

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 950 760**

51 Int. Cl.:

C11D 3/30 (2006.01)
C11D 3/386 (2006.01)
C07C 213/02 (2006.01)
C07C 213/08 (2006.01)
C07C 227/06 (2006.01)
C07C 229/12 (2006.01)
C07C 291/04 (2006.01)
A01N 25/04 (2006.01)
A01N 25/30 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **30.10.2018 PCT/US2018/058077**
- 87 Fecha y número de publicación internacional: **27.06.2019 WO19125603**
- 96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **30.10.2018 E 18892787 (5)**
- 97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **10.05.2023 EP 3728541**

54 Título: **Alcoxilatos de polietermina de base aromática**

30 Prioridad:

20.12.2017 US 201762608003 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
13.10.2023

73 Titular/es:

**HUNTSMAN PETROCHEMICAL LLC (100.0%)
10003 Woodloch Forest Drive
The Woodlands, TX 77380, US**

72 Inventor/es:

MEREDITH, MATTHEW T.

74 Agente/Representante:

IZQUIERDO BLANCO, María Alicia

ES 2 950 760 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Alcoxilatos de polieteramina de base aromática

5 REFERENCIA CRUZADA A SOLICITUDES RELACIONADAS

Esta solicitud reivindica la prioridad de la Solicitud de Patente Provisional de Estados Unidos N° de serie 62/608,003, presentada el 20 de diciembre de 2017.

10 CAMPO

La presente divulgación se refiere de manera general a un compuesto de alcoxilato de polieteramina de base aromática derivado de fenilmetanol, difenilmetanol o trifenilmetanol (cada uno de los cuales puede estar opcionalmente alquilado) y métodos para preparar tales compuestos. El compuesto de alcoxilato de polieteramina de la presente divulgación puede usarse en una variedad de aplicaciones que incluyen, pero no se limitan a, limpieza, tratamiento de telas, acondicionamiento del cabello, aditivos para combustibles, campos petrolíferos, formulaciones agrícolas, de cuidado personal y antimicrobianas, composiciones de resinas curables, fluidos de trabajo de metales y en la fabricación de espuma de poliuretano.

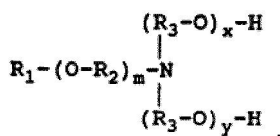
20 ANTECEDENTES

Los compuestos de polieteramina y los procesos para elaborar tales compuestos son bien conocidos. En general, el proceso implica: la alcoxilación de un alcohol iniciador mediante la adición de un óxido de alquileo (por ejemplo, óxido de etileno, óxido de propileno u óxido de butileno) para formar un polioxilalquilenpoliol que tiene varias funcionalidades; y someter el polioxilalquilenpoliol a aminación reductora a temperaturas y presiones altas para producir la poliéteramina.

Pueden usarse varios alcoholes iniciadores para derivar el compuesto de polieteramina. Por ejemplo, una clase de alcoholes iniciadores incluye alcoholes grasos en los que las cadenas grasas son principalmente grupos C₁₄-C₁₈ lineales y saturados que están alcoxilados y aminados para formar alcoxilatos de aminas grasas.

Debido a su funcionalidad única, alto rendimiento y bajo coste, los alcoholes que contienen grupos aromáticos también pueden usarse como alcohol iniciador. Como sabe bien un experto en la técnica, los alcoholes aromáticos contienen una fracción hidroxilo unida indirectamente a un grupo hidrocarbonado aromático, en contraste con los fenoles que contienen un grupo hidroxilo unido directamente a un carbono aromático. Los alquilfenoles son una clase de tales alcoholes que contienen grupos aromáticos que han logrado una amplia aceptación en la técnica, especialmente con respecto a los alcoxilatos. Otra clase versátil y bien conocida de alcoholes iniciadores que contienen grupos aromáticos incluye los alcoholes de poliarilfenol y, en particular, triestirilfenol.

La WO 96/32839 A2 divulga alquil éter aminas alcoxiladas que tienen la fórmula general



que son útiles como herbicida. Ninguno de los compuestos ejemplificados en la WO 96/32839 A2 tiene R₁ como un grupo alquilarilo.

