



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

(11) PI 0415901-2 B1

(22) Data do Depósito: 29/10/2004

(45) Data de Concessão: 26/01/2016
(RPI 2351)



* B R P I 0 4 1 5 9 0 1 B 1 *

(54) Título: PROCESSO PARA PREPARAR COMPOSTOS, COMPOSTO, USO DO MESMO, E, AGENTE DE LAVAGEM OU DE LIMPEZA

(51) Int.Cl.: C07C 2/66; C11D 1/22

(30) Prioridade Unionista: 29/10/2003 DE 103 50 333.1

(73) Titular(es): BASF AKTIENGESELLSCHAFT

(72) Inventor(es): NILS BOTTKE, REGINA BENFER, MARCO BOSCH, THOMAS NARBESHUBER, ULRICH STEINBRENNER, JÜRGEN STEPHAN

“PROCESSO PARA PREPARAR COMPOSTOS, COMPOSTO, USO DO MESMO, E, AGENTE DE LAVAGEM OU DE LIMPEZA”

A presente invenção diz respeito a processos para preparar compostos de alquilarila e alquilarilsulfonatos obteníveis por estes processos, para o uso destes últimos como tensoativos, preferivelmente em agentes de lavagem e de limpeza, e a agentes de lavagem e de limpeza contendo-os.

Os alquilbenzenossulfonatos (ABS) têm sido usados por algum tempo como tensoativos em agentes de lavagem e de limpeza. Após tais tensoativos com base no tetrapropilenobenzenossulfonatos substancialmente lineares (LAS) terem sido usados a princípio, porém tinham biodegradabilidade deficiente, os alquilbenzenossulfonatos substancialmente lineares (LAS) foram preparados e usados na ocasião subsequente. Entretanto, os alquilbenzenossulfonatos lineares não possuem perfis de propriedades adequados em todos os campos de aplicação.

Deve ser vantajoso, por exemplo, aprimorar suas propriedades de lavagem a frio ou suas propriedades em água pesada. Da mesma forma desejável é a facilidade de formulação, originando-se da viscosidade dos sulfonatos e de sua solubilidade. Estas propriedades aprimoradas são apresentadas pelos compostos levemente ramificados ou misturas de compostos levemente ramificados com compostos lineares, não obstante a graduação correta de ramificação e/ou a graduação correta da mistura tenham sido alcançadas. A ramificação excessiva prejudica a biodegradabilidade dos produtos. Os produtos excessivamente lineares têm uma influência negativa sobre a viscosidade e a solubilidade dos sulfonatos.

Além disso, a relação dos fenilalcanos terminais (2-fenilalcanos e 3-fenilalcanos) para os fenilalcanos internos (4-, 5-, 6- etc. fenilalcanos) desempenha um papel nas propriedades do produto. Uma fração de 2-fenila de cerca de 20 a 40 % e uma fração de 2- e 3-fenila de cerca de 40 a 60 % podem ser vantajosas com respeito à qualidade do produto

(solubilidade, viscosidade, propriedades de lavagem, biodegradabilidade).

Para preparar alquilbenzenos levemente ramificados (MLAB), por exemplo, uma mistura de olefina levemente ramificada é reagida com benzeno na presença de um catalisador de alquilação. A posição do grupo fenila é determinada pela seletividade de conformação do catalisador. Os zeólitos do tipo de estrutura mordenite reagem com preferência de aproximadamente 85 % para dar 2-fenilalquenos; aproximadamente 15 % de 3-fenilalcano são formados, ver Wang *et al.*, *Catl. Letters* 2001, 76, 1-2.

Os tensoativos tendo teores muito elevados de 2- e 3-fenila podem ter a desvantagem de que a processabilidade dos produtos sofra uma grande elevação na viscosidade dos sulfonatos.

Além disso, o procedimento de dissolução imperfeita pode resultar. Por exemplo, o ponto de Krafft de uma solução de LAS tendo frações de 2- e 3-fenila muito elevadas ou muito baixas vai até 10 a 20 °C acima de quando a fração ótima de 2- e 3-fenila é selecionada.

