação às manchas de sangue, a composição contendo o ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção alcançou a maior remoção de mancha. Contudo, todos os oxidantes concentrados tiveram bom desempenho na remoção de manchas de sangue. Com relação às manchas de vinho tinto, o ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção teve um bom desempenho em comparação com o PAP-70®.

Exemplo 4 - Estudos de estabilidade

A estabilidade de um ácido sulfoperoxicarboxílico da presente invenção, ou seja, ácido 11-sulfoundecaneperoxoico (Composto D), foi comparada com a do ácido ftalimidoperoxiexanoico (PAP). Os dados de estabilidade da amostra de PAP foram extraídos da patente dos EUA N.º 5.994.284, atribuída à Clariant GmbH. As amostras do composto da presente invenção foram armazenadas por quatro (4) semanas em diferentes temperaturas. A perda de oxigênio ativo foi medida por titrimetria. Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

Tabela 10.

Composto	Tempo de armazenamento (semanas)	Temperatura (°C)	Perda de oxigênio ativo (%)
Composto D	4	Temp. ambiente	0.78
Composto D	4	38	7.9
Composto D	4	50	15.7
PAP	4	25	1.4
PAP	4	40	2.0
PAP	4	50	12.0

Como pode ser observado nessa tabela, o composto da presente invenção foi mais estável, ou seja, perdeu menos oxigênio ativo, à temperatura ambiente, cerca de 23 °C, do que o PAP a 25 °C.

Exemplo 5 – Desempenho de alvejamento de várias fórmulas da presente invenção

Um teste foi realizado para comparar as propriedades de clareamento de composições da presente invenção com os seguintes agentes alvejantes disponíveis comercialmen-

te: Ozonit®, disponibilizado pela Ecolab Inc., e PAP®, disponibilizado pela Clariant. Foram usadas as seguintes composições da presente invenção: A Fórmula A, que incluía cerca de 25% do peso do produto de ácido peroleico sulfonado, cerca de 70% do peso de H₂O₂ (35%) e cerca de 5% do peso de HEDP 60; a Fórmula B que incluía cerca de 24% do peso 5 de uma mistura de produto de ácido peroleico sulfonado e ácido peroxioctanoico, cerca de 72% do peso de H₂O₂ (35%) e cerca de 4% do peso de HEDP 60; e a Fórmula C que incluía cerca de 20% do peso de uma mistura do produto de ácido peroleico sulfonado e ácido peroxioctanoico, cerca de 62% do peso de H₂O₂ (35%), cerca de 4% do peso de HEDP 60 e cerca de 13% do peso de ácido acético. Essas fórmulas foram comparadas a agentes alvejantes disponíveis no mercado, a 40 °C em um pH entre 7 e 8. O Ozonit® também foi testado a 60 °C.

10 Para medir a habilidade de alvejamento das formulações, foi realizado um teste de alvejamento descrito no Exemplo 2. Os resultados são mostrados na Figura 4. Como pode ser observar nessa figura, as Fórmulas A, B e C tiveram habilidade de alvejamento muito 15 superior em comparação com Ozonit® a 40°C. Quando o Ozonit® foi usado a 60 °C, as Fórmulas A, B e C tiveram habilidade de alvejamento muito similar. A Fórmula C também teve desempenho de alvejamento similar em comparação com PAP. Assim, as Fórmulas A, B e C mostraram propriedades de alvejamento iguais, se não melhores, em comparação com agentes alvejantes conhecidos e disponíveis comercialmente, a 40 °C.

20 *Exemplo 6 - Estudos antimicrobianos*

(a) *Eficácia bactericida*

Foi realizado um experimento para determinar a eficácia bactericida de uma composição de acordo com a presente invenção, com e sem surfactante, em comparação com outros produtos disponíveis no mercado. A Fórmula A incluía cerca de 1.190 ppm de um 25 produto de ácido peroleico sulfonado, além de ácido peroxioctanoico e ácido peracético. O surfactante usado nesse exemplo foi o Turboemulsion® (TE), disponibilizado comercialmente pela Ecolab Inc. As composições foram testadas em relação à *Clostridium difficile* ATCC 9689, MRSA ATCC 33592, *Enterococcus hirae* ATCC 10541, *Escherichia coli* ATCC 11229 e *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 15442, em tempos de exposição de 5 e 60 minutos. As 30 composições disponíveis comercialmente Ozonit® e PAP também foram testadas. As seguintes formulações foram testadas:

Tabela 11.

Formulação de teste	Concentração desejada de agente ativo	Diluente	Solução de uso no teste (volume da substância de teste/volume total)	pH
Fórmula A com surfactante	1.190 ppm	Água estéril MilliQ	0,194g de Fórmula A + 170 µl de TE/100g	7.59

Fórmula A sem surfactante	1.190 ppm		0,194 g de Fórmula A/100g	8.53
PAP®	1.820 ppm		0,182 g de PAP + 1,5 g de TE/100 g	8.50
Ozonit®	2000		0,200 g de Ozonit + 1,5 g de TE/100 g	7.21

O método de teste utilizado estava de acordo com a Norma Europeia EN 13704: *Quantitative Suspension Test for the Evaluation of Sporicidal Activity of Chemical Disinfectants and Antiseptics Used in Food, Industrial, Domestic and Institutional Areas*. Em geral, uma suspensão de teste de esporos bacterianos em uma solução de substância de referência, simulando condições de limpeza, foi adicionada a uma amostra preparada da formulação de teste diluída em água dura. A mistura foi mantida na temperatura específica pelo tempo desejado. Nesse tempo de contato, uma alíquota foi tirada, a ação esporicida nessa parte foi imediatamente neutralizada ou suprimida por um método validado. O número de esporos bacterianos sobreviventes em cada amostra foi determinado e foi calculada a redução em contagens viáveis.

As propriedades desinfetantes de cada uma das formulações, em 5 minutos e 40 °C, são exibidas na Tabela 12.

Tabela 12.

Teste/Sistema	Fórmula A com PAP surfactante	Ozonit	Fórmula A sem surfactante
MRSA	>6.66	>6.66	>6.66
<i>Enterococcus hirae</i> ATCC 10541	>6.26	>6.26	>6.26
<i>Escherichia coli</i> ATCC 11229	>6.74	>6.74	>6.74
<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	>6.32	>6.32	>6.32
<i>Clostridium difficile</i> ATCC 9689	>3.87	1.17	2.57
			3.09

Como pode ser observado nessa tabela, as composições da presente invenção que foram testadas foram tão eficazes como desinfetante quanto as formulações testadas disponíveis comercialmente. Além disso, no que diz respeito à *Clostridium difficile*, as composições da presente invenção foram mais eficazes do que os produtos testados disponíveis no mercado.

(b) Estabilidade e eficácia esporicida em 14 dias

Foi realizado um teste para determinar a estabilidade e eficácia esporicida de uma composição da presente invenção contra esporos. A composição testada incluiu o produto de ácido peroleico sulfonado e uma quantidade de ácido peroxioctanoico. O método de teste usado estava de acordo com a Norma Europeia EN 13704: *Quantitative Suspension Test for the Evaluation of Sporicidal Activity of Chemical Disinfectants and Antiseptics Used in Food, Industrial, Domestic and Institutional Areas*, descrita abaixo. A tabela abaixo exibe os resultados desse estudo.

Tabela 13.

Produto de ácido peroleico sulfonado + POOA	
(Referência de 14 dias)	
Água DI	
pH 6,5	
B. subtilis C. difficile	
Condições de limpeza	
20 °C	
60 min 60 min	
Redução de log de 3,84 Redução de log de 2,71	

10 Também foi testada uma composição que incluiu 30 ppm de ácido peroxioctanoico. A composição de apenas ácido peroxioctanoico não resultou em redução.

A Figura 5 mostra o impacto da estabilidade que o composto usado da presente invenção, ou seja, o produto de ácido peroleico sulfonado, teve sobre a quantidade de POOA ao longo do tempo durante esse estudo. Como é possível observar nessa figura, a quantidade de POOA disponível ao longo do tempo foi maior com a amostra de POOA estabilizada com uma composição da presente invenção em comparação com uma amostra de POOA não estabilizada com uma composição da presente invenção.

(c) Efeito sinérgico de uma composição da presente invenção com um desinfetante conhecido

20 Para esse estudo, foi usado o ASME 1052-96: Um método de teste padrão para eficácia de agentes antimicrobianos contra vírus em suspensão. Uma composição que incluiu 1.000 ppm de ácido peroxiacético (POAA) foi testada isoladamente e em combinação com o produto de ácido peroleico sulfonado.

A solução de POAA sozinho não mostrou uma completa inativação de poliovírus tipo 1 após um tempo de exposição de 4 minutos. As reduções na titulação viral foram $\leq 0,75$ e $\leq 0,50 \log_{10}$. Quando a solução de POAA foi testada com 1.000 ppm de produto de ácido peroleico sulfonado, ela apresentou uma inativação completa de poliovírus tipo 1 após um

tempo de exposição de alguns minutos e, portanto, foi eficaz contra o vírus. A redução na titulação viral foi $\geq 5,75 \log_{10}$.

(d) *Efeito sinérgico de um composto da presente invenção com ácido peroxioctanoico*

5 Para esse estudo, foi utilizado o MS103: Um teste tuberculocida quantitativo O produto de ácido peroleico sulfonado foi testado isoladamente e em combinação com o ácido peroxioctanoico em várias concentrações contra a *Mycobacterium bovis* BCG. As composições foram testadas em um pH de 6,5 em temperatura ambiente. Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

10 *Tabela 14.*

Substância de teste	Tempo de exposição	Redução de log
1.000 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado	2,5 min	4.46
	5 min	5.11
300 ppm de POOA	2,5 min	3.48
	5 min	<4.31
1.000 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado e 300 ppm de POOA	2,5 min	>7.31
	5 min	>7.31
1.000 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado e 150 ppm de POOA	2,5 min	>7.31
	5 min	>7.31

Como é possível observar nessa tabela, as amostras tratadas com uma composição da presente invenção que incluía o produto de ácido peroleico sulfonado e POOA tiveram maior redução de log da *Mycobacterium bovis* BCG do que as amostras tratadas com o produto de ácido peroleico sulfonado ou POOA isoladamente. Contudo, verificou-se que as amostras tratadas apenas com o produto de ácido peroleico sulfonado tiveram maior redução de log de bactérias do que as amostras tratadas apenas com POOA.