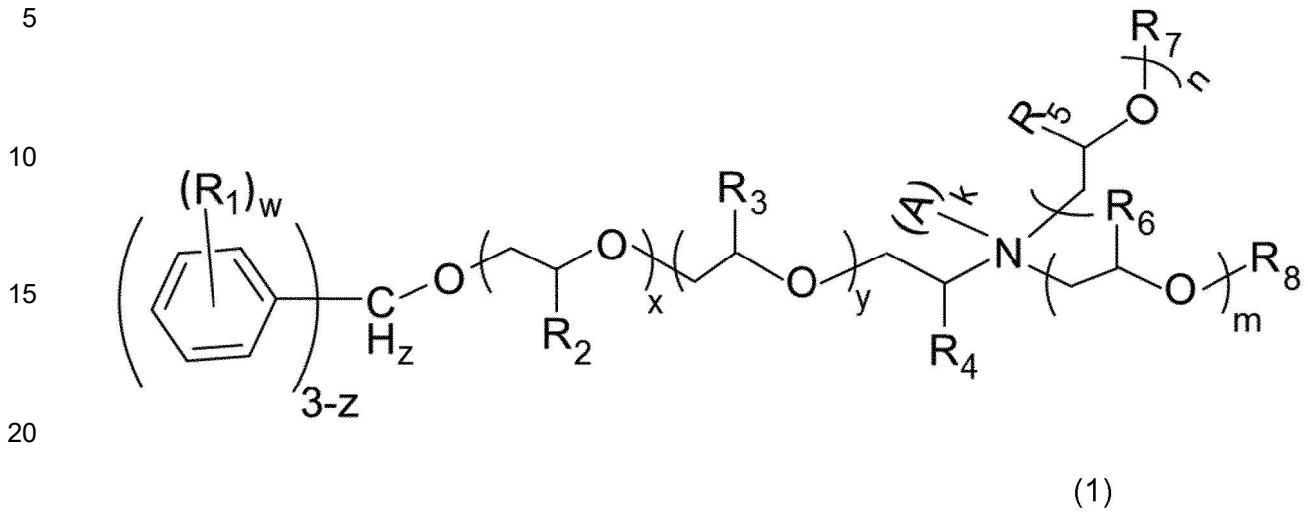
Desafortunadamente, cada uno de los anteriores muestra propiedades indeseables, como toxicidad y/o problemas de persistencia ambiental. Por ejemplo, aunque los alcoholes grasos generalmente no son tóxicos, se sabe que los alcoxilatos de aminas grasas producidos posteriormente, como las aminas de sebo etoxiladas, provocan irritación de los ojos y la piel y tienen toxicidad acuática. Además, el uso de alquilfenoles y trisfenoles se ha vuelto desfavorable debido al hecho de que ahora se sabe que los alquilfenoles son disruptores endocrinos, mientras que se sabe los alquilfenoles y los trisfenoles son contaminantes ambientales persistentes (ver, por ejemplo, Soto, A.M. et al. *Environ. Health Persp.* 1991, 92, 167; Environmental risk evaluation report: Styrenated phenol - ISBN 978-1-84911-162-1, 2009).

Por consiguiente, sería deseable identificar, desarrollar y emplear compuestos de alcoxilatos de polieteramina alternativos que puedan derivarse de alcoholes aromáticos que proporcionen por lo menos un rendimiento similar al de los alcoxilatos de polieteramina del estado de la técnica, que demuestren una irritación y toxicidad oculares/cutánea reducidas y que también sean respetuosos con el medio ambiente.