A WO 03/029172 descreve processos para preparar compostos de alquilarila em que as misturas de olefina C₄ originadas das correntes de LPG, LNG ou MTO são convertidas em olefinas C₁₀₋₁₂ por metátese e dimerização, e são então usadas para alquilar hidrocarbonetos aromáticos. O processo provê compostos de alquilarila semi-ramificados, os quais são referidos como tendo propriedades vantajosas quando usados como tensoativos.

A DE-A 100 39 995 diz respeito a processos para preparar alquilarilsulfonatos, que são obtidos por uma metátese de dois estágios de olefinas C₄ para olefinas C₁₀₋₁₂, seguida pela alquilação de compostos aromáticos, e subsequente sulfonação e neutralização. As fontes listadas para as olefinas C₄ são processos de craquear tais como o craqueamento a vapor ou o craqueamento de FCC ou a desidrogenação de butanos ou a dimerização de eteno. Nestes últimos processos, os dienos, alquinas ou eninas podem ser

removidos antes da metátese por métodos comuns tais como a extração ou a hidrogenação seletiva.

5 A DE-A-100 59 398 da mesma forma diz respeito a um processo para preparar alquilarilsulfonatos em que, na média estatística, olefinas C_{10-14} predominantemente mono-ramificadas são reagidas com um hidrocarboneto aromático na presença de um catalisador de alquilação que contenha zeólitos do tipo faujasita. As olefinas C_{10-14} podem ser obtidas por metátese, extração, síntese de Fischer-Tropsch, dimerização ou isomerização.

10 Algumas das olefinas usadas até agora para alquilação têm um grau de ramificação muito elevado ou muito baixo, ou têm uma relação imperfeita de fenilalcanos terminais para internos.

É um objeto da presente invenção prover um processo para preparar compostos de alquilarila e alquilarilsulfonatos que sejam, pelo menos parcialmente, ramificados e, assim, tenham propriedades vantajosas para uso em agentes de lavagem e de limpeza, em comparação com os compostos conhecidos. Eles devem, em particular, ter um perfil de propriedades adequadas de biodegradabilidade, insensibilidade à dureza da água, solubilidade e viscosidade no decurso da preparação e no decurso do uso. Além disso, deve ser possível preparar os alquilarilsulfonatos de forma barata.

20 De acordo com a invenção, este objeto é alcançado por um processo para preparar compostos de alquilarila mediante a reação de uma mistura de monoolefina C_{10-14} com um hidrocarboneto aromático na presença de um catalisador de alquilação, para formar compostos aromáticos alquílicos e, se apropriado, subseqüentemente sulfonando-se e neutralizando-se os compostos de alquilarila resultantes, em que, nas monoolefinas C_{10-14} , em média, mais do que 0 % e até 100 % de ramos metílicos estejam presentes na cadeia de carbono mais longa e menos do que 50 % dos ramos metílicos estejam nas posições 2, 3 e 4, calculados partindo-se das extremidades das cadeias da cadeia de carbono mais longa.

O processo de acordo com a invenção oferece a vantagem significativa de que o uso da única mistura olefínica, após a alquilação de um aromático, sulfonação e neutralização, produz um tensoativo que caracteriza uma combinação de propriedades de desempenho excelentes (solubilidade, viscosidade, estabilidade quanto à dureza da água, propriedades de lavagem, biodegradabilidade). Com respeito à biodegradabilidade dos alquilarilsulfonatos, os compostos que sejam menos intensamente adsorvidos na lama de despejo do que o LAS convencional, são particularmente vantajosos.

Na etapa de alquilação, existe isomerização estrutural da olefina, por exemplo a migração do grupo alquila. A estrutura ramificada da mistura olefínica usada difere daquela da cadeia lateral dos isômeros de MLAB formados, isto é, o tipo e a posição das ramificações podem ser mudados na alquilação. Entretanto, o grau de ramificação é muito substancialmente retido.

Em conformidade com a invenção, foi observado que, para a preparação de alquilbenzenos levemente ramificados (MLAB), não é apenas a proporção da olefina ramificada em metila isoladamente e, portanto, o grau de ramificação, que é importante na alquilação, porém certamente de forma igual a posição dos grupos metila. A ausência substancial, de preferência completa, das ramificações 2-, 3- e 4-metila na olefina de partida, tem sido observada como sendo particularmente favorável à qualidade do produto dos MLAB, e também ao tempo de existência do catalisador de alquilação.