15 (e) *Uso de um composto da invenção como desinfetante hospitalar*

Para esse teste, foram usados o Método Oficial da AOAC 955.15 -Testing Disinfectant Against *Staphylococcus aureus* e o Método Oficial da AOAC 964.02 - Testing Disinfectants Against *Pseudomonas aeruginosa*. A composição utilizada incluiu o produto de ácido peroleico sulfonado e ácido peroxioctanoico (POOA), em diferentes concentrações. A tabela a seguir resume o procedimento de teste utilizado e os resultados.

Tabela 15.

Substância de desejada teste	Concentração	Diluente	Diluição (Volume do sistema de teste / Volumen total)	pH do teste
Produto de ácido peroleico sulfonado POOA	1.000 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado + ácido peroleico sintética POOA	400 ppm de água dura	2,910g de produto de ácido peroleico sulfonado + 0,2345g de POOA / 1.500 g	6.5
	1.000 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado 150 ppm de POOA		0,1852 g de produto de ácido peroleico sulfonado + 0,4690 g de POOA / 1.500 g	6.5
Sistema de teste	Substância de teste		N.º de tubos negativos / N.º de veículos testados	
<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	1.000 ppm de produto de ácido peroleico sulfonado + 300 ppm de POOA		60 / 60	
<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	1.000 ppm de produto de ácido peroleico sulfonado + 150 ppm de POOA		60 / 60	
<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	1.000 ppm de produto de ácido peroleico sulfonado + 300 ppm de POOA		60 / 60	
<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	1.000 ppm de produto de ácido peroleico sulfonado + 150 ppm de POOA		60 / 60	

Como se pode observar nessa tabela, as composições testadas foram eficazes contra cada um dos sistemas de teste.

Exemplo 7 - Habilidades de acoplamento dos compostos da presente invenção

A habilidade de uma composição da presente invenção que inclui o produto de ácido peroleico sulfonado para acoplar ácido octanoico foi comparada às habilidades de aco-

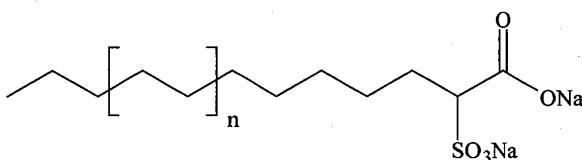
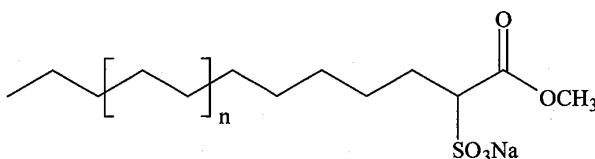
plamento de dois agentes de acoplamento conhecidos e disponíveis comercialmente: NAS e alquilbenzeno linear sulfonado (LAS).

Os resultados podem ser visualizados na Figura 6. Como se pode observar nessa figura, um grama do produto de ácido peroleico sulfonado foi capaz de acoplar duas vezes 5 mais ácido octanoico em comparação com os outros agentes de acoplamento testados.

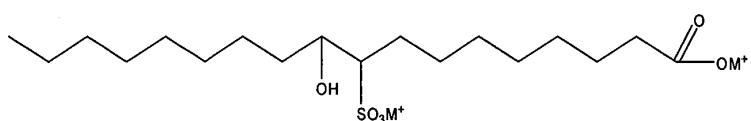
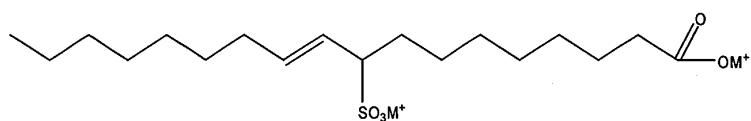
Exemplo 8 – Formação de ácidos carboxílicos sulfonados e seus sais percarboxílicos

Foi realizado um estudo para determinar o efeito da posição do grupo sulfonado sobre o ácido carboxílico na formação de um perácido. Especificamente, o estudo foi realizado para determinar se ter o grupo sulfonado na posição α proíbe a oxidação e/ou peridrólise do grupo de ácido carboxílico para formar o ácido peroxicarboxílico correspondente.

Sais de ácido graxos sulfonados (ésteres metílicos) disponíveis comercialmente são predominantemente sulfonados em α , incluindo, por exemplo, Alpha-Step PC-48 (disponibilizado comercialmente pela Stepan Comp.), Alpha-Step MC-48 (MC-48) (disponibilizado comercialmente pela Stepan Comp.), Alpha-Step BSS-45 (disponibilizado comercialmente pela Stepan Comp.) e MES (disponibilizado comercialmente pela Lion Corporation). Estruturalmente, esses compostos são ésteres alfassulfometílicos de sódio C_{12} - C_{18} e os sais de ácido graxo alfassulfodissódicos C_{12} - C_{18} . Suas estruturas são apresentadas abaixo:



O ácido oleico sulfonado é outro ácido graxo sulfonado disponível comercialmente. 20 Esse composto é principalmente um sal de ácido 8-sulfo-octadecenoico, com uma minoria de sais de ácido 9-sulfo-10-hidróxi-octadecanoico. Eles não são sulfonados na posição α . As estruturas desses tipos de compostos são mostradas abaixo:



Ácidos graxos sulfonados em α foram preparados pela hidrólise da mistura de éster metílico de ácidos graxos sulfonados em α e o ácido (MC-48). Em um bêquer com 25 g de MC-48, foram adicionados 12g da solução NaOH a 50%. A mistura foi agitada à temperatura ambiente por 3 horas. A mistura foi então acidificada com a adição de H_2SO_4 (50%) até que 5 o pH da mistura atingiu cerca de 0 -1. O precipitado sólido branco foi filtrado, lavado com água fria e secado. O pó branco sólido produzido foi avaliado usando ^{13}C NMR (DMSO-d₆). O grupo metila do éster metílico da matéria-prima não foi observado, indicando uma hidrólise completa.

A fim de tentar formar o perácido usando uma reação de hidróxido catalisada por 10 ácido, foi executada a seguinte reação. 0,5 g do sulfonato de ácido graxo derivados de MC-48, como preparado acima, foi pesado em um bêquer de 50 ml. A esse bêquer, foram adicionados 30 g de H_2O_2 (35%). Em seguida, 5g de H_2SO_4 (985) foram adicionados lentamente, produzindo uma solução transparente. Após repousar a 50 °C por 24 horas, a solução foi analisada para determinar a presença de um perácido.

15 Para determinar a presença de um perácido, foi usada uma titulação iodométrica cinética semelhante ao método divulgado em Sully e Williams ("The Analysis of Per-Acids and Hydrogen Peroxide," *The Analyst*, 87:1037, p. 653 (ago. de 1962)). Esse método demonstrou um limite de detecção menor de cerca de 0,3 ppm para POAA. Em vista da relação de peso molecular do POAA com a perspectiva de ácido percarboxílico do PC-48, o 20 limite de detecção foi estimado em cerca de 1,4 ppm ($3,93 \times 10^{-6}$ M). Não foi observada formação de perácido. Isso é equivalente a uma constante de formação de ácido percarboxílico (Keq) inferior a 0,002, sugerindo que basicamente nenhum perácido foi formado.

Como opção, a formação do perácido foi determinada usando ^{13}C NMR (D₂O). Usando essa técnica, não foi observado um sinal de ressonância de carbonila do perácido.

25 Outras fontes de ácidos graxos sulfonados em α , como Alpha-Step PC-48 e Alpha-Step BSS-45 também reagiram com H_2O_2 de forma semelhante e, em ambos os casos, não foram detectados perácidos correspondentes.

Ácidos graxos não sulfonados em α também foram testados para determinar a probabilidade da formação de perácido. Para o ácido oleico sulfonado examinado acima, a 30 constante de formação medida foi de 1,42. O ácido undecenoico sulfonado foi coletado como um pó sólido estável, de modo a constante de formação não foi medida. Embora a constante de formação do perácido de ácido oleico sulfonado seja significativamente menor do que aquela do perácido comercializado mais comumente, o ácido peroxiacético (Keq = 2,70), ainda é alta o suficiente para produzir resultados práticos.

35 No geral, sem querer se vincular a qualquer teoria em particular, acredita-se que o grupo α -sulfo proíbe a oxidação e/ou peridrólise do grupo de ácido carboxílico por H_2O_2 no perácido correspondente. Isso pode acontecer, em parte, devido a seus fortes efeitos de

retirada de elétrons.

Exemplo 9 – Composições de desinfecção para limpeza no local

Foi realizado um estudo para determinar a eficácia das composições da presente invenção como desinfetantes utilizados em um método de limpeza no local. Foi preparada

5 uma composição que incluiu cerca de 5,85% do peso do produto de ácido peroleico sulfonado e cerca de 11,6% de peróxido de hidrogênio, cerca de 1% do peso de um agente quelante, cerca de 12,75% do peso de H_2SO_4 , cerca de 13,6% do peso de NAS-FAL (sulfonato de octano de sódio) e cerca de 1,5% do peso de SXS (disponibilizado comercialmente pela Stepan Company). Água dura sintética foi usada para diluir a composição de teste até a

10 concentração desejada de perácido. O perácido foi testado nas concentrações de 1.000 ppm, 750 ppm e 500 ppm. Os pHs das soluções de uso foram os seguintes:

Concentração de perácido na solução de uso	pH
500 ppm de perácido	1.65
750 ppm	1.46
1.000 ppm	1.38

As soluções de uso foram testadas contra *Staphylococcus aureus* ATCC 6538 e *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 15442. As machas orgânicas usadas foram soro bovino fetal a 5%. O tempo de exposição do teste foi de 5 minutos a uma temperatura de 20 ± 1 °C.

