

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号

特許第7418211号

(P7418211)

(45)発行日 令和6年1月19日(2024.1.19)

(24)登録日 令和6年1月11日(2024.1.11)

(51)国際特許分類

F I

C 0 8 G 73/04 (2006.01)

C 0 8 G 73/04

A 0 1 P 3/00 (2006.01)

A 0 1 P 3/00

A 0 1 N 61/00 (2006.01)

A 0 1 N 61/00

D

C 0 2 F 1/76 (2023.01)

C 0 2 F 1/76

A

C 0 2 F 1/78 (2023.01)

C 0 2 F 1/78

請求項の数 33 (全65頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2019-532045(P2019-532045)

(86)(22)出願日 平成29年12月12日(2017.12.12)

(65)公表番号 特表2020-502331(P2020-502331
A)

(43)公表日 令和2年1月23日(2020.1.23)

(86)国際出願番号 PCT/US2017/065873

(87)国際公開番号 WO2018/111911

(87)国際公開日 平成30年6月21日(2018.6.21)

審査請求日 令和2年11月26日(2020.11.26)

(31)優先権主張番号 62/433,903

(32)優先日 平成28年12月14日(2016.12.14)

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(31)優先権主張番号 62/433,967

(32)優先日 平成28年12月14日(2016.12.14)

最終頁に続く

(73)特許権者 515050220

エコラブ ユーエスエイ インク

アメリカ合衆国 ミネソタ セイント ポ
ール エコラブ プレイス 1

(74)代理人 110001210

弁理士法人Y K I 国際特許事務所

(72)発明者 ゾン チェンガン

アメリカ合衆国 イリノイ オーロラ ク

レメンティ レーン 2 1 7 4

(72)発明者 シオン クン

アメリカ合衆国 イリノイ ネイパービル

ノッティンガム レーン 2 4 1 5

(72)発明者 クラム ジェフリー アール

アメリカ合衆国 イリノイ パタビア エ

ドワーズ ドライブ 1 0 1 7

最終頁に続く

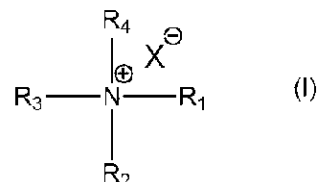
(54)【発明の名称】 四級カチオン性ポリマー

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

アルキレントリアミンと式(I)の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含む、カチオン性ポリマー塩であって、

【化1】



10

式中、

各X⁻が、独立して、アニオンであり、

R₁が、ヒドロキシルまたは-O R₅およびX⁻末端基で置換されたC₁~C₆アルキレンであり、

R₂、R₃、およびR₄が、各々独立して、C₁~C₂₂アルキルまたはC₇~C₂₂アリールアルキルであり、

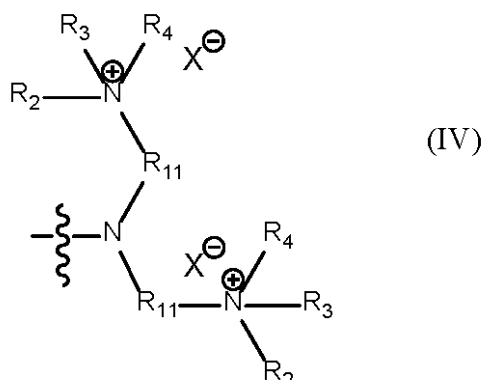
R₅が、C₁~C₆アルキルであり、

以下、

20

(A) カチオン性ポリマー塩が、少なくとも 4 つの四級アンモニウム基を含む、または
(B) カチオン性ポリマー塩が、式 (IV) を有する 1 つ以上の末端三級アミン基を有し、

【化 2】



10

式中、 R_{11} が、 X^- 末端基を有しない R_1 であり、前記ポリマー塩が、その主鎖内に置換を有しないか、 R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 が、メチルであり、または

(C) R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルもしくは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 が、メチルである、うちのいずれかである、カチオン性ポリマー塩。

20

【請求項 2】

X^- が、塩化物、臭化物、フッ化物、ヨウ化物、酢酸塩、アルミン酸塩、シアン酸塩、シアン化物、リン酸二水素塩、亜リン酸二水素塩、ギ酸塩、炭酸水素塩、シュウ酸水素塩、硫酸水素塩、水酸化物、メタニオブ酸塩、メタバナジン酸塩、硝酸塩、亜硝酸塩、チオシアネート、およびそれらの任意の組み合わせからなる群から選択される、請求項 1 に記載のポリマー塩。

【請求項 3】

X^- が、塩化物または臭化物である、請求項 2 に記載のポリマー塩。

【請求項 4】

R_1 が、ヒドロキシルで置換された $C_2 \sim C_3$ アルキレンである、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載のポリマー塩。

30

【請求項 5】

前記置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩が、3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - トリメチルアンモニウムクロリド、3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ドデシル - ジメチルアンモニウムクロリド、3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ステアリル - ジメチルアンモニウムクロリド、またはそれらの任意の組み合わせを含む、請求項 1 に記載のポリマー塩。

【請求項 6】

(A) 前記カチオン性ポリマー塩が、少なくとも 4 つの四級アンモニウム基を含む、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載のポリマー塩。

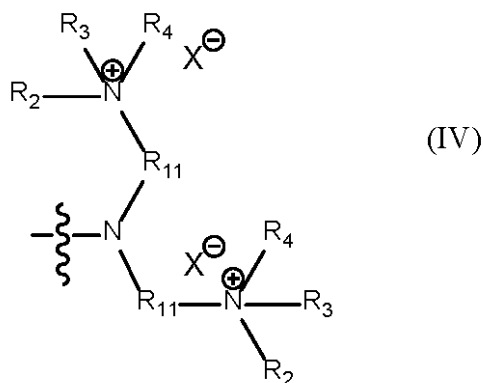
40

【請求項 7】

(B) 前記カチオン性ポリマー塩が、式 (IV) を有する 1 つ以上の末端三級アミン基を有し、

50

【化 3】



10

式中、 R_{11} が、 X^- 末端基を有しない R_1 であり、前記ポリマー塩が、その主鎖内に置換を有しないか、もしくは R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 が、メチルである、請求項1～5のいずれか一項に記載のポリマー塩。

【請求項 8】

(C) R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 が、メチルである、請求項1～5のいずれか一項記載のポリマー塩。

20

【請求項 9】

前記アルキレントリアミンが、ジエレントリアミンである、請求項1～5のいずれか一項に記載のポリマー塩。

【請求項 10】

前記アルキレントリアミンと前記置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩とのモル比が、 $1:1 \sim 1:100$ 、 $1:1 \sim 1:50$ 、 $1:1 \sim 25$ 、 $1:1 \sim 1:10$ 、 $1:1 \sim 1:5$ 、または $1:1 \sim 1:2$ の範囲である、請求項1～9のいずれか一項に記載のポリマー塩。

【請求項 11】

請求項1～10のいずれか一項に記載のカチオン性ポリマー塩および担体を含む、組成物。

30

【請求項 12】

前記担体が、水、アルコール、芳香族炭化水素、アルキレングリコール、アルキレングリコールアルキルエーテル、またはそれらの組み合わせを含む、請求項11に記載の組成物。

【請求項 13】

前記担体が、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール、イソブタノール、モノエチレングリコール、エチレングリコールモノブチルエーテル、ヘキシレングリコール、またはそれらの組み合わせを含む、請求項11に記載の組成物。

【請求項 14】

請求項1～10のいずれか一項に記載のカチオン性ポリマー塩および水性担体を含む、界面活性剤組成物。

40

【請求項 15】

前記組成物が、表面での腐食を抑制するための成分をさらに含み、前記成分が、有機溶媒、追加の腐食抑制剤、アスファルテン抑制剤、パラフィン抑制剤、スケール抑制剤、乳化剤、水浄化剤、分散剤、エマルジョン破壊剤、ガスハイドレート抑制剤、殺生物剤、pH調整剤、界面活性剤、またはそれらの任意の組み合わせを含む、請求項11に記載の組成物。

【請求項 16】

前記成分が、有機溶媒を含み、前記有機溶媒が、アルコール、炭化水素、ケトン、エー

50

テル、アルキレングリコール、グリコールエーテル、アミド、ニトリル、スルホキシド、エステル、またはそれらの任意の組み合わせを含み、前記組成物が、任意選択に水を含む、請求項 15 に記載の組成物。

【請求項 17】

前記成分が、有機溶媒を含み、前記有機溶媒が、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール、2-エチルヘキサノール、ヘキサノール、オクタノール、デカノール、2-ブトキシエタノール、メチレングリコール、エチレングリコール、1,2-プロピレングリコール、1,3-プロピレングリコール、ジエチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノブチルエーテル、エチレングリコールジブチルエーテル、ペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、ヘプタン、デカン、ドデカン、ディーゼル燃料、トルエン、キシレン、重芳香族ナフサ、シクロヘキサノン、ジイソブチルケトン、ジエチルエーテル、プロピレンカーボネート、N-メチルピロリジノン、N,N-ジメチルホルムアミド、またはそれらの任意の組み合わせを含み、請求項 15 に記載の組成物。

10

【請求項 18】

前記成分が、追加の腐食抑制剤を含み、前記追加の腐食抑制剤が、イミダゾリン化合物、ピリジニウム化合物、またはそれらの組み合わせを含み、請求項 15 ~ 17 のいずれか一項に記載の組成物。

【請求項 19】

0.1 ~ 20 重量 % の前記カチオン性ポリマー塩を含む、請求項 15 ~ 18 のいずれか一項に記載の組成物。

20

【請求項 20】

表面上の腐食を抑制する方法であって、前記方法が、

前記表面上の腐食を抑制するために、前記表面を、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載のカチオン性ポリマー塩または請求項 11 および 15 ~ 19 のうちのいずれか一項に記載の組成物と接触させること、または

前記表面上の腐食を抑制するために、請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載のカチオン性ポリマー塩または請求項 11 および 15 ~ 19 のいずれか一項に記載の組成物を、前記表面に接触する流体に添加することと、を含む、方法。

【請求項 21】

30

表面上の腐食を抑制する方法であって、

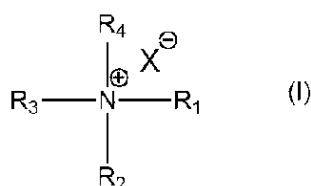
前記表面上の腐食を抑制するために、前記表面を、カチオン性ポリマー塩もしくは前記カチオン性ポリマー塩を含む組成物、および有機溶媒、腐食抑制剤、有機硫黄化合物、アスファルテン抑制剤、パラフィン抑制剤、スケール抑制剤、乳化剤、水浄化剤、分散剤、エマルジョン破壊剤、ガスハイドレート抑制剤、殺生物剤、pH 調整剤、界面活性剤、またはそれらの組み合わせを含む成分と接触させること、または

前記表面上の腐食を抑制するために、前記カチオン性ポリマー塩または前記組成物を、前記表面に接触する流体に添加することを含み、

(i) 前記カチオン性ポリマー塩が、アルキレントリアミンと式 (I) の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含み、

40

【化 4】



式中、

各 X^- が、独立して、アニオンであり、

50

R_1 が、ヒドロキシルまたは $-OR_5$ および X^- 末端基で置換された $C_1 \sim C_6$ アルキレンであり、

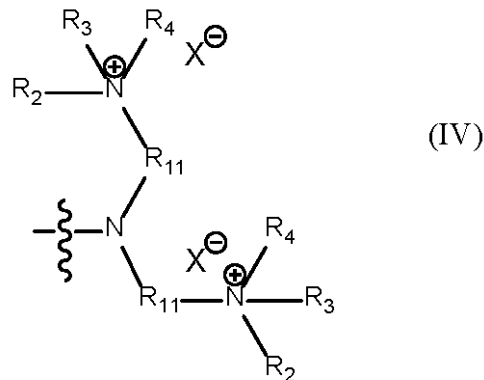
R_2 、 R_3 、および R_4 が、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、

R_5 が、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであり、
以下、

(A) カチオン性ポリマー塩が、少なくとも 4 つの四級アンモニウム基を含む、または
(B) カチオン性ポリマー塩が、式 (IV) を有する 1 つ以上の末端三級アミン基を有し、

【化 5】

10



20

式中、 R_{11} が、 X^- 末端基を有しない R_1 であり、前記ポリマー塩が、その主鎖内に置換を有しないか、 R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 が、メチルであり、または

(C) R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルもしくは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 が、メチルである、うちのいずれかである、方法。

【請求項 22】

前記表面が、前記流体の生成、輸送、貯蔵、および/または分離に使用される坑井または装置の一部である、請求項 20 または 21 に記載の方法。

30

【請求項 23】

前記表面が、石炭燃焼プロセス、廃水プロセス、農場、食肉処理場、埋め立て地、自治体廃水プラント、コーキング石炭プロセス、またはバイオ燃料プロセスに使用される装置の一部である、請求項 20 または 21 に記載の方法。

【請求項 24】

前記装置が、パイプライン、貯蔵容器、ダウンホール注入管、フローライン、または注入ラインを含む、請求項 22 または 23 に記載の方法。

【請求項 25】

前記流体が、天然ガスまたは液体炭化水素を含む、請求項 21 ~ 24 のいずれか一項に記載の方法。

40

【請求項 26】

前記液体炭化水素が、原油、重油、加工残油、瀝青油、コッカー油、軽油、流動接触分解供給原料またはスラリー、ナフサ、ディーゼル燃料、重油、ジェット燃料、ガソリン、または灯油を含む、請求項 25 に記載の方法。

【請求項 27】

表面上の微生物を制御する方法であって、
請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載のカチオン性ポリマー塩を含む組成物を、前記表面に添加することを含む、方法。

【請求項 28】

前記組成物が、冷却水システム、ボイラー水システム、石油井戸、ダウンホール層、地

50

熱井、鉱物洗浄、浮遊および選鉱、製紙、ガスクラバー、エアウォッシャー、冶金産業における連続鑄造プロセス、空調および冷蔵、水再生、浄水、膜濾過、食品加工、浄化剤、都市下水処理、都市水処理、ならびに飲用水道システムからなる群から選択される工業プロセスで使用されるプロセス水に添加される、請求項 27 に記載の方法。

【請求項 29】

前記組成物が、塩素、次亜塩素酸塩、 ClO_2 、臭素、オゾン、過酸化水素、過酢酸、ペルオキシ硫酸塩、グルタルアルデヒド、ジブロモニトロトリプロピオンアミド、イソチアゾロン、テルブチラジン、ポリマービグアニド、メチレンビスチオシアネート、テトラキスヒドロキシメチルホスホニウムスルフェート、およびそれらの任意の組み合わせからなる群から選択される殺生物剤をさらに含む、請求項 27 または 28 に記載の方法。

10

【請求項 30】

前記組成物が、担体を含む、請求項 27 ~ 29 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 31】

前記担体が、水、アルコール、芳香族炭化水素、アルキレングリコール、アルキレングリコールアルキルエーテル、またはそれらの組み合わせを含む、請求項 30 に記載の方法。

【請求項 32】

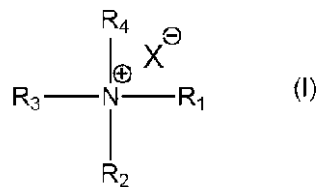
請求項 1 ~ 10 のいずれか一項に記載のポリマー塩を水系システムに添加することを含む、前記水系システム中の微生物を制御する方法。

【請求項 33】

水系システム中の微生物を制御するための方法であって、アルキレントリアミンと式 (I) の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含む、カチオン性ポリマー塩を前記水系システムに添加することを含み、

20

【化 6】



30

式中、

各 X^- が、独立して、アニオンであり、

R_1 が、ヒドロキシルまたは $-\text{OR}_5$ および X^- 末端基で置換された $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキレンであり、

R_2 、 R_3 、および R_4 が、各々独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{22}$ アルキルまたは $\text{C}_7 \sim \text{C}_{22}$ アリールアルキルであり、

R_5 が、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルであり、

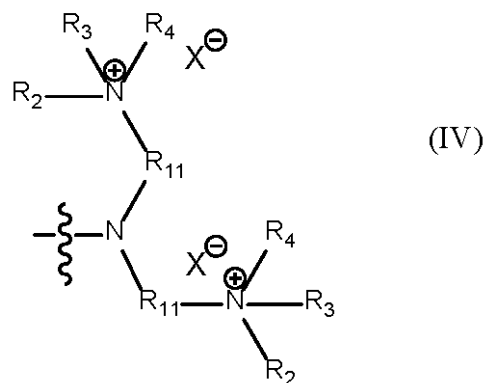
以下、

(A) カチオン性ポリマー塩が、少なくとも 4 つの四級アンモニウム基を含む、または

(B) カチオン性ポリマー塩が、式 (IV) を有する 1 つ以上の末端三級アミン基を有し、

40

【化 7】



10

式中、 R_{11} が、 X^- 末端基を有しない R_1 であり、前記ポリマー塩が、その主鎖内に置換を有しないか、 R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリアルキルであり、 R_4 が、メチルであり、または

(C) R_2 および R_3 が、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルもしくは $C_7 \sim C_{22}$ アリアルキルであり、 R_4 が、メチルである、うちのいずれかである、方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

20

【0001】

本開示は、一般に、カチオン性ポリマー塩に関し、より具体的には、界面活性剤、抗微生物化合物、および腐食抑制剤として使用される組成物に関する。

【背景技術】

【0002】

四級アンモニウム化合物は、それらが独特の性質を含むため、界面活性剤の重要なサブカテゴリーを構成する。四級アンモニウム化合物と他の界面活性剤との間の主な違いは、それらの独特の構造である。四級アンモニウム化合物は、主に二つの部分、疎水性基、例えば長アルキル基、および四級アンモニウム塩基からなる。アンモニウムの独特の正電荷は、界面活性剤と表面との間の重要な役割、すなわち静電相互作用を担う。

30

【0003】

工業用水システムは、多くの異なる目的に役立つようにプロセス水を用いるが、微生物による汚染や汚損が発生しやすい場合がある。現在利用可能な最良の水処理プログラムで処理された工業用水システムにおいてさえ、あらゆる有機または無機材料の汚損または付着が起こり得る。

【0004】

これらの工業用水システムが定期的に清掃されない場合、それらはひどく汚損される。汚損は、工業用水システムに悪影響を及ぼす。例えば、深刻なミネラルスケール（無機材料）が、水との接触面上に堆積し、スケールが存在するあらゆる場所が、微生物の成長に理想的な環境を提供する。

40

【0005】

蒸発冷却水システムは、特に汚損を生じやすい。この汚損は、風媒性、水媒性、または水から形成された汚染物質の付着；水の淀み；プロセス漏出；および他の要因を含む種々の機序によって発生する。進行させると、システムは、運用効率の低下、装置の早期故障、および微生物汚損に関連した健康関連リスクの増大を被る可能性がある。

【0006】

汚損はまた、微生物学的汚染に起因して起こり得る。工業用水システムにおける微生物汚染の原因は数多くあり、風媒性汚染、水補給、プロセス漏出、および不適切に洗浄された装置が含まれ得るが、これらに限定されない。これらの微生物は、水システムの任意の湿潤性または半湿潤性表面上に微生物群集を確立することができる。

50

【 0 0 0 7 】

微生物群集が表面上に発達するにつれて、微生物によって分泌されたエキソポリマー物質が、バイオフィルムの形成を助ける。これらのバイオフィルムは、栄養素を集めるための手段を確立し、成長に対する保護を提供する複雑な生態系であり、バイオフィルムはスケール、腐食、および他の汚損プロセスを加速させる可能性がある。バイオフィルムは、システム効率の低下に寄与するだけでなく、レジオネラ属細菌を含み得る微生物増殖のための優れた環境も提供する。したがって、レジオネラ属菌および他の水媒性病原体に関連した健康関連のリスクを最小限に抑えるために、バイオフィルムおよび他の汚損プロセスを可能な限り低減することが重要である。

【 0 0 0 8 】

腐食抑制剤は、炭素鋼パイプラインおよびインフラストラクチャを腐食から保護するために、上流の石油およびガス生産流体にしばしば添加される。四級アンモニウム化合物は、腐食抑制剤配合物の一部として長年使用されてきたが、最も頻繁には、ビス四級種または塩化ベンジルで四級化された種であり、これは非常に危険であることが知られている。

【 0 0 0 9 】

このニッチな界面活性剤および腐食抑制剤を満たす四級アンモニウム化合物が、引き続き必要とされている。

【 先行技術文献 】

【 特許文献 】

【 0 0 1 0 】

【 文献 】 米国特許第 3 7 1 8 6 3 9 号明細書

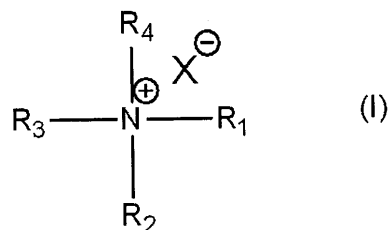
【 発明の概要 】

【 0 0 1 1 】

いくつかの実施形態では、ポリアミンまたはポリアルキレンイミンと置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含む、カチオン性ポリマー塩が提供される。

ある特定の実施形態では、本開示は、ポリアミンまたはポリアルキレンイミンと式 (I) の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含む、カチオン性ポリマー塩が提供され、

【 化 1 】



式中、各 X^- は、独立して、アニオンであり、 R_1 は、ヒドロキシルまたは $-\text{OR}_5$ および X^- 末端基で置換された $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキレンであり、 R_2 、 R_3 、および R_4 は、各々独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{22}$ アルキルまたは $\text{C}_7 \sim \text{C}_{22}$ アリールアルキルであり、 R_5 は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルである。

【 0 0 1 2 】

いくつかの実施形態では、式 (III) を含むカチオン性ポリマー塩が提供され、

10

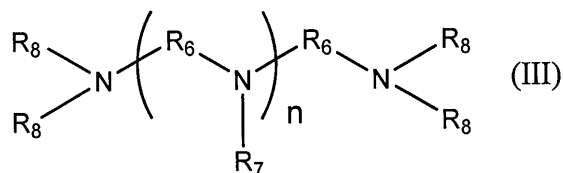
20

30

40

50

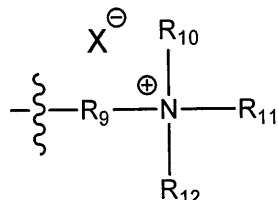
【化 2】



式中、各 R_6 は、独立して、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキレンであり、各 R_7 は、独立して、水素、 $-\text{R}_8$ 、 $-\text{R}_6 - \text{N}(\text{R}_8)_2$ 、 $-\text{R}_6 - \text{N}(\text{R}_8) - \text{R}_6 - \text{N}(\text{R}_8)_2$ 、または $-\text{R}_6 - \text{N} - (\text{R}_6 - \text{N}(\text{R}_8)_2)_2$ であり、各 R_8 は、独立して、水素または

10

【化 3】



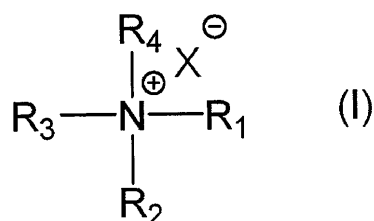
であり、各 R_9 は、独立して、ヒドロキシルまたは $-\text{OR}_{13}$ 置換された $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキレンであり、 R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} は、各々独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{22}$ アルキルまたは $\text{C}_7 \sim \text{C}_{22}$ アリールアルキルであり、 R_{13} は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルであり、 n は、 $1 \sim 100$ の整数であり、各 X^- は、独立して、アニオンである。

20

【0013】

いくつかの実施形態では、ポリアミン、アルキレンイミン、またはポリアルキレンイミンと式 (I) の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含む、カチオン性ポリマー塩が提供され、

【化 4】



30

式中、各 X^- は、独立して、アニオンであり、 R_1 は、ヒドロキシルまたは $-\text{OR}_5$ および X^- 末端基で置換された $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキレンであり、 R_2 、 R_3 、および R_4 は、各々独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{22}$ アルキルまたは $\text{C}_7 \sim \text{C}_{22}$ アリールアルキルであり、 R_5 は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルであり、

以下のうちのいずれか 1 つである。

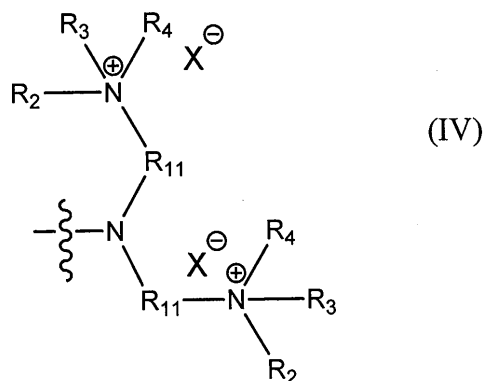
40

(A) カチオン性ポリマー塩が、その主鎖内に置換を有さず、その主鎖内にアルキル四級化アンモニウムを有さず、少なくとも 4 つの四級アンモニウム基を含むか、または

(B) カチオン性ポリマー塩が、式 (IV) を有する 1 つ以上の末端三級アミン基を有し、

50

【化 5】



10

式中、 R_{11} は、 X^- 末端基を有しない R_1 であり、ポリマー塩は、その主鎖内に置換を有しないか、もしくは R_2 、 R_3 、および R_4 のうちの少なくとも1つが、 $C_9 \sim C_{22}$ アルキル基であるかのいずれかであるか、または

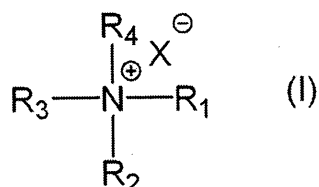
(C) R_2 および R_3 は、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルもしくは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 は、メチルである。

【0014】

いくつかの実施形態では、水系システム中の微生物を制御するための方法が開示される。この方法は、ポリアミンまたはポリアルキレンイミンと式(I)の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を、水系システムに添加することを含み得、

20

【化 6】



30

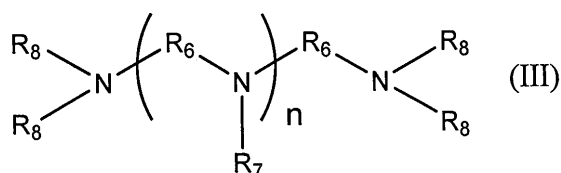
式中、各 X^- は、独立して、アニオンであり、 R_1 は、ヒドロキシルまたは $-OR_5$ および X^- 末端基で置換された $C_1 \sim C_6$ アルキレンであり、 R_2 、 R_3 、および R_4 は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_5 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルである。

【0015】

本開示のいくつかの実施形態では、プロセス水に組成物を添加することによって、プロセス水中の微生物を制御するための方法が開示される。組成物は、式(III)のカチオン性ポリマーを含んでもよく、