Neste contexto, é sem importância o quando a ligação dupla se acha na olefina, uma vez ela seja isomerizada sob as condições da alquilação. No contexto deste pedido, e em um afastamento dos regulamentos do IUPAC, “a ramificação metila na posição 2”, por exemplo, intenta referir-se a todos os alquenos que, após a hidrogenação, sejam convertidos em alcanos, os quais, de acordo com os regulamentos do IUPAC (referência: por exemplo,

“*Hellwinkel*”), pertencem aos 2-metilalcanos. Por exemplo, o 2-metilundec-2-eno deve ser igualado com o 10-metilundec-2-eno, mas também com, por exemplo, o 10-metilundec-4-eno. O mesmo se aplica às ramificações de metila nas posições 3 e 4 ao longo, ou na cadeia mais longa, de carbono. No caso da reação de metilalcanos com benzeno na presença de um catalisador de alquilação, o rearranjo apenas ocorre em uma leve extensão. Os alquilbenzenos quaternários, 2-metil-2-fenilalcano e 3-metil-3-fenilalcano, são predominantemente formados.

É sabido que as estruturas deste tipo têm apenas fraca biodegradabilidade e sua presença, portanto, reduz a qualidade do produto, conforme as WO 99/05244 e WO 02/092737.

O uso de 4-metilalquenos (alqueno tendo um radical alquila na posição 4, observado de uma extremidade da cadeia de carbono mais longa) na alquilação conduz a uma desativação rápida do catalisador. A formação dos 4-metil-4-fenilalcanos em massa pode levar ao bloqueio dos canais de cobertura dos centros ativos do catalisador.

De acordo com a invenção, foi observado que tanto a reação dos 5-metilalquenos quanto dos 6-metilalquenos (isto é, alquenos tendo radicais metila nas posições 5 ou 6, observados das extremidades de cadeia da cadeia de carbono mais longa) com benzeno na presença do mesmo catalisador de alquilação, formam alquilbenzenos tendo predominantemente cadeias laterais de ramificação metila isoladamente. O tempo de vida do catalisador é elevado, a fração do MLAB quaternário é baixa, embora a migração do grupo metila forme isômeros em que o grupo metila esteja nas posições 2, 3 ou 4 da cadeia lateral.

De acordo com a invenção, as misturas de monoolefina C_{10-14} são usadas. Estas podem ser misturas de monoolefinas C_{10} , C_{11} , C_{12} , C_{13} ou C_{14} ou mesmo ser misturas de monoolefinas tendo diferentes comprimentos de cadeia. Por exemplo, as monoolefinas C_{10-12} tendo comprimentos de cadeia

nesta faixa podem ser usadas. Tipicamente, cada um dos comprimentos de cadeia é uma mistura de olefinas ramificadas e não ramificadas, e as olefinas ramificadas, por sua vez, são olefinas diferentemente ramificadas.

De acordo com a invenção, em média nas monoolefinas C_{10-14} , mais do que 0 % e até 100 %, preferivelmente de 10 % a 80 %, mais preferível de 10 % a 60 %, das ramificações metila, acham-se presentes na cadeia de carbono mais longa, e menos do que 50 %, preferivelmente menos do que 30 %, mais preferível menos do que 10 %, em particular menos do que 5 %, das ramificações metila se acham presentes nas posições 2, 3 e 4, calculadas partindo-se das extremidades de cadeia da cadeia de carbono mais longa. As posições 2, 3 e 4 dizem respeito à cadeia de carbono mais longa, independente da posição da ligação dupla dentro da cadeia de carbono. A expressão “em média” significa que, por exemplo, no caso de 100 % de ramificações metila, cada cadeia de olefina estatisticamente tem uma ramificação metila, embora possa na prática haver olefinas presentes na mistura que tenham nenhuma, uma, duas ou mais ramificações metila. As monoolefinas C_{10-14} , em cada caso, preferivelmente têm um máximo de 2 ramificações metila, em particular um máximo de uma ramificação metila.