15 Uma tela neutralizadora também foi preparada como parte dos testes para verificar se o neutralizador inutilizava adequadamente o produto e não foi prejudicial para os organismos testados. As placas foram incubadas a 35 °C por 48 horas com os sistemas de teste anteriores à exposição aos perácidos. Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

Tabela 16.

20 *Staphylococcus aureus* ATCC 6538

Substância de teste	N.º de tubos negativos / N.º de veículos testados
1.000 ppm de composição de perácido	60 / 60

Pseudomonas aeruginosa ATCC 15442

Substância de teste	N.º de tubos negativos / N.º de veículos testados
1.000 ppm de composição de perácido	60 / 60

Controles de teste

Controle	Sistema de teste	Resultados
Veículo negativo		1 negativo de 1 testado

Veículo positivo	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	1 positivos de 1 testados
Veículo positivo	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	1 positivos de 1 testados
Mancha orgâni- ca		1 negativo de 1 testado
Neutralização (1.000 ppm)	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	6 positivos de 6 testados
Neutralização (1.000 ppm)	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	6 positivos de 6 testados
Enumeração de cultura	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	$9,0 \times 10^8$ CFU/ml
Enumeração de cultura	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	$1,0 \times 10^9$ CFU/ml
Enumeração de veículo	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	$1,0 \times 10^6$ CFU/ml $1,0 \times 10^7$ CFU/veículo
Enumeração de veículo	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	$2,3 \times 10^6$ CFU/ml $2,3 \times 10^7$ CFU/veículo

Staphylococcus aureus ATCC 6538

Substância de teste	N.º de tubos negativos / N.º de veículos testados
500 ppm de composição de perácido	59 / 60
750 ppm de composição de perácido	60 / 60

Pseudomonas aeruginosa ATCC 15442

Substância de teste	N.º de tubos negativos / N.º de veículos testados
500 ppm de composição de perácido	58 / 60
750 ppm de composição de perácido	60 / 60

Controles de teste

Controle	Sistema de teste	Resultados
Veículo negativo		1 negativo de 1 testado
Veículo positivo	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	1 positivos de 1 testados
Veículo positivo	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	1 positivos de 1 testados
Mancha orgânica		1 negativo de 1 testado
Neutralização	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	3 positivos de 3 testados
Neutralização	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	3 positivos de 3 testados
Enumeração de	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	$1,0 \times 10^9$ CFU/ml

cultura		
Enumeração de cultura	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	$1,0 \times 10^9$ CFU/ml
Enumeração de veículo	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	$7,2 \times 10^5$ CFU/ml $7,2 \times 10^6$ CFU/veículo
Enumeração de veículo	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 15442	$2,0 \times 10^6$ CFU/ml $2,0 \times 10^7$ CFU/veículo

Como se pode observar nesses resultados, as soluções de uso testadas foram desinfetantes eficazes contra *Staphylococcus aureus* e *Pseudomonas aeruginosa* nas concentrações testadas.

Outro estudo foi realizado para determinar a eficácia de desinfecção da solução de teste contra *Staphylococcus aureus* ATCC 6538 e *Escherichia coli* ATCC 11229 depois de um tempo de exposição de 30 segundos. Para esse experimento as soluções foram diluídas para ter uma concentração de 50 ppm, 75 ppm ou 100 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado. Os pHs das soluções de uso foram os seguintes:

Concentração de perácido na solução de uso	pH
50 ppm de perácido	2.70
75 ppm	2.47
100 ppm	2.30

As soluções de uso foram testadas contra *Staphylococcus aureus* ATCC 6538 e *Escherichia coli* ATCC 11229. O tempo de exposição foi de 30 segundos a uma temperatura de 25 ± 1 °C. Uma tela neutralizadora também foi preparada como parte dos testes para verificar se o neutralizador inutilizava adequadamente o produto e não foi prejudicial para os organismos testados. As placas foram incubadas a 35 °C por 48 horas com os sistemas de teste anteriores à exposição aos perácidos. Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

15 *Tabela 17.*

Números de inóculos

Sistema de teste	CFU/ml	Crescimento de \log_{10}	Crescimento médio de \log_{10}
<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	107×10^6 , 109×10^6	8.03, 8.04	8.04
<i>Escherichia coli</i> ATCC 11229	138×10^6 , 151×10^6	8.14, 8.18	8.16

Staphylococcus aureus ATCC 6538

Substância de teste	Sobrevidentes (CFU/ml)	Crescimento de \log_{10}	Crescimento médio de \log_{10}	Redução de log
50 ppm de composição de perácido	28×10^1 , 20×10^1	2.45, 2.30	2.38	5.66
75 ppm de composição de perácido	0×10^1 , 100×10^1	<1.00, 3.00	<2.00	>6.04
100 ppm de composição de perácido	0×10^1 , 0×10^1	<1.00, <1.00	<1.00	>7.04

Escherichia coli ATCC 11229

Substância de teste	Sobrevidentes (CFU/ml)	Crescimento de \log_{10}	Crescimento médio de \log_{10}	Redução de log
50 ppm de composição de perácido	0×10^1 , 2×10^1	<1.00, 1.30	<1.15	>7.01
75 ppm de composição de perácido	0×10^1 , 0×10^1	<1.00, <1.00	<1.00	>7.16
100 ppm de composição de perácido	0×10^1 , 0×10^1	<1.00, <1.00	<1.00	>7.16

Como se pode observar nesses resultados, as soluções de uso testadas foram desinfetantes eficazes contra *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*. A solução de teste que continha 100 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado foi o desinfetante mais eficaz.

Exemplo 10 - Propriedades espumantes das composições selecionadas da presente invenção

Foi realizado um estudo para determinar as propriedades espumantes das composições selecionadas da presente invenção em comparação com composições que incluíam surfactantes disponíveis comercialmente. As seguintes composições foram preparadas: A

10 Fórmula A incluiu 50 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado em pH 2,48; a Fórmula B incluiu 50 ppm do produto de ácido peroleico sulfonado em pH 6,75; a Fórmula C incluiu 64 ppm de um ácido oleico sulfonado disponível comercialmente (SOA) (Lankropol OPA (50%), disponibilizado pela Akzo Nobel) em pH 2,48; a Fórmula D incluiu 64 ppm de um ácido oleico sulfonado disponível comercialmente (Lankropol OPA - 50% disponibilizado pela Akzo Nobel) em pH 6,56; a Fórmula E incluiu 128 ppm de um ácido oleico sulfonado disponível comercialmente (Lankropol OPA - 50% disponibilizado pela Akzo Nobel) em pH 2,48; a Fórmula F incluiu 128 ppm de um ácido oleico sulfonado disponível comercialmente (Lan-

15

kropol OPA - 50% disponibilizado pela Akzo Nobel) em pH 7,20; e a Fórmula G incluiu 93 ppm de sulfonato de octano de sódio (NAS) (disponibilizado comercialmente pela Ecolab) em pH 2,48. As alturas de espuma foram determinadas usando o seguinte método. Primeiro, 3.000 ml de cada fórmula foram preparados e suavemente despejados dentro do cilindro 5 Glewwe. Uma régua foi anexada ao lado do cilindro, e a solução foi nivelada com a parte inferior da régua. A bomba foi ligada. A altura da espuma foi estimada pela leitura do nível médio de espuma, de acordo com a régua. As leituras de altura de espuma foram feitas em função do tempo com um cronômetro ou timer. A bomba foi desligada e a altura da espuma foi registrada em vários momentos. Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

10

Tabela 18.

Amostra	Tempo da bomba ligada (s)			Tempo da bomba desligada (s)		
	30	60	300	30	60	300
	Altura da espuma (pol.)	Altura da espuma (pol.)	Altura da espuma (pol.)	Altura da espuma (pol.)	Altura da espuma (pol.)	Altura da espuma (pol.)
Fórmula A	2.5	3.8	5.5	3.5	2.0	0.5
Fórmula B	1.5	2.0	2.5	0.2	<0.1	N/A
Fórmula C	4.0	6.2	9.2	8.7	8.5	5.5
Fórmula D	3.1	4.5	10	9.8	8.5	4.0
Fórmula E	2.6	4.5	8.5	8.2	8.0	5.0
Fórmula F	0.15	0.15	0.2	<0.1	<0.1	<0.1
Fórmula G	1.0	1.0	1.2	0.4	0.2	<0.1

Como se pode observar nesses resultados, as fórmulas que incluíram composições da presente invenção, ou seja, Fórmulas A e B, tiveram alturas de espuma muito menores do que as Fórmulas C e D, que incluíram a forma não perácido do material sulfonado, ou seja, ácido oleico sulfonado. A altura reduzida da espuma das composições da presente 15 invenção é útil ao usar as composições em aplicações nas quais a produção da espuma é prejudicial para a aplicação, por exemplo, em uma aplicação de limpeza e/ou desinfecção no local.

Exemplo 11 - Composições para desinfecção em lavanderia

Foi realizado um estudo para determinar a habilidade de uma composição da presente invenção para desinfetar roupas durante a lavagem. Uma composição que continha o produto de ácido peroleico sulfonado foi testada em comparação com composições de limpeza disponíveis comercialmente: Ozonit®, disponibilizada pela Ecolab Inc., e PAP-70®, disponibilizada pela Solvay. As composições foram testadas contra *Staphylococcus aureus* ATCC 6538 e *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 15442 a 40 °C (104 °F) durante 6 minutos.

Foi utilizado o seguinte método de teste. Foram obtidas amostras de tecido que haviam sido enxaguadas com água fervente contendo 300 gramas de carbonato de sódio e 1,5 grama de um agente umectante não iônico (por exemplo, Triton X-100), seguido por um enxágue com água fria até que todos os indícios visíveis do agente umectante foram removidos. Foi permitido que as amostras de tecido secassem completamente. As amostras de tecido foram então colocadas em autoclave para esterilização.