40

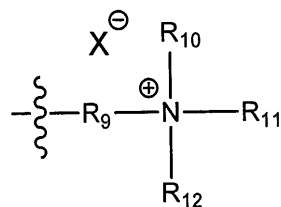
【化 7】



式中、各 R_6 は、独立して、 $C_2 \sim C_6$ アルキレンであってもよく、各 R_7 は、独立して、水素、 $-R_8$ 、 $-R_6-N(R_8)_2$ 、 $-R_6-N(R_8)-R_6-N(R_8)_2$ 、または $-R_6-N-(R_6-N(R_8)_2)_2$ であってもよく、各 R_8 は、独立して、水素または

50

【化 8】



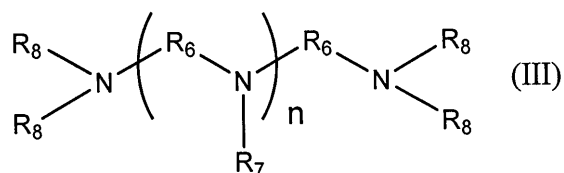
であってもよく、各 R_9 は、独立して、ヒドロキシルまたは $-OR_{13}$ 置換された $C_2 \sim C_6$ アルキレンであってもよく、 R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_{13} は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであってもよく、 n は、 $1 \sim 100$ の整数であってもよく、各 X^- は、独立して、アニオンであってもよい。

10

【0016】

いくつかの実施形態では、表面に組成物を添加することによって、表面上の微生物を制御するための方法が提供される。組成物は、式 (III) のカチオン性ポリマーを含んでもよく、

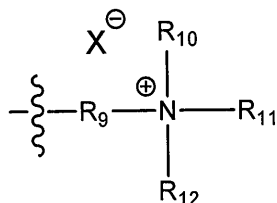
【化 9】



20

式中、各 R_6 は、独立して、 $C_2 \sim C_6$ アルキレンであってもよく、各 R_7 は、独立して、水素、 $-R_8$ 、 $-R_6-N(R_8)_2$ 、 $-R_6-N(R_8)-R_6-N(R_8)_2$ 、または $-R_6-N-(R_6-N(R_8)_2)_2$ であってもよく、各 R_8 は、独立して、水素または

【化 10】



30

であってもよく、各 R_9 は、独立して、ヒドロキシルまたは $-OR_{13}$ 置換された $C_2 \sim C_6$ アルキレンであってもよく、 R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_{13} は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであってもよく、 n は、 $1 \sim 100$ の整数であってもよく、各 X^- は、独立して、アニオンであってもよい。

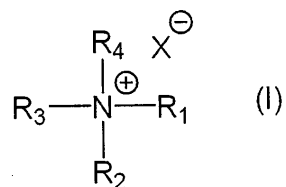
40

【0017】

いくつかの実施形態では、表面上の腐食を抑制する方法が開示されている。この方法は、表面を、ポリアミンまたはポリアルキレンイミンと式 (I) の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物と接触させることを含み得、

50

【化 1 1】



式中、各 X^{\ominus} は、独立して、アニオンであり、 R_1 は、ヒドロキシルまたは $-OR_5$ および X^{\ominus} 末端基で置換された $C_1 \sim C_6$ アルキレンであり、 R_2 、 R_3 、および R_4 は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_5 は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルである。

10

【0018】

前述されたことは、後続の発明を実施するための形態をより良く理解できるように、本開示の特色および技術的利点を概括的に概説したものである。本出願の特許請求の範囲の主題を形成する、本開示のさらなる特色および利点については、以下で説明する。開示される概念および具体的な実施形態は、本開示と同じ目的を実行するための他の実施形態を修正または設計するための基礎として容易に活用できることが、当業者には理解されるべきである。また、かかる等価の実施形態は、添付の特許請求の範囲に示されるような本開示の趣旨および範囲から逸脱しないことが、当業者には認識されるべきである。

20

【図面の簡単な説明】

【0019】

以下、発明を実施するための形態を、以下の図面を具体的に参照しながら説明する。

【0020】

【図1】様々な四級カチオン性界面活性剤の表面張力 (mN/m) 対濃度 (重量%) のグラフを示す。

【0021】

【図2】様々な時点における冷却水中の細菌減少に対する異なる濃度の化合物1の効果を示す。

【0022】

30

【図3】様々な濃度の化合物1に対する接触時間の関数としての細菌濃度を示す。

【0023】

【図4】化合物1～4に対する時間の関数としての細菌濃度を示す。

【0024】

【図5】様々な時点における冷却水中の細菌濃度に対する異なる濃度の化合物4の効果を示す。

【0025】

【図6】様々な濃度の化合物4に対する接触時間の関数としての細菌濃度を示す。

【0026】

【図7】ポリマー四級化合物と比較した単一四級化合物のバイオフィルム減少を示す。

40

【0027】

【図8】ポリマー四級化合物と比較した単一四級化合物のバイオフィルム減少を示す。

【発明を実施するための形態】

【0028】

本出願は、ポリアミン、アルキレンイミン、またはポリアルキレンイミンと置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含む、カチオン性ポリマー塩を開示する。複数の四級基を有する新たに合成された抗菌性および防食性のカチオン性ポリマー塩が、本明細書に開示されており、例えば、微生物集団の制御または工業システムで使用されるプロセス水中の腐食抑制において特に有用であり得る。開示された化合物は、抗菌性および防食活性を示し、微生物の制御または腐食抑制を必要とする

50

あらゆる用途において使用され得る。

【0029】

別段に定義されない限り、本明細書で使用される全ての技術用語および科学用語は、当業者によって一般に理解されるものと同じ意味を有する。矛盾する場合、定義を含む本文書が優先される。本明細書に記載されるものと同様または同等の方法および材料を、本発明の実施または試験に使用することができるが、好ましい方法および材料を以下に記載する。本明細書で言及される全ての刊行物、特許出願、特許、および他の参考文献は、参照によりそれら全体が組み込まれる。本明細書に開示される材料、方法、および実施例は、単なる例示であり、限定することを意図するものではない。

【0030】

本明細書で使用される場合、用語「含む (comprise)」、「含む (include)」、「有する (having)」、「有する (has)」、「することができる (can)」、「含む (contain)」、およびそれらの変形は、追加のステップまたは構成要素の可能性を排除しない制限のない移行句、用語、または単語であることが意図される。単数形「a」、「and」および「the」は、文脈が明らかにそうでないことを指示しない限り、複数の指示対象を含む。本開示はまた、明示的に記載されているか否かにかかわらず、本明細書に提示された実施形態または要素を「含む」、「からなる」、および「から本質的になる」他の実施形態も企図する。

【0031】

別段の指示がない限り、本明細書に記載される「アルキル」基は、単独でまたは別の基の一部として、1～32個の炭素原子を含む任意に置換された直鎖飽和一価炭化水素ラジカル、または3～32個の炭素原子を含む任意に置換された分岐飽和一価炭化水素ラジカルである。非置換アルキル基の例としては、メチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、n-ブチル、i-ブチル、s-ブチル、t-ブチル、n-ペンチル、i-ペンチル、s-ペンチル、t-ペンチルなどが挙げられる。アルキル基は、以下に定義されるように、非置換であり得るか、または1つ以上の適切な置換基によって置換され得る。好ましくは、置換は、ポリマー塩の主鎖または骨格内にはない。

【0032】

「アリールアルキル」とは、アルキレン基を介して親分子に結合したアリール基を意味する。アリール基およびアルキレン基における炭素原子の数は、アリールアルキル基に合計で約7～約22個の炭素原子が存在するように選択される。好ましいアリールアルキル基は、ベンジルである。

【0033】

別の基の一部として接尾辞として使用される用語「-エン (-ene)」は、水素原子が基の2つの末端炭素の各々から除去されている二価ラジカルを表す。例えば、アルキレンは、メチレン (-CH₂-) またはエチレン (-CH₂CH₂-) などの二価アルキル基を表す。明確にするために、接尾辞-エンの追加は、2価ラジカルを表す以外に主語の定義を変更することは意図されない。したがって、上記の例を続けると、アルキレンは、任意に置換された直鎖飽和二価炭化水素ラジカルを表す。

【0034】

本明細書で使用される場合、用語「適切な置換基」は、本発明の化合物の活動を打ち消さない化学的に許容される官能基を意味することが意図される。かかる適切な置換基としては、ハロ基、ペルフルオロアルキル基、ペルフルオロアルコキシ基、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヒドロキシ基、オキソ基、メルカプト基、アルキルチオ基、アルコキシ基、アリールまたはヘテロアリール基、アリールオキシまたはヘテロアリールオキシ基、アリールアルキルまたはヘテロアリールアルキル基、アリールアルコキシまたはヘテロアリールアルコキシ基、カルボキシ基、複素環基、シクロアルキル基、アミノ基、アルキル基およびジアルキルアミノ基、カルバモイル基、アルキルカルボニル基、アルコキシカルボニル基、アルキルアミノカルボニル基、ジアルキルアミノカルボニル基、アリールカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アルキルスルホニル基、およびアリ

10

20

30

40

50

ールスルホニル基が挙げられるが、これらに限定されない。当業者は、多くの置換基が、追加の置換基によって置換され得ることを理解するであろう。

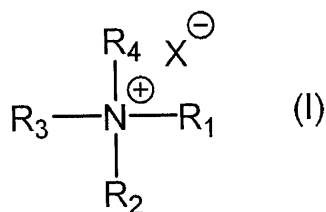
【 0 0 3 5 】

本開示のカチオン性ポリマー塩は、分子中のアルキル鎖の数が増えるにつれて水溶液中で減少した表面張力を呈し、カチオン性界面活性剤または発泡剤として有用である（例えば、洗浄配合物またはシャンプーなどのパーソナルケア製品に使用するため）。カチオン性ポリマー塩は、1つのアルキル鎖および1つの親水性基を有する従来の両親媒性化合物と比較して、予想外の物理化学的性質を提供する複数のアルキル鎖および複数の親水性基を有する。

【 0 0 3 6 】

いくつかの実施形態では、置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩モノマーは、式（I）を含み、

【 化 1 2 】



式中、各 X^{\ominus} は、独立して、アニオンであり、 R_1 は、ヒドロキシルまたは $-\text{OR}_5$ および X^{\ominus} 末端基で置換された $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキレンであり、 R_2 、 R_3 、および R_4 は、各々独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{22}$ アルキルまたは $\text{C}_7 \sim \text{C}_{22}$ アリールアルキルであり、 R_5 は、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6$ アルキルである。

【 0 0 3 7 】

R_1 は、ヒドロキシルで置換され、 X^{\ominus} 末端基を有する $\text{C}_2 \sim \text{C}_3$ アルキレンを含み得る。

【 0 0 3 8 】

適切な X^{\ominus} アニオンとしては、塩化物、臭化物、フッ化物、ヨウ化物、酢酸塩、アルミン酸塩、シアン酸塩、シアン化物、リン酸二水素塩、亜リン酸二水素塩、ギ酸塩、炭酸水素塩、シュウ酸水素塩、硫酸水素塩、水酸化物、メタニオブ酸塩、メタバナジン酸塩、硝酸塩、亜硝酸塩、チオシアネート、またはそれらの組み合わせを挙げることができるが、これらに限定されない。いくつかの実施形態では、アニオンは、塩化物または臭化物を含み得る。

【 0 0 3 9 】

R_2 、 R_3 、および R_4 は、独立して、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{22}$ アルキルであり得る。いくつかの実施形態では、

R_2 、 R_3 、および R_4 は、全てメチルであり得る。あるいは、 R_2 は、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{22}$ アルキルまたは $\text{C}_7 \sim \text{C}_{22}$ アリールアルキルであり得、 R_3 および R_4 は、メチルなどの $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルであり得るか、または R_2 および R_3 は、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{22}$ アルキルもしくは $\text{C}_7 \sim \text{C}_{22}$ アリールアルキルであり、 R_4 は、メチルなどの $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキルである。

【 0 0 4 0 】

適切な置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩モノマーとしては、3-クロロ-2-ヒドロキシプロピル-トリメチルアンモニウムクロリド、3-クロロ-2-ヒドロキシプロピル-ドデシル-ジメチルアンモニウムクロリド、3-クロロ-2-ヒドロキシプロピル-ステアシル-ジメチルアンモニウムクロリド、またはそれらの任意の組み合わせを挙げることができるが、これらに限定されない。

【 0 0 4 1 】

ポリアミンは、式（II）のポリマーを含み得、

10

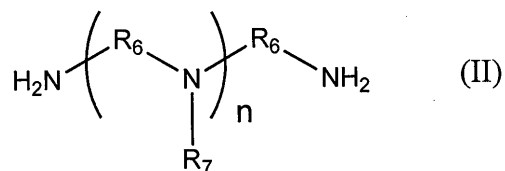
20

30

40

50

【化 1 3】



式中、 n は、 $0 \sim 100$ の整数であり、各 R_6 は、独立して、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキレンであり、各 R_7 は、独立して、水素または $-\text{R}_6 - \text{NH}_2$ 、 $-\text{R}_6 - \text{NH} - \text{R}_6 - \text{NH}_2$ 、または $-\text{R}_6 - \text{N} - (\text{R}_6 - \text{NH}_2)_2$ である。

10

【0042】

式(II)のポリアミンにおいて、 n は、 $0 \sim 90$ 、 $0 \sim 80$ 、 $0 \sim 70$ 、 $0 \sim 60$ 、 $0 \sim 50$ 、 $0 \sim 45$ 、 $0 \sim 40$ 、 $0 \sim 35$ 、 $0 \sim 30$ 、 $0 \sim 25$ 、 $0 \sim 20$ 、 $0 \sim 15$ 、 $0 \sim 10$ 、 $0 \sim 9$ 、 $0 \sim 8$ 、 $0 \sim 7$ 、 $0 \sim 6$ 、 $0 \sim 5$ 、 $1 \sim 90$ 、 $1 \sim 80$ 、 $1 \sim 70$ 、 $1 \sim 60$ 、 $1 \sim 50$ 、 $1 \sim 45$ 、 $1 \sim 40$ 、 $1 \sim 35$ 、 $1 \sim 30$ 、 $1 \sim 25$ 、 $1 \sim 20$ 、 $1 \sim 15$ 、 $1 \sim 10$ 、 $1 \sim 9$ 、 $1 \sim 8$ 、 $1 \sim 7$ 、 $1 \sim 6$ 、 $1 \sim 5$ であり得る。いくつかの実施形態では、 n は、 $2 \sim 5$ 、 $2 \sim 6$ 、 $2 \sim 7$ 、 $2 \sim 8$ 、 $2 \sim 9$ 、 $2 \sim 10$ 、 $2 \sim 25$ 、 $2 \sim 30$ 、 $2 \sim 35$ 、 $2 \sim 40$ 、 $2 \sim 45$ 、 $2 \sim 90$ 、またはそれらの任意の部分範囲であつてもよい。他の実施形態では、 n は、 $3 \sim 100$ 、 $3 \sim 90$ 、 $3 \sim 80$ 、 $3 \sim 70$ 、 $3 \sim 60$ 、 $3 \sim 50$ 、 $3 \sim 45$ 、 $3 \sim 40$ 、 $3 \sim 35$ 、 $3 \sim 30$ 、 $3 \sim 25$ 、 $3 \sim 10$ 、またはそれらの任意の部分範囲であつてもよい。ある特定の実施形態では、 n は、 1 、 2 、 3 、 4 、 5 、 6 、 7 、 8 、 9 、または 10 から選択される。

20

【0043】

式(II)のポリアミンにおいて、 R_6 は、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_3$ アルキルであり得る。いくつかの実施形態では、 R_6 は、エチルであり得る。

【0044】

式(II)のポリアミンにおいて、ポリアミンの窒素のいずれも四級化される必要はない。

【0045】

適切なポリアミンは、アルキレンアミンを含み得る。アルキレンアミンは、エチレンジアミン、ジエチレントリアミン、トリエチレンテトラミン、ジエチレントリアミン、トリエチレンテトラミン、テトラエチレンペンタミン、ペンタエチレンヘキサミン、ヘキサエチレンヘプタミン、またはそれらの組み合わせを含み得るが、これらに限定されない。

30

【0046】

適切なポリアルキレンイミンとしては、エチレンイミン、プロピレンイミン、ブチレンイミン、ペンチレンイミン、ヘキシレンイミン、ヘプチレンイミン、またはそれらの組み合わせを挙げることができるが、これらに限定されない。

【0047】

適切なポリアルキレンイミンとしては、分岐鎖、直鎖、またはデンドリマーポリエチレンイミンを挙げることができるが、これらに限定されない。

40

【0048】

いくつかの実施形態では、直鎖、分岐鎖、またはデンドリマーポリエチレンイミンの重量平均分子量は、ゲル浸透クロマトグラフィーによって測定して、約 200 g/mol ～約 750 、 000 g/mol の範囲であり得る。いくつかの実施形態では、ポリマー塩の重量平均分子量は、約 800 g/mol 、約 $1,300 \text{ g/mol}$ 、約 $2,000 \text{ g/mol}$ 、約 $5,000 \text{ g/mol}$ 、約 $20,000 \text{ g/mol}$ 、約 $25,000 \text{ g/mol}$ 、または約 $750,000 \text{ g/mol}$ であり得る。

【0049】

いくつかの実施形態では、直鎖、分岐鎖、またはデンドリマーポリエチレンイミンの粘

50

度は、ブルックフィールド粘度計でISO 2555に従って測定して、約100 mPa・s ~ 約30,000 mPa・sの範囲であり得る。いくつかの実施形態では、直鎖、分岐鎖、または dendrimer ポリエチレンイミンの粘度は、約200 mPa・s ~ 約15,000 mPa・s、または約200 mPa・s ~ 約500 mPa・sの範囲であり得る。いくつかの実施形態では、直鎖、分岐鎖、または dendrimer ポリエチレンイミンの粘度は、約300 mPa・s、約400 mPa・s、約500 mPa・s、約600 mPa・s、または約1000 mPa・sであり得る。

【0050】

いくつかの実施形態では、ポリエチレンイミン中の一級アミン/二級アミン/三級アミンの比は、 ^1H NMRによって測定して、約1/0.9/0.6であり得る。乾燥ポリエチレンイミン中のアミンの量は、約10 mmol/g ~ 約30 mmol/gの範囲であり得る。ポリエチレンイミン中のアミンの量は、約12 mmol/g、約13 mmol/g、約14 mmol/g、約15 mmol/g、約16 mmol/g、約17 mmol/g、約18 mmol/g、約19 mmol/g、約20 mmol/g、約21 mmol/g、または約22 mmol/gであり得る。

【0051】

反応物としてのポリアミンまたはポリアルキレンイミンと置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩とのモル比は、1:1 ~ 1:100、1:1 ~ 1:90、1:1 ~ 1:80、1:1 ~ 1:70、1:1 ~ 1:60、1:1 ~ 1:50、1:1 ~ 1:45、1:1 ~ 1:40、1:1 ~ 1:35、1:1 ~ 1:30、1:1 ~ 1:25、1:1 ~ 1:20、1:1 ~ 1:15、1:1 ~ 1:10、1:1 ~ 1:9、1:1 ~ 1:8、1:1 ~ 1:7、1:1 ~ 1:6、1:1 ~ 1:5、1:1 ~ 1:4、1:1 ~ 1:3、または1:1 ~ 1:2の範囲であり得る。

【0052】

いくつかの実施形態では、ポリアミン、アルキレンイミン、またはポリアルキレンイミンと、上記式(I)の置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応から誘導される反応生成物を含む、カチオン性ポリマー塩が提供され、以下のうちのいずれか1つである。

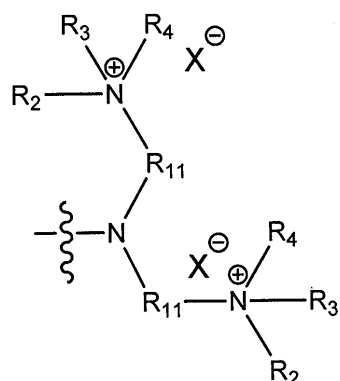
【0053】

(A) カチオン性ポリマー塩は、その主鎖内に置換を有さず、その主鎖内にアルキル四級化アンモニウムを有さず、少なくとも4つの四級アンモニウム基を含むか、または

【0054】

(B) カチオン性ポリマー塩は、式(IV)を有する1つ以上の末端三級アミン基を有し、

【化14】



(IV)

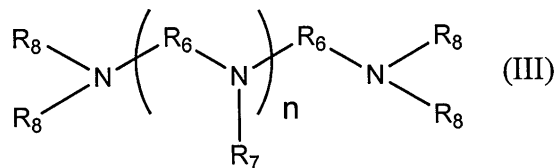
式中、 R_{11} が、 X^- 末端基を有しない R_1 であり、ポリマー塩が、その主鎖内に置換を有しないか、もしくは R_2 、 R_3 、および R_4 のうちの少なくとも1つが、 $C_9 \sim C_{22}$ アルキル基であるかのいずれかであるか、または

【 0 0 5 5 】

(C) 式 (I) の R_2 および R_3 は、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキルもしくは $C_7 \sim C_{22}$ アリー
ルアルキルであり、 R_4 は、メチルである。

【 0 0 5 6 】

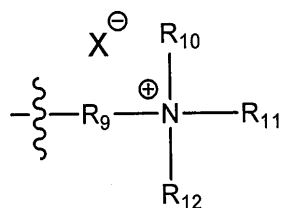
いくつかの実施形態では、カチオン性ポリマー塩は、式 (I I I) のポリマーを含み得、
【 化 1 5 】



10

式中、各 R_6 は、独立して、 $C_2 \sim C_6$ アルキレンであり、各 R_7 は、独立して、水素、
 $-R_8$ 、 $-R_6-N(R_8)_2$ 、 $-R_6-N(R_8)-R_6-N(R_8)_2$ 、または $-R_6-N-$
 $(R_6-N(R_8)_2)_2$ であり、各 R_8 は、独立して、水素または

【 化 1 6 】



20

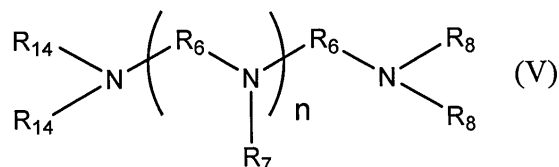
であり、各 R_9 は、独立して、ヒドロキシルまたは $-OR_{13}$ で置換された $C_2 \sim C_6$ アル
キレンであり、 R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルま
たは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_{13} は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであり、 n は、
1 ~ 100 の整数であり、各 X^- は、独立して、アニオンである。

【 0 0 5 7 】

式 (V) を有するカチオン性ポリマー塩も提供され、

30

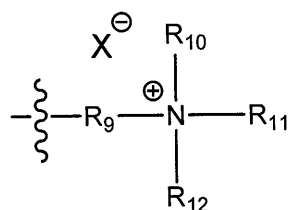
【 化 1 7 】



式中、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 、 R_{11} 、 R_{12} 、 R_{13} 、 n 、および X^- は、上記
式 (I I I) について定義した通りであり、 R_{14} は、

40

【 化 1 8 】



であり、以下のうちの 1 つである。

(a) ポリマー塩は、その主鎖内に置換を有さず、その主鎖内にアルキル四級化アンモ

50

ニウムを有さず、少なくとも4つの四級アンモニウム基を含むか、または

(b) ポリマー塩は、その主鎖内に置換を有しないか、もしくは R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} の R_{14} のうちの少なくとも1つが、 $C_9 \sim C_{22}$ アルキル基であるかのいずれかであるか、または

(c) ポリマー塩は、少なくとも3つの R_{12} を含み、 R_{12} は、 $C_9 \sim C_{15}$ アルキルであるか、または

(d) ポリマー塩は、少なくとも3つの R_{12} を含み、 R_{12} は、 $C_{15} \sim C_{22}$ アルキルである。

【0058】

式(III)または(V)のポリマー塩において、 n は、 $1 \sim 90$ 、 $1 \sim 80$ 、 $1 \sim 70$ 、 $1 \sim 60$ 、 $1 \sim 50$ 、 $1 \sim 45$ 、 $1 \sim 40$ 、 $1 \sim 35$ 、 $1 \sim 30$ 、 $1 \sim 25$ 、またはそれらの任意の部分範囲であり得る。いくつかの実施形態では、 n は、 $2 \sim 25$ 、 $2 \sim 30$ 、 $2 \sim 35$ 、 $2 \sim 40$ 、 $2 \sim 45$ 、 $2 \sim 90$ 、またはそれらの任意の部分範囲であり得る。他の実施形態では、 n は、 $3 \sim 100$ 、 $3 \sim 90$ 、 $3 \sim 80$ 、 $3 \sim 70$ 、 $3 \sim 60$ 、 $3 \sim 50$ 、 $3 \sim 45$ 、 $3 \sim 40$ 、 $3 \sim 35$ 、 $3 \sim 30$ 、 $3 \sim 25$ 、またはそれらの任意の部分範囲であってもよい。ある特定の実施形態では、 n は、1、2、3、4、5、6、7、8、9、または10から選択される。

10

【0059】

式(III)または(V)のポリマー塩では、各 R_6 および R_9 は、独立して、 $C_2 \sim C_3$ アルキレンであり得る。いくつかの実施形態では、各 R_6 は、エチレンであり得る。

20

【0060】

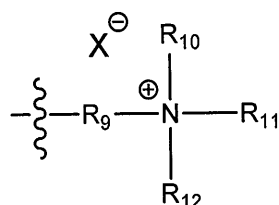
式(III)のポリマー塩において、各 R_9 は、ヒドロキシプロピレンであり得、 R_{10} および R_{11} は、メチルであり得、各 R_{12} は、独立して、メチルまたは $C_8 \sim C_{22}$ アルキルであり得る。いくつかの実施形態では、少なくとも1つの R_{12} は、 $C_8 \sim C_{22}$ アルキルである。

【0061】

式(III)のポリマー塩の他の実施形態では、 R_7 は、 $-R_8$ 、 $-R_6-N(R_8)_2$ 、 $-R_6-N(R_8)-R_6-N(R_8)_2$ または $-R_6-N-(R_6-N(R_8)_2)_2$ であり、各 R_8 は、

【化19】

30



であり、各 R_9 は、独立して、ヒドロキシルまたは $-OR_{13}$ で置換された $C_2 \sim C_6$ アルキレンであり、 R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_{13} は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであり、 n は、 $1 \sim 100$ の整数であり、各 X^- は、独立して、アニオンである。