A fração e a posição das ramificações metila podem ser determinadas por cromatografia gasosa e pelos métodos costumeiros.

A mistura de olefinas pode originar-se de numerosas fontes e, pode ser tratada posteriormente mediante etapas adequadas de modo a apresentar o padrão de ramificação da invenção. Por exemplo, as olefinas lineares ou seletivamente ramificadas podem ser adicionadas a uma mistura, ou uma remoção de certas olefinas da mistura pode ser realizada.

Por exemplo, a olefina é obtida por

a1) preparar-se uma mistura de olefina C_4/C_5 ,

b1) converter a mistura de olefina C_4/C_5 obtida desta maneira através de catalisador de metátese para preparar uma mistura de olefina que

compreenda 2-penteno e/ou 2-hexeno e/ou 3-hepteno, e, se apropriado, remover 2-penteno e/ou 3-hexeno e/ou 3-hepteno,

c1) dimerizar o 2-penteno e/ou 2-hexeno e/ou 3-hepteno obtidos no estágio b1) através de um catalisador de dimerização para dar uma
5 mistura compreendendo olefinas C_{10-14} e, se apropriado, removendo as olefinas C_{10-14} .

No estágio a1), as olefinas C_4 da mistura de olefinas C_4/C_5 podem ser obtidas por desidrogenação da fração C_4 da corrente de LPG, LNG ou MTO e, subsequentemente, removendo-se quaisquer dienos, alquinas e eninas formadas, e a fração da corrente de LPG, LNG ou MTO antes ou após
10 a desidrogenação e remoção dos dienos, alquinas e eninas. A corrente de LNG pode ser convertida na mistura de olefina C_4 através de um processo de MTO.

No estágio c1), os heptenos podem também ser misturados entre si.

15 A mistura olefinica pode também ser obtida por

a2) preparar uma mistura de olefina C_{5-7} mediante desidrogenação de alcanos C_{5-7} com isomerização a montante ou a jusante, se apropriado,

b2) dimerizar a mistura de olefina C_{5-7} obtida no estágio a2)
20 através de um catalisador de dimerização para dar uma mistura compreendendo as olefinas C_{10-14} e, se apropriado, removendo-se as olefinas C_{10-14} .

Aromáticos adequados são benzeno, tolueno, etilbenzeno e os xilenos; preferência é dada aos benzeno, tolueno e etilbenzeno, particular
25 preferência ao benzeno.

Catalisadores adequados são os zeólitos dos tipos de estrutura EPI, FER, pentasilas tendo a estrutura MFI ou MEL, faujasitas, por exemplo Y, LTL, MOR, BEA, GME, MAZ. Preferência é dada a LTL, FAU, incluindo os tipos USY, BEA e MOR. Preferência particular é dada a MOR.

Estes zeólitos são preferivelmente usados na forma de H e/ou Al, embora, dependendo da preparação, traços de Na, K, Mg ou Ca possam estar presentes. A troca parcial ou completa do alumínio da treliça por B, Ga ou Fe é possível.

5 O catalisador pode ser usado diretamente como um pó fino em suspensão; no caso de zeólitos, existem, por exemplo, tamanhos de partículas entre 100 nm e uns poucos μm . Entretanto, estes catalisadores são usualmente conformados entre si com materiais aglutinantes para dar corpos conformados de 0,1 a 5 mm de diâmetro. Para uso em leitos fixos, preferência é dada a 1 a 10 3 mm, a 0,001 a 1 mm em suspensão, a 0,1 a 3 mm em leitos fluidificados. Aglutinantes particularmente adequados são as argilas, aluminas, por exemplo Purals, Sirals e Versals, e géis de sílica. Além disso, os enchedores inertes tais como SiO_2 (por exemplo o Aerosil da Degussa) podem ser adicionados.

15 Corpos conformados adequados são os tabletes, os extrusados, anéis, extrusados com nervuras, extrusados em estrela ou roda de vagão.