65

SUMARIO

De acuerdo con una realización, la presente divulgación proporciona un compuesto de alcoxilato de polieteramina que tiene la fórmula (1)



25 donde cada R₁ es independientemente hidrógeno o un grupo alquilo; cada R₂, R₃, R₄, R₅ y R₆ son independientemente hidrógeno, metilo o etilo; R₇ y R₈ son independientemente hidrógeno, SO₃M, COOM o PO₃M₂; M es hidrógeno, un catión soluble en agua, un metal monovalente o un catión de metal polivalente; A es metilo, etilo, oxígeno o CH₂COO; w es un número entero de 0 a 3; z es un número entero de 0 a 2; x es un número entero de 0 a 100; y es un número entero de 0 a 100; m es un número entero de 0 a 50; n es un número entero de 0 a 50; k es 0 o 1; y en donde x + y = 1 a 100. En otra realización, m + n = 1 a 50, en donde cuando z es 2, w es 1 y R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄; cuando z es 1, w es 0; cuando z es 1, w es 1 y R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄; cuando z es 2, w es 2 y por lo menos un R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄; cuando z es 1, w es 2 y por lo menos un R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄; cuando z es 0, w es 1 y R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄; o cuando z es 0, w es 2 y por lo menos un R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄.

35 En una realización adicional, se proporciona un método para elaborar el compuesto de alcoxilato de polieteramina de fórmula (1) haciendo reaccionar fenilmetanol (opcionalmente alquilado), difenilmetanol (opcionalmente alquilado) o trifenilmetanol (opcionalmente alquilado) o una mezcla de los mismos con un óxido de alquilenos o un polialquilenglicol en presencia de un catalizador de ácido o un catalizador de base para formar un poliol precursor, aminando el poliol precursor para formar una polieteramina y haciendo reaccionar la polieteramina con un óxido de alquilenos para formar el compuesto de alcoxilato de polieteramina de base aromática. En realizaciones adicionales, el compuesto de alcoxilato de polieteramina puede cuaternizarse u oxidarse opcionalmente, en realizaciones adicionales, el alcoxilato de polieteramina puede hacerse reaccionar además opcionalmente con una fracción de ácido y neutralizarse con una fuente de metal alcalino, metal alcalinotérreo, amina o amoniaco.

45 En otra realización más, se proporcionan usos de los compuestos de alcoxilato de polieteramina de la presente divulgación, como en formulaciones químicas de rendimiento o formulaciones para el cuidado personal.

BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS DIBUJOS

50 Las Figuras 1 y 2 representan la eficacia del glifosato para eliminar las malas hierbas cuando se usan como adyuvantes los compuestos de la presente divulgación y un etoxilato de amina de sebo.

DESCRIPCIÓN DETALLADA

55 Los siguientes términos tendrán los siguientes significados.

Si aparece en la presente, el término "que comprende" y los derivados del mismo no se pretende que excluyan la presencia de ningún componente, paso o procedimiento adicional, se divulga o no en la presente. Para evitar cualquier duda, todas las composiciones reivindicadas en la presente mediante el uso del término "que comprende" pueden incluir cualquier aditivo, adyuvante o compuesto adicional, a menos que se indique lo contrario. Por el contrario, el término "que consiste esencialmente en" si aparece en la presente, excluye del alcance de cualquier enumeración posterior cualquier otro componente, paso o procedimiento, excepto aquellos que no son esenciales para la operatividad y el término "que consiste en", si se usa, excluye cualquier componente, paso o procedimiento no descrito o enumerado específicamente. El término "o", a menos que se indique lo contrario, se refiere a los miembros enumerados individualmente así como en cualquier combinación.

Los artículos "un" y "uno" se usan en la presente para referirse a uno o más de uno (es decir, por lo menos uno) de los objetos gramaticales del artículo. A modo de ejemplo, "un óxido de alquileo" significa un óxido de alquileo o más de un óxido de alquileo. Las frases "en una realización", "de acuerdo con una realización" y similares generalmente significan que el rasgo, estructura o característica particular que sigue a la frase está incluida en por lo menos una realización de la presente divulgación, y puede estar incluida en más de una realización de la presente divulgación. Es importante destacar que tales frases no se refieren necesariamente a la misma realización. Si la memoria descriptiva establece que un componente o rasgo "puede" o "podría" incluirse o tener una característica, no se requiere que se incluya ese componente o característica particular o tenga la característica.

El término "alifático" o "grupo alifático", como se usa en la presente, denota una fracción de hidrocarburo que puede ser de cadena lineal (es decir, no ramificada), ramificada o cíclica (incluyendo los policíclicos fusionados, con puente y espirofusionados) y puede estar completamente saturada o puede contener una o más unidades de insaturación, pero que no es aromática. A menos que se especifique lo contrario, los grupos alifáticos pueden tener de 1 a 20 átomos de carbono.