40

【0062】

式(III)のポリマー塩のいくつかの実施形態では、少なくとも1つの R_{12} は、飽和 $C_9 \sim C_{15}$ アルキル基であり得る。飽和アルキル基は、 $C_{10} \sim C_{15}$ 、 $C_{11} \sim C_{15}$ 、 $C_{12} \sim C_{15}$ 、 $C_{12} \sim C_{14}$ 、 $C_{11} \sim C_{14}$ 、 $C_{10} \sim C_{14}$ 、 $C_9 \sim C_{14}$ 、 $C_9 \sim C_{13}$ 、 $C_{10} \sim C_{13}$ 、または $C_{11} \sim C_{13}$ の範囲であり得る。他の実施形態では、少なくとも2、3、4、または5つの R_{12} は、飽和 $C_9 \sim C_{15}$ アルキル基であり得る。例えば、少なくとも1つの R_{12} は、 C_{12} アルキル基であり得るか、または少なくとも2、3、4、または5つの R_{12} は、 C_{12} アルキル基であり得る。

【0063】

50

式(III)のポリマー塩の他の実施形態では、少なくとも1つの R_{12} は、飽和 $C_{15} \sim C_{22}$ アルキル基であってもよい。飽和アルキル基は、 $C_{16} \sim C_{22}$ 、 $C_{17} \sim C_{21}$ 、 $C_{16} \sim C_{20}$ 、 $C_{18} \sim C_{22}$ 、 $C_{16} \sim C_{18}$ 、 $C_{15} \sim C_{18}$ 、 $C_{15} \sim C_{20}$ 、または $C_{17} \sim C_{19}$ の範囲であり得る。他の実施形態では、少なくとも2、3、4、または5つの R_{12} は、飽和 $C_{15} \sim C_{22}$ アルキル基であり得る。

【0064】

他の実施形態では、少なくとも1つの R_{12} は、飽和 C_{12} アルキル基であり得る。なおもさらなる実施形態では、少なくとも2、3、4、または5つの R_{12} は、飽和 C_{12} アルキル基であり得る。

【0065】

他の実施形態では、少なくとも1つの R_{12} は、飽和 C_{18} アルキル基であり得る。なおもさらなる実施形態では、少なくとも2、3、4、または5つの R_{12} は、飽和 C_{18} アルキル基であり得る。

【0066】

式(III)のポリマー塩のいくつかの実施形態では、少なくとも1つの R_9 は、 R_8 であり得るか、または少なくとも2、3、もしくは4つの R_9 は、 R_8 であり得る。いくつかの実施形態では、式(III)のカチオン塩は、少なくとも3つの置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム基を含み得る。他の実施形態では、少なくとも4、5、または6つの四級アンモニウム基が存在してもよい。いくつかの実施形態では、四級アンモニウム基は、ポリマー塩の主鎖または骨格ではなく、分岐鎖または側鎖にのみ存在し得る。

【0067】

本明細書に記載されるポリマー塩のいずれにおいても、ポリマー塩は、ポリマー塩の主鎖内にアルキル四級アンモニウムを全く有していなくてもよい。例えば、ポリマー塩は、ポリマー塩の主鎖内に $-N(CH_3)(CH_3)-$ 窒素を全く有していなくてもよい。さらに、ポリマー塩は、ポリマー塩の主鎖(すなわち、骨格)内に置換を全く有していなくてもよい。

【0068】

ある特定の実施形態では、カチオン性ポリマーの組成物は、担体をさらに含み得る。いくつかの実施形態では、界面活性剤組成物が提供され、界面活性剤組成物はカチオン性ポリマー塩および水性担体などの担体を含み得る。

【0069】

適切な担体としては、水、アルコール、芳香族炭化水素、アルキレングリコール、アルキレングリコールアルキルエーテル、またはそれらの組み合わせを挙げることができるが、これらに限定されない。例えば、適切な担体としては、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール、イソブタノール、モノエチレングリコール、エチレングリコールモノブチルエーテル、ヘキシレングリコール、またはそれらの組み合わせが挙げられる。

【0070】

カチオン性ポリマー塩の調製は、ポリアミンもしくはポリアルキレンイミンまたはそれらの任意の組み合わせを、少なくとも約7.5のpHで置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩と反応させてポリマー塩を形成することによって、簡便に実施することができる。反応物としてのポリアミンまたはポリアルキレンイミンと置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩とのモル比は、1:1~1:100、1:1~1:90、1:1~1:80、1:1~1:70、1:1~1:60、1:1~1:50、1:1~1:45、1:1~1:40、1:1~1:35、1:1~1:30、1:1~1:25、1:1~1:20、1:1~1:15、1:1~1:10、1:1~1:9、1:1~1:8、1:1~1:7、1:1~1:6、1:1~1:5、1:1~1:4、1:1~1:3、または1:1~1:2の範囲であり得る。反応混合物を攪拌し、約2~6時間にわたって約50~100 に加熱することができる。塩基を添加して、少なくとも約7.5のpHを維持することができる。例えば、反応が完了するまで水溶液のpHをモニタリングし、

10

20

30

40

50

水性媒体のpHを調整して水溶液のpH値を約7.5以上に維持しながら、反応物を反応器中の水溶液に添加することができる。

【0071】

例えば、ジエチレントリアミンなどのアルキレンアミンおよび3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリドなどの置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩を、機械攪拌器、温度計、温度制御装置、冷却器、および添加漏斗を備えた反応容器に加えることができる。反応混合物を攪拌し、穏やかに約60に加熱する。反応のpH値を、連続的にモニタリングする。水酸化ナトリウム(50%水溶液)などの塩基を、反応容器にゆっくり加え、温度を約60で一定に保つ。反応溶液のpH値を測定し、約7.5より上で一定に保つ。反応温度を約85に上げ、約5時間にわたって一定に保つ。

10

【0072】

別の例として、ポリエチレンジアミンなどのポリアルキレンジアミンおよび3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリドなどの置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩を、機械攪拌器、温度計、温度制御装置、冷却器、および添加漏斗を備えた反応容器に加えることができる。反応混合物を攪拌し、穏やかに約60に加熱する。反応のpH値を、連続的にモニタリングする。水酸化ナトリウム(50%水溶液)などの塩基を、反応容器にゆっくり加え、温度を約60で一定に保つ。反応溶液のpH値を測定し、約7.5より上で一定に保つ。反応温度を約85に上げ、約5時間にわたって一定に保つ。

20

【0073】

本明細書に記載のポリマー塩は、一般にランダムポリマーであり、ポリアミン、ポリアルキレンジアミン、および置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩から誘導される構造単位の正確な順序は予め決められていない。

【0074】

ポリマー塩は、一般に、ポリマーに化学的に組み込まれていない成分も含み得る混合物の反応生成物である。ポリマーに組み込まれることを意図しない追加の成分を混合物中に含むそれらの反応生成物については、かかる追加の成分は、典型的には溶媒、pH調整剤、緩衝剤、および/または当業者に既知の他の成分を含む。

【0075】

本明細書に記載のカチオン性ポリマー塩は、カチオン性界面活性剤として使用することができ、従来の洗浄剤および他の配合物において従来の四級アンモニウムカチオン性界面活性剤の代わりに使用することができる。

30

【0076】

いくつかの実施形態では、本明細書に記載のカチオン性ポリマー塩の重量平均分子量は、ゲル浸透クロマトグラフィーによって測定して、約200 g/mol ~ 約1,000,000 g/molの範囲であり得る。いくつかの実施形態では、ポリマー塩の重量平均分子量は、約500 g/mol ~ 約100,000 g/mol、約500 g/mol ~ 約50,000 g/mol、約500 g/mol ~ 約40,000 g/mol、約500 g/mol ~ 約30,000 g/mol、約5,000 g/mol ~ 約30,000 g/mol、約10,000 g/mol ~ 約30,000 g/mol、約500 g/mol ~ 約20,000 g/mol、約500 g/mol ~ 約10,000 g/mol、または約500 g/mol ~ 約5,000 g/molであり得る。

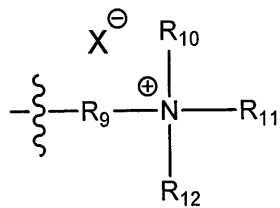
40

【0077】

いくつかの実施形態では、組成物を表面またはプロセス水に添加することを含む、表面上またはプロセス水中の微生物を制御するための方法が提供される。組成物は、上に示される式IIIのカチオン性ポリマーを含んでもよく、式中、各 R_6 は、独立して、 $C_2 \sim C_6$ アルキレンであってもよく、各 R_7 は、独立して、水素、 $-R_8$ 、 $-R_6-N(R_8)_2$ 、 $-R_6-N(R_8)-R_6-N(R_8)_2$ 、または $-R_6-N-(R_6-N(R_8)_2)_2$

50

であってもよく、各 R_8 は、独立して、水素または
【化 20】

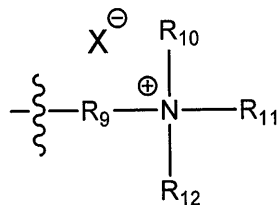


であってもよく、各 R_9 は、独立して、ヒドロキシルまたは $-OR_{13}$ 置換された $C_2 \sim C_6$ アルキレンであってもよく、 R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_{13} は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであってもよく、 n は、 $1 \sim 100$ の整数であってもよく、各 X^- は、独立して、アニオンであってもよい。

【0078】

他の実施形態では、組成物を表面またはプロセス水に添加することを含む、表面上またはプロセス水中の微生物を制御するための方法が提供される。組成物は、上に示される式 III のカチオン性ポリマーを含んでもよく、式中、各 R_6 は、 C_2 アルキレンであってもよく、各 R_7 は、独立して、水素、 $-R_8$ 、 $-R_6-N(R_8)_2$ 、 $-R_6-N(R_8)-R_6-N(R_8)_2$ 、または $-R_6-N-(R_6-N(R_8)_2)_2$ であってもよく、各 R_8 は、独立して、水素または

【化 21】



であってもよく、各 R_9 は、独立して、ヒドロキシルまたは $-OR_{13}$ 置換された $C_2 \sim C_6$ アルキレンであってもよく、 R_{10} 、 R_{11} 、および R_{12} は、各々独立して、 $C_1 \sim C_{22}$ アルキルまたは $C_7 \sim C_{22}$ アリールアルキルであり、 R_{13} は、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであってもよく、 n は、 $1 \sim 100$ の整数であってもよく、各 X^- は、独立して、アニオンであってもよい。

【0079】

ある特定の実施形態では、組成物は、異なるカチオンポリマー塩の混合物を含み得る。いくつかの実施形態では、抗菌性組成物が提供される。抗菌性組成物は、式 (III) のカチオン性ポリマー塩および水性担体を含み得る。

【0080】

適切な担体としては、水、アルコール、芳香族炭化水素、アルキレングリコール、アルキレングリコールアルキルエーテル、またはそれらの組み合わせを挙げることができるが、これらに限定されない。例えば、適切な担体としては、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール、イソブタノール、モノエチレングリコール、エチレングリコールモノブチルエーテル、またはそれらの組み合わせが挙げられる。

【0081】

いくつかの実施形態では、表面またはプロセス水に添加される組成物は、化合物 1、化合物 2、化合物 3、または化合物 4 などのカチオン性ポリマー塩を含み得る。

10

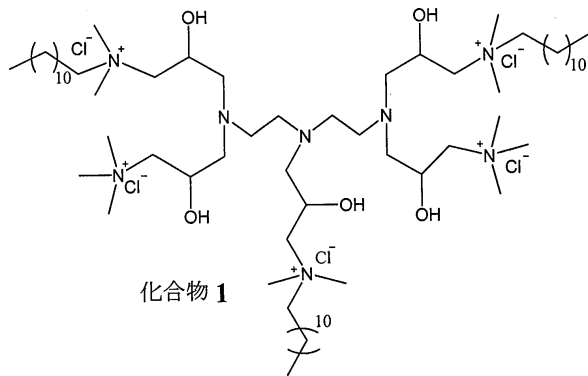
20

30

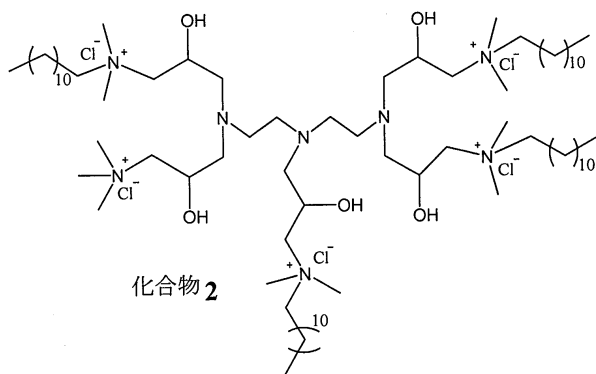
40

50

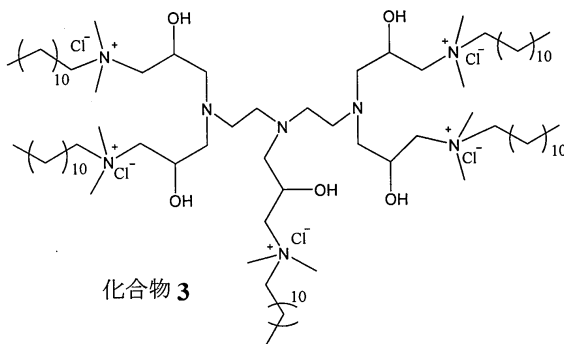
【化 2 2】



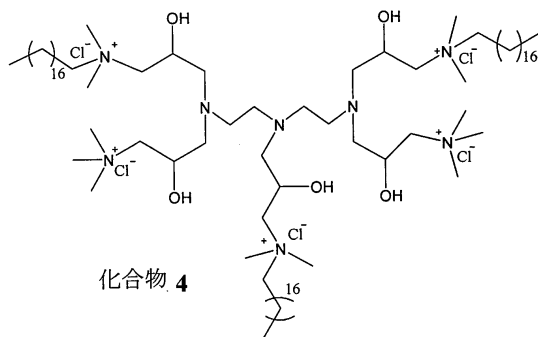
10



20



30



40

【0082】

いくつかの実施形態では、表面または処理水に添加される組成物は、化合物 1 を含む得る。化合物 1 は、5 つの四級アミン基を含み、5 つのうち 4 つは、飽和 C₁₂ アルキル基を含む。

【0083】

ある特定の実施形態では、組成物は、殺生物剤、担体、および化合物 1、化合物 2、化合物 3、化合物 4、化合物 5、化合物 6、化合物 7、化合物 8、化合物 9、化合物 10、化合物 11、化合物 12、化合物 13、またはそれらの任意の組み合わせから選択されるカチオン性ポリマー塩を含む。ある特定の実施形態では、組成物は、殺生物剤、担体、お

50

よび化合物 14、化合物 15、または化合物 16 から選択されるカチオン性ポリマー塩を含む。いくつかの実施形態では、組成物は、式 I I I のカチオン性ポリマー塩からなり得る。いくつかの実施形態では、組成物は、式 I I I のカチオン性ポリマー塩および水からなり得る。いくつかの実施形態では、組成物は、式 I I I のカチオン性ポリマー塩、水、および殺生物剤からなり得る。

【0084】

使用に適した殺生物剤は、酸化または非酸化殺生物剤であり得る。酸化殺生物剤としては、漂白剤、塩素、臭素、二酸化塩素、ならびに塩素および臭素を放出することができる材料が挙げられるが、これらに限定されない。非酸化殺生物剤としては、グルタルアルデヒド、イソチアゾリン、2,2-ジブromo-3-ニトリロプロピオンアミド、2-bromo-2-ニトリロプロpan-1,3ジオール、1-bromo-1-(bromoメチル)-1,3-プロpanジカルボニトリル、テトラクロロイソフタロニトリル、アルキルジメチルベンジルアンモニウムクロリド、ジメチルジアルキルアンモニウムクロリド、ジデシルジメチルアンモニウムクロリド、ポリ(オキシエチレン(ジメチルイミノ)エチレン(ジメチルイミノ)エチレンジクロリド、メチレンビスチオシアネート、2-デシルチオエタンアミン、テトラキスヒドロキシメチルホスホニウムサルフェート、ジチオカルバメート、シアノジチオイミドカルボネート、2-メチル-5-ニトリイミダゾール-1-エタノール、2-(2-bromo-2-ニトリエチニル)フラン、-bromo--ニトロスチレン、-ニトロスチレン、-ニトロビニルフラン、2-bromo-2-プロモメチルグルタロニトリル、ビス(トリクロロメチル)スルホン、S-(2-ヒドロキシプロピル)チオメタンスルホネート、テトラヒドロ-3,5-ジメチル-2H-1,3,5-ヒドラジン-2-チオン、2-(チオシアノメチルチオ)ベンゾチアゾール、2-bromo-4-ヒドロキシアセトフェノン、1,4-ビス(プロモアセトキシ)-2-ブテン、ビス(トリブチルスズ)オキシド、2-(tert-ブチルアミノ)-4-クロロ-6-(エチルアミノ)-s-トリアジン、ドデシルグアニジンアセテート、ドデシルグアニジンヒドロクロリド、ココアルキルジメチルアミンオキシド、n-ココアルキルトリメチレンジアミン、テトラ-アルキルホスホニウムクロリド、7-オキサビシクロ[2.2.1]ヘプタン-2,3-ジカルボン酸、4,5-ジクロロ-2-n-オクチル-4-イソチアゾリン-3-オン、5-クロロ-2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オン、および2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オンが挙げられるが、これらに限定されない。

【0085】

他の実施形態では、工業用水システムにおける金属の腐食を低減するために必要なときに、腐食抑制剤を添加することができる。多金属保護のための腐食抑制剤は、典型的には、限定されないが、ベンゾトリアゾール、ハロゲン化トリアゾール、およびニトロ置換アゾールなどのトリアゾールである。

【0086】

いくつかの実施形態では、分散剤を添加して、工業用水システムの水中に存在する粒子状物質を分散させることができ、それにより洗浄および消毒プロセス中に凝集して汚損を引き起こさないようにする。ポリマー分散剤は、アクリル酸、ポリマレイン酸、アクリル酸とスルホン化モノマーとのコポリマー、およびそれらのアルキルエステルであり得る。これらのポリマーは、アクリル酸、アクリルアミド、およびスルホン化モノマーのターポリマーを含み得る。これらのポリマーはまた、アクリル酸および他の3つのモノマーからなる四級物ポリマーを含み得る。

【0087】

他の実施形態では、プロセス水または表面に式 I I I のカチオン性ポリマー塩を含む組成物を添加することによって、プロセス水中または表面上の微生物を抑制するための方法が提供される。他の実施形態では、本方法は、式 I I I のカチオン性ポリマー塩を含む組成物を、表面またはプロセス水に添加することを含みことができ、式中、nは、1より大きく、各R₇は、独立して、水素、-R₈、-R₆-N(R₈)₂、-R₆-N(R₈)-R₆-N(R₈)₂、または-R₆-N-(R₆-N(R₈)₂)₂であり得る。カチオン

性ポリマー塩は、水性組成物としてまたは乾燥粉末として表面または処理水に添加することができる。カチオン性ポリマー塩は、連続的に添加されてもよく、またはより多くの抗菌活性が必要とされ得る場合には、間欠的に添加されてもよい。

【 0 0 8 8 】

他の実施形態では、組成物中のカチオン性ポリマー塩は、化合物 1、化合物 2、化合物 3、化合物 4、化合物 5、化合物 6、化合物 7、化合物 8、化合物 9、化合物 10、化合物 11、化合物 12、化合物 13、化合物 14、化合物 15、またはそれらの任意の組み合わせであってもよい。化合物 5 ~ 13 の化学構造は、以下の実施例に示される。

【 0 0 8 9 】

いくつかの実施形態では、カチオン性ポリマー塩は、約 1 p p m から約 1 0 0 0 p p m の範囲の量でプロセス水に添加されてもよい。他の実施形態では、プロセス水中の添加されたカチオン性ポリマー塩の量は、約 5 p p m ~ 約 1 0 0 p p m、約 5 p p m ~ 約 5 0 p p m、約 5 p p m ~ 約 4 0 p p m、約 5 p p m ~ 約 3 0 p p m、約 1 0 p p m ~ 約 6 0 p p m、約 1 0 p p m ~ 約 5 0 p p m、約 1 0 p p m ~ 約 4 0 p p m、約 1 0 p p m ~ 約 3 0 p p m、約 2 0 p p m ~ 約 6 0 p p m、約 2 0 p p m ~ 約 5 0 p p m、約 2 0 p p m ~ 約 4 0 p p m、または約 2 0 p p m ~ 約 3 0 p p m の範囲であり得る。いくつかの実施形態では、カチオン性ポリマー塩は、約 1 0 0 p p m ~ 約 1 0 0 0、約 1 2 5 ~ 約 1 0 0 0、約 2 5 0 ~ 約 1 0 0 0、または約 5 0 0 ~ 約 1 0 0 0 の範囲の量までプロセス水に添加されてもよい。

【 0 0 9 0 】

いくつかの実施形態では、この方法を使用して、任意の工業用水システムにおいて表面またはプロセス水を洗浄および消毒することができる。これらの工業用水システムとしては、開放再循環システムを含む冷却水システム、閉鎖式および貫流式冷却水システム、ボイラーおよびボイラー水システム、石油井戸システム、坑井内地層、地熱井および他の油田用途、ミネラル洗浄システム、浮遊選鉱システム、製紙工場の蒸解缶、洗濯機、漂白プラント、ストックチェスト、白水システム、製紙機械の表面、パルプ業界の黒液蒸発器、ガススクラバーおよびエアウォッシャー、冶金業界の連続鑄造プロセス、空調および冷凍システム、工業用および石油プロセス用水、間接接触冷却および加熱用水、水再生システム、浄水システム、膜ろ過水システム、食品加工用ストリーム（肉、野菜、テンサイ、サトウキビ、穀物、家禽、果物、および大豆）、廃棄物処理システム、浄化剤、固液処理、地方自治体下水処理、都市水道システム、飲料水システム、帯水層、貯水タンク、スプリンクラーシステム、ならびに給湯器を挙げることができるが、これらに限定されない。

【 0 0 9 1 】

いくつかの実施形態では、工業用水システムは、開放再循環式を含む冷却水システム、閉鎖式および貫流式冷却水システム、製紙機械の表面、食品加工ストリーム、廃棄物処理システム、および飲料水システムであり得る。

【 0 0 9 2 】

なおもさらなる実施形態では、プロセス水を処理する方法は、プロセス水中の孢子または好熱菌を組成物と接触させるステップを含み得る。組成物は、孢子または好熱菌を部分的に不活性化するか、または殺すことができる。他の実施形態では、この方法は、プロセス水中の細菌を組成物と接触させるステップを含み得る。組成物は、プロセス水中の細菌を殺すか、または細菌もしくは微生物を部分的に殺すことができる。

【 0 0 9 3 】

別の実施形態では、この方法で使用される組成物は、殺生物剤を含み得る。殺生物剤は、上に列挙したもののいずれかまたは他の既知の薬剤であり得る。組成物中の殺生物剤の量は、プロセス中の微生物を適切に制御するのに有効な量であり得る。

【 0 0 9 4 】

本発明の別の態様は、表面での腐食を抑制するための組成物である。組成物は、本明細書に記載のカチオン性ポリマー塩と、有機溶媒、腐食抑制剤、有機硫黄化合物、アスファルテン抑制剤、パラフィン抑制剤、スケール抑制剤、乳化剤、水浄化剤、分散剤、エマル

10

20

30

40

50

ジョン破壊剤、ガスハイドレート抑制剤、殺生物剤、pH調整剤、界面活性剤、またはそれらの組み合わせを含む成分とを含む。

【0095】

組成物は、例えば、約0.1～約20重量%の1種以上のカチオン性ポリマー塩および約80～約99.9重量%の成分；約0.1～約20重量%の1種以上のカチオン性ポリマー塩、約1～約60重量%の成分、および約20～約98.9重量%の水；約10～約20重量%の1種以上のカチオン性ポリマー塩、約30～約40重量%の成分、および約40～約60重量%の水；または約15～約20重量%の1種以上のカチオン性ポリマー塩、約1～約10重量%の成分、および約70～約84重量%の水を含み得る。

【0096】

組成物の成分は、有機溶媒を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約1～80重量%、約5～50重量%、または約10～35重量%の1種以上の有機溶媒を含み得る。有機溶媒は、アルコール、炭化水素、ケトン、エーテル、アルキレングリコール、グリコールエーテル、アミド、ニトリル、スルホキシド、エステル、またはそれらの組み合わせを含み得る。適切な有機溶媒の例としては、メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ブタノール、2-エチルヘキサノール、ヘキサノール、オクタノール、デカノール、2-ブトキシエタノール、メチレングリコール、エチレングリコール、1,2-プロピレングリコール、1,3-プロピレングリコール、ジエチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノブチルエーテル、エチレングリコールジブチルエーテル、ペンタン、ヘキサン、シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、ヘプタン、デカン、ドデカン、ディーゼル、トルエン、キシレン、重芳香族ナフサ、シクロヘキサノン、ジイソブチルケトン、ジエチルエーテル、プロピレンカーボネート、N-メチルピロリジノン、N,N-ジメチルホルムアミド、またはそれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。

【0097】

成分に加えて、組成物は、水を含むことができる。

【0098】

組成物の成分は、1種以上のカチオン性ポリマー塩に加えて腐食抑制剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1～20重量%、0.1～10重量%、または0.1～5重量%の1種以上の追加の腐食抑制剤を含み得る。本発明の組成物は、組成物の総重量に基づいて、0～10重量パーセントの1種以上の追加の腐食抑制剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、1.0重量%、1.5重量%、2.0重量%、2.5重量%、3.0重量%、3.5重量%、4.0重量%、4.5重量%、5.0重量%、5.5重量%、6.0重量%、6.5重量%、7.0重量%、7.5重量%、8.0重量%、8.5重量%、9.0重量%、9.5重量%、10.0重量%、10.5重量%、11.0重量%、11.5重量%、12.0重量%、12.5重量%、13.0重量%、13.5重量%、14.0重量%、14.5重量%、または15.0重量%の1種以上の追加の腐食抑制剤を含み得る。各システムはそれ自体の要件を有することができ、組成物中の1種以上の追加の腐食抑制剤の重量パーセントは、それが使用されるシステムによって変更することができる。