Os catalisadores preferivelmente têm áreas superficiais específicas de 30 a 2000 m^2/g , preferivelmente de 100 a 700 m^2/g . O volume dos poros tendo um diâmetro de 2 a 20 nm é tipicamente de 0,05 a 0,5 ml/g, preferivelmente de 0,01 a 0,1 ml/g, e aquele dos poros de 200 a 2000 nm é 20 tipicamente de 0,05 a 0,5 ml/g, preferivelmente de 0,05 a 0,3 ml/g.

Os catalisadores desativados podem, na maioria dos casos, ser reativados, por exemplo, por dissipação ao ar ou ao ar pobre em 250 a 550 $^{\circ}\text{C}$. Alternativamente, o tratamento com compostos que tenham ação oxidante em temperatura relativamente baixa, opcionalmente também na fase líquida, é 25 possível; menção deve ser feita aqui, em particular, aos NO_x , H_2O_2 e aos halogêneos. A regeneração pode ser efetuada diretamente no reator de alquilação ou externamente.

A alquilação preferivelmente tem lugar na fase líquida, isto é, sem fase gasosa, o que pode ser obtido por uma pressão apropriada do

sistema. As temperaturas de alquilação são preferivelmente de 100 a 250 °C, mais preferível de 120 a 220 °C, ainda mais preferível de 130 a 220 °C, especialmente de 150 °C a 180 °C, por exemplo 160 °C.

5 Reatores adequados são, por exemplo, todos os sistemas que tenham características de tanque agitado, isto é, tanques agitados, reatores de circuito fechado, reatores tendo circulação externa, reatores de circuito fechado de jato, e também leitos fluidificados ou móveis são adequados.

10 A invenção também diz respeito a compostos de alquilarila, especialmente de alquilbenzenossulfonatos, os quais são obteníveis pelo processo de acordo com a invenção. Os alquilbenzenossulfonatos podem de preferência ser usados como tensoativos, especialmente em agentes de lavagem e de limpeza.

15 A invenção também diz respeito a agentes de lavagem e de limpeza, que compreendem os alquilbenzenossulfonatos da invenção, além dos ingredientes costumeiros. Quanto aos ingredientes costumeiros e às composições agentes de lavagem, referência pode ser feita à WO 03/029172. Ali, os ingredientes costumeiros, tais como branqueadores, ativadores de branqueamento, estabilizadores de branqueamento, reforçadores inorgânicos (substâncias reforçadoras), tensoativos aniônicos, tensoativos não iônicos, co-
20 reforçadores orgânicos, inibidores do acinzentamento e polímeros de liberação de sujidades, inibidores da transferência de cores, enzimas, etc., são listados.

25 Um detergente típico de lavagem de roupa de serviço pesado, pulverulento ou granular, da invenção, pode ter, por exemplo, a seguintes composição:

- de 0,5 a 50 % em peso, preferivelmente de 5 a 30 % em peso, de pelo menos um tensoativo aniônico e/ou não iônico,
- de 0,5 a 60 % em peso, preferivelmente de 15 a 40 % em peso, de pelo menos um reforçador inorgânico,

– de 0 a 20 % em peso, preferivelmente de 0,5 a 8 % em peso, de pelo menos um co-reforçador orgânico,

– de 2 a 35 % em peso, preferivelmente de 5 a 30 % em peso, de um branqueador inorgânico,

5 – de 0,1 a 20 % em peso, preferivelmente de 0,5 a 10 % em peso, de um ativador de branqueamento, se apropriado em uma mistura com outros ativadores de branqueamento,

– de 0 a 1 % em peso, preferivelmente até no máximo 0,5 % em peso, de um catalisador de branqueamento,

10 – de 0 a 5 % em peso, preferivelmente de 0 a 2,5 % em peso, de um inibidor polimérico de transferência de cor,

– de 0 a 1,5 % em peso, preferivelmente de 0,1 a 1,0 % em peso, de proteases,

15 – de 0 a 1,5 % em peso, preferivelmente de 0,1 a 1,0 % em peso, de lipases,

– de 0 a 1,5 % em peso, preferivelmente de 0,2 a 1,0 % em peso, de um polímero de liberação de sujidades,

adicionar 100 % de auxiliares e adjuvantes costumeiros e água.

20 Os reforçadores inorgânicos usados com preferência em agentes de lavagem, são o carbonato de sódio, o hidrogencarbonato de sódio, os zeólitos A e P, e também os silicatos de sódio amorfos e cristalinos.