El término "alquilo" incluye grupos tanto de cadena lineal como de cadena ramificada y grupos cíclicos. Los grupos de cadena lineal y cadena ramificada pueden tener hasta 20 átomos de carbono a menos que se especifique lo contrario. Los grupos cíclicos pueden ser monocíclicos o policíclicos y, en algunas realizaciones, pueden tener de 3 a 10 átomos de carbono.

El término "alcarilo" significa un grupo arilo sustituido con un grupo alquilo.

El "alqueno", como se usa en la presente, es un grupo hidrocarbonado que tiene de 2 a 20 átomos de carbono con una fórmula estructural que contiene por lo menos un enlace doble carbono-carbono.

El término "alcoxi" significa un grupo éter de hidrocarburo de cadena lineal o ramificada de 10 o menos átomos de carbono, que incluye metoxi, etoxi, 2-propoxi, propoxi, butoxi, 3-pentoxi y similares.

El término "alcoxilato" incluye sustancias puras así como mezclas que se obtienen usando diferentes óxidos de alquileo y/o diferentes alcoholes.

El término "aromático" se refiere a compuestos que tienen hidrocarburos cíclicos insaturados que contienen uno o más anillos.

El término "arilo" como se usa en la presente es un grupo que contiene cualquier grupo aromático basado en carbono que incluye, pero no se limita a, benceno, naftaleno, fenilo, bifenilo, antraceno y similares, que tienen de 6 a 20 átomos de carbono.

El término "carbocíclico" significa que tiene o se refiere a o se caracteriza por un anillo compuesto de 4 a 20 átomos de carbono.

El término "cicloalqueno" significa un sistema de anillo monocíclico o multicíclico no aromático que tiene un único radical y que contiene un enlace doble carbono-carbono y que tiene de 3 a 10 átomos de carbono. Los ejemplos de anillos de cicloalqueno monocíclicos incluyen ciclopentenilo, ciclohexenilo o cicloheptenilo. Un anillo de cicloalqueno multicíclico ejemplar es el norbornenilo.

Los términos "halo", "halógeno" o "haluro", como se usan en la presente, pueden usarse indistintamente y se refieren a F, Cl, Br o I.

El término "heteroarilo" significa un radical monocíclico o bicíclico de 5 a 12 átomos en el anillo que tiene por lo menos un anillo aromático que contiene uno, dos o tres heteroátomos en el anillo seleccionados de N, O y S, los átomos restantes del anillo siendo átomos de carbono.

El término "heterocíclico" significa radicales monocíclicos o bicíclicos no aromáticos de 3 a 8 átomos en el anillo en los que uno o dos átomos en el anillo son heteroátomos seleccionados de N, O o S(O)_n (donde n es un número entero de 0 a 2), los átomos restantes del anillo siendo átomos de carbono.

El término "hidroxilo" o "hidroxi" como se usa en la presente se representa mediante la fórmula -OH.

El término "sustancialmente libre" significa, cuando se usa con referencia a la ausencia sustancial de un componente en una composición, que tal componente no está presente, o si lo está, lo está como una impureza incidental o un subproducto. En otras palabras, el componente no afecta a las propiedades de la composición.

El término "formulaciones de productos químicos de rendimiento" se refiere a formulaciones de cuidado no