【0099】

1種以上の追加の腐食抑制剤は、イミダゾリン化合物、四級アンモニウム化合物、ピリジニウム化合物、またはそれらの組み合わせを含み得る。

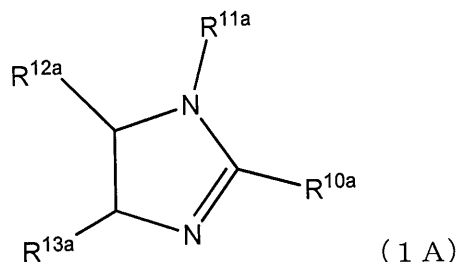
【0100】

1種以上の追加の腐食抑制剤成分は、イミダゾリンを含み得る。イミダゾリンは、例えば、エチレンジアミン(EDA)などのジアミン、ジエチレントリアミン(DETA)、トリエチレントトラアミン(TETA)等、およびトール油脂肪酸(TOFA)などの長鎖脂肪酸から誘導されるイミダゾリンであり得る。イミダゾリンは、式(1A)のイミダゾリンまたはイミダゾリン誘導体であり得る。代表的なイミダゾリン誘導体としては、式(2A)のイミダゾリニウム化合物または式(3A)のビス四級化合物が挙げられる。

【 0 1 0 1 】

1 種以上の追加の腐食抑制剤成分は、式 (1 A) のイミダゾリンを含み得、

【 化 2 3 】



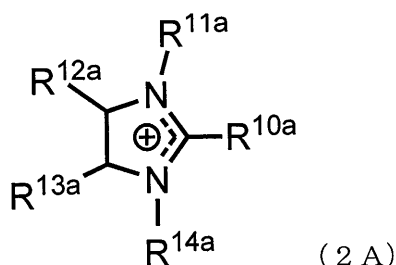
10

式中、 R^{10a} は、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基または $C_1 \sim C_{20}$ アルコシアルキル基であり、 R^{11a} は、水素、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ヒドロシアルキル、または $C_1 \sim C_6$ アリールアルキルであり、 R^{12a} および R^{13a} は、独立して、水素または $C_1 \sim C_6$ アルキル基である。好ましくは、イミダゾリンは、トール油脂肪酸 (T O F A) に典型的なアルキル混合物である R^{10a} を含み、 R^{11a} 、 R^{12a} 、および R^{13a} は、各々水素である。

【 0 1 0 2 】

1 種以上の追加の腐食抑制剤成分は、式 (2 A) のイミダゾリン化合物を含み得、

【 化 2 4 】



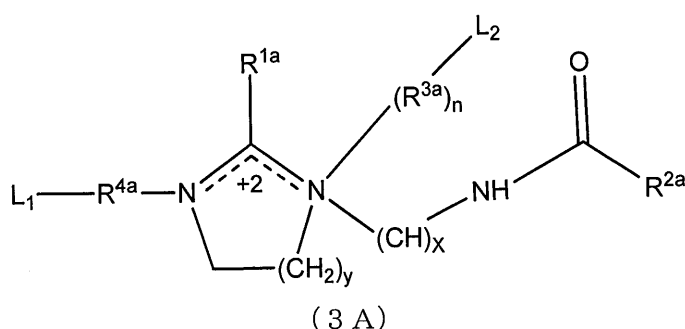
30

式中、 R^{10a} は、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基または $C_1 \sim C_{20}$ アルコシアルキル基であり、 R^{11a} および R^{14a} は、独立して、水素、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、 $C_1 \sim C_6$ ヒドロシアルキル、または $C_1 \sim C_6$ アリールアルキルであり、 R^{12a} および R^{13a} は、独立して、水素または $C_1 \sim C_6$ アルキル基であり、 X^- は、ハロゲン化物 (塩化物、臭化物、ヨウ化物など)、炭酸塩、スルホン酸塩、リン酸塩、または有機カルボン酸 (酢酸塩など) のアニオンである。好ましくは、イミダゾリニウム化合物は、1 - ベンジル - 1 - (2 - ヒドロキシエチル) - 2 - トール油 - 2 - イミダゾリニウムクロリドを含む。

【 0 1 0 3 】

1 種以上の追加の腐食抑制剤は、式 (3 A) を有するビス四級化化合物を含み得、

【 化 2 5 】



40

50

式中：

R^{1a} および R^{2a} は、各々独立して、1～約29個の炭素原子を有する、非置換の分岐鎖、鎖状、もしくは環式アルキルもしくはアルケニル；1～約29個の炭素原子を有する部分的もしくは完全に酸素化、硫化、および/もしくはリン酸化された分岐鎖、鎖状、もしくは環式アルキルもしくはアルケニル；またはそれらの組み合わせであり、

R^{3a} および R^{4a} は、各々独立して、1～約29個の炭素原子を有する、非置換の分岐鎖、鎖状、もしくは環式アルキレンもしくはアルケニレン；1～約29個の炭素原子を有する部分的もしくは完全に酸素化、硫化、および/もしくはリン酸化された分岐鎖、鎖状、もしくは環式アルキレンもしくはアルケニレン；またはそれらの組み合わせであり、

L_1 および L_2 は、各々独立して、存在しないか、H、 $-COOH$ 、 $-SO_3H$ 、 $-PO_3H_2$ 、 $-COOR^{5a}$ 、 $-CONH_2$ 、 $-CONHR^{5a}$ 、または $-CON(R^{5a})_2$ であり、

R^{5a} は、各々独立して、1～約10個の炭素原子を有する分岐または非分岐アルキル、アリール、アルキルアリール、アルキルヘテロアリール、シクロアルキル、またはヘテロアリール基であり、

n は、0または1であり、 n が0のとき、 L_2 は存在しないか、またはHであり、

x は、1～約10であり、

y は、1～約5である。好ましくは、 R^{1a} および R^{2a} は、それぞれ独立して、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキル、 $C_8 \sim C_{20}$ アルキル、 $C_{12} \sim C_{18}$ アルキル、 $C_{16} \sim C_{18}$ アルキル、もしくはそれらの組み合わせであり、 R^{3a} および R^{4a} は、 $C_1 \sim C_{10}$ アルキレン、 $C_2 \sim C_8$ アルキレン、 $C_2 \sim C_6$ アルキレン、または $C_2 \sim C_3$ アルキレンであり、 n は0もしくは1であり、 x は2であり、 y は1であり、 R_3 および R_4 は $-C_2H_2-$ であり、 L_1 は $-COOH$ 、 $-SO_3H$ 、もしくは $-PO_3H_2$ であり、 L_2 は存在しないか、H、 $-COOH$ 、 $-SO_3H$ 、もしくは $-PO_3H_2$ である。例えば、 R^{1a} および R^{2a} は、トール油脂肪酸の混合物から誘導することができ、主として $C_{17}H_{33}$ および $C_{17}H_{31}$ の混合物であるか、または $C_{16} \sim C_{18}$ アルキルであり得； R^{3a} および R^{4a} は、 $C_2 \sim C_3$ アルキレン、例えば $-C_2H_2-$ であり得； n は、1であり、かつ L_2 は、 $-COOH$ であるか、または n は、0であり、かつ L_2 は、存在しないかもしくはHであり； x は2であり； y は1であり； R^{3a} および R^{4a} は、 $-C_2H_2$ であり； L_1 は、 $-COOH$ である。

【0104】

式(3A)の各基について特定される炭素原子の数は、炭素原子の主鎖を指し、置換基によって寄与され得る炭素原子を含まないことを理解されたい。

【0105】

1種以上の追加の腐食抑制剤は、式(3A)を有するビス四級化イミダゾリン化合物を含むことができ、式中、 R^{1a} および R^{2a} は、各々独立して、 $C_6 \sim C_{22}$ アルキル、 $C_8 \sim C_{20}$ アルキル、 $C_{12} \sim C_{18}$ アルキルであるか、または $C_{16} \sim C_{18}$ アルキルもしくはそれらの組み合わせであり； R^{4a} は、 $C_1 \sim C_{10}$ アルキレン、 $C_2 \sim C_8$ アルキレン、 $C_2 \sim C_6$ アルキレン、もしくは $C_2 \sim C_3$ アルキレンであり； x は、2であり； y は、1であり； n は、0であり； L_1 は、 $-COOH$ 、 $-SO_3H$ 、または $-PO_3H_2$ であり、 L_2 は、存在しないか、またはHである。好ましくは、ビス-四級化化合物は、式(3A)を有し、式中、 R^{1a} および R^{2a} は、各々独立して、 $C_{16} \sim C_{18}$ アルキルであり； R^{4a} は、 $-C_2H_2-$ であり； x は、2であり； y は、1であり； n は、0であり； L_1 は、 $-COOH$ 、 $-SO_3H$ 、または $-PO_3H_2$ であり、 L_2 は、存在しないかまたはHである。

【0106】

1種以上の追加の腐食抑制剤は、式(4A)の四級アンモニウム化合物を含み得、

10

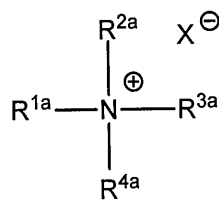
20

30

40

50

【化 2 6】



(4 A)

式中、 R^{1a} 、 R^{2a} 、および R^{3a} は、独立して、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキルであり、 R^{4a} は、メチルまたはベンジルであり、 X^- は、ハロゲン化物またはメトサルフェートである。

【0107】

適切なアルキル、ヒドロキシアリル、アルキルアリール、アリールアルキル、またはアリールアミンの四級塩は、式 $[N^+ R^{5a} R^{6a} R^{7a} R^{8a}] [X^-]$ のアルキルアリール、アリールアルキル、およびアリールアミンの四級塩を含み、式中、 R^{5a} 、 R^{6a} 、 R^{7a} および R^{8a} は、1～18個の炭素原子を含有し、 X は、Cl、Br、またはIである。四級塩の場合、 R^{5a} 、 R^{6a} 、 R^{7a} および R^{8a} は、各々独立して、アルキル（例えば、 $C_1 \sim C_{18}$ アルキル）、ヒドロキシアリル（例えば、 $C_1 \sim C_{18}$ ヒドロキシアリル）、およびアリールアルキル（例えば、ベンジル）であり得る。アルキルまたはアルキルアリールハロゲン化物との単環式または多環式芳香族アミン塩は、式 $[N^+ R^{5a} R^{6a} R^{7a} R^{8a}] [X^-]$ の塩を含み、式中、 R^{5a} 、 R^{6a} 、 R^{7a} 、および R^{8a} は、1～18個の炭素原子および少なくとも1つのアリール基を含有し、 X は、Cl、Br、またはIである。

【0108】

適切な四級アンモニウム塩としては、テトラメチルアンモニウム塩、テトラエチルアンモニウム塩、テトラプロピルアンモニウム塩、テトラブチルアンモニウム塩、テトラヘキシルアンモニウム塩、テトラオクチルアンモニウム塩、ベンジルトリメチルアンモニウム塩、ベンジルトリエチルアンモニウム塩、フェニルトリメチルアンモニウム塩、フェニルトリエチルアンモニウム塩、セチルベンジルジメチルアンモニウム塩、ヘキサデシルトリメチルアンモニウム塩、ジメチルアルキルベンジル四級アンモニウム塩、モノメチルジアルキルベンジル四級アンモニウム塩、またはトリアルキルベンジル四級アンモニウム塩（上記のアルキル基は、約6～約24個の炭素原子、約10～約18個の炭素原子、または約12～約16個の炭素原子を有する）を挙げることができるが、これらに限定されない。四級アンモニウム塩は、ベンジルトリアルキル四級アンモニウム塩、ベンジルトリエタノールアミン四級アンモニウム塩、またはベンジルジメチルアミノエタノールアミン四級アンモニウム塩であり得る。

【0109】

1種以上の追加の腐食抑制剤成分は、式(5A)で表されるものなどのピリジニウム塩を含み得、

10

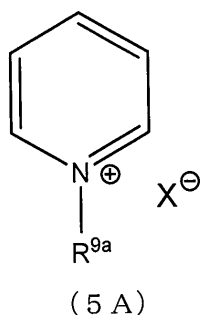
20

30

40

50

【化 2 7】



10

式中、 R^{9a} は、アルキル基、アリール基、またはアリールアルキル基であり、当該アルキル基は、1～約18個の炭素原子を有し、 X^- は、塩化物、臭化物、またはヨウ化物などのハロゲン化物である。これらの化合物の中には、アルキルピリジニウム塩およびアルキルピリジニウムベンジル四級物がある。例示的な化合物としては、メチルピリジニウムクロリド、エチルピリジニウムクロリド、プロピルピリジニウムクロリド、ブチルピリジニウムクロリド、オクチルピリジニウムクロリド、デシルピリジニウムクロリド、ラウリルピリジニウムクロリド、セチルピリジニウムクロリド、ベンジルピリジニウムクロリド、およびアルキルベンジルピリジニウムクロリドが挙げられ、好ましくは、アルキルは、 $C_1 \sim C_6$ ヒドロカルビル基である。好ましくは、ピリジニウム化合物は、ベンジルピリジニウムクロリドを含む。

20

【0110】

1種以上の追加の腐食抑制剤成分は、リン酸エステル、モノマーもしくはオリゴマー脂肪酸、またはアルコキシル化アミンなどの追加の腐食抑制剤を含み得る。

【0111】

1種以上の追加の腐食抑制剤成分は、リン酸エステルを含み得る。適切なモノ -、ジ -、およびトリ - アルキル、ならびにモノ -、ジ - および、トリエタノールアミンのアルキルアリールリン酸エステル、およびリン酸エステルは、典型的には1～約18個の炭素原子を含有する。好ましいモノ -、ジ -、およびトリアルキルリン酸エステル、アルキルアリール、またはアリールアルキルリン酸エステルは、 $C_3 \sim C_{18}$ 脂肪族アルコールを五酸化リンと反応させることによって調製されるものである。リン酸エステル中間体は、そのエステル基をトリエチルホスフェートと交換して、より広い分布のアルキルリン酸エステルを生成する。

30

【0112】

あるいは、リン酸エステルは、アルキルジエステルを、低分子量アルキルアルコールまたはジオールの混合物と混和することによって作製され得る。低分子量アルキルアルコールまたはジオールは、好ましくは $C_6 \sim C_{10}$ アルコールまたはジオールを含む。さらに、1つ以上の2 - ヒドロキシエチル基を含有するポリオールのリン酸エステルおよびそれらの塩、ならびにポリリン酸または五酸化リンをジエタノールアミンまたはトリエタノールアミンなどのヒドロキシルアミンと反応させることによって得られるヒドロキシルアミンリン酸エステルが好ましい。

40

【0113】

1種以上の追加の腐食抑制剤成分は、モノマーまたはオリゴマー脂肪酸を含み得る。好ましいモノマーまたはオリゴマー脂肪酸は、 $C_{14} \sim C_{22}$ 飽和および不飽和脂肪酸、ならびにそのような脂肪酸のうちの1つ以上を重合することによって得られるダイマー、トリマー、およびオリゴマー生成物である。

【0114】

1種以上の追加の腐食抑制剤成分は、アルコキシル化アミンを含み得る。アルコキシル化アミンは、エトキシル化アルキルアミンであり得る。アルコキシル化アミンは、エトキシル化獣脂アミンであり得る。

50

【 0 1 1 5 】

組成物の成分は、有機硫黄化合物、例えばメルカプトアルキルアルコール、メルカプト酢酸、チオグリコール酸、3,3 - ジチオジプロピオン酸、チオ硫酸ナトリウム、チオ尿素、L - システイン、tert - ブチルメルカプタン、チオ硫酸ナトリウム、チオ硫酸アンモニウム、チオシアン酸ナトリウム、チオシアン酸アンモニウム、メタ重亜硫酸ナトリウム、またはそれらの組み合わせを含み得る。好ましくは、メルカプトアルキルアルコールは、2 - メルカプトエタノールを含む。かかる化合物は、組成物中で相乗剤として使用される。有機硫黄化合物は、組成物の総重量に基づいて、組成物の0.5 ~ 15重量%、好ましくは約1 ~ 約10重量%、より好ましくは約1 ~ 約5重量%を構成し得る。有機硫黄化合物は、組成物の1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、または15重量%を構成し得る。

10

【 0 1 1 6 】

組成物の成分は、抗乳化剤をさらに含み得る。好ましくは、抗乳化剤は、ポリアルキレングリコールなどのオキシアルキレートポリマーを含む。抗乳化剤は、組成物の総重量に基づいて、組成物の約0.1 ~ 10重量%、約0.5 ~ 5重量%、または約0.5 ~ 4重量%を構成し得る。抗乳化剤は、組成物の0.5、1、1.5、2、2.5、3、3.5、4、4.5、または5重量%を構成し得る。

【 0 1 1 7 】

組成物の成分は、アスファルテン抑制剤を含むことができる。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1 ~ 10重量%、約0.1 ~ 5重量%、または約0.5 ~ 4重量%のアスファルテン抑制剤を含み得る。適切なアスファルテン抑制剤としては、脂肪族スルホン酸、アルキルアリールスルホン酸、アリールスルホネート、リグノスルホネート、アルキルフェノール / アルデヒド樹脂および類似のスルホン化樹脂、ポリオレフィンエステル、ポリオレフィンイミド、アルキル、アルキレンフェニルまたはアルキレンピリジル官能基を有するポリオレフィンエステル、ポリオレフィンアミド、アルキル、アルキレンフェニルまたはアルキレンピリジル官能基を有するポリオレフィンアミド、アルキル、アルキレンフェニルまたはアルキレンピリジル官能基を有するポリオレフィンイミド、アルケニル / ビニルピロリドンコポリマー、ポリオレフィンと無水マレイン酸またはビニルイミダゾールとのグラフトポリマー、超分岐ポリエステルアミド、ポリアルコキシ化アスファルテン、両性脂肪酸、コハク酸アルキルの塩、モノオレイン酸ソルビタン、およびポリイソブチレン無水コハク酸が挙げられるが、これらに限定されない。

20

30

【 0 1 1 8 】

組成物の成分は、パラフィン抑制剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1 ~ 10重量%、約0.1 ~ 5重量%、または約0.5 ~ 4重量%のパラフィン抑制剤を含み得る。適切なパラフィン抑制剤としては、パラフィン結晶改質剤、および分散剤 / 結晶改質剤の組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。適切なパラフィン結晶改質剤としては、アルキルアクリレートコポリマー、アルキルアクリレートビニルピリジンコポリマー、エチレン酢酸ビニルコポリマー、無水マレイン酸エステルコポリマー、分岐ポリエチレン、ナフタレン、アントラセン、マイクロクリスタリンワックス、および / またはアスファルテンが挙げられるが、これらに限定されない。適切なパラフィン分散剤としては、ドデシルベンゼンスルホネート、オキシアルキル化アルキルフェノール、およびオキシアルキル化アルキルフェノール樹脂が挙げられるが、これらに限定されない。

40

【 0 1 1 9 】

組成物の成分は、スケール抑制剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1 ~ 20重量%、約0.5 ~ 10重量%、または約1 ~ 10重量%のスケール抑制剤を含み得る。適切なスケール抑制剤としては、リン酸塩、リン酸エステル、リン酸、ホスホン酸エステル、ホスホン酸、ポリアクリルアミド、アクリルアミドメチルプロパンスルホネート / アクリル酸コポリマー (AMPSS / AA) の塩、リン酸化マレイン酸コポリマー (PHOS / MA)、およびポリマレイン酸 / アクリル酸 / アクリルアミドメチルプ

50

ロパンスルホネートターポリマー（PMA/A A/AMPS）の塩が挙げられるが、これらに限定されない。

【0120】

組成物の成分は、乳化剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1～10重量%、約0.5～5重量%、または約0.5～4重量%の乳化剤を含み得る。適切な乳化剤としては、カルボン酸の塩、カルボン酸またはカルボン酸無水物とアミンとの間のアシル化反応の生成物、ならびに糖のアルキル、アシル、およびアミド誘導体（アルキル-糖乳化剤）が挙げられるが、これらに限定されない。

【0121】

組成物の成分は、水浄化剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1～10重量%、約0.5～5重量%、または約0.5～4重量%の水浄化剤を含み得る。適切な水浄化剤としては、ミョウバン、塩化アルミニウム、およびアルミニウムクロロハイドレートなどの無機金属塩、またはアクリル酸系ポリマー、アクリルアミド系ポリマー、重合アミン、アルカノールアミン、チオカルバメート、およびジアリルジメチルアンモニウムクロリド（DADMAC）などのようなカチオン性ポリマーなどの有機ポリマーが挙げられるが、これらに限定されない。

10

【0122】

組成物の成分は、分散剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1～10重量%、約0.5～5重量%、または約0.5～4重量%の分散剤を含み得る。適切な分散剤としては、限定されないが、ヒドロキシエチルジホスホン酸などの2～50個の炭素を有する脂肪族ホスホン酸、およびアミノアルキルホスホン酸、例えば、2～10個のN原子を有するポリアミノメチレンホスホネート（例えば、各々が少なくとも1つのメチレンホスホン酸基を有する）が挙げられ、後者の例は、エチレンジアミンテトラ（メチレンホスホネート）、ジエチレントリアミンペンタ（メチレンホスホネート）、および各N原子間に2～4個のメチレン基を有し、各ホスホネートにおけるメチレン基の数の少なくとも2つが異なるトリアミン-およびテトラアミン-ポリメチレンホスホネートである。他の適切な分散剤としては、リグニン、またはリグノスルホネートなどのリグニンの誘導体、ならびにナフタレンスルホン酸および誘導体が挙げられる。

20

【0123】

組成物の成分は、エマルジョン破壊剤を含み得る。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1～10重量%、約0.5～5重量%、または約0.5～4重量%のエマルジョン破壊剤を含み得る。適切なエマルジョン破壊剤としては、ドデシルベンジルスルホン酸（DDBSA）、キシレンスルホン酸のナトリウム塩（NAXSA）、エポキシ化およびプロポキシ化化合物、アニオン性、カチオン性、および非イオン性界面活性剤、ならびにフェノールおよびエポキシ樹脂などの樹脂が挙げられるが、これらに限定されない。

30

【0124】

組成物の成分は、硫化水素捕捉剤を含むことができる。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約1～50重量%、約1～40重量%、または約1～30重量%の硫化水素捕捉剤を含み得る。適切な追加の硫化水素捕捉剤としては、酸化剤（例えば、過酸化ナトリウムまたは二酸化塩素などの無機過酸化物）、アルデヒド（例えば、ホルムアルデヒド、グリオキサール、グルタルアルデヒド、アクロレイン、またはメタクロレインなどの炭素数1～10のもの）、トリアジン（例えば、モノエタノールアミントリアジン、モノメチルアミントリアジン、および複数のアミンからのトリアジン、またはこれらの混合物）、二級または三級アミンとアルデヒドとの縮合生成物、ならびにアルキルアルコールとアルデヒドとの縮合生成物が挙げられるが、これらに限定されない。

40

【0125】

組成物の成分は、ガスハイドレート抑制剤を含むことができる。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約0.1～25重量%、約0.5～20重量%、または約1～10重量%のガスハイドレート抑制剤を含み得る。適切なガスハイドレート抑制剤としては、熱力学的ハイドレート抑制剤（THI）、動的ハイドレート抑制剤（KHI）、および凝集抑

50

制剤（ＡＡ）が挙げられるが、これらに限定されない。適切な熱力学的ハイドレート抑制剤としては、塩化ナトリウム、塩化カリウム、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、臭化ナトリウム、ギ酸塩ブライン（例えば、ギ酸カリウム）、ポリオール（グルコース、スクロース、フルクトース、マルトース、ラクトース、グルコネート、モノエチレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、モノプロピレングリコール、ジプロピレングリコール、トリプロピレングリコール、テトラプロピレングリコール、モノブチレングリコール、ジブチレングリコール、トリブチレングリコール、グリセロール、ジグリセロール、トリグリセロール、および糖アルコール（例えば、ソルビトール、マンニトール）など）、メタノール、プロパノール、エタノール、グリコールエーテル（ジエチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノブチルエーテルなど）、な

10

【 0 1 2 6 】

組成物の成分は、動的ハイドレート抑制剤を含むことができる。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約 0 . 1 ~ 2 5 重量 %、約 0 . 5 ~ 2 0 重量 %、または約 1 ~ 1 0 重量 % の動的ハイドレート抑制剤を含み得る。適切な動的ハイドレート抑制剤および凝集抑制剤としては、ポリマーおよびコポリマー、多糖類（ヒドロキシエチルセルロース（ＨＥＣ）、カルボキシメチルセルロース（ＣＭＣ）、デンプン、デンプン誘導体、およびキサンタンなど）、ラクタム（ポリビニルカプロラクタム、ポリビニルラクタムなど）、ピロリドン（種々の分子量のポリビニルピロリドンなど）、界面活性剤（脂肪酸塩、エトキシ

20

【 0 1 2 7 】

組成物の成分は、殺生物剤を含むことができる。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約 0 . 1 ~ 1 0 重量 %、約 0 . 5 ~ 5 重量 %、または約 0 . 5 ~ 4 重量 % の殺生物剤を含み得る。適切な殺生物剤としては、酸化性および非酸化性殺生物剤が挙げられるが、これらに限定されない。適切な非酸化殺生物剤としては、例えば、アルデヒド（例えば、ホルムアルデヒド、グルタルアルデヒド、およびアクロレイン）、アミン型化合物（例えば、四級アミン化合物およびココジアミン）、ハロゲン化合物（例えば、2 - ブロモ - 2 - ニトロプロパン - 3 - ジオール）（Bronopol）および 2 , 2 - ジブロモ - 3 - ニトリプロピオンアミド（DBNPA）、硫黄化合物（例えば、イソチアゾロン、カルバメート、およびメトロニダゾール）、ならびに四級ホスホニウム塩（例えば、テトラキス（ヒドロキシメチル） - ホスホニウムサルフェート（THPS））が挙げられる。適切な酸化殺生物剤としては、例えば、次亜塩素酸ナトリウム、トリクロロイソシアヌル酸、ジクロロイソシアヌル酸、次亜塩素酸カルシウム、次亜塩素酸リチウム、塩素化ヒダントイン、安定化次亜臭素酸ナトリウム、活性臭化ナトリウム、臭素化ヒダントイン、二酸化塩素、オゾン、および過酸化物が挙げられる。

30

40

【 0 1 2 8 】

組成物の成分は、pH 調整剤を含むことができる。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約 0 . 1 ~ 2 0 重量 %、約 0 . 5 ~ 1 0 重量 %、または約 0 . 5 ~ 5 重量 % の pH 調整剤を含み得る。適切な pH 調整剤は、アルカリ水酸化物、アルカリ炭酸塩、アルカリ重炭酸塩、アルカリ土類金属水酸化物、アルカリ土類金属炭酸塩、アルカリ土類金属重炭酸塩、およびこれらの混合物または組み合わせを含むが、これらに限定されない。例示的な pH 調整剤としては、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、水酸化カルシウム、酸化カルシウム、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウム、酸化マグネシウム、および水酸化マグネシウムが挙げられる。