Os co-reforçadores orgânicos usados com preferência em agentes de lavagem são os copolímeros de ácido acrílico/ácido maleico, os terpolímeros de ácido acrílico/ácido maleico/éster vinílico, e ácido cítrico.

25 Branqueadores inorgânicos usados com preferência em detergentes de lavagem de roupa são o perborato de sódio e o carbonato de sódio peridrato.

Os tensoativos aniônicos usados com preferência em agentes de lavagem são os alquilbenzenossulfonatos (LAS) lineares e levemente

ramificados da invenção, os sulfatos de álcool graxo e os sabões.

Os tensoativos não iônicos usados com preferência em agentes de lavagem são os etoxilatos de álcool oxo C_{11} a C_{17} tendo de 3 a 13 unidades de óxido de etileno, os etoxilatos de álcool graxo C_{10} a C_{16} tendo de 3 a 13 unidades de óxido de etileno, e também os álcoois graxos ou oxo etoxilados adicionalmente alcoxilados com 1 a 4 unidades de óxido de propileno ou de óxido de butileno.

As enzimas usadas com preferência em agentes de lavagem são as proteases, as lipases e as celulases. As enzimas comerciais são adicionadas ao agente de lavagem geralmente nas quantidades de 0,05 a 2,0 % em peso, preferivelmente de 0,2 a 1,5 % em peso, da enzima formulada. Proteases adequadas são, por exemplo, Savinase, Desazym e Esperase (fabricante: Novo Nordisk). Uma lipase adequada é, por exemplo, a Lipolase (fabricante: Novo Nordisk). Uma celulase adequada é, por exemplo, Celluzym (fabricante: Novo Nordisk).

Os inibidores de acinzentamento e os polímeros de liberação de sujidades que são usados com preferência nos agentes de lavagem, são polímeros de enxerto de acetato de vinila em óxido de polietileno de massa molar de 2500 a 8000, em uma relação em peso de 1,2:1 a 3,0:1, tereftalato de polietileno/tereftalato de oxietileno de massa molar de 3000 a 25000, composto de óxidos de polietileno de massa molar de 750 a 5000, com ácido tereftálico e óxido de etileno, e uma relação molar de tereftalato de polietileno para tereftalato de polioxietileno de 8:1 a 1:1, e também policondensados em bloco de acordo com a DE-A-44 03 866.

Os inibidores de transferência de cor que são usados com preferência em agentes de lavagem são copolímeros solúveis de vinilpirrolidona e vinilimidazol tendo massas molares acima de 25000, e também polímeros reticulados finamente divididos com base em vinilimidazol.

Os agentes de lavagem pulverulentos ou granulares da invenção podem conter até 60 % em peso de extensores inorgânicos. É de costume usar sulfato de sódio para esta finalidade. No entanto, os agentes de lavagem da invenção são de preferência pobres em extensores e contêm apenas até 20 % em peso, mais preferível apenas até 8 % em peso, de extensores.

Os agentes de lavagem da invenção podem ter densidades de massa variáveis na faixa de 300 a 1200 g/litro, em particular de 500 a 950 g/litro. Os agentes compactos modernos de lavagem geralmente têm altas densidades de massa e apresentam uma estrutura granular.

A invenção é ilustrada com detalhes nos exemplos que seguem.

EXEMPLOS

EXEMPLO 1

Um reator tubular disposto em um forno de ar forçado foi carregado com 32 g de pedaço de catalisador (60 % de H-mordenite tendo $\text{SiO}_2:\text{Al}_2\text{O}_3 = 24,5$, conformado com 40 % de Pural SB da Condea) de tamanho de partícula de 0,7 a 1,0 mm, e ativado em 500 °C por 6 horas. O forno foi então esfriado, jateado com uma alimentação de benzeno: 5-metilundeceno (4:1 molar) e carregado a 0,44 g/g_{cat}h, e a velocidade de fluxo da corrente de circulação foi estabelecida em 10 vezes mais elevada. Finalmente o reator foi aquecido a 160 °C (líquido monofásico, 30 bar de pressão hidráulica), e o conteúdo de reagentes e produtos na corrente efluente foi detectado por meio de GC resolvido no tempo. A mistura resultante de alquilarila C₁₈ foi purificada por destilação e analisada por meio da acoplagem de cromatografia gasosa-espectrometria de massa e ¹H/¹³C RMN. Após 86 horas, uma redução na conversão de dodeceno abaixo de 95 % foi observada.