As substâncias de teste foram então preparadas e as amostras de tecido foram inoculadas com as substâncias de teste. Em seguida, as amostras inoculadas foram secas. Então, as amostras foram colocadas em um verificador de velocidade de lavagem e agitadas em água de lavagem. A água de lavagem foi removida da câmara da lavadora, e tanto ela como as amostras de tecido foram avaliadas quanto à redução da população de micro-organismos testados.

Os resultados são mostrados na tabela abaixo.

Tabela 19.

Teste/Sistema	Composição que inclui produto de ácido peroleico sulfonado	PAP-70®	Ozonit®
Tela de desinfetante	>3.82	>3.82	N/A
Desinfetante (tela de transporte de tecido)	9 negativos/9 total	9 negativos/9 total	5 negativos/9 total

Como é possível observar nesses resultados, a composição da presente invenção testada apresentou uma redução superior a 3 log na água de lavagem e nos transportadores de tecido contra *P. aeruginosa* e nestes últimos contra *S. aureus*.

A presente invenção também se relaciona a novos compostos e à síntese deles. Assim, os exemplos a seguir são apresentados para ilustrar como alguns desses compostos podem ser preparados.

Síntese de compostos selecionados da invenção

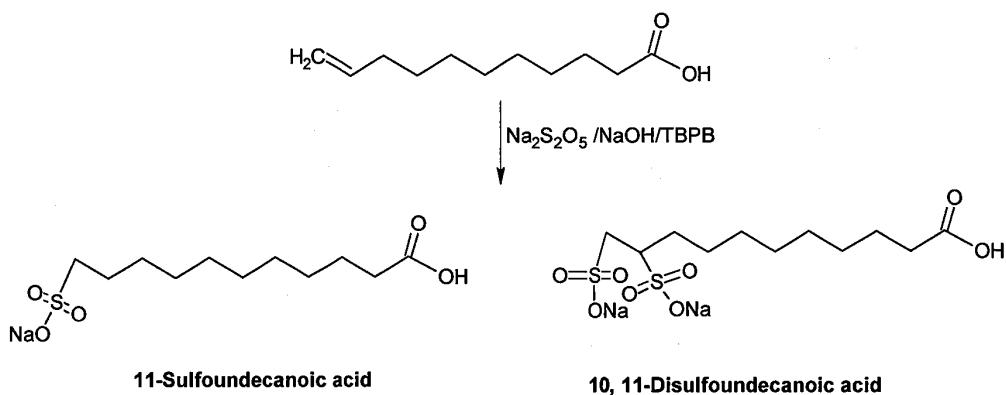
Preparação do produto de ácido peroleico sulfonado.

417,8 g de OA5-R (da Intertrade Organic, 40% de ácido oleico sulfonado ativo) foram adicionados a um bêquer de 2 litros imerso em uma grande banheira de gelo, à qual foram adicionados posteriormente 66,4 g de Dequest 2010 (60% de ácido hidroxietileno difosfônico ativo, da Monsanto) e 535 g de peróxido de hidrogênio (46% ativo, da Solvay-Interox). O bêquer foi fixado com uma barra de agitação magnética e a solução foi agitada vigorosamente enquanto foram acrescentados 940 g de ácido sulfúrico (96% ativo, da Mallinkrodt). A taxa de adição do ácido sulfúrico foi controlada para produzir uma exotermia de

48,9 °C (120 °F) na solução de reação e, embora isso fosse às vezes ultrapassado em vários graus, não foi permitido que ultrapassasse 51,7 °C (125 °F). Vários minutos após concluir a adição de ácido sulfúrico, o banho de gelo foi interrompido e a solução heterogênea foi agitada por 72 horas, permitindo que a temperatura fosse equilibrada com as condições 5 ambiente (21 °C/70 °F).

Várias horas após a interrupção da agitação, a solução de reação de duas fases foi adicionada a um funil de separação e as fases superior e inferior foram separadas. 239,4 g da fase superior foram coletados e ela foi purificada adicionalmente por centrifugação a 3.000 rpm durante 10 minutos. A produção da fase superior final foi de 206 g (produção teórica de 174 g) e titulados como 55% de peroxiácido baseado em um suposto peso molecular de 380. Além disso, a fase superior continha 1,8% de peróxido de hidrogênio. Uma amostra da fase inferior centrifugada foi titulada como 13% de peroxiácido (MW 380) e 8,8% de peróxido de hidrogênio. 10

Síntese do ácido 11-sulfoundecanoico e do ácido 10, 11-disulfoundecanoico



15 Ácido 11-sulfoundecanoico: Água deionizada (150 ml), álcool isopropílico (200 ml) e ácido 11-undecilênico (28,56 g, 0,155 mol) foram colocados em um frasco de 1 litro equipado com agitador, funil adicional, condensador de refluxo, termômetro e um tubo de entrada de gás. Ao funil adicional foi acrescentada uma pré-mistura que continha 15,2 g (0,08 mol) de metabissulfito de sódio e 1,28 g de NaOH em 55 g de água. O dispositivo inteiro foi purgado suavemente com nitrogênio. Após o aquecimento para refluxo (82 °C), uma pequena porção de perbenzoato de *t-butila* (de uma quantidade total de 0,5 g, 2,5 mmol) foi adicionada ao frasco. Em seguida, a pré-mistura de metabissulfito de sódio/NaOH foi adicionada continuamente ao longo de um período de cinco horas à solução de reação por um funil de adição. O restante do perbenzoato de *t-butila* também foi adicionado em pequenas porções 20 durante esse tempo.

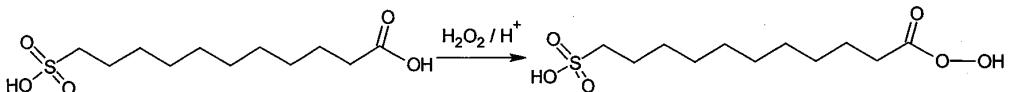
25 O solvente foi então removido sob pressão reduzida utilizando um rotavapor, e o resíduo foi lavado com acetona e então seco, produzindo 31,0 g de sólido branco. A análise RMN dos sólidos não indicou a presença das matérias-primas residuais. O sólido branco obtido foi dissolvido em água quente (100 ml, 75 °C) e neutralizado a um pH 5,5 com NaOH.

Em seguida, 2,0 g de H_2O_2 a 50% foram adicionados à solução. A solução foi então deixada esfriar a temperatura ambiente, e o precipitado sólido foi filtrado, lavado com água fria e seco, resultando em 21,0 g de sólido branco, caracterizado como ácido 11-sulfoundecanoico puro. ^{13}C NMR (D_2O): 180, 51, 34, 28-29 (múltiplo), 27,5, 24,5, 24 ppm. MS (ESI): 265,1 ($\text{M}^+ -\text{H}$).

Ácido 10, 11-dissulfoundecanoico: Esse composto foi obtido como subproduto da reação do ácido 11-sulfoundecanoico, conforme descrito acima. O filtrado, após a coleta do ácido 11-sulfoundecanoico por filtração, foi concentrado em ~ 50 ml, quando o precipitado começou a se formar. A mistura foi resfriada no refrigerador, e o sólido adicional formado foi filtrado, lavado com uma pequena quantidade de água gelada e então seco, produzindo 5,0 g de sólido branco. ^{13}C NMR (D_2O): 184, 57, 51,5, 37,5, 28-29 (múltiplo), 27,5, 26, 24 ppm. MS (ESI): 345,0.

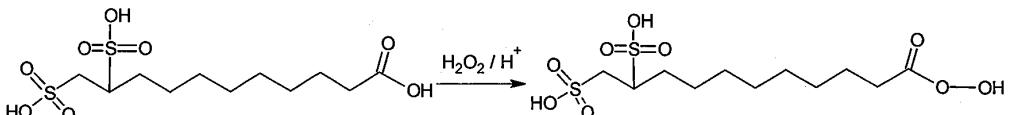
Síntese do ácido 11-sulfoundecaneperoxoico (Composto D) e ácido 10, 11-dissulfoundecaneperoxoico (Composto E)

15 Ácido 11-sulfoperoxiundecanoico:



1,3 g de ácido 11-sulfoundecanoico foi dissolvido em 2,5 g de ácido sulfúrico a 98%. A essa solução (cuja temperatura não ultrapassou 60 °C) foi adicionado 1,5 g de H_2O_2 a 50%, e a mistura resultante foi agitada à temperatura ambiente por 1,5 hora. Nesse momento, um sólido branco se precipitou da solução. A mistura foi reaquecida a 50 °C com um banho de água até que a solução ficou clara. A solução foi então agitada à temperatura ambiente por 0,5 hora e resfriada no refrigerador. Em seguida, 20 ml de água gelada foram adicionados à mistura, o sólido filtrado foi lavado com água gelada e seco a vácuo, produzindo 0,6 g de um sólido branco. ^{13}C NMR (D_2O): 176, 51,5, 30,5, 27,5-29 (múltiplo), 24,5, 24 ppm. MS (ESI): 281,5 ($\text{M}^+ -\text{H}$). Oxigênio disponível (iodometrônico): 5,41% (teórico: 5,64%).