50

【 0 1 2 9 】

組成物の成分は、界面活性剤を含むことができる。組成物は、組成物の総重量に基づいて、約 0 . 1 ~ 1 0 重量 %、約 0 . 5 ~ 5 重量 %、または約 0 . 5 ~ 4 重量 % の界面活性剤を含み得る。適切な界面活性剤としては、アニオン性界面活性剤および非イオン性界面活性剤が挙げられるが、これらに限定されない。アニオン性界面活性剤としては、アルキルアリールスルホネート、オレフィンスルホネート、パラフィンスルホネート、アルコールサルフェート、アルコールエーテルサルフェート、アルキルカルボキシレートおよびアルキルエーテルカルボキシレート、ならびにアルキルおよびエトキシ化アルキルリン酸エステル、ならびにモノおよびジアルキルスルホサクシネートおよびスルホサクシネートが挙げられる。非イオン性界面活性剤としては、アルコールアルコキシレート、アルキルフェノールアルコキシレート、エチレン、プロピレン、およびブチレンオキシドのブロックコポリマー、アルキルジメチルアミンオキシド、アルキルビス (2 - ヒドロキシエチル) アミンオキシド、アルキルアミドプロピルジメチルアミンオキシド、アルキルアミドプロピルビス (2 - ヒドロキシエチル) アミンオキシド、アルキルポリグルコシド、ポリアルコキシ化グリセリド、ソルビタンエステル、およびポリアルコキシ化ソルビタンエステル、ならびにアルコイルポリエチレングリコールエステルおよびジエステルが挙げられる。ベタインおよびスルタン (s u l t a n e) 、両性界面活性剤、例えばアルキルアンホアセテートおよびアンホジアセテート、アルキルアンホプロピオネートおよびアンホジプロピオネート、ならびにアルキルイミノジプロピオネートなども含まれる。

10

【 0 1 3 0 】

本発明に従って作製された腐食抑制剤組成物は、有益な性質を提供する追加の機能剤または添加剤をさらに含み得る。例えば、追加の薬剤または添加剤は、金属イオン封鎖剤、可溶化剤、潤滑剤、緩衝剤、洗浄剤、リンス助剤、保存剤、結合剤、増粘剤もしくは他の粘度調整剤、加工助剤、担体、水質調整剤、発泡抑制剤もしくは発泡剤、スレッシュホールド剤 (t h r e s h o l d a g e n t) もしくは系、審美的増強剤 (すなわち、染料、着臭剤、香料) 、または腐食抑制剤組成物を用いた配合に適した他の添加剤、およびこれらの混合物であり得る。追加の薬剤または添加剤は、製造されている特定の腐食抑制剤組成物および当業者が理解するであろうその意図された用途に従って変化するであろう。

20

【 0 1 3 1 】

あるいは、組成物は、追加の薬剤または添加剤のいずれも含有しなくてよい。

30

【 0 1 3 2 】

さらに、本発明の腐食抑制剤は、以下の成分を含む組成物に配合することができる。これらの配合物は、列挙された成分の範囲を含み、任意に追加の薬剤を含み得る。以下の表の値は、重量パーセントである。

40

50

【表 1】

成分	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
カチオン性ポリマー塩	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	10-20	10-20	10-20	10-20	10-20	0.1-20
有機溶媒	5-40	-	5-50	-	5-50	5-50	5-40	-	5-50	-	-	10-20
追加の腐食抑制剤	0.1-20	0.1-20	-	-	-	-	0.1-20	0.1-20	-	-	-	0.1-20
アスファルテン抑制剤	0.1-5	0.1-5	0.1-5	0.1-5	-	-	0.1-5	0.1-5	0.1-5	-	-	0.1-5
スケール抑制剤	1-10	1-10	1-10	1-10	1-10	-	1-10	1-10	1-10	1-10	-	1-10
ガスハイドレート抑制剤	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.1-25
殺生物剤	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	-
水	0.00	0-40	0-10	0-60	0-15	0-25	0.00	0-40	0-10	0-65	0-75	-

成分	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
カチオン性ポリマー塩	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	10-20	10-20	10-20	10-20	10-20	10-20
有機溶媒	-	10-20	-	10-35	10-35	-	10-15	-	-	10-35	10-35	-
追加の腐食抑制剤	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20	0.1-20
アスファルテン抑制剤	0.1-5	-	-	-	-	-	0.1-5	-	-	-	-	-
スケール抑制剤	1-10	1-10	-	-	1-10	-	1-10	1-10	-	-	-	1-10
ガスハイドレート抑制剤	0.1-25	0.1-25	0.1-25	-	-	-	0.1-25	0.1-25	0.1-25	-	0.1-25	-
殺生物剤	-	-	-	-	-	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	0.5-5	-	-
水	0-20	0-5	0-35	0-25	0-15	0-55	0.00	0-20	0-30	0-20	0.00	0-50

【0133】

本発明の別の態様は、表面での腐食を抑制する方法である。この方法は、以下のいずれかを含む。表面をカチオン性ポリマー塩と接触させて、表面上の腐食を抑制すること；カチオン性ポリマー塩と、有機溶媒、腐食抑制剤、有機硫黄化合物、アスファルテン抑制剤、パラフィン抑制剤、スケール抑制剤、乳化剤、水浄化剤、分散剤、エマルジョン破壊剤、ガスハイドレート抑制剤、殺生物剤、pH調整剤、界面活性剤、もしくはそれらの組み合わせを含む成分とを含む組成物と表面を接触させて、表面上の腐食を抑制すること；または化合物もしくは組成物を、表面に接触する流体に添加して、表面上の腐食を抑制すること。カチオン性ポリマー塩は、化合物1～15などの本明細書に記載のカチオン性ポリ

10

20

30

40

50

マー塩のうちの1つ以上であり得る。組成物は、本明細書に記載されるような任意の組成物であり得る。

【0134】

ポリマー塩／組成物は、例えば、ガス流または液体流を、本明細書に記載されるような有効量の化合物または組成物で処理することによって、油およびガス用途における腐食を抑制するために使用することができる。化合物および組成物は、表面での腐食を抑制することが望ましいあらゆる産業において使用され得る。

【0135】

ポリマー塩／組成物は、水システム、凝縮液／油システム／ガスシステム、またはそれらの任意の組み合わせにおいて使用することができる。例えば、ポリマー塩／組成物は、熱交換器表面上のスケールを制御するのに使用することができる。

10

【0136】

ポリマー塩／組成物を、生成されたガスまたは液体に適用するか、または原油もしくは天然ガスの生成、輸送、貯蔵、および／もしくは分離に使用することができる。

【0137】

ポリマー塩／組成物は、石炭火力発電所などの石炭火力プロセスで使用されるかまたは製造されるガス流に適用することができる。

【0138】

ポリマー塩／組成物は、廃水プロセス、農場、食肉処理場、埋め立て地、地方自治体廃水プラント、コークス用炭プロセス、またはバイオ燃料プロセスで製造または使用されるガスまたは液体に適用することができる。

20

【0139】

ポリマー塩／組成物が導入され得る流体は、水性媒体であり得る。水性媒体は、水、ガス、および任意に液体炭化水素を含み得る。

【0140】

ポリマー塩／組成物が導入され得る流体は、液体炭化水素であり得る。液体炭化水素は、原油、重油、加工残油、瀝青油、コークー油、コークー軽油、流動接触分解供給原料、軽油、ナフサ、流動触媒分解スラリー、ディーゼル燃料、燃料油、ジェット燃料、ガソリン、および灯油が挙げられるが、これらに限定されない任意の種類の液体炭化水素であり得る。

30

【0141】

流体またはガスは、精製された炭化水素生成物であり得る。

【0142】

ポリマー塩／組成物で処理された流体またはガスは、周囲温度または高温などの任意の選択された温度であり得る。流体（例えば、液体炭化水素）またはガスは、約40～約250の温度であり得る。流体またはガスは、-50～300、0～200、10～100、または20～90の温度であり得る。流体またはガスは、22、23、24、25、26、27、28、29、30、31、32、33、34、35、36、37、38、39、または40の温度であり得る。流体またはガスは、85、86、87、88、89、90、91、92、93、94、95、96、97、98、99、または100の温度であり得る。

40

【0143】

ポリマー塩／組成物は、様々なレベルの含水率で流体に添加することができる。例えば、含水率は、0%～100%体積／体積（v/v）、1%～80%v/v、または1%～60%v/vであり得る。流体は、様々なレベルの塩分を含有する水性媒体であり得る。流体は、0%～25%、約1%～24%、または約10%～25%重量／重量（w/w）の全溶解固形物（TDS）の塩分を有し得る。

【0144】

ポリマー塩／組成物が導入される流体またはガスは、多くの異なる種類の装置に収容さ

50

れおよび／またはそれに曝露され得る。例えば、流体またはガスは、石油および／またはガスパイプラインなどの、ある点から別の点へ流体またはガスを輸送する装置に収容することができる。装置は、パイプライン、分離容器、脱水装置、またはガスラインなどの石油および／またはガス精製所の一部であり得る。流体は、坑口などの、石油の抽出および／または生成に使用される装置に収容されおよび／またはそれに曝露され得る。装置は、石炭火力発電所の一部であり得る。装置は、スクラバー（例えば、湿式排煙脱硫装置、噴霧乾燥吸収装置、乾燥収着剤注入装置、噴霧塔、接触塔または気泡塔等）であり得る。装置は、貨物船、貯蔵船、貯蔵タンク、またはタンク、船、もしくは処理ユニットを接続するパイプラインであり得る。

【 0 1 4 5 】

10

ポリマー塩／組成物は、流体またはガスを通して確実に分散させるための任意の適切な方法によって流体またはガスに導入することができる。

【 0 1 4 6 】

炭化水素流体が表面に接触する前に、ポリマー塩／組成物を炭化水素流体に添加することができる。

【 0 1 4 7 】

ポリマー塩／組成物は、腐食抑制および／またはシュム除去が所望される点より上流のフローライン内の点で添加され得る。

【 0 1 4 8 】

例えば、ポリマー塩／組成物は、化学注入ポンプ、パイピングティー、注入器具、アトマイザー、クイル等の機械装置を使用して注入することができる。

20

【 0 1 4 9 】

本発明のポリマー塩／組成物は、用途および要件に応じて、１つまたは複数の追加の極性または非極性溶媒を用いてまたは用いずに導入することができる。

【 0 1 5 0 】

ポリマー塩／組成物は、アンピリカルラインを使用して、石油および／またはガスパイプラインに圧送することができる。毛管注入システムを使用して、ポリマー塩／組成物を選択された流体に送達することができる。

【 0 1 5 1 】

組成物が導入され得る流体は、水性媒体であり得る。水性媒体は、水、ガス、および任意に液体炭化水素を含み得る。ポリマー塩／組成物が導入され得る流体は、液体炭化水素であり得る。

30

【 0 1 5 2 】

ポリマー塩／組成物は、液体中に導入され、混合され得る。

【 0 1 5 3 】

ポリマー塩／組成物は、水溶液または非水溶液、混合物、またはスラリーとしてガス流に注入することができる。

【 0 1 5 4 】

流体またはガスは、ポリマー塩／組成物を含む吸収塔を通過することができる。

【 0 1 5 5 】

40

ポリマー塩／組成物を流体またはガスに適用して、任意の選択された濃度を提供することができる。実際には、ポリマー塩／組成物は、典型的には約 0 . 0 1 ~ 約 5 , 0 0 0 p p m の記載された化合物の有効処理用量を提供するためにフローラインに添加される。ポリマー塩／組成物を流体またはガスに適用して、1 0 0 万当たり約 1 部 (p p m) ~ 約 1 , 0 0 0 , 0 0 0 p p m 、1 0 0 万当たり約 1 部 (p p m) ~ 約 1 0 0 , 0 0 0 p p m 、または約 1 0 p p m ~ 約 7 5 , 0 0 0 p p m の活性物質濃度を提供することができる。ポリマー塩／組成物を流体に適用して、約 1 0 0 p p m ~ 約 1 0 , 0 0 0 p p m 、約 2 0 0 p p m ~ 約 8 , 0 0 0 p p m 、または約 5 0 0 p p m ~ 約 6 , 0 0 0 p p m の活性物質濃度を提供することができる。活性物質濃度は、式 (1) の化合物の濃度を意味する。

【 0 1 5 6 】

50

ポリマー塩 / 組成物を流体またはガスに適用して、0.1 ppm、0.5 ppm、1 ppm、2 ppm、5 ppm、10 ppm、20 ppm、100 ppm、200 ppm、500 ppm、または1,000の活性物質濃度を提供することができる。ポリマー塩 / 組成物を流体またはガスに適用して、0.125 ppm、0.25 ppm、0.625 ppm、1 ppm、1.25 ppm、2.5 ppm、5 ppm、10 ppm、または20 ppmの活性物質濃度を提供することができる。各システムは、それ自体の用量レベル要件を有することができ、腐食速度を十分に低減するためのポリマー塩 / 組成物の有効用量レベルは、それが使用されるシステムによって変わり得る。

【0157】

ポリマー塩 / 組成物は、連続的に、バッチで、またはそれらの組み合わせで適用することができる。ポリマー塩 / 組成物の用量は、腐食を防ぐために連続的であり得る。ポリマー塩 / 組成物の用量は、間欠的（すなわちバッチ処理）であり得るか、またはポリマー塩 / 組成物の用量は、腐食を抑制するために連続的 / 維持的および / もしくは間欠的であり得る。

10

【0158】

連続処理のための投与速度は、典型的には、約10 ~ 約500 ppm、または約10 ~ 約200 ppmの範囲である。バッチ処理のための投与速度は、典型的には、約10 ~ 約400, 000 ppm、または約10 ~ 約20, 000 ppmの範囲である。ポリマー塩 / 組成物は、パイプラインへの丸剤として適用することができ、高用量（例えば、20, 000 ppm）の組成物を提供する。

20

【0159】

ポリマー塩 / 組成物が使用されるフローラインの流速は、毎秒0 ~ 100フィート、または毎秒0.1 ~ 50フィートであり得る。フローラインへの添加を容易にするために、ポリマー塩 / 組成物を水と配合することもできる。

【0160】

表面は、原油または天然ガスなどの流体の生成、輸送、貯蔵、および / または分離に使用される坑井または装置の一部であり得る。

【0161】

より具体的には、表面は、石炭燃焼プロセス、廃水プロセス、農場、食肉処理場、埋立地、自治体廃水プラント、コークス用石炭プロセス、またはバイオ燃料プロセスを使用する装置の一部であり得る。好ましくは、表面は、原油または天然ガスの生成に使用される装置の一部であり得る。

30

【0162】

装置は、パイプライン、貯蔵容器、坑内注入管、フローライン、または注入ラインを含むことができる。

【0163】

本発明のポリマー塩 / 組成物は、他の用途において腐食を抑制するために使用することができる。

【0164】

ポリマー塩 / 組成物は、食品サービスまたは食品加工産業における容器、加工設備、または装置の腐食抑制に有用である。ポリマー塩 / 組成物は、食品包装材料および装置上での使用にとって、かつ特に低温または高温無菌包装にとって特に価値がある。ポリマー塩 / 組成物を用いることができる加工設備の例としては、ミルク管酪農、連続醸造システム、汲み上げ可能な食品システムおよび飲料ラインなどの食品加工ライン、食器洗浄器、低温食器洗浄器、食器類、ボトル洗浄機、ボトル冷却装置、加温器、第3のシンク洗浄器、タンク、バット、ライン、ポンプ、およびホースなどの加工装置（例えば、牛乳、チーズ、アイスクリーム、および他の乳製品を加工するための乳製品加工装置）、ならびに輸送車両が挙げられる。ポリマー塩 / 組成物を使用して、清涼飲料材料の製造および貯蔵に使用されるタンク、ライン、ポンプ、および他の装置における腐食を抑制することができ、また飲料用の瓶詰めまたは容器に使用することもできる。

40

50

【 0 1 6 5 】

ポリマー塩 / 組成物はまた、他の工業装置上またはその中、および例えばヒーター、冷却塔、ボイラー、レトルト水、すすぎ水、無菌包装洗浄水等の他の工業プロセス流中で使用することもできる。ポリマー塩 / 組成物を使用して、プール、温泉、娯楽用水路およびウォータースライド、噴水等の娯楽用水中の表面を処理することができる。

【 0 1 6 6 】

ポリマー塩 / 組成物を使用して、清掃および / またはハウスキーパー用途、食品加工装置、および / または植物用途、ならびに洗濯用途に見られる表面中のクリーナーと接触する金属表面の腐食を抑制することができる。例えば、布地を洗浄するためのトンネル式洗浄器などの洗浄器の腐食は、本明細書に開示されている方法に従って抑制することができる。

10

【 0 1 6 7 】

ポリマー塩 / 組成物は、低温の食器および / または食器用消毒の最終リンス、便器洗浄剤、および洗濯用漂白剤と組み合わせて使用または適用することができる。これらの化合物、組成物、および方法を使用して、腐食性供給源を用いて清掃および / または消毒された食器などの金属表面を処理することができる。

【 0 1 6 8 】

本明細書に開示されている化合物、組成物、および方法は、次亜塩素酸塩漂白剤によって引き起こされる腐食から表面を保護する。方法は、次亜塩素酸塩溶液によって引き起こされる腐食を抑制するために、次亜塩素酸塩溶液で処理された表面に腐食抑制剤ポリマー塩 / 組成物を提供することを含み得る。方法は、本腐食抑制剤組成物の水性使用組成物を調製することを含み得る。方法は、次亜塩素酸塩溶液との接触による腐食抑制が必要な硬質金属表面などの表面を接触させることをさらに含み得る。

20

【 0 1 6 9 】

ポリマー塩 / 組成物は、当業者に一般に知られている任意の適切な方法で分配することができる。例えば、米国特許第 4, 826, 661 号、同第 4, 690, 305 号、同第 4, 687, 121 号、同第 4, 426, 362 号、ならびに米国特許第 Re 32, 763 号および同第 32, 818 号（これらの開示は、参照により本明細書に組み込まれる）に開示されるものなどの噴霧型ディスペンサーが使用され得る。噴霧型ディスペンサーは、組成物の一部分を溶解させるために組成物の露出面に水噴霧を衝突させ、次いで直ちに組成物を含む濃縮物溶液をディスペンサーから貯蔵リザーバへ、または使用点に直接向けることによって機能する。

30

【 0 1 7 0 】

ポリマー塩 / 組成物は、間欠的にまたは連続的に水中に浸漬することによって分配することができる。次いで、組成物は、例えば制御されたまたは所定の速度で溶解することができる。この速度は、本明細書に開示されている方法に従って使用するのに有効である、溶解剤の濃度を維持するのに有効であり得る。

【 実施例 】

【 0 1 7 1 】

以下の非限定的な実施例は、本開示の様々な態様をさらに説明するために提供される。別段の記載がない限り、全ての化学物質は、供給元から受領したまま使用した。

40

【 0 1 7 2 】

カチオン性ポリマー塩の NMR 試料は、D₂O 中で調製した。全てのスペクトルは、25 °C で得た。炭素用の 10 mm 広帯域プローブまたは Z 勾配を有するプロトン用の 5 mm の 2 チャンネルプローブを備えた A G I L E N T 500 MHz 分光計で実施された単一パルスシーケンスを使用して、定量的プロトン (¹H) および炭素 (¹³C) を得た。4 ~ 8 スキャンで ¹H スペクトルを得た。400 ~ 500 スキャンで ¹³C スペクトルを得た。M e s t R e N o v a v . 9 を使用して、データを処理し、分析した (M e s t r e l a b , S p a i n) 。

【 0 1 7 3 】

50

化学シフト (ppm) は、別段の記載がない限り、参照として残留溶媒ピークを使用して、TMS (テトラメチルシラン) に対して報告される。次の略語を使用して、多重度を表す。s = 一重項、d = 二重項、t = 三重項、q = 四重項、m = 多重項、br = 広域。

【0174】

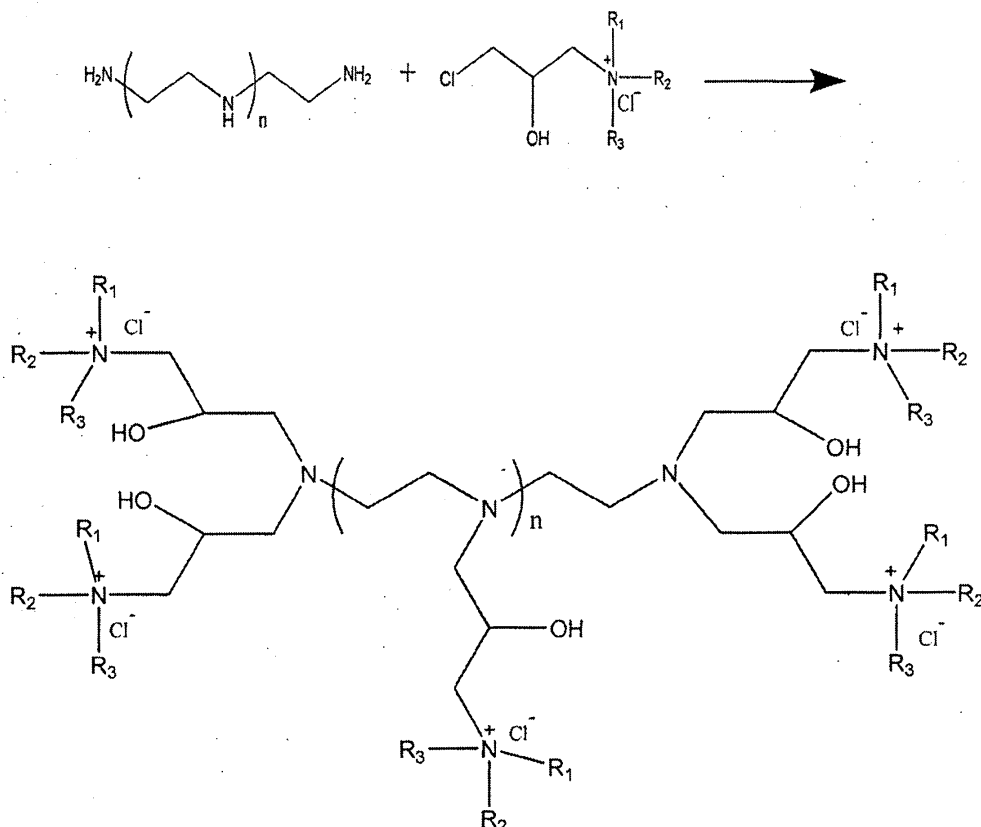
カチオン性界面活性剤の質量分析は、イオンフィルターとして四重極を備え、かつエレクトロスプレーイオン化 (ESI) 源を備えた Q EXACTIVE ORBITRAP 高分解能質量分析計 (Thermo Fisher Scientific) で行った。界面活性剤試料を約 100 ppm に希釈し、次いで 10 μ L / 分の流量で注入により質量分析計に注入した。スペクトルは、ポジティブ ESI モードで取得した。走査範囲: 50 ~ 750 m/z; 分解能: 140 k; AGC ターゲット: 3⁶; シースガス流量: 2 (任意単位); 補助ガス流量: 0 (任意単位); 噴霧電圧: 2.5 kV; 毛細管温度: 150 ; 補助ガスヒーター温度: 30 ; および S - Len RF レベル: 50。データを取得し、XCALIBUR および FREESTYLE ソフトウェア (Thermo Fisher Scientific) によって分析した。

【0175】

実施例 1: メチル基を有する複数の四級カチオン性界面活性剤の合成

ジエチレントリアミン (DETA、10.32 グラム、0.10 mol) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリド (156.7 グラム、60.0 %、0.50 mol、(Sigma - Aldrich)) を、機械攪拌器、温度計、温度調節器、凝縮器、および添加漏斗を備えた 500 mL の四首丸底フラスコに加えた。反応混合物を攪拌し、穏やかに約 60 に加熱した。反応の pH 値を、連続的にモニタリングした。水酸化ナトリウム (50 % 水溶液) を、反応フラスコにゆっくり加え、温度を 60 で一定に保った。反応溶液の pH 値を測定し、7.5 より上で一定に保った。反応温度を 85 に上げ、5 時間にわたって一定に保った。反応スキームは以下の通りであり、ここで R₁、R₂、および R₃ は、メチルであり、n は、1 である。

【化 28】



【0176】

^{13}C NMR (500 MHz, D_2O , 25 °C) スペクトルは、44 ~ 46 ppm および 58 ~ 59.3 ppm で化学シフトを示し、これは反応した DETA に帰属した。47.5 ppm の共鳴シグナルは、未反応の 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリド中の塩素化メチレンを表す。3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリドの総量は、メチル基からの 54.5 ppm での鋭いシグナルに基づいて決定した。DETA 当たりの平均電荷は 4.8 であり、理論値の 5 電荷と一致した。MS (ESI) : 計算値 $[\text{M} - 2\text{Cl}]^-$ $^2 + 394.275$ 、実測値 394.278 ; 計算値 $[\text{M} - 3\text{Cl}]^-$ $^3 + 251.193$ 、実測値 251.195 ; 計算値 $[\text{M} - 4\text{Cl}]^-$ $^4 + 179.655$ 、実測値 179.654 ; 計算値 $[\text{M} - 5\text{Cl}]^-$ $^5 + 136.73$ 、実測値 136.73。

10

【0177】

実施例 2 : ラウリル基を有する複数の四級カチオン性界面活性剤の合成

ラウリル鎖を有する複数の四級カチオン性界面活性剤は、ジエチレントリアミン (DETA) と 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ドデシル - ジメチルアンモニウムクロリド (Quab Chemicals (Saddle Brook, NJ) からの QUAB 342 (商標)) とを反応させることによって合成した。ジエチレントリアミン (5.16 グラム、0.05 mol) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ドデシル - ジメチルアンモニウムクロリド (222.66 グラム、38.4 重量%、0.25 mol) を、機械攪拌器、温度計、温度調節器、冷却器、および添加漏斗を備えた 500 mL の 4 首フラスコに入れた。反応混合物を攪拌し、穏やかに約 60 °C に加熱した。反応の pH 値を、連続的にモニタリングした。水酸化ナトリウム (50% 水溶液) を、反応フラスコにゆっくり加え、温度を 60 °C で一定に保った。反応溶液の pH 値を測定し、7.5 より上で一定に保った。反応温度を 85 °C に上げ、5 時間にわたって一定に保った。