EXEMPLO 2 (COMPARATIVO)

No aparelho do Exemplo 1, uma alimentação de benzeno: 4-

metilundeceno (4:1 molar) foi convertida sob condições similares. A redução na conversão de dodeceno abaixo de 95 % foi observada tão cedo quanto após 30 horas.

EXEMPLO 3

5 Em uma autoclave, diferentes metilundecenos como especificado abaixo, foram reagidos com benzeno em uma relação molar de 1:10 em diferentes temperaturas através de um catalisador de mordenite (5 % em peso). Os resultados são resumidos nas tabelas que seguem:

Conversão de 2-metilundeceno (comparativa):

10	Temperatura da reação	Produtos da reação	
		2-m-2-p	3-m-3-p
	100 °C	100 %	< 1 %
	120 °C	94,9 %	< 1 %
	140 °C	88,7 %	< 1 %
15	160 °C	86,9 %	< 1 %
	180 °C	77,8 %	< 1 %
	200 °C	42,5 %	< 1 %

Conversão de 3-metilundeceno (comparativa):

20	Temperatura da reação	Produtos da reação		
		2-m-2-p	2-m-2-p	3-m-3-p
	100 °C	13,6 %	47,4 %	15,6 %
	120 °C	16,1 %	50,4 %	12,7 %
	140 °C	14,4 %	46,6 %	8,9 %
	160 °C	13,8 %	44,0 %	6,3 %
25	180 °C	19,3 %	39,8 %	8,0 %
	200 °C	21,9 %	27,4 %	4,7 %

Conversão de 5-metilundeceno

	Temperatura da reação	Produtos da reação		
		5/7-m-2-p	2-m-2-p	3-m-3-p
	100 °C	47,9 %	1,6 %	< 1 %
5	120 °C	50,0 %	2,2 %	< 1 %
	140 °C	47,6 %	3,2 %	< 1 %
	160 °C	47,5 %	2,1 %	< 1 %
	180 °C	30,3 %	2,9 %	< 1 %
	200 °C	23,3 %	2,0 %	< 1 %

Conversão de 6-metilundeceno:

	Temperatura da reação	Produtos da reação		
		6-m-2-p	2-m-2-p	3-m-3-p
	160 °C	48,0	1,8 %	< 1 %
	180 °C	40,7	3,2 %	< 1 %

15 Nas abreviaturas para os produtos, m significa metila e p significa fenilundecano. 2-m-2-p, assim, significa 2-metil-2-fenilundecano.

EXEMPLO 4 (COMPARATIVO)

Na WO 01/05733 A1 (UOP), a composição de uma olefina ex isomerização/desidrogenação é especificada como segue:

	<u>Olefina</u>	<u>Conteúdo</u>
	Olefinas leves	0,64 %
	Olefinas lineares	30,11 %
	6-Metilundeceno	7,66 %
	5-Metilundeceno	15,33 %
25	4-Metilundeceno	11,82 %
	3-Metilundeceno	12,95 %
	2-Metilundeceno	8,87 %
	Outras olefinas ramificadas	9,05 %
	<u>Isômeros superiores</u>	<u>3,53 %</u>

Soma 99,96 %

Uma mistura desta olefina com benzeno (93,3 % de benzeno, 6,7 % de olefina, relação molar de benzeno:olefina de aproximadamente 30:1) foi convertida a 125 °C e 35 bar na presença de 75 ml (53,0 g) de mordenita em um LHSV de 2,0 h⁻¹ (velocidade espacial horária de 0,15 g de olefina/g de cat.)

A seletividade da 2-fenila no produto foi determinada como sendo de 82,0 %, a fração de 2-metil-2-fenilundecano de 6,98 % e a fração dos quartos superiores de 1,9 %.