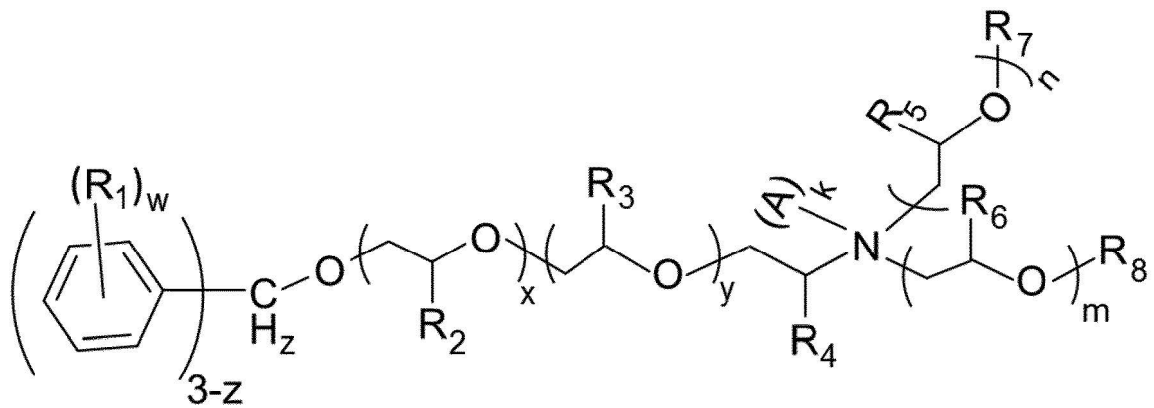
personal que sirven para una amplia variedad de aplicaciones e incluyen formulaciones no limitativas como adhesivos, agricultura, biocidas, recubrimientos, electrónica, hogar-industrial-institucional (HI&I), tintas, membranas, metalurgia, papel, pinturas, plásticos, imprentas, yesos, yacimientos petrolíferos, poliuretano, formulaciones para el cuidado de textiles y de la madera.

El término "formulación para el cuidado personal" se refiere a formulaciones ilustrativas no limitativas como formulaciones para la piel, el sol, aceite, cabello, cosméticos y conservantes, incluyendo aquellas para alterar el color y la apariencia de la piel. Las posibles formulaciones para el cuidado personal incluyen, pero no se limitan a, polímeros para una flexibilidad aumentada en el peinado, un peinado duradero y una resistencia aumentada a la humedad para el cabello, la piel y los cosméticos de color, protección solar a prueba de agua/resistencia, resistencia al desgaste y formulaciones de protección/potenciación térmica.

El término "aditivo para combustible" significa un aditivo que imparte propiedades beneficiosas al combustible y/o a un motor y los componentes relacionados con el manejo del combustible.

De acuerdo con una realización, la presente divulgación proporciona un nuevo compuesto de alcoxilato de polieteramina que contiene grupos aromáticos en el hidrófobo que permite que el compuesto muestre la funcionalidad única, el alto rendimiento y el bajo coste de los alquilfenoles y los trisfenoles, pero sin los problemas de toxicidad y/o persistencia ambiental asociados con estos compuestos convencionales. En particular, los solicitantes han descubierto sorprendentemente que la colocación de un espaciador de alquilo entre la fracción aromática y el grupo hidroxilo, al contrario que con la unión directa del grupo hidroxilo a la fracción aromática, maximiza las características de biodegradación de los compuestos de la presente divulgación. Inicialmente, debe entenderse que los compuestos de la presente divulgación no son fenoles. Es decir, la unión indirecta del grupo hidroxilo a la fracción aromática de los presentes compuestos elimina la donación de electrones del grupo de oxígeno enriquecido en electrones al anillo aromático. Sin desear estar limitados por la teoría, se cree que esta unión indirecta del grupo hidroxilo a la fracción aromática da como resultado la disminución de la polarización y la polarizabilidad de los presentes compuestos, aumentando de este modo su biodegradabilidad sin afectar a las propiedades de rendimiento de los compuestos de la invención. Sorprendentemente, se ha descubierto que muestran propiedades de rendimiento que son por lo menos comparables, o incluso mejoradas, a las de los compuestos del estado de la técnica, como los alcoxilatos de aminas grasas.