20

【0178】

質量分析データは、反応生成物が 2 つの四級 - 2 - ジメチルドデシルアンモニウムクロリドの混合物を含むことを示した (MS (ESI) : 計算値 $[\text{M} - 2\text{Cl}]^-$ $^2 + 321.83$ 、実測値 321.83) ; 3 四級 - 3 ジメチルドデシルアンモニウムクロリド (MS (ESI) : 計算値 $[\text{M} - \text{Cl}]^-$ $^+ 983.89$ 、実測値 983.89 ; 計算値 $[\text{M} - 2\text{Cl}]^-$ $^2 + 474.46$ 、実測値 474.46 ; 4 四級 - 4 ジメチルドデシルアンモニウムクロリド (MS (ESI) : 計算値 $[\text{M} - \text{Cl}]^-$ $^+ 1289.14$ 、実測値 1289.13、計算値 $[\text{M} - 2\text{Cl}]^-$ $^2 + 627.08$ 、実測値 627.08 ; 計算値 $[\text{M} - 3\text{Cl}]^-$ $^3 + 406.40$ 、実測値 406.40 ; 計算値 $[\text{M} - 4\text{Cl}]^-$ $^4 + 296.06$ 、実測値 296.06) ; および 5 四級 - 5 ジメチルドデシルアンモニウムクロリド (MS (ESI) : 計算値 $[\text{M} - 2\text{Cl}]^-$ $^2 + 779.71$ 、実測値 779.71 ; 計算値 $[\text{M} - 3\text{Cl}]^-$ $^3 + 508.15$ 、実測値 508.48 ; 計算値 $[\text{M} - 4\text{Cl}]^-$ $^4 + 372.37$ 、実測値 372.37)。0.050 重量% 水溶液での表面張力 63.63 mN/m。

30

【0179】

実施例 3 : 異なるアルキル鎖を有する複数の四級カチオン性界面活性剤の合成

5 四級カチオン性界面活性剤は、実施例 1 に記載の手順を使用し、ジエチレントリアミン (DETA、10.32 グラム、0.10 mol) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリド (62.7 グラム、60.0%、0.20 mol)、および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ジメチルドデシルアンモニウムクロリド (267.2 グラム、38.4 重量%、0.30 mol) (QUAB 342 (商標)) を反応させることによって合成した。

40

【0180】

あるいは、合成は、異なるモル比の 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリドと 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ジメチルオクタデシルアンモニウムクロリドとの混合物を使用して行うことができるが、合計 5 モルのトリアルキルアンモニウムクロリドを一定に保った。

50

【0181】

6 四級カチオン性界面活性剤は、実施例 1 に記載の手順を使用し、トリエチレントトラアミン (TETA、12.2 グラム、60 重量%、0.05 mol) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルジメチルオクタデシルアンモニウムクロリド (336.3 グラム、38.0%、0.30 mol; Quab Chemicals (Saddle Brook, NJ) からの QUAB 426 (商標)) を、プロピレングリコール (PP425、69.9 グラム) 中で反応させることによって合成した。

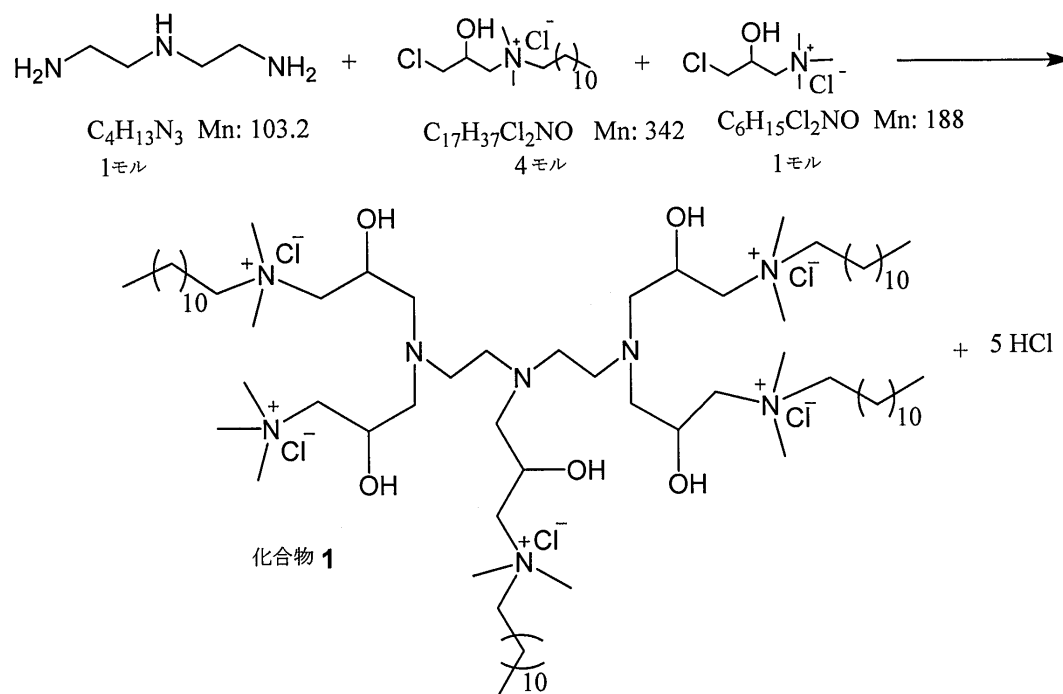
【0182】

水 / プロパンジオールと水 / プロパンジオール / PP425 または水 / ヘキシレングリコールとの混合物の間で溶媒を変えることが、反応中に均一相を達成することが決定された。さらに、プロパンジオールおよびプロピレングリコールは、長アルキル鎖を有する複数のカチオン性界面活性剤の水溶性を増大させることがわかった。

【0183】

化合物 1 は、ジエチレントリアミン (1 mol)、(3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル) ラウリルジメチルアンモニウムクロリド (4 mol)、および (3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル) トリメチルアンモニウムクロリド (1 mol) を使用して合成した。質量分析により、化合物 1 の合成を確認した。計算値 $[M - 2Cl]^{-}$ $^2 + 702.62$ 、実測値 703.62; 計算値 $[M - 3Cl]^{-}$ $^3 + 456.76$ 、実測値 457.09。

【化29】



【0184】

化合物 2 は、ジエチレントリアミン (1 mol)、(3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル) ラウリルジメチルアンモニウムクロリド (3 mol)、および (3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル) トリメチルアンモニウムクロリド (2 mol) を使用して合成した。質量分析により、化合物 2 の合成を確認した。計算値 $[M - 2Cl]^{-}$ $^2 + 625.54$ 、実測値 626.53; 計算値 $[M - 3Cl]^{-}$ $^3 + 405.37$ 、実測値 405.7; 計算値 $[M - 4Cl]^{-}$ $^4 + 295.28$ 、実測値 295.28。

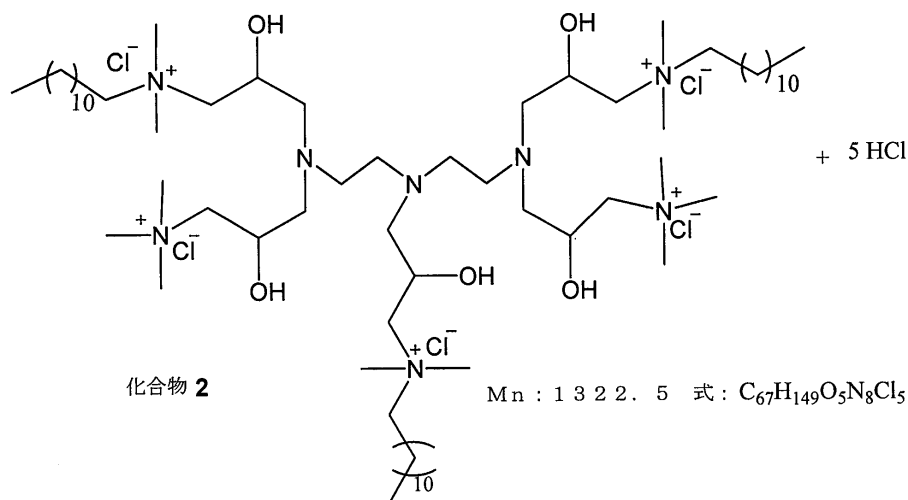
10

20

30

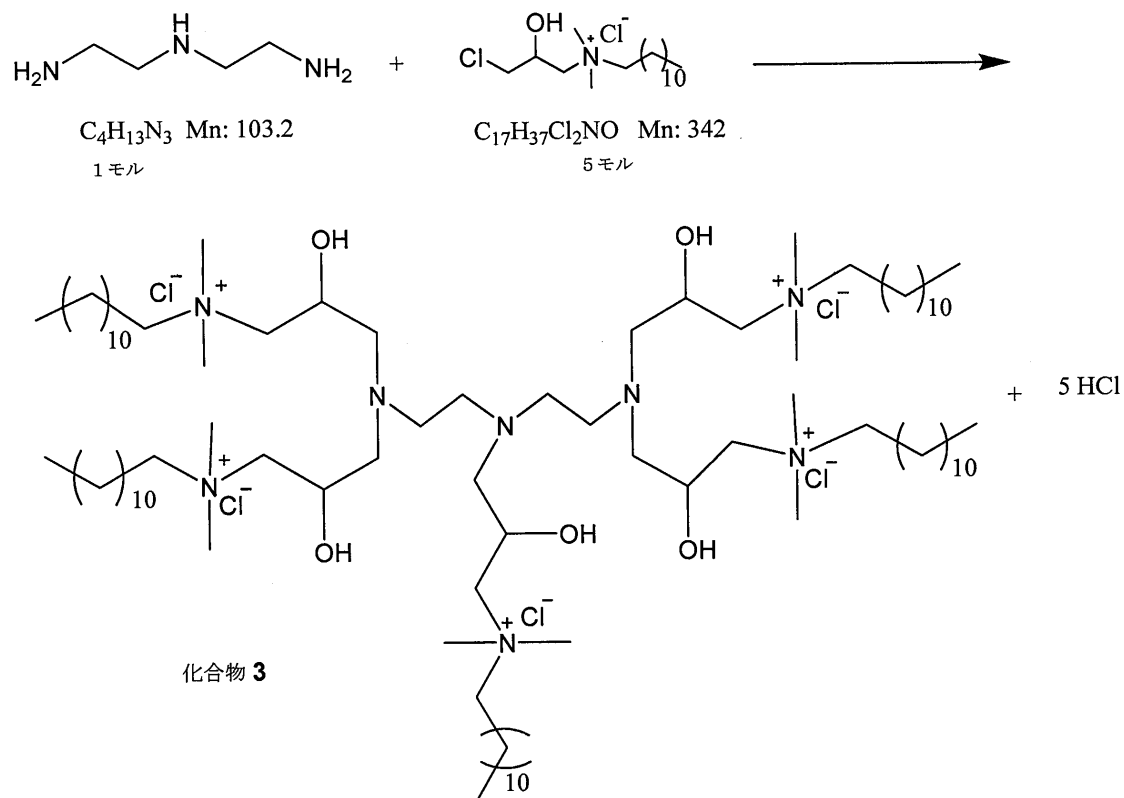
40

50

$$\begin{array}{ccccc} \text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2 & + & \text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{OH})-\text{N}^+(\text{CH}_2)_9\text{Cl}^- & + & \text{Cl}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{OH})-\text{N}^+(\text{CH}_2)_5\text{Cl}^- \\ \text{C}_4\text{H}_{13}\text{N}_3 \text{ Mn: } 103.2 & & \text{C}_{17}\text{H}_{37}\text{Cl}_2\text{NO} \text{ Mn: } 342 & & \text{C}_6\text{H}_{15}\text{Cl}_2\text{NO} \text{ Mn: } 188 \\ 1\text{モル} & & 3\text{モル} & & 2\text{モル} \end{array} \longrightarrow$$


化合物 3 は、ジエチレントリアミン (1 m o l) および (3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル) ラウリルジメチルアンモニウムクロリド (5 m o l) を使用して合成した。質量分析により、化合物 3 の合成を確認した。計算値 $[M - 2Cl]^{-}$ $^{2} + 779.71$ 、実測値 779.71；計算値 $[M - 3Cl]^{-}$ $^{3} + 508.15$ 、実測値 508.48；計算値 $[M - 4Cl]^{-}$ $^{4} + 372.37$ 、実測値 372.37。

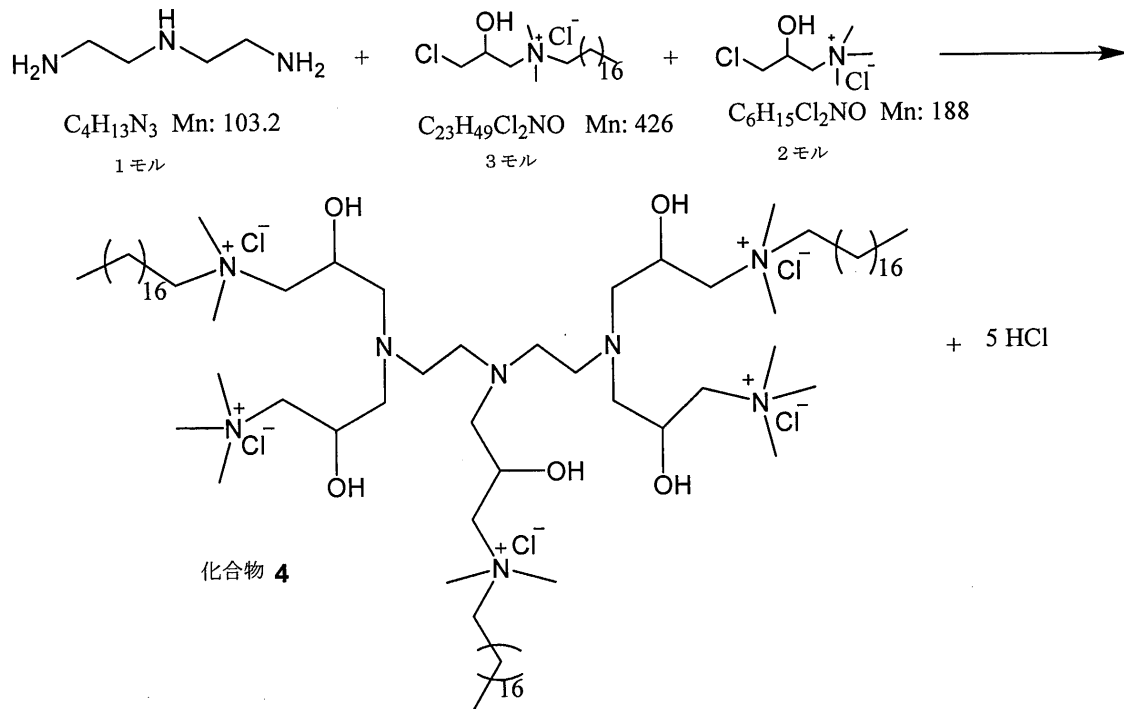
【化 3 1】



【 0 1 8 6 】

化合物 4 は、ジエチレントリアミン（1 mol）、（3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル）オクタデシルジメチルアンモニウムクロリド（3 mol）、および（3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル）トリメチルアンモニウムクロリド（2 mol）を使用して合成した。

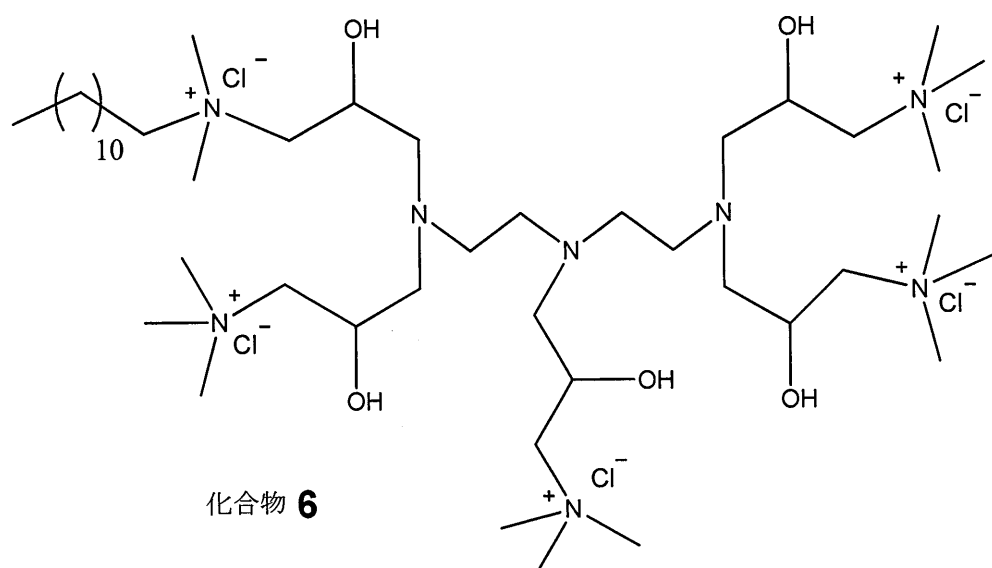
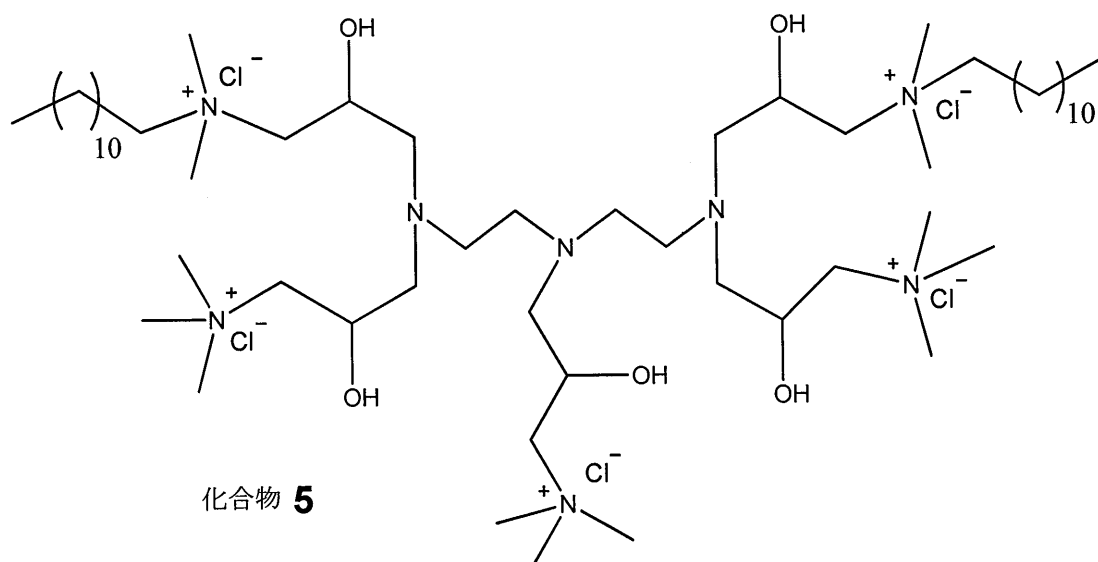
【化 3 2】



【 0 1 8 7 】

化合物 5 および 6 は、上記のように、化合物 1 ~ 3 と同様に合成した。質量分析により、化合物 5 の合成を確認した。計算値 $[\text{M} - 2 \text{Cl}^-]^2 + 548.45$ 、実測値 549.45 ；計算値 $[\text{M} - 3 \text{Cl}^-]^3 + 353.98$ 、実測値 354.64 ；計算値 $[\text{M} - 4 \text{Cl}^-]^4 + 256.74$ 、実測値 256.74 。質量分析により、化合物 6 の合成を確認した： $[\text{M} - 5 \text{Cl}^-]^5 + 167.56$ 、実測値 167.56 。