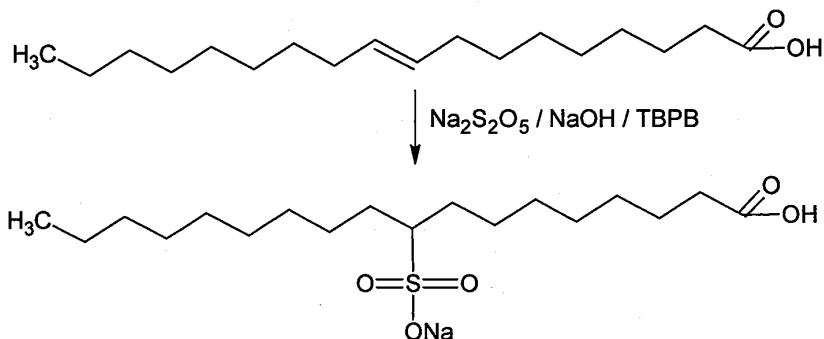
25 Ácido 10, 11-dissulfoundecaneperoxoico (Composto E):



A 1,5 g de ácido 10, 11-dissulfoundecaneperoxoico foram adicionados 2,5 g de H_2SO_4 a 96%, e a mistura foi agitada à temperatura ambiente. Em seguida, 1,0 g de H_2O_2 a 50% foi adicionado lentamente (a temperatura não ultrapassou 60 °C) à mistura a qual, após a adição, foi aquecida a 50 °C com banho de água, e a solução foi agitada por 2 horas. A solução foi então resfriada no refrigerador e 20 ml de água gelada foram adicionados durante a agitação. O precipitado sólido foi filtrado, lavado com água gelada e seco a vácuo, resultando em 1,0 g de sólido branco. ^{13}C NMR (D_2O): 175,5, 57, 30,5, 27,5-29 (múltiplo),

24,5, 24 ppm. Oxigênio disponível (iodométrico): 4,10 % (teórico: 4.41%).

Síntese do ácido 9/10-sulfoesteárico (ácido esteárico sulfonado)



Água deionizada (150 ml), álcool isopropílico (200 ml) e ácido oleico (43,78 g, 0,155 mol) foram colocados em um frasco de 1 litro equipado com agitador, funil adicional, condensador de refluxo, termômetro e tubo de entrada de gás. Ao funil adicional foi acrescentada uma pré-mistura que continha 15,2 g (0,08 mol) de metabissulfito de sódio ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_5$) e 1,28 g de NaOH em 55 g de água. O dispositivo todo foi efervescido suavemente com nitrogênio. Após o aquecimento para refluxo (82 °C), uma pequena porção de perbenzoato de t-butila (de uma quantidade total de 0,5 g, 2,5 mmol) foi adicionada ao frasco. Em seguida, a

5 densador de refluxo, termômetro e tubo de entrada de gás. Ao funil adicional foi acrescentada uma pré-mistura que continha 15,2 g (0,08 mol) de metabissulfito de sódio ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_5$) e 1,28 g de NaOH em 55 g de água. O dispositivo todo foi efervescido suavemente com nitrogênio. Após o aquecimento para refluxo (82 °C), uma pequena porção de perbenzoato de t-butila (de uma quantidade total de 0,5 g, 2,5 mmol) foi adicionada ao frasco. Em seguida, a
10 pré-mistura de $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_5$ /NaOH foi adicionada pelo funil de adição continuamente ao longo de cinco horas. O restante do perbenzoato de t-butila também foi adicionado em porções durante esse tempo.

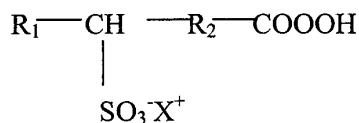
O solvente foi então removido sob pressão reduzida utilizando um rotavapor. Ao resíduo foram adicionados 100 ml de água DI, e o pH da solução foi ajustado para 2,5 com H_2SO_4 . A mistura/solução resultante foi transferida para um funil de separação, e a camada oleosa superior (ácido oleico não reagido) foi removida. A camada aquosa foi extraída com éter de petróleo (2 x 50 ml) e, após a remoção da água, resultou em 12,5 g de sólido branco pastoso. ^{13}C NMR (D_2O): 179, 60, 34,5, 32, 28,5-30 (múltiplo), 24,5, 22,5, 14 ppm. MS (ESI): 363,4 ($\text{M}^+ - \text{H}$).

20 Preparação do ácido 9/10-sulfoperoxisteárico (em formulação)

A uma mistura de 2,0 g de ácido 9 ou 10-sulfoesteárico foram adicionados 2,0 g de H_2O_2 a 50%. A mistura foi agitada à temperatura ambiente até que todo o sólido fosse dissolvido. Em seguida, foram adicionados 2,0 g de H_3PO_4 a 75% e a solução resultante foi agitada à temperatura ambiente durante a noite. Não foi feita qualquer tentativa de isolar o ácido 9 ou 10-sulfoperoxisteárico puro da solução. O ^{13}C NMR (D_2O) da solução mostrou um pico de perácido (COOOH) a 174 ppm e o pai, um pico de ácido carboxílico a 178 ppm. A titulação iodométrica (QATM -202) indicou 18,96% de ácido sulfoperoxisteárico.

REIVINDICAÇÕES

1. Composto, **CARACTERIZADO** pelo fato de ser de acordo com a Fórmula I:



(Fórmula I)

5 onde:

R_1 é hidrogênio ou um grupo alquila C_m substituído;

R_2 é um grupo alquila C_n substituído ou não substituído;

X é hidrogênio, um grupo catiônico ou um éster que forma uma fração;

n é de 1 a 10;

10 m é de 1 a 10; e

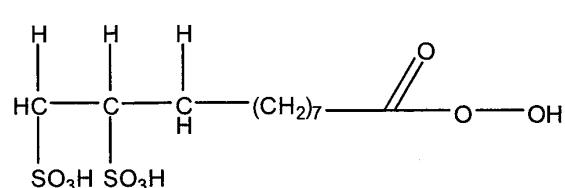
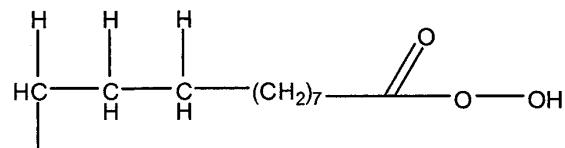
$m+n$ é menor ou igual a 18, ou sais ou ésteres do mesmo.

2. Composto, de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADO** pelo fato de que R_1 é hidrogênio.

3. Composto, de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADO** pelo fato de que 15 R_1 é um grupo alquila C_1 substituído.

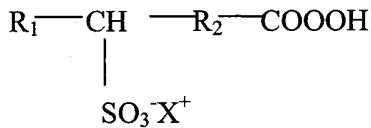
4. Composto, de acordo com a reivindicação 3, **CARACTERIZADO** pelo fato de que o grupo alquila C_1 é substituído por um grupo sulfonado.

5. Composto, de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADO** pelo fato de que o composto mencionado é selecionado do grupo constituído de:



sais, ésteres e misturas dos mesmos.

6. Composição, **CARACTERIZADA** pelo fato de que compreende um composto de 25 acordo com a Fórmula I:



(Fórmula I)

onde:

5 R_1 é hidrogênio ou um grupo alquila C_m substituído;

R_2 é um grupo alquila C_n substituído ou não substituído;

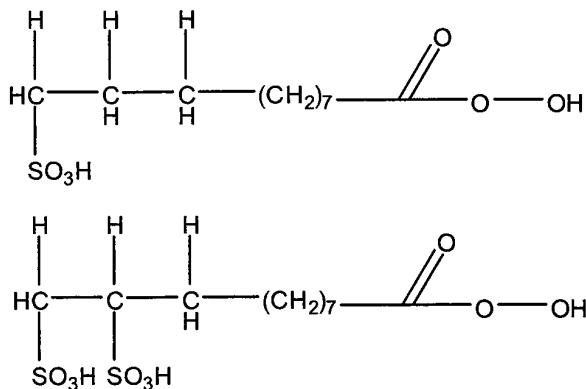
X é hidrogênio, um grupo catiônico ou um éster que forma uma fração;

n é de 1 a 10;

m é de 1 a 10; e

$m+n$ é menor ou igual a 18, ou sais, ésteres ou misturas dos mesmos.

10 7. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto mencionado é selecionado do grupo que consiste de:



e misturas e derivados dos mesmos.

15 8. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o pH da composição é menor que cerca de 9.

9. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto está presente de cerca de 10 ppm a cerca de 100% em peso.

10. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de 20 que o composto está presente de cerca de 0,1% em peso a cerca de 10% em peso.

11. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto está presente de cerca de 1% em peso a cerca de 5% em peso.

12. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto está presente em uma quantidade antimicrobiana eficaz.

25 13. Composição, de acordo com a reivindicação 12, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto está presente de cerca de 10 ppm a cerca de 100 ppm.

14. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto está presente em uma quantidade eficaz para matar uma ou mais das bac-

térias patogênicas ou de deterioração transportadas por alimentos associadas a um produto alimentício.

15. Composição, de acordo com a reivindicação 14, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o produto alimentar é selecionado do grupo que consiste de carne, produtos de carne, frutos do mar, aves, produtos avícolas, vegetais, ovos, ovos vivos, produtos de ovo, alimentos pronto para consumo, trigo, sementes, raízes, tubérculos, folhas, caules, espigas, flores, brotos, temperos e suas combinações.

16. Composição, de acordo com a reivindicação 14, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a bactéria é selecionada do grupo que consiste de *Salmonella typhimurium*, *Salmonella javiana*, *Campylocater jejuni*, *Listeria monocytogenes*, *Escherichia coli* 0157:H7, leveduras, bolores e misturas dos mesmos.

17. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto está presente em uma quantidade eficaz para reduzir uma população de um micro-organismo selecionado do grupo que consiste de esporos, bactérias, bolores, leveduras, vírus e misturas dos mesmos.

18. Composição, de acordo com a reivindicação 17, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o micro-organismo é selecionado do grupo que consiste de *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus* resistente à meticilina e misturas dos mesmos.

20. Composição, de acordo com a reivindicação 17, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o micro-organismo é selecionado do grupo que consiste de *Bacillus subtilis*, *Bacillus cereus*, *Clostridium sporogenes*, *Clostridium botulinum*, *Clostridium difficile*, *Clostridium sporogenes* e misturas dos mesmos.

20. Composição, de acordo com a reivindicação 17, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o micro-organismo é selecionado do grupo que consiste de poliovírus, *Mycobacterium tuberculosis* e misturas dos mesmos.

21. Composição, de acordo com a reivindicação 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição compreende também um agente oxidante.