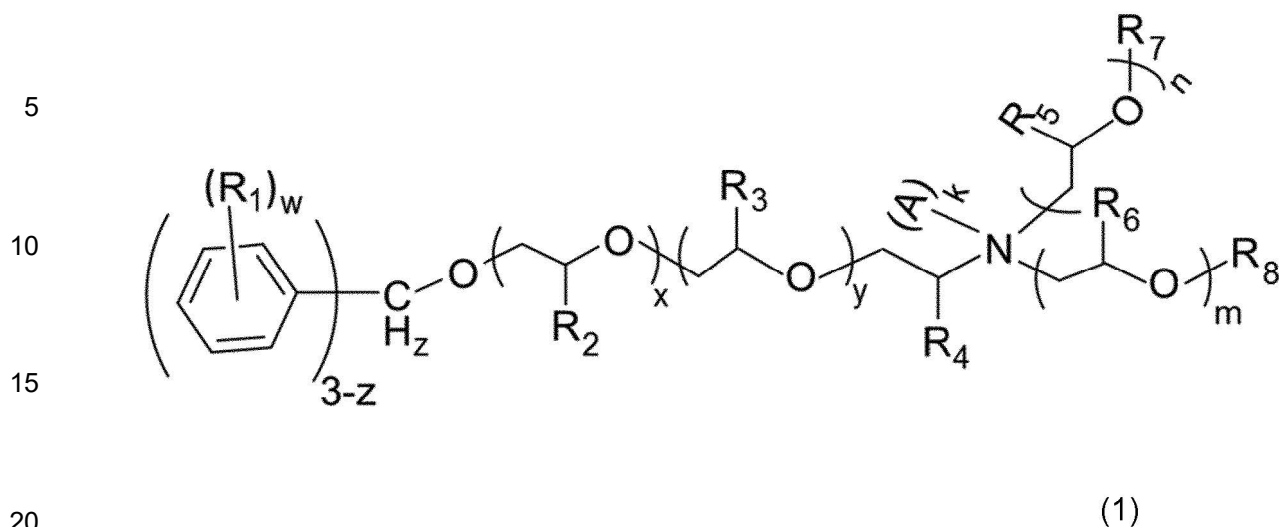
De acuerdo con una realización, el compuesto de alcoxilato de polieteramina es un compuesto que tiene la fórmula general (1)



(1)

donde cada R₁ es independientemente hidrógeno, un grupo alquilo o un grupo cicloalquilo; cada R₂, R₃, R₄, R₅ y R₆ son independientemente hidrógeno, metilo o etilo; R₇ y R₈ son independientemente hidrógeno, SO₃M, COOM o PO₃M₂; M es hidrógeno, un catión soluble en agua, un metal monovalente o un catión de metal polivalente; A es metilo, etilo, oxígeno o CH₂COO; w es un número entero de 0 a 3; z es un número entero de 0 a 2; x es un número entero de 0 a 100; y es un número entero de 0 a 100; m es un número entero de 0 a 50; n es un número entero de 0 a 50; k es 0 o 1; y en donde x + y = 1 a 100, en donde cuando z es 2, w es 1 y R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄, o w es 2 y por lo menos un R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄; cuando z es 1, w es 0, w es 1 y R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄, o w es 2 y por lo menos un R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄; y cuando z es 0, w es 1 y R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄, o w es 2 y por lo menos un R₁ es un grupo alquilo o cicloalquilo C₄-C₁₄. En algunas realizaciones, M puede ser independientemente hidrógeno, sodio, potasio, magnesio o calcio.

De acuerdo con otra realización, el compuesto de alcoxilato de polieteramina es un compuesto que tiene la fórmula general (1)



25 donde cada R_1 es independientemente hidrógeno, un grupo alquilo o un grupo cicloalquilo; cada R_2 , R_3 , R_4 , R_5 y R_6 son independientemente hidrógeno, metilo o etilo; R_7 y R_8 son independientemente hidrógeno, SO_3M , $COOM$ o PO_3M_2 ; M es hidrógeno, un catión soluble en agua, un metal monovalente o un catión de metal polivalente; A es metilo, etilo, oxígeno o CH_2COO ; w es un número entero de 0 a 3; z es 0, 1 o 2; x es un número entero de 0 a 50; y es un número entero de 0 a 50; m es un número entero de 0 a 50; n es un número entero de 0 a 50; k es 0 o 1; y en donde x e y $x + y = 1$ a 100 y $m + n = 1$ a 50, en donde cuando z es 2, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ; cuando z es 1, w es 0, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ; y cuando z es 0, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} . En algunas realizaciones, M puede ser independientemente hidrógeno, sodio, potasio, magnesio o calcio.