【化 3 3】



【 0 1 8 8 】

化合物 7 ~ 1 2 は、上記の化合物 4 と同様の方法で合成した。異なる比率の反応物は、カチオン性ポリマー中に異なる割合の長鎖アルキル基を生じた。

10

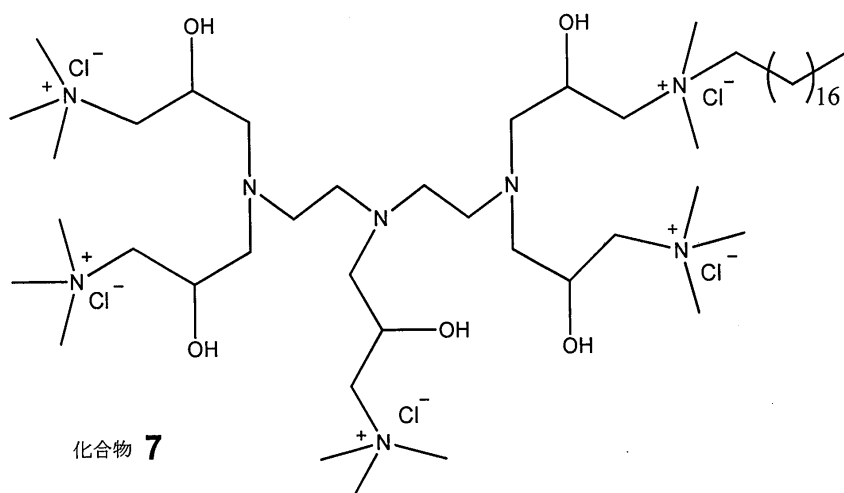
20

30

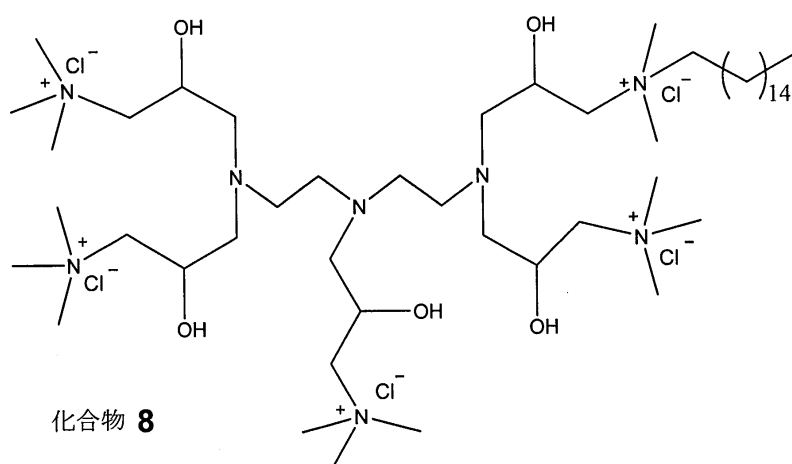
40

50

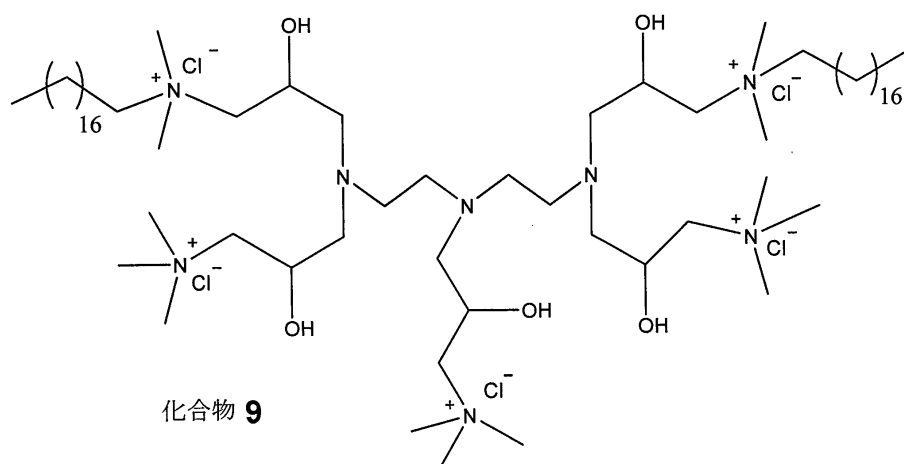
【化 3 4】



10



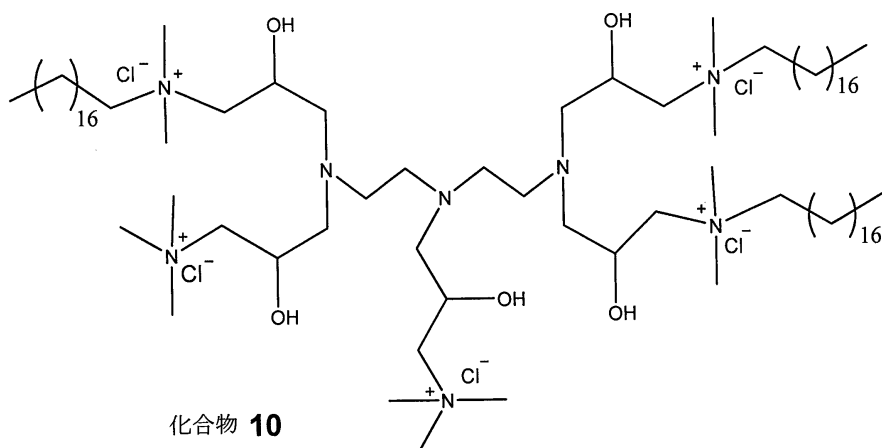
20



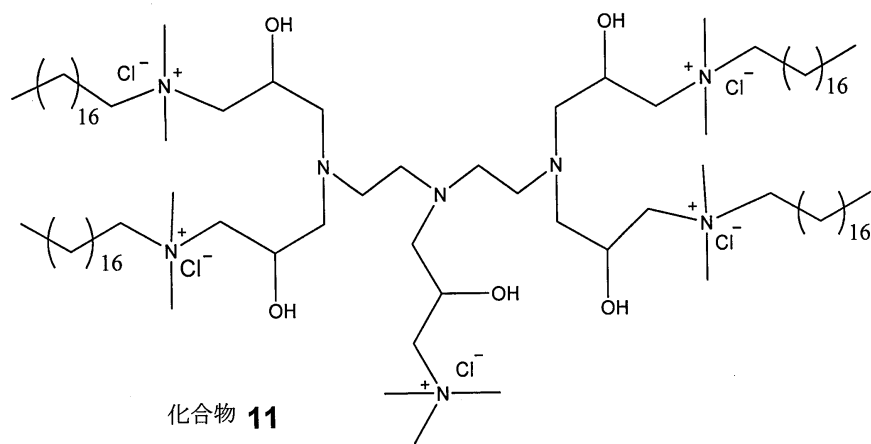
30

40

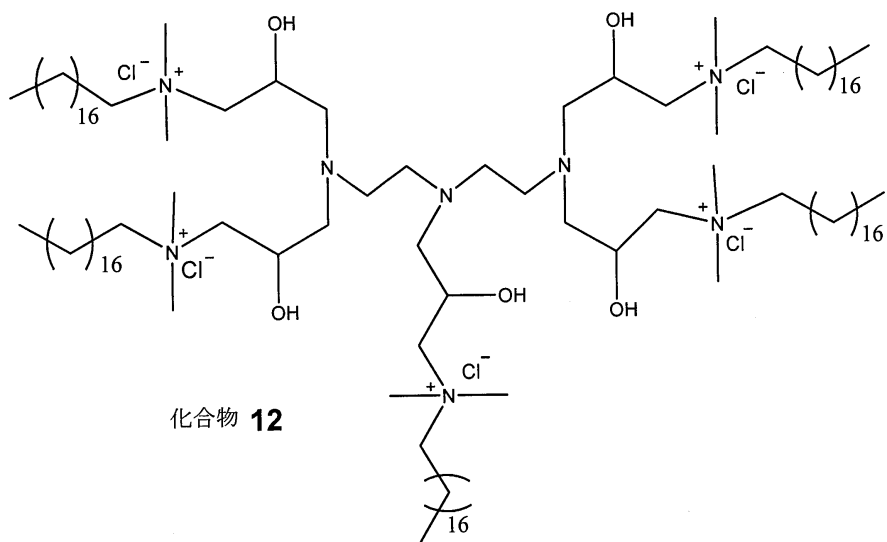
50



10



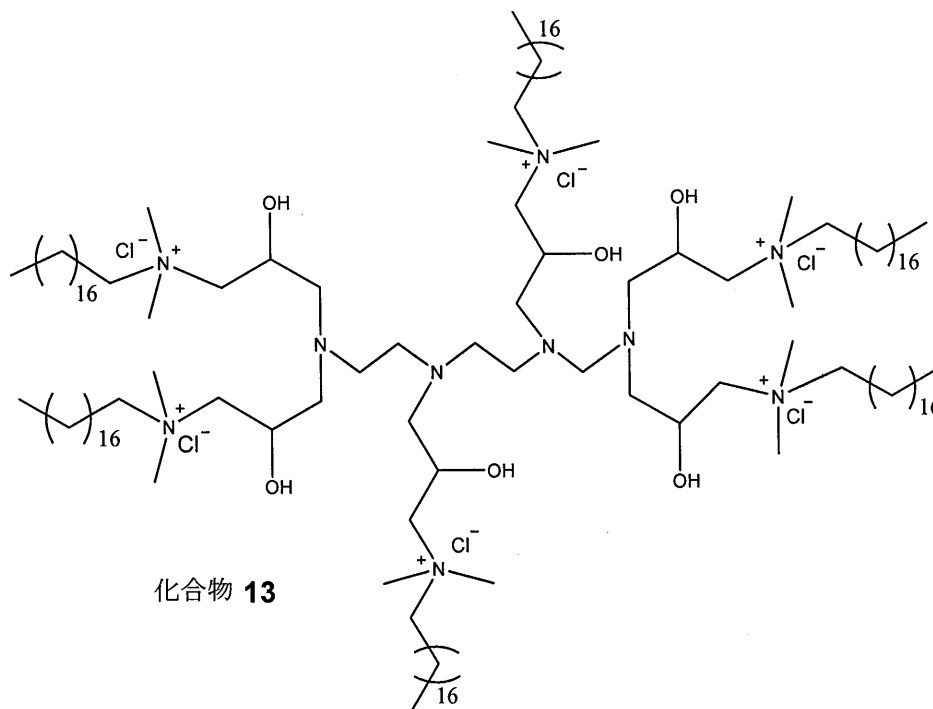
20



30

40

50



【 0 1 8 9 】

上述の合成スキーム、例えば、DETA、TETA、3-クロロ-2-ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリド(Dow Chemical Company(Midland, Michigan)からのQUAT 188(商標)カチオン性モノマー)およびQUAB 426(商標)反応物を使用して、様々な複数のカチオン性界面活性剤を合成し、生成物を以下の表1に要約する。表1に報告される構造に関して、「5Q-1ステアリル(C18)/4トリメチル四級物」は、生成物が合計5つの四級基(5Q)を有し、これらのうち1つの四級基が、R₁およびR₂をメチルとして、ならびにR₃をステアリルとして有し、4つの四級基が、R₁、R₂、およびR₃をメチルとして有し、n = 1

であることを意味する。同様に、「5Q-2ステアリル(C18)/3トリメチル四級物」は、生成物が合計5つの四級基(5Q)を有し、これらのうち2つの四級基が、R₁およびR₂をメチルとして、ならびにR₃をステアリルとして有し、3つの四級基が、R₁、R₂、およびR₃をメチルとして有し、n = 1であることを意味する。「5Q-3ステアリル(C18)/2トリメチル四級物」は、生成物が合計5つの四級基(5Q)を有し、これらのうち3つの四級基が、R₁およびR₂をメチルとして、ならびにR₃をステアリルとして有し、2つの四級基が、R₁、R₂、およびR₃をメチルとして有し、n = 1であることを意味する。「5Q-4ステアリル(C18)/1トリメチル四級物」は、生成物が合計5つの四級基(5Q)を有し、これらのうち4つの四級基が、R₁およびR₂をメチルとして、ならびにR₃をステアリルとして有し、1つの四級基が、R₁、R₂、およびR₃をメチルとして有し、n = 1であることを意味する。「5Q-5ステアリル(C18)」は、生成物が合計5つの四級基(5Q)を有し、これらのうち5つの四級基が、R₁およびR₂をメチルとして、ならびにR₃をステアリルとして有し、n = 1であることを意味する。「6Q-6ステアリル(C18)」は、生成物が合計6つの全四級基(6Q)を有し、これらのうち6つの四級基が、R₁およびR₂をメチルとして、ならびにR₃をステアリルとして有し、n = 2であることを意味する。

【表 2】

表 1. 複数の四級カチオン界面活性剤の物理的性質

化合物 番号	構造	ポリア ミン	QUAB 426/ QUAT 188 の比	溶媒	活性物質、重量%	
					計算値、%	測定値、%
7	5Q-1 ス テアリル (C18) / 4 トリメチ ル四級物	DETA	1/4	水/プロパ ンジオール	51. 47	52. 58
9	5Q-2 ス テアリル (C18) / 3 トリメチ ル四級物	DETA	2/3	水/プロパ ンジオール	46. 54	51. 3
10	5Q-3 ス テアリル (C18) / 2 トリメチ ル四級物	DETA	3/2	水/プロパ ンジオール	43. 41	61. 77
11	5Q-4 ス テアリル (C18) / 1 トリメチ ル四級物	DETA	4/1	水/プロパ ンジオール /PP425	33. 68	62. 88
12	5Q-5 ス テアリル (C18)	DETA	5/0	水/プロパ ンジオール /PP425	33. 74	53. 99
13	6Q-6 ス テアリル (C18)	TETA	6/0	水/プロパ ンジオール /PP425	33. 28	49. 40

【 0 1 9 0 】

化合物 9 の質量スペクトルは、反応生成物が、2 - C 1 8 / 3 - トリメチルの混合物を含むことを示した (MS (ESI) : 計算値 $[M - 2C1]^-$ $^2 + 632.545$; 実測値 632.5423 ; 計算値 $[M - 3C1]^-$ $^3 + 410.04$ 、実測値 410.038 ; 計算値 $[M - 4C1]^-$ $^4 + 298.7875$ 、実測値 298.786 ; 計算値 $[M - 5C1]^-$ $^5 + 232.036$ 、実測値 232.210) ; 2 - C 1 6 / 3 - トリメチル (MS (ESI) : 計算値 $[M - 2C1]^-$ $^2 + 604.51$; 実測値 604.51 、計算値 $[M - 3C1]^-$ $^3 + 391.35$ 、実測値 391.35 ; 計算値 $[M - 4C1]^-$ $^4 + 284.77$ 、実測値 284.77 ; 計算値 $[M - 5C1]^-$ $^5 + 220.824$ 、実測値 220.555 ; 1 - C 1 8 / 1 - C 1 6 / 3 - トリメチル (MS (ESI) : 計算値 $[M - 2C1]^-$ $^2 + 618.525$; 実測値 618.5266 ; 計算値 $[M - 3C1]^-$ $^3 + 400.697$ 、実測値 400.694 ; 計算値 $[M - 4C1]^-$ $^4 + 291.78$ 、実測値 291.778 ; 計算値 $[M - 5C1]^-$ $^5 + 226.43$ 、実測値 226.429) ; 1 - C 1 8 / 4 - トリメチル (MS (ESI) : 計算値 $[M - 2C1]^-$ $^2 + 513.41$; 実測値 513.4098 ; 計算値 $[M - 3C1]^-$ $^3 + 330.62$ 、実測値 330.6166

; 計算値 $[M - 4Cl^-]^4 + 239.22$ 、実測値 239.2202 ; 計算値 $[M - 5Cl^-]^5 + 184.38$ 、実測値 184.3823 ; および $1 - C16 / 4 -$ トリメチル (MS (ESI)): 計算値 $[M - 2Cl^-]^2 + 449.395$; 実測値 449.4368 ; 計算値 $[M - 3Cl^-]^3 + 321.27$ 、実測値 321.2728 ; 計算値 $[M - 4Cl^-]^4 + 232.21$ 、実測値 232.212 ; 計算値 $[M - 5Cl^-]^5 + 178.776$ 、実測値 178.776 。

【0191】

実施例 4: 表面張力測定および臨界ミセル濃度 (CMC) 計算

表面張力測定は、室温で Tracker 張力計 (Teclis Instrument s) で行った。様々な濃度の界面活性剤溶液を調製し、測定を行った。

【0192】

カチオン性界面活性剤試料の濃度の関数としての表面張力を測定し、表 2 に列挙する。ここで、NT は、試験しないことを意味する。

【表 3】

表 2. 各種カチオン性界面活性剤試料の表面張力のまとめ

濃度 (%)	7	9	10	11	12	13
0.010	73.70	73.11	70.99	63.52	63.16	63.28
0.025	72.05	69.16	61.99	60.01	55.77	59.04
0.050	64.84	60.77	57.33	56.35	51.89	55.36
0.100	60.93	54.69	52.64	53.23	49.42	52.65
0.200	57.12	52.05	50.58	50.16	47.02	50.31
0.500	55.13	50.09	47.92	47.38	45.02	48.02
1.000	NT	49.38	47.48	46.58	44.22	47.78
1.500	NT	NT	NT	NT	43.46	NT
2.000	NT	NT	NT	NT	42.97	NT

【0193】

様々なカチオン性界面活性剤試料の表面張力はまた、図 1 にグラフで示されている。

【0194】

実施例 5: ポリアルキレンイミンと置換アルキルトリアルキル四級アンモニウム塩との反応に基づく複数の四級カチオン性界面活性剤の合成

ポリエチレンイミン (Lupasol G20 (50 重量% 溶液)、20 グラム、 $0.2204 \text{ mol} - \text{NH}^-$) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリド (69.06 グラム、60.0%、 0.2204 mol 、(Sigma-Aldrich)) を、機械攪拌器、温度計、温度調節器、凝縮器、および添加漏斗を備えた 500 mL の四首丸底フラスコに加えた。反応混合物を攪拌し、穏やかに約 60 に加熱した。反応の pH 値を、連続的にモニタリングした。水酸化ナトリウム (50% 水溶液) を、反応フラスコにゆっくり加え、温度を 60 で一定に保った。反応溶液の pH 値を測定し、7.5 より上で一定に保った。反応温度を 85 に上げ、5 時間にわたって一定に保った。以下に示す化合物 14 は、一般化された反応生成物の描写である。以下の構造は、ポリエチレンイミン中の全ての二級アミンおよび一級アミンが、3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリドと反応し、それにより、二級アミンが残らないことを示している。カチオン性ポリマー塩中にいくらかの二級アミンを残して、完全には反応しないいくらかのアミンが存在し得る。

10

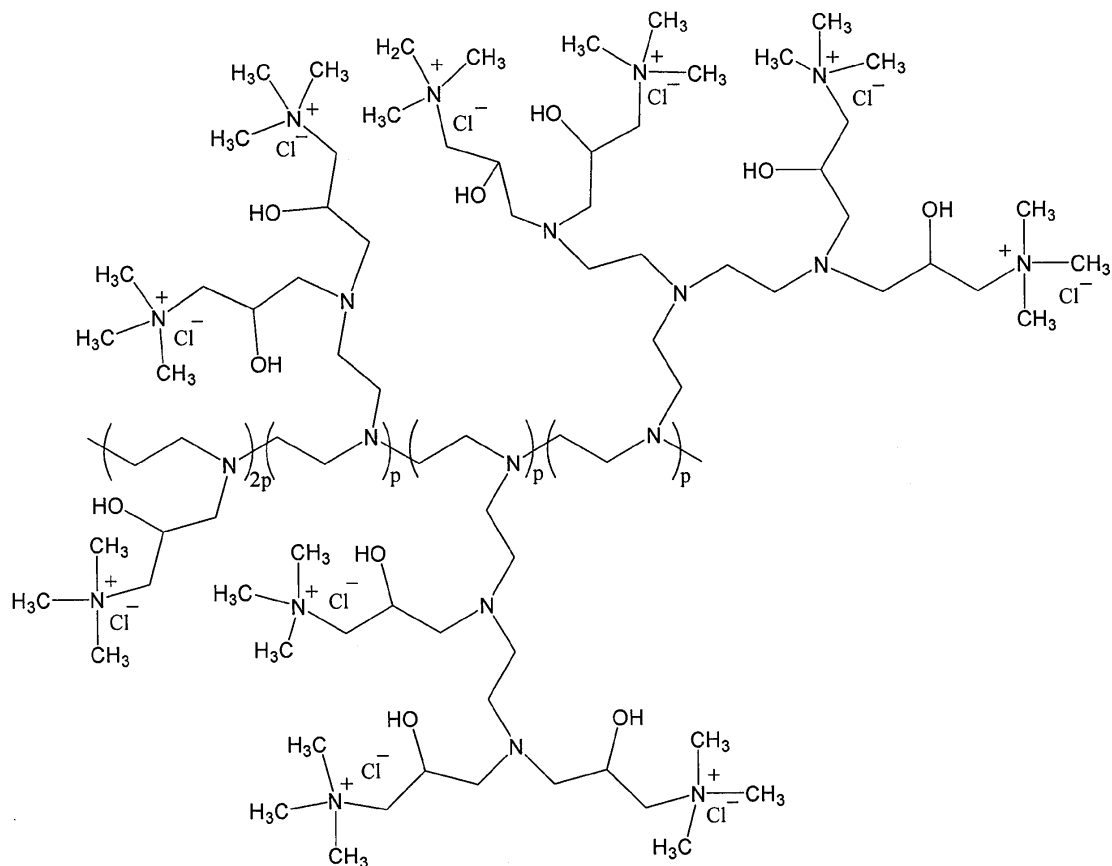
20

30

40

50

【化 3 5】



化合物 14

【0195】

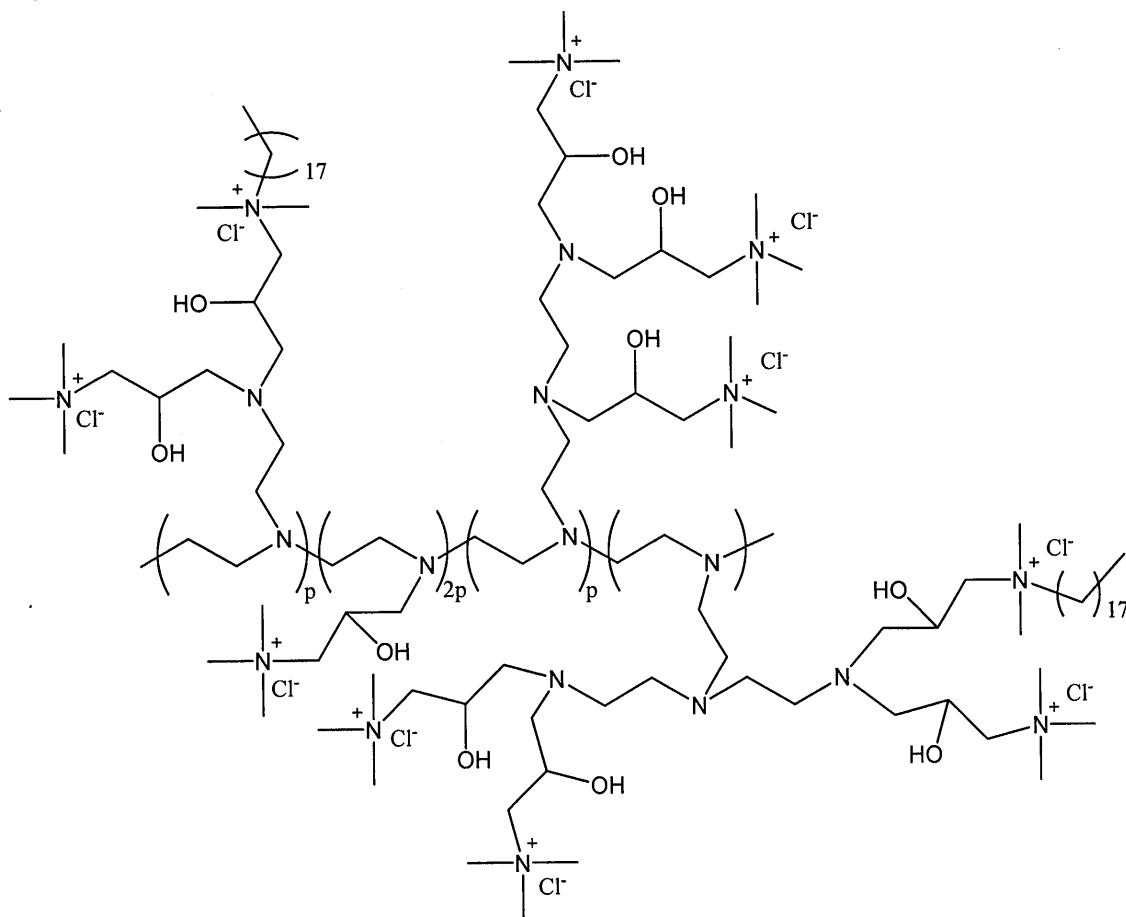
ステアリル鎖を有する複数の四級カチオン性界面活性剤は、分岐ポリエチレンイミン (Sigma - Aldrich) を 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ステアリルジメチルアンモニウムクロリド (Quab Chemicals (Saddle Brook, NJ) からの QUAB 426 (商標)) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリド (Sigma - Aldrich) と反応させることによって合成した。ポリエチレンイミン (40.0 グラム (50%)、0.4206 mol - NH-) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピル - ステアリルジメチルアンモニウムクロリド (47.15 グラム、38.5 重量%、0.0426 mol) および 3 - クロロ - 2 - ヒドロキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリド (118.6 グラム、(60%)、0.3785 mol) を、機械攪拌器、温度計、温度調節器、凝縮器、および添加漏斗を備えた 500 mL の四首丸底フラスコに加えた。反応混合物を攪拌し、穏やかに約 60 に加熱した。反応の pH 値を、連続的にモニタリングした。水酸化ナトリウム (50 % 水溶液) を、反応フラスコにゆっくり加え、温度を 60 で一定に保った。反応溶液の pH 値を測定し、7.5 より上で一定に保った。反応温度を 85 に上げ、5 時間にわたって一定に保った。0.050 重量% 水溶液での表面張力 41.55 mN/m。化合物 15 は、一般化された反応生成物を示す。化合物 14 のように、反応が完了まで進行しなかった場合、いくつかの二級アミンが存在し得る。

【0196】

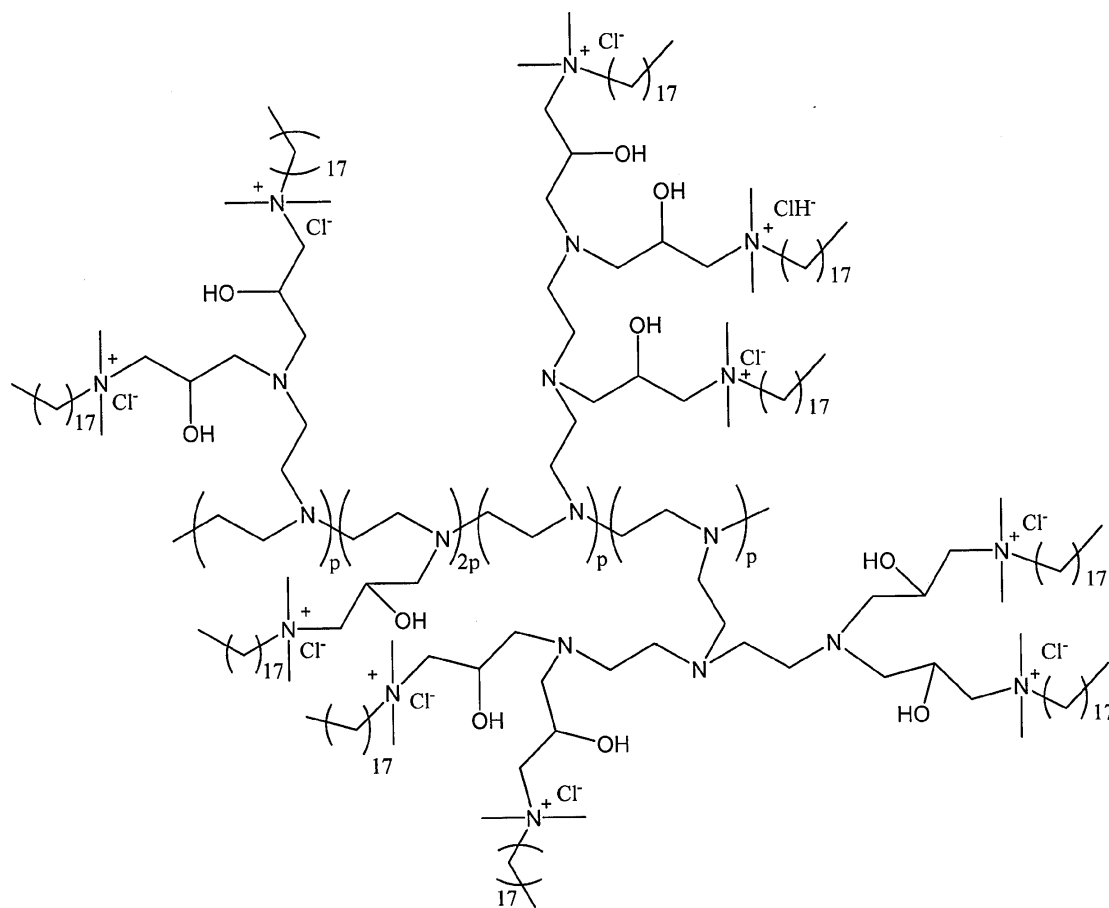
ポリマー四級化合物を、上記の手順に従って合成して、化合物 15 および化合物 16 を生成した。化合物 16 は、ゲル浸透クロマトグラフィーにより測定して、約 1300 gm/mol の重量平均分子量を有していた。化合物 15 は、ゲル浸透クロマトグラフィーにより測定して、約 25,000 gm/mol の重量平均分子量を有していた。変数「p」

は、約 10^{-5} の範囲であり得る。

【化 36】



化合物 15



化合物 1 6

【 0 1 9 7 】

実施例 6 : カチオン性ポリマー塩の抗菌効果

合成された化合物の抗菌効率は、冷却水中の殺微生物剤効率についての A S T M 法に従って非酸化抗菌効率試験手順を用いて試験した (E 6 4 5 - 0 2 a、2 0 0 5)。有効性試験に使用された細菌は、北米の 3 0 を超える冷却システムからの好気性集団の混合物を含んでいた。特定の種は同定されなかった。それらの種は、R 2 A 寒天上で成長させた。

【 0 1 9 8 】

一実験において、様々な濃度 (0 p p m、5 p p m、1 0 p p m、2 0 p p m、3 0 p p m、4 0 p p m、および 5 0 p p m) の化合物 1 を、水中の細菌に適用した。コロニー形成単位での $\log 10$ 濃度 (C F U / m L) を、4 つの時点 (0 分、6 0 分、2 4 0 分、および 1 4 4 0 分) で測定した。図 1 および図 2 は、5 p p m の濃度で単一の $\log 10$ 減少が達成されたことを示す。約 2 0 p p m では、約 6 0 分、2 4 0 分、および 1 4 4 0 分において 5 つの $\log 10$ 減少が観察された。

【 0 1 9 9 】

濃度 5 0 p p m での化合物 1 ~ 4 の微生物活性を、上記と同じ手順に従って試験した。図 3 は、全ての化合物が、6 0 分の接触時間後に C F U の有意な減少を示すことを示す。約 5 p p m で、化合物 2 は、C F U の単一の $\log 10$ 減少を示す、いくつかの抗菌活性を示した。

【 0 2 0 0 】

化合物 4 の抗菌活性を、上記と同じ手順を用いて試験した。図 4 および 5 は、試験した濃度で有意な抗菌活性を示す。

【 0 2 0 1 】

実施例 7：孢子および好熱菌に対するカチオン性ポリマー塩の効果

細菌孢子または好熱菌に対する化合物の効果も試験した。化合物 1 および 4 を、約 20 ppm の濃度の孢子または好熱菌と別々にインキュベートし、濃度の減少を 4 つの時点で測定した（表 3 を参照）。

【表 4】

表 3. 抗孢子および抗好熱活性のまとめ

接触時間 (分)	対照 (Log cfu/mL)	化合物 1 (Log cfu /mL)	化合物 1 の Log 減少	化合物 4 (Log cfu /mL)	化合物 4 の Log 減少
0	2.49	2.41	0.08	2.53	-0.04
60	2.34	1.85	0.5	1.6	0.74
240	2.48	1.48	1.0	0.00	2.48
1440	2.53	1.48	1.05	1.78	0.75

10

【0202】

実施例 8：単一四級化合物および多四級カチオン性ポリマーの抗菌効果

単一四級化合物と比較した多四級カチオン性ポリマーの有効性を試験するために、バイオフィルム減少実験を行った。単一四級化合物を含む 2 つの異なる組成物を調製した。約 50 重量%のビスオクチルジメチルアンモニウムクロリド (CAS # 5538-94-3) および約 5 ~ 10 重量%のグリセリンを含む組成物 (単一四級物 1)、ならびに約 50 重量%のジデシル - ジメチルアンモニウムクロリド (CAS # 7173-51-5) および約 10 ~ 30 重量%のエタノールを含む組成物 (単一四級物 2)。試験細菌は、北米全域の冷却塔内の 30 の水試料からの好気性細菌の収集物を含んでいた。約 0.8 ppm ~ 約 1000 ppm の範囲の異なる濃度のカチオン性ポリマー塩および単一四級化合物を試験した。バイオフィルム抑制試験プロトコルを使用して、吸収された汚れを抽出し、吸光度を 590 nm で測定した。バイオフィルム減少は、処理された対照と未処理の対照の吸光度を比較することによって計算し、次いで 6 つの複製について平均した。