22. Composição, de acordo com a reivindicação 21, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o agente oxidante compreende peróxido de hidrogênio.

23. Composição, de acordo com a reivindicação 21, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição compreende também pelo menos um ácido peroxicarboxílico C1 a C22.

24. Composição, de acordo com a reivindicação 23, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o ácido peroxicarboxílico compreende pelo menos um ácido peroxicarboxílico C5 a C11.

25. Composição, de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADA** pelo fato

de que o ácido peroxicarboxílico compreende ácido peroxyoctanóico.

26. Composição, de acordo com a reivindicação 25, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o ácido peroxyoctanóico está presente de cerca de 0,1% em peso a cerca de 10% em peso.

5 27. Composição, de acordo com a reivindicação 23, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o ácido peroxicarboxílico compreende ácido peroxyacético.

28. Composição, de acordo com a reivindicação 27, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o ácido peroxyacético está presente de cerca de 1% em peso a cerca de 10% em peso.

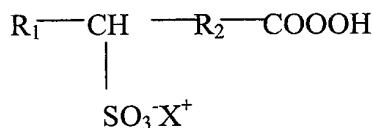
10 29. Composição, de acordo com a reivindicação 23, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição compreende também pelo menos um ácido carboxílico.

30. Composição, de acordo com a reivindicação 29, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o ácido carboxílico é pelo menos um ácido carboxílico C5 a C11.

15 31. Composição, de acordo com a reivindicação 23, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição compreende pelo menos um ácido peroxicarboxílico C1 a C4 e pelo menos um ácido carboxílico C5 a C11.

32. Composição de clareamento antimicrobiana aquosa, **CARACTERIZADA** pelo fato de que compreende:

a) um composto de acordo com a Fórmula I:



20

(Fórmula I)

onde:

R₁ é hidrogênio ou um grupo alquila C_m substituído;

R₂ é um grupo alquila C_n substituído ou não substituído;

25 X é hidrogênio, um grupo catiônico ou um éster que forma uma fração;

n é de 1 a 10;

m é de 1 a 10; e

m+n é menor ou igual a 18, ou sais ou ésteres dos mesmos,

(b) um ácido carboxílico C₁ a C₄;

30 (c) um ácido carboxílico C₅ a C₁₁; e

(d) um agente oxidante

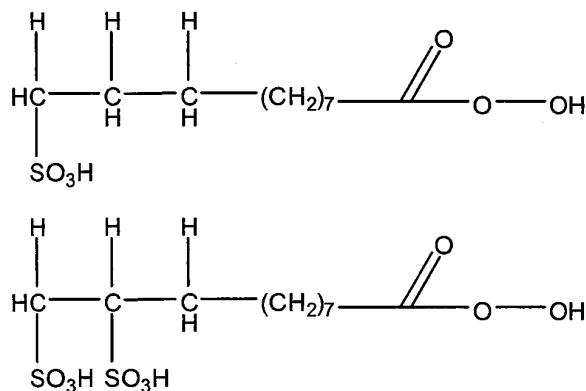
onde o pH da composição é de cerca de 7 a cerca de 14.

33. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o ácido carboxílico C₁ a C₄ é ácido acético.

35 34. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato

de que o ácido carboxílico C₅ a C₁₁ é ácido octanóico.

35. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto de Fórmula I é selecionado do grupo que consiste de:



5

e misturas e derivados dos mesmos.

36. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição é estável a 122 °F (50 °C) por pelo menos cerca de 4 semanas.

37. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o agente oxidante compreende peróxido de hidrogênio.

38. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato de que ainda compreende um agente estabilizante.

39. Composição, de acordo com a reivindicação 38, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o agente estabilizante é selecionado do grupo que consiste de agentes complexantes de ácido aminopolifosfônico orgânico, agentes complexantes de ácido hidroxilpolifosfônico orgânico e misturas dos mesmos.

40. Composição, de acordo com a reivindicação 38, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o agente estabilizante é selecionado do grupo que consiste de ácidos carboxílicos, ácidos hidroxicarboxílicos, ácidos aminocarboxílico, ácidos carboxílicos heterocíclicos e misturas dos mesmos.

41. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição é substancialmente isenta de fósforo.

42. Composição, de acordo com a reivindicação 32, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição compreende:

25 (a) de cerca de 1% em peso a cerca de 5% em peso de um composto de acordo com a Fórmula I;

(b) de cerca de 1% em peso a cerca de 10% em peso do ácido carboxílico C₁ a C₄;

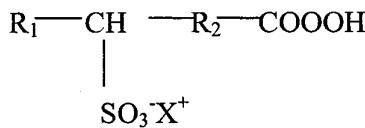
(c) de cerca de 1% em peso a cerca de 10% em peso do ácido carboxílico C₅ a C₁₁;

e

30 (d) de cerca de 10% em peso a cerca de 30% em peso de agente oxidante.

43. Desinfetante aquoso, **CARACTERIZADO** pelo fato de que compreende:

(a) um composto de acordo com a Fórmula I



(Fórmula I)

onde:

5 R₁ é hidrogênio ou um grupo alquila C_m substituído;

R₂ é um grupo alquila C_n substituído ou não substituído;

X é hidrogênio, um grupo catiônico ou um éster que forma uma fração;

n é de 1 a 10:

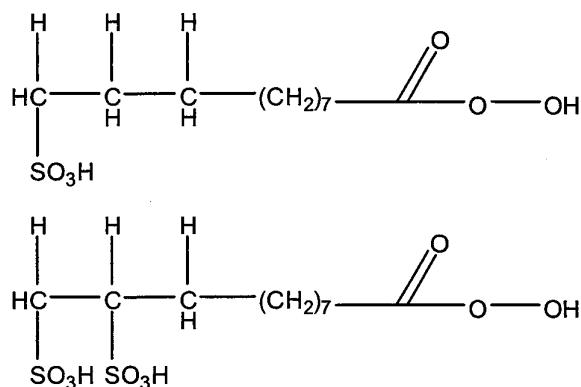
m é de 1 a 10: e

10 m+n é menor ou igual a 18, ou sais ou ésteres do mesmo; e

(b) um acidulante, e

(c) um agente oxidante.

44. Composição, de acordo com a reivindicação 43, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o composto é selecionado do grupo que consiste de:



e sais, ésteres e misturas dos mesmos.

45. Composição, de acordo com a reivindicação 43, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o agente oxidante compreende peróxido de hidrogênio.

20 46. Composição, de acordo com a reivindicação 43, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o acidulante é selecionado do grupo que consiste de ácido sulfúrico, bissulfato de sódio, ácido nítrico, ácido clorídrico e combinações dos mesmos.

47. Composição, de acordo com a reivindicação 43, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o acidulante é selecionado do grupo que consiste de ácido metanossulfônico, ácido etanossulfônico, ácido propanossulfônico, ácido butanossulfônico, ácido xilenossulfônico, ácido benzenossulfônico, ácido fórmico, ácido acético, ácidos halocarboxílicos, ácido picolínico, ácido dipicolínico e misturas dos mesmos.

48. Composição, de acordo com a reivindicação 43, **CARACTERIZADA** pelo fato

de que ainda compreende um agente estabilizante.

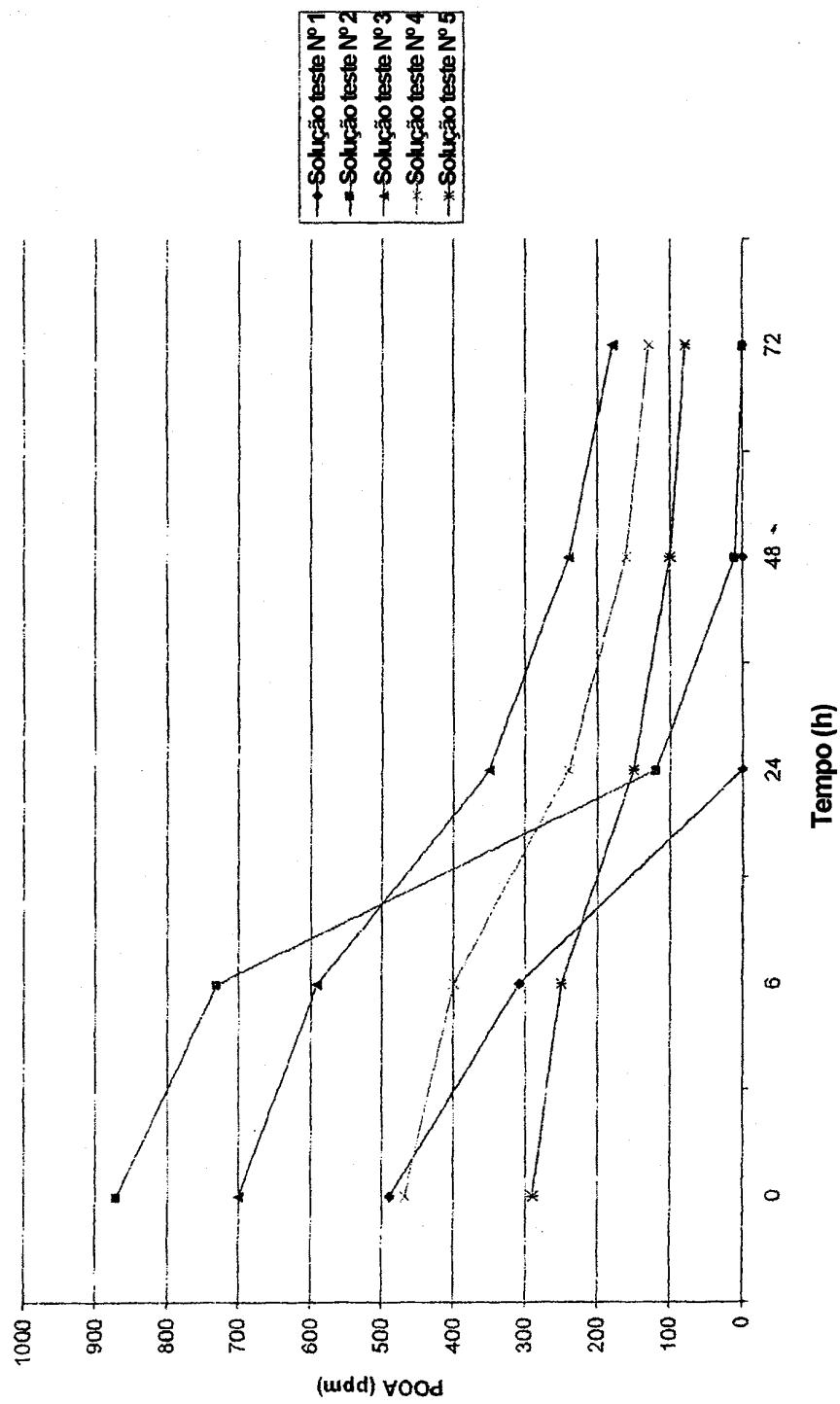
49. Composição, de acordo com a reivindicação 48, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o agente estabilizante é selecionado do grupo que consiste de agentes complexantes de ácido aminopolifosfônico orgânico, agentes complexantes de ácido hidroxilpolifosfônico orgânico e misturas dos mesmos.