35 De acuerdo con una realización particular, z es 2, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo C_4-C_{14} , mientras que en otras realizaciones R_1 es un grupo alquilo C_6-C_{12} o en otra realización R_1 es un grupo alquilo C_8-C_{10} en el compuesto de fórmula (1). En otra realización más, z es 2, w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_4-C_{14} , mientras que en otras realizaciones por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_6-C_{12} o en otras realizaciones por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_8-C_{10} en el compuesto de fórmula (1).

40 De acuerdo con otra realización, z es 1, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo C_4-C_{14} , mientras que en otra realización R_1 es un grupo alquilo C_6-C_{12} o en otra realización más R_1 es un grupo alquilo C_8-C_{10} en el compuesto de fórmula (1). En otra realización más, z es 1, w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_4-C_{14} , mientras que en otras realizaciones por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_6-C_{12} o en otras realizaciones más por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_8-C_{10} en el compuesto de fórmula (1).

45 En otra realización más, en el compuesto de fórmula (1), z es 0, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo C_4-C_{14} , mientras que en otras realizaciones R_1 es un grupo alquilo C_6-C_{12} o en otras realizaciones más, R_1 es un grupo alquilo C_8-C_{10} . En otra realización más, en el compuesto de fórmula (1), z es 0, w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_4-C_{14} , mientras que en otras realizaciones por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_6-C_{12} o en otras realizaciones más por lo menos un R_1 es un grupo alquilo C_8-C_{10} .

50 De acuerdo con otra realización particular, en el compuesto de fórmula (1), x es de 0 a 50, y es de 0 a 50 y $x + y = 1$ a 50. En otras realizaciones más, en el compuesto de fórmula (1), x es de 0 a 20, y es de 0 a 20 y $x + y = 1$ a 20, mientras que en realizaciones adicionales, x es de 0 a 10, y es de 0 a 10 y $x + y = 1$ a 10. En otra realización más, en el compuesto de fórmula (1), R_4 es metilo o etilo, en algunas realizaciones, metilo y R_2 y R_3 se eligen de tal manera que los grupos x y los grupos y sean grupos de bloques de óxido de etileno, óxido de propileno u óxido de butileno. En otras realizaciones, los grupos oxialquileno x e y también pueden mezclarse en bloques. En una realización particular, en el compuesto de fórmula (1), cada R_2 y R_3 es independientemente hidrógeno o metilo y los grupos oxialquileno x y y están dispuestos en grupos de bloques de óxido de etileno y óxido de propileno.

60 De acuerdo con otra realización particular más, en el compuesto de fórmula (1), m es de 0 a 50, n es de 0 a 50 y $m + n = 2$ a 50. En otras realizaciones más, m es de 0 a 20, n es de 0 a 20 y $m + n = 2-20$, mientras que en otras realizaciones, m es de 0 a 10, n es de 0 a 10 y $m + n = 2$ a 10. En otra realización más, en el compuesto de fórmula (1), R_5 y R_6 se eligen de manera que los grupos m y los grupos n sean grupos de bloques de óxido de etileno, óxido de propileno u óxido de butileno. En una realización particular, en el compuesto de fórmula (1), cada R_5 y R_6 es independientemente hidrógeno o metilo y los grupos oxialquileno m y n están dispuestos en grupos de bloques de

óxido de etileno y óxido de propileno.

En una realización adicional, en el compuesto de fórmula (1), k es 0. En otra realización, en el compuesto de fórmula (1), k es 1 y A es metilo o etilo. En otra realización más, en el compuesto de fórmula (1), k es 1 y A es O o CH_2COO .

De acuerdo con otra realización particular, en el compuesto de fórmula (1), R_7 y R_8 son hidrógeno o metilo. En otra realización más, en el compuesto de fórmula (1), uno de R_7 o R_8 es SO_3M o PO_3M y el otro es hidrógeno o metilo donde M es hidrógeno, sodio, potasio, magnesio o calcio.

El compuesto de fórmula (1) generalmente puede prepararse convirtiendo un alcohol iniciador