20

30

【0203】

化合物 7 および 9 を、上記の単一四級物 2 組成物と比較した。表 4 および 5 は、約 12 ppm という低い濃度で、化合物 7 が単一四級物 2 組成物よりもバイオフィルムを大幅に減少させたことを示している。化合物 7 はまた、約 0.8 ppm ~ 約 ppm の濃度範囲で約 12 ~ 約 65 % のバイオフィルム減少を示した。化合物 9 は、約 100 ppm の濃度でバイオフィルム形成の 95 % 超の減少を達成した。これらの化合物は、伝統的な生成物よりも重要な利点を示す。

40

50

【表 5】

表 4. 単一四級物 2 と比較した化合物 7 のバイオフィルム減少

活性物質濃度 p p m	単一四級物 2 %	化合物 7 %	$\frac{(\text{比較例 7} - \text{単一四級物 2}) * 100}{\text{単一四級物 2}}$ %
1 0 0 0 . 0	6 0 . 1	9 8 . 4	6 3 . 7
5 0 0 . 0	9 2 . 0	9 7 . 8	6 . 3
2 5 0 . 0	8 4 . 2	9 7 . 1	1 5 . 3
1 2 5 . 0	- 6 . 8	9 6 . 6	1 5 1 7 . 3
1 0 0 . 0	- 1 5 . 6	7 9 . 3	6 0 8 . 5
6 2 . 0	6 5 . 4	9 6 . 6	4 7 . 6
5 0 . 0	8 0 . 4	9 3 . 0	1 5 . 7
3 1 . 0	8 1 . 6	9 4 . 7	1 6 . 0
2 5 . 0	8 0 . 3	9 0 . 6	1 2 . 9
1 6 . 0	8 1 . 7	9 0 . 6	1 0 . 9
1 2 . 0	5 2 . 5	6 5 . 1	2 4 . 2
8 . 0	6 9 . 3	5 4 . 9	- 2 0 . 8
6 . 0	8 . 0	2 3 . 5	1 9 5 . 0
3 . 0	3 4 . 5	4 6 . 7	3 5 . 5
1 . 6	- 5 . 7	1 2 . 7	3 2 1 . 3
0 . 8	1 1 . 1	2 2 . 9	1 0 6 . 8

10

20

30

40

50

表 5. 単一四級物 2 と比較した化合物 9 のバイオフィルム減少

活性物質濃度 p p m	單一四級物 2	化合物 9	(比較例 9 - 單一四級物 2) * 1 0 0
	%	%	單一四級物 2
			%
1 0 0 0 . 0	7 4 . 7	9 9 . 6	3 3 . 5
5 0 0 . 0	8 0 . 5	9 9 . 6	2 3 . 7
2 5 0 . 0	6 4 . 1	9 9 . 5	5 5 . 3
1 2 5 . 0	5 2 . 4	9 8 . 9	8 8 . 6
1 0 0 . 0	6 8 . 6	9 7 . 3	4 1 . 9
6 2 . 0	9 1 . 1	9 0 . 7	- 0 . 4
5 0 . 0	9 2 . 2	7 7 . 6	- 1 5 . 9
3 1 . 0	9 5 . 4	4 6 . 9	- 5 0 . 8
2 5 . 0	9 1 . 3	7 6 . 8	- 1 5 . 9
1 6 . 0	9 3 . 5	7 9 . 0	- 1 5 . 5
1 2 . 0	8 1 . 6	7 0 . 9	- 1 3 . 2
8 . 0	6 8 . 5	6 2 . 6	- 8 . 6
6 . 0	5 1 . 1	4 5 . 4	- 1 1 . 1
3 . 0	7 2 . 5	4 1 . 2	- 4 3 . 2
1 . 6	3 9 . 7	3 5 . 9	- 9 . 6
0 . 8	- 9 . 6	2 0 . 5	3 1 4 . 7

10

20

【 0 2 0 4 】

実施例 9 : 単一四級物 2 と比較したポリマー四級物を使用したバイオフィルム減少

バイオフィルムアッセイは、A S T M E 2 7 9 9 - 1 1 の修正版を使用して行った。
単一四級物 2 を、化合物 1 5 と比較した。表 6 は、単一四級物 2 と比較したバイオフィルムの変化率を示す。図 7 および図 8 は、単一四級物 2 および化合物 1 6 と比較した、化合物 1 5 のバイオフィルム減少のグラフ図を示す。

30

40

50

【表 6】

表 6. 単一四級物 2 と比較した化合物 1 5 のバイオフィルム減少

活性物質濃度 p p m	単一四級物 2 %	化合物 1 5 %	$\frac{(\text{比較例 1 5} - \text{単一四級物 2}) * 10}{\text{単一四級物 2}}$ %
1 0 0 0. 0	6 8. 0	9 9. 6	4 6. 5
5 0 0. 0	8 3. 2	9 9. 3	1 9. 4
2 5 0. 0	6 9. 2	9 4. 8	3 7. 1
1 2 5. 0	4 4. 1	8 4. 4	9 1. 4
1 0 0. 0	4 5. 9	9 3. 8	1 0 4. 2
6 2. 0	7 3. 8	5 3. 8	- 2 7. 1
5 0. 0	8 9. 8	8 5. 8	- 4. 5
3 1. 0	7 9. 4	6 2. 6	- 2 1. 1
2 5. 0	9 2. 4	7 2. 8	- 2 1. 2
1 6. 0	8 6. 7	5 2. 7	- 3 9. 2
1 2. 0	8 6. 1	5 5. 5	- 3 5. 6
8. 0	7 1. 0	1 8. 0	- 7 4. 6
6. 0	8. 2	2 5. 9	2 1 7. 6
3. 0	6 5. 3	1 2. 3	- 8 1. 2
2	1 7. 8	1 2. 7	- 2 8. 7
1	- 3 0. 0	- 0. 1	- 9 9. 5

【 0 2 0 5 】

バイオフィルムアッセイにおいて、単一四級物 2 を化合物 1 6 と比較した。表 7 は、単一四級物 2 と比較したバイオフィルムの変化率を示す。図 7 および図 8 は、単一四級物 2 および化合物 1 5 と比較した化合物 1 6 のバイオフィルム減少のグラフ図を示す。

10

20

30

40

50

【表 7】

表 7. 単一四級物 2 と比較した化合物 1 6 のバイオフィルム減少

活性物質濃度 p p m	単一四級物 2 %	化合物 1 6 %	(比較例 1 6 - 単一四級物 2) * 1 0
			単一四級物 2
			%
1 0 0 0 . 0	7 4 . 7	9 3 . 3	2 5 . 0
5 0 0 . 0	8 0 . 5	8 4 . 8	5 . 3
2 5 0 . 0	6 4 . 1	7 6 . 7	1 9 . 7
1 2 5 . 0	5 2 . 4	6 4 . 4	2 2 . 8
1 0 0 . 0	6 8 . 6	7 4 . 3	8 . 4
6 2 . 0	9 1 . 1	3 0 . 4	- 6 6 . 6
5 0 . 0	9 2 . 2	4 5 . 2	- 5 1 . 0
3 1 . 0	9 5 . 4	- 6 . 0	- 1 0 6 . 3
2 5 . 0	9 1 . 3	2 5 . 9	- 7 1 . 6
1 6 . 0	9 3 . 5	- 2 . 7	- 1 0 2 . 9
1 2 . 0	8 1 . 6	1 4 . 4	- 8 2 . 3
8 . 0	6 8 . 5	- 2 9 . 3	- 1 4 2 . 8
6 . 0	5 1 . 1	1 . 9	- 9 6 . 3
3 . 0	7 2 . 5	- 1 . 7	- 1 0 2 . 3
1 . 6	3 9 . 7	1 . 4	- 9 6 . 5
0 . 8	- 9 . 6	- 1 0 . 0	- 4 . 9

【 0 2 0 6 】

実施例 1 0 : 五級カチオン性ポリマー塩の腐食気泡セル試験

気泡試験手順を介して、C₁₂ ~ C₁₈ アルキルジメチルベンジルアンモニウムクロリドと比較して、カチオン性ポリマー塩を、腐食性能について評価した。気泡試験は、水と油の混合がほとんどまたは全く起こらない低流量領域をシミュレートする。試験は、ブライン（ブラインの 8 0 % が、3 % 塩化ナトリウムブラインであり、ブラインの 2 0 % が、7 5 % L V T - 2 0 0 灯油および 2 5 % キシレンを含有する炭化水素である）を使用して行った。ブラインをケトルに入れ、二酸化炭素でパージした。試験を開始する前に、ブラインを二酸化炭素で連続的にパージして、ブラインを飽和させた。試験開始後、電極を挿入する 1 時間前および試験期間を通して試験セルを二酸化炭素で覆い、飽和を維持した。試験期間にわたってケトルを毎分 1 5 0 回転（r p m）で撹拌して、8 0 の熱平衡を維持した。腐食速度は、直線偏光抵抗（L P R）技術によって測定した。使用した作用電極は、炭素鋼であった。対電極および参照電極は、両方とも 1 0 1 8 炭素鋼であった。試験前に電極を全て洗浄し、研磨した。2 0 p p m の組成物の各々（有機溶媒中の相乗剤として、2 p p m の様々な五級カチオン性ポリマー塩の各々または比較の C₁₂ ~ C₁₈ アルキルジメチルベンジルアンモニウムクロリドおよび 1 % の 2 - メルカプトエタノール（2 M E）を含有する）が、そのそれぞれのセルに投与される前の 3 時間にわたってデータを収集した。データを一晚収集した。低濃度の組成物を使用して、組成物を区別した。

【 0 2 0 7 】

気泡試験の結果を表 8 に示す。ここで、p p m は、1 0 0 万当たりの部であり、C I は、腐食抑制剤であり、m p y は、1 年当たりのミル数であり、化合物番号は、表 1 に列挙する、および / または実施例 3 に示す通りである。

【表 8】

表 8. 気泡試験結果

カチオン性ポリマー塩 または比較カチオン性 化合物	カチオン性 ポリマー塩 または化合 物の投与量 (ppm)	相乗剤	カチオン性 ポリマー塩 または化合 物を添加す る前の平均 ベースライ ン腐食速度 (mpy)	カチオン性 ポリマー塩 または化合 物を添加し た15時間 後の腐食速 度の抑制 (mpy)	保護%
なし	0	なし	260	500	-92
C ₁₂ ~C ₁₈ アルキルジ メチルベンジルアンモ ニウムクロリド (比較 例)	2	1% 2ME	236	147	38
化合物1 (4ラウリルジ メチルおよび1トリメ チル四級物)	2	1% 2ME	223	130	42
化合物7 (1ステアリル ジメチルおよび1トリ メチル四級物)	2	1% 2ME	251	90	64
化合物9 (2ステアリル ジメチルおよび3トリ メチル四級物)	2	1% 2ME	226	90	60
化合物11 (4ステアリ ルジメチルおよび1ト リメチル四級物)	2	1% 2ME	228	55	76
化合物12 (5ステアリ ルジメチル四級物)	2	1% 2ME	255	115	55

【0208】

実施例11：六級カチオン性ポリマー塩の腐食気泡セル試験

腐食気泡セル試験を実施例A1の方法に従って行い、C₁₂~C₁₈アルキルジメチルベンジルアンモニウムクロリドと比較して、六級カチオン性ポリマー塩を腐食性能について評価した。20ppmの組成物の各々（有機溶媒中の相乗剤として、2ppmの様々な六級カチオン性ポリマー塩の各々または比較のC₁₂~C₁₈アルキルジメチルベンジルアンモニウムクロリドおよび1%の2MEを含有する）が、そのそれぞれのセルに投与される前の3時間にわたってデータを収集した。データを一晚収集した。低濃度の組成物を使用して、組成物を区別した。

【0209】

気泡試験の結果を表9に示す。ここで、ppmは、100万当たりの部であり、CIは、腐食抑制剤であり、mpyは、1年当たりのミル数であり、化合物番号は、表1に列挙する、および/または実施例3に示す通りである。

10

20

30

40

50

【表 9】

表 9. 気泡試験結果

カチオン性ポリマー塩 または比較カチオン性 化合物	カチオン性 ポリマー塩 または化合 物の投与量 (ppm)	相乗剤	カチオン性 ポリマー塩 または化合 物を添加す る前の平均 ベースライ ン腐食速度 (mpy)	カチオン性 ポリマー塩 または化合 物を添加し た15時間 後の腐食速 度の抑制 (mpy)	保護%
なし	0	なし	260	500	-92
C ₁₂ ~C ₁₈ アルキルジ メチルベンジルアンモ ニウムクロリド (比較 例)	2	1% 2ME	236	147	38
化合物13(6ステアリ ルジメチル四級物)	2	1% 2ME	239	114	52

10

20

【0210】

実施例12：ポリエチレンイミン系カチオン性ポリマー塩の腐食気泡セル試験

気泡試験手順を介して、C₁₂~C₁₈アルキルジメチルベンジルアンモニウムクロリドと比較して、カチオン性ポリマー塩を、腐食性能について評価した。気泡試験は、水と油の混合がほとんどまたは全く起こらない低流量領域をシミュレートする。試験は、ブライン(ブラインの80%が、3%塩化ナトリウムブラインであり、ブラインの20%が、75% LVT-200灯油および25%キシレンを含有する炭化水素である)を使用して行った。ブラインをケトルに入れ、二酸化炭素でパージした。試験を開始する前に、ブラインを二酸化炭素で連続的にパージして、ブラインを飽和させた。試験開始後、電極を挿入する1時間前および試験期間を通して試験セルを二酸化炭素で覆い、飽和を維持した。試験期間にわたってケトルを毎分150回転(rpm)で攪拌して、80の熱平衡を維持した。腐食速度は、直線偏光抵抗(LPR)技術によって測定した。使用した作用電極は、炭素鋼であった。対電極および参照電極は、両方とも1018炭素鋼であった。試験前に電極を全て洗浄し、研磨した。20ppmの組成物の各々(有機溶媒中の相乗剤として、2ppmの様々なポリエチレンイミン系カチオン性ポリマー塩の各々または比較のC₁₂~C₁₈アルキルジメチルベンジルアンモニウムクロリドおよび1%の2-メルカプトエタノール(2ME)を含有する)が、そのそれぞれのセルに投与される前の6時間にわたってデータを収集した。しかしながら、比較組成物については、組成物を添加する3時間前にデータを収集しただけであった。データを一晚収集した。低濃度の組成物を使用し、組成物を区別した。

30

40

【0211】

気泡試験の結果を表10に示す。ここで、ppmは、100万当たりの部であり、CIは、腐食抑制剤であり、mpyは、1年当たりのミル数であり、化合物番号は、実施例5に示す通りである。

50

【表 10】

表 10. 気泡試験結果

カチオン性ポリマー塩 または比較カチオン性 化合物	カチオン性 ポリマー塩 または化合物 の投与量 (ppm)	相乗剤	カチオン性 ポリマー塩 または化合物 を添加す る前の平均 ベースライ ン腐食速度 (mpy)	カチオン性 ポリマー塩 または化合物 を添加し た15時間 後の腐食速 度の抑制 (mpy)	保護%
なし	0	なし	260	500	-92
C ₁₂ ~C ₁₈ アルキルジ メチルベンジルアンモ ニウムクロリド (比較 例)	2	1% 2ME	236	147	38
化合物 14	2	1% 2ME	257	138	46
化合物 15	2	1% 2ME	255	134	48

10

【0212】

化合物 15 により多くのステアрил基を添加すると、化合物 15 と比較して、腐食速度がさらに低下し、保護性が向上すると予想される。

【0213】

本明細書に開示される任意の組成物は、本明細書に開示される化合物 / 成分のいずれかを含む、それからなる、または本質的にそれからなることができる。本開示によれば、「から本質的になる (consist essentially of)」、「から本質的になる (consists essentially of)」、「から本質的になる (consisting essentially of)」等の語句は、特許請求の範囲を、特定の材料またはステップ、および請求された発明の基本的および新規特徴 (複数可) に実質的に影響を及ぼさない材料またはステップに限定する。

30

【0214】

本明細書で使用される場合、用語「約」は、それらそれぞれの試験測定値において見出される標準偏差から生じる誤差内にある引用された値を指し、それらの誤差が決定できない場合、「約」は、引用された値の 10% 以内を指す。

【0215】

開示され、本発明において特許請求される組成物および方法の全ては、本開示の観点から、不適当な実験を伴わずに作製および実行できる。本発明は多くの異なる形態で具現化され得るが、本明細書において詳細に説明したものが、本発明の具体的な好ましい実施形態である。本開示は、本発明の原理の単なる例示であり、本発明を図示の特定の実施形態に限定することを意図したものではない。さらに、異なるように明示的に述べられない限り、用語「a (ある 1 つの)」は、「少なくとも 1 つ」または「1 つ以上」を含むことを意図する。例えば、「ある 1 つの界面活性剤 (a surfactant)」は、「少なくとも 1 種の界面活性剤」または「1 種以上の界面活性剤」を含むことを意図する。

40

【0216】

絶対項または近似項で与えられる任意の範囲はどちらも、両方を包括することを意図するものであり、本明細書において使用されるあらゆる定義は、明確にすることを意図するものであり、限定を意図するものではない。本発明の広範な範囲を示す数値範囲およびパラメータは近似値であるものの、具体的な実施例において示される数値は可能な限り正確に報告されている。しかしながら、あらゆる数値は、それらそれぞれの試験測定値におい

50

て見出される標準偏差に必然的に起因するある特定の誤差を本質的に含んでいる。また、本明細書に開示される全ての範囲は、その中に包含されるあらゆる全ての部分範囲（全ての小数值および全体値を含む）を包括するものとして理解されるべきである。

【 0 2 1 7 】

さらに、本発明は、本明細書に記載される様々な実施形態の一部または全ての、あらゆる全ての可能な組み合わせを包括する。また、本明細書に開示される好ましい実施形態に対する様々な変更および修正が、当業者には明らかであることも理解されるべきである。かかる変更および修正は、本発明の趣旨および範囲を逸脱することなく、かつその意図する利点を縮小することなく行うことができる。したがって、かかる変更および修正は、添付の特許請求の範囲によって網羅されることが意図される。

10

20

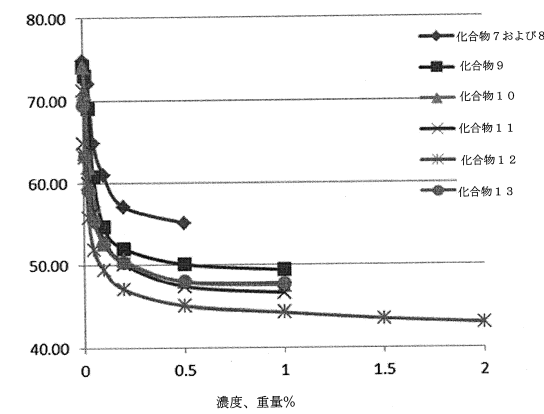
30

40

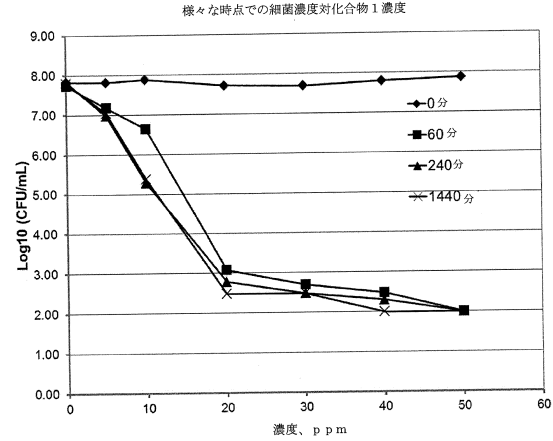
50

【図面】

【図 1】

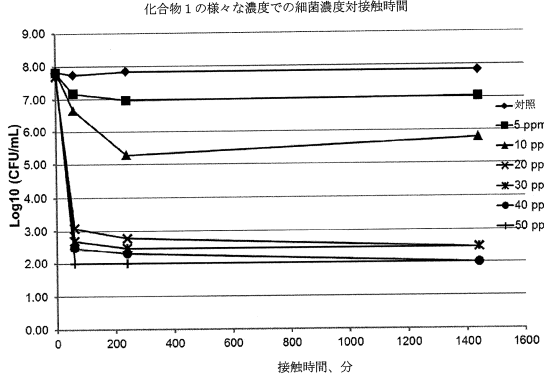


【図 2】

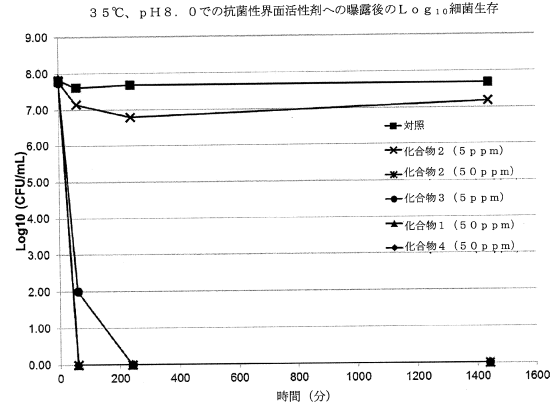


10

【図 3】



【図 4】



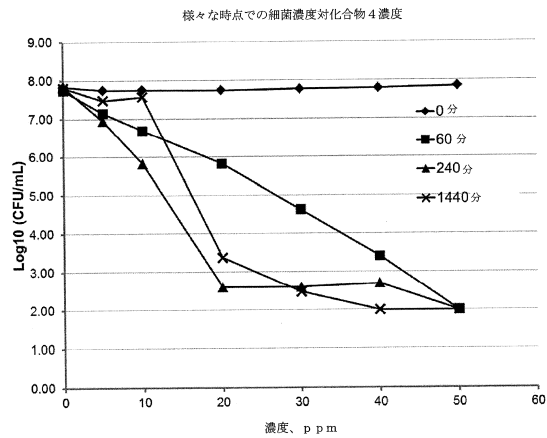
20

30

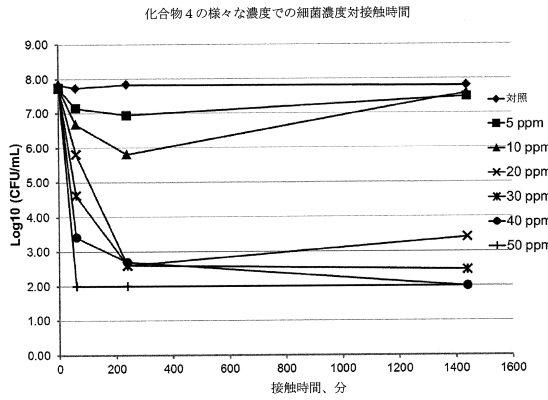
40

50

【図 5】

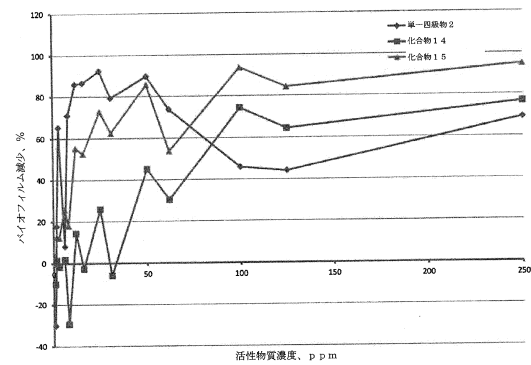


【図 6】

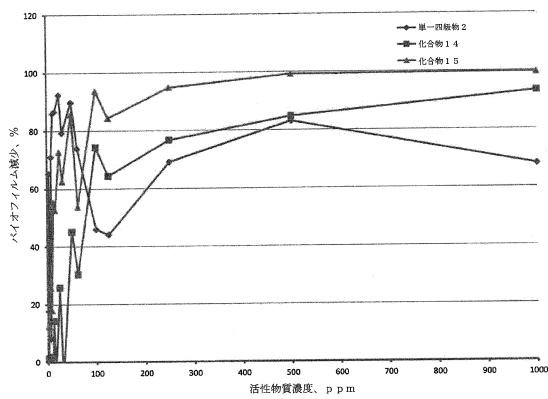


10

【図 7】



【図 8】



20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

C 0 2 F 1/50 (2023.01)
C 2 3 F 11/14 (2006.01)

F I

C 0 2 F 1/50 5 1 0 A
C 0 2 F 1/50 5 2 0 A
C 0 2 F 1/50 5 2 0 B
C 0 2 F 1/50 5 2 0 C
C 0 2 F 1/50 5 2 0 K
C 0 2 F 1/50 5 2 0 P
C 0 2 F 1/50 5 3 1 K
C 0 2 F 1/50 5 3 1 M
C 0 2 F 1/50 5 3 1 N
C 0 2 F 1/50 5 3 1 P
C 0 2 F 1/50 5 3 1 Q
C 0 2 F 1/50 5 3 1 R
C 0 2 F 1/50 5 3 2 B
C 0 2 F 1/50 5 3 2 C
C 0 2 F 1/50 5 3 2 D
C 0 2 F 1/50 5 3 2 H
C 0 2 F 1/50 5 3 2 J
C 0 2 F 1/50 5 3 2 K
C 0 2 F 1/50 5 4 0 B
C 0 2 F 1/50 5 4 0 F
C 2 3 F 11/14

(33)優先権主張国・地域又は機関

米国(US)

(72)発明者 ファン シャオドン

アメリカ合衆国 イリノイ オーロラ プリークネス ドライブ 3 1 4 9

(72)発明者 モロニー ジェレミー

アメリカ合衆国 テキサス ケイティ サウス レイク ビレッジ ドライブ 3 4 1 1

(72)発明者 ダウン アシシュ

アメリカ合衆国 イリノイ ネイパービル ウェストミンスター ドライブ 1 5 1 7 アpartment
1 0 3

審査官 古妻 泰一

(56)参考文献 中国特許出願公開第 1 0 3 9 3 6 6 0 3 (C N , A)

SUN Yuhai et al. , Synthesis and properties of oligomeric cationic surfactants , Jingxi Shiyo
u Huagong , 2014年09月 , No.31,Vol.5 , pp.35-38

(58)調査した分野 (Int.Cl. , D B 名)

C 0 8 G 7 3 / 0 4

A 0 1 P 3 / 0 0

A 0 1 N 6 1 / 0 0

C 0 2 F 1 / 7 6

C 0 2 F 1 / 7 8

C 0 2 F 1 / 5 0

C 2 3 F 1 1 / 1 4

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)