50. Composição, de acordo com a reivindicação 48, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o agente estabilizante é selecionado do grupo que consiste de ácidos carboxílicos, ácidos hidroxicarboxílicos, ácidos aminocarboxílicos, ácidos carboxílicos heterocíclicos e misturas dos mesmos.

10 51. Composição, de acordo com a reivindicação 43, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição é substancialmente isenta de fósforo.

52. Composição, de acordo com a reivindicação 43, **CARACTERIZADA** pelo fato de que ainda compreende um surfactante.

15 53. Composição, de acordo com a reivindicação 52, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o surfactante é selecionado do grupo que consiste de sulfonatos de alquila, sulfonatos aromáticos e misturas dos mesmos.

Figura 1

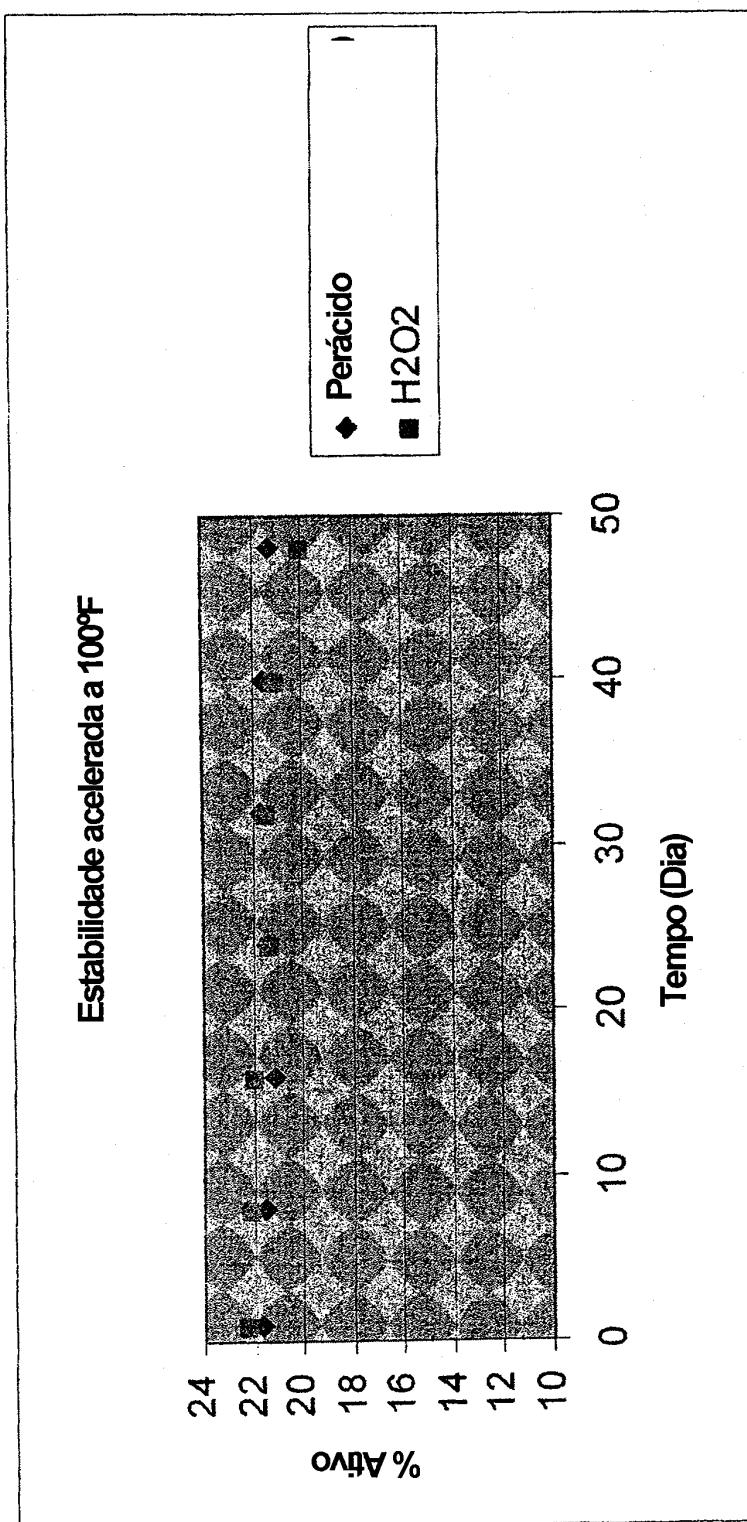


Figura 2

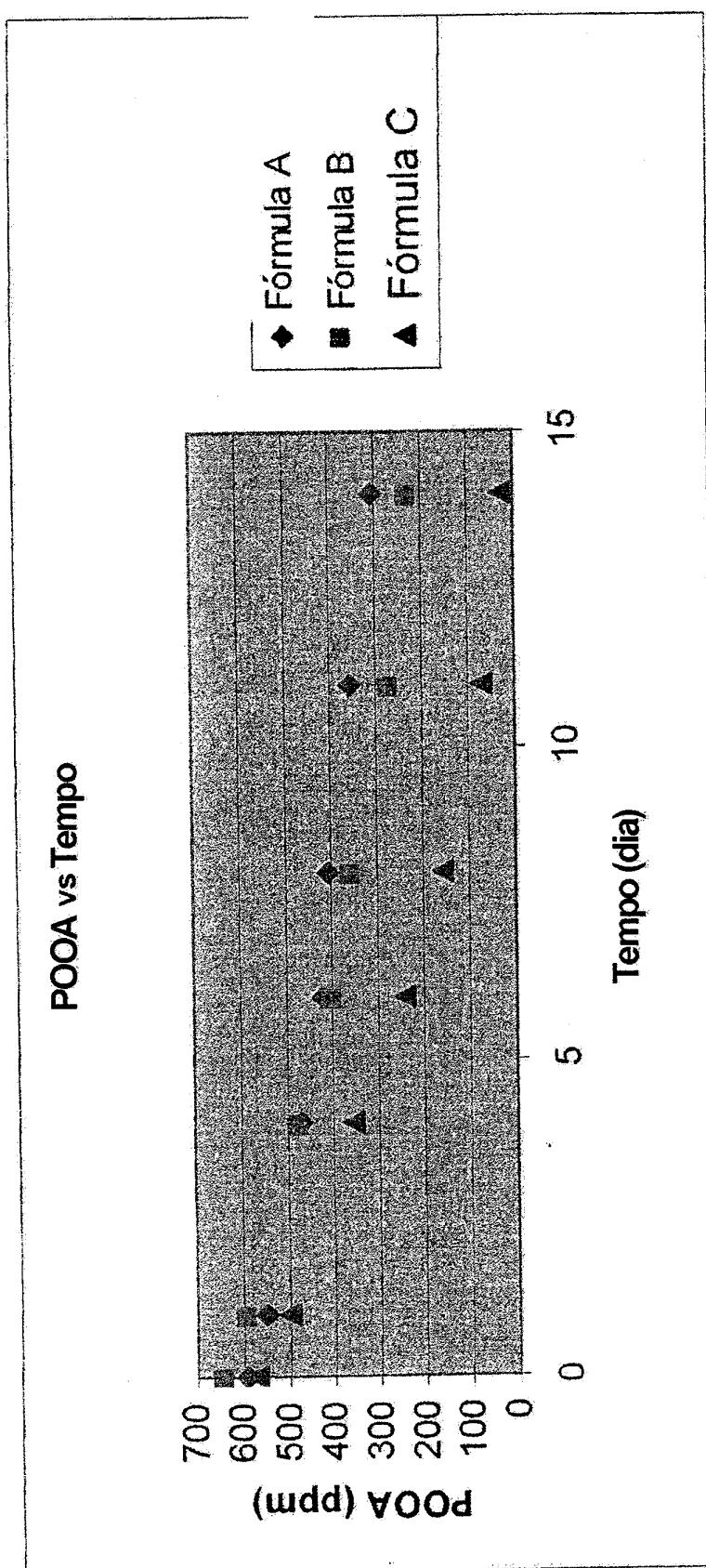


Figura 3

Desempenho do branqueamento de formulações PSOA

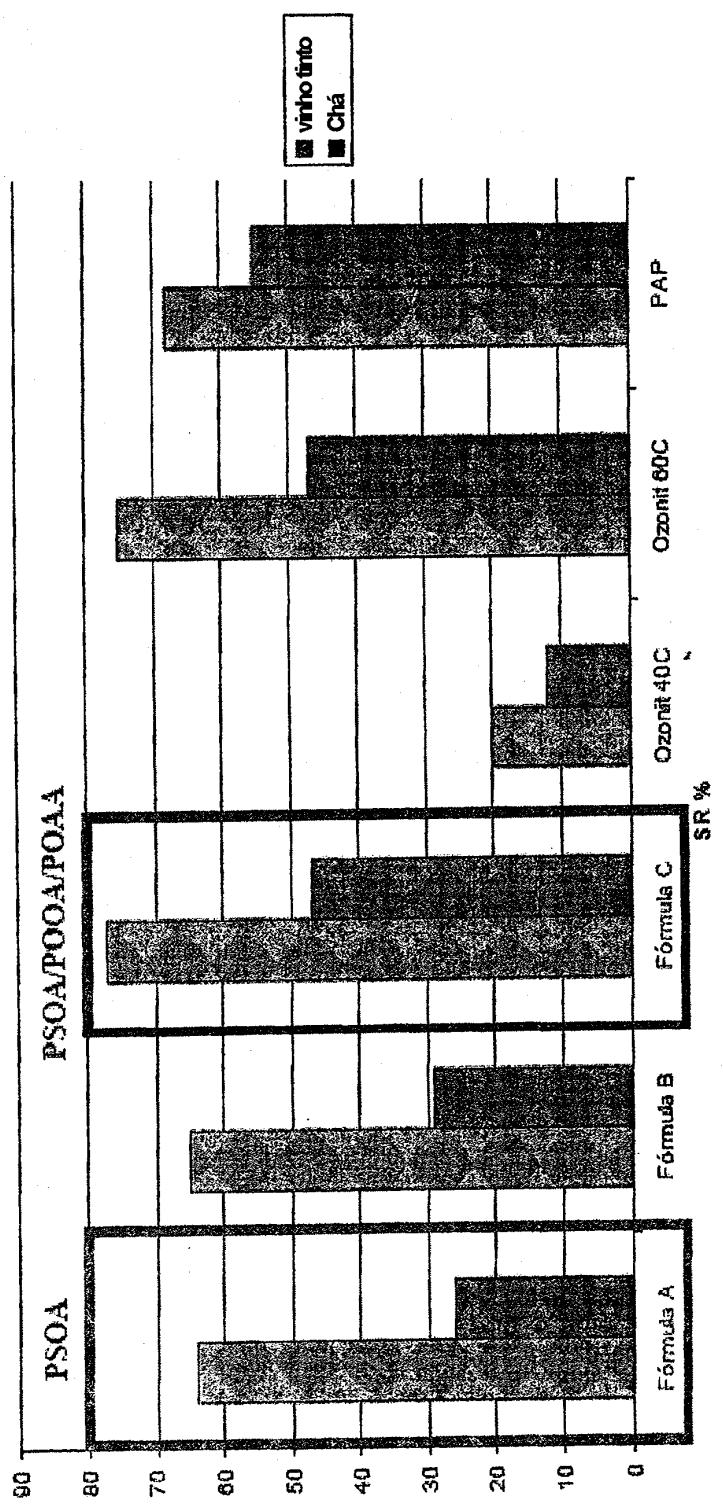


Figura 4

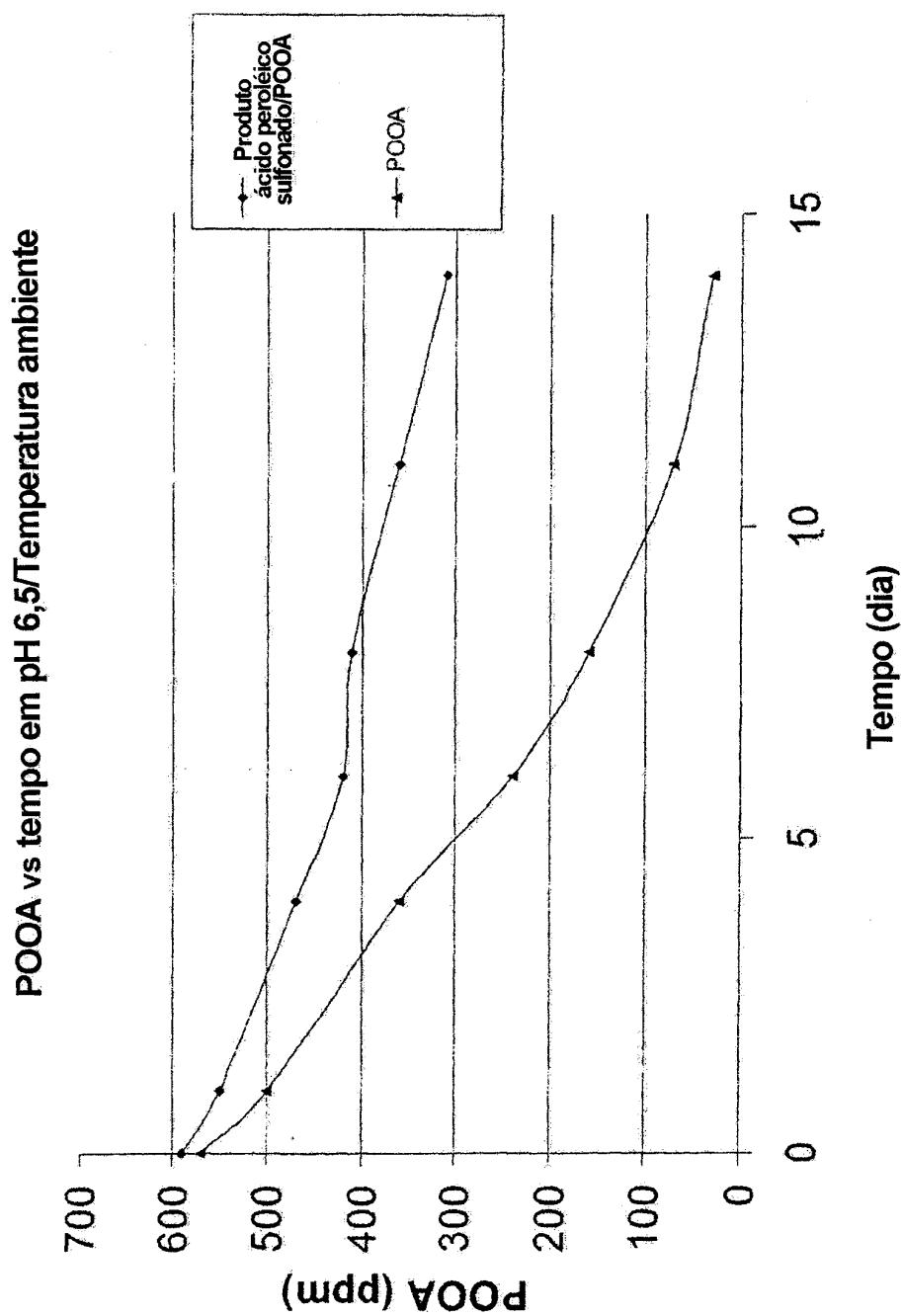


Figura 5

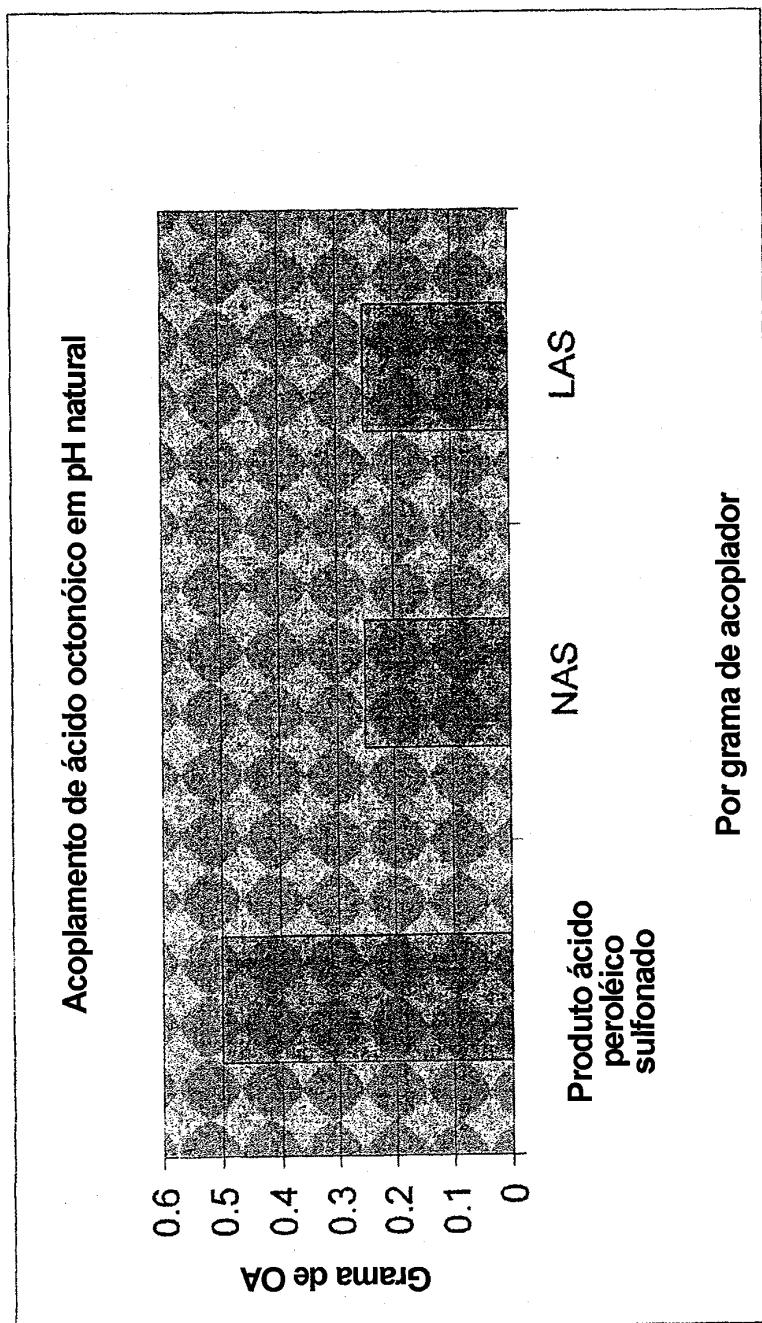


Figura 6