EXEMPLO 5

Sob as condições especificadas acima no Exemplo 4, uma olefina da cadeia olefínica de hidroformilação aldol condensação-hidrogenação-desidratação, ou de acordo com o exemplo 3 da WO 03/029172, foi usada.

	<u>Olefina</u>	<u>Conteúdo</u>
15	Olefinas lineares	14,0 %
	5-Metilundeceno	35,0 %
	4-Etildeceno	32,5 %
	Olefinas mais altamente ramificadas	17,0 %
20	<u>Isômeros superiores</u>	1,4 %
	Soma	99,9 %

A seletividade da 2-fenila no produto foi determinada como sendo de 82,4 %, a fração do 2-metil-2-fenilundecano de 2,33 % e a fração dos quartos superiores de 0,8 %.

REIVINDICAÇÕES

1. Processo para preparar compostos de alquilarila mediante reação de uma mistura de monoolefina C_{10-14} com um hidrocarboneto aromático, na presença de um catalisador de alquilação, para formar
5 compostos aromáticos de alquila e, se apropriado, subseqüentemente sunfonando-se e neutralizando-se os compostos de alquilarila resultantes, caracterizado pelo fato de que, nas monoolefinas C_{10-14} , em média, mais do que 0 % e até 100 % das ramificações metila se acham presentes na cadeia de carbono mais longa e menos do que 10 % das ramificações metila se acham
10 nas posições 2, 3 e 4, calculado partindo-se das extremidades das cadeias da cadeia de carbono mais longa, em que as monoolefinas C_{10-14} , em cada caso, têm um máximo de uma ramificação metila.

2. Processo de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que, nas monoolefinas C_{10-14} , em média, de 10 a 80 % de
15 ramificações metila se acham presentes na cadeia de hidrocarboneto mais longa.

3. Processo de acordo com a reivindicação 1 ou 2, caracterizado pelo fato de que o hidrocarboneto aromático é benzeno.

4. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações de
20 1 a 3, caracterizado pelo fato de que o catalisador de alquilação é selecionado dos zeólitos dos tipos estruturais EPI, FER, pentasilas tendo estrutura de MFI ou MEL, e faujasitas.

5. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações de
25 1 a 4, caracterizado pelo fato de que a alquilação é realizada na fase líquida em uma temperatura na faixa de 100 a 250 °C.

6. Composto alquilbenzenosulfonado, caracterizado pelo fato de ser obténível por um processo como definido em qualquer uma das reivindicações de 1 a 5, baseado em uma mistura de monoolefina C_{10-14} , em que, nas monoolefinas C_{10-14} , em média, mais do que 0 % e até 100 % das

ramificações metila se acham presentes na cadeia de carbono mais longa e menos do que 10 % das ramificações metila se acham nas posições 2, 3 e 4, calculado partindo-se das extremidades das cadeias da cadeia de carbono mais longa, em que as monoolefinas C₁₀₋₁₄, em cada caso, têm um máximo de uma ramificação metila.

5

7. Uso de compostos sendo alquilarilsulfonatos como definidos na reivindicação 6, caracterizado pelo fato de ser como tensoativos.

8. Agente de lavagem ou de limpeza, caracterizado pelo fato de que compreende, além dos ingredientes costumeiros, o alquilarilsulfonato como definido na reivindicação 6.

10

RESUMO

“PROCESSO PARA PREPARAR COMPOSTOS, COMPOSTO, USO DO MESMO, E, AGENTE DE LAVAGEM OU DE LIMPEZA”

5 Em um processo para preparar compostos de alquilarila mediante a reação de uma mistura de monoolefina C₁₀₋₁₄ com um hidrocarboneto aromático, na presença de um catalisador de alquilação, para formar compostos aromáticos de alquila e, se apropriado, subseqüentemente sulfonando-se e neutralizando-se os compostos de alquilarila resultantes, nas monoolefinas C₁₀₋₁₄, em média, mais do que 0 % e até 100 % de ramificações metila se acham presentes na cadeia de carbono mais longa, e menos do que 10 50 % das ramificações metila se acham nas posições 2, 3 e 4, calculado partindo-se das extremidades de cadeia da cadeia de carbono mais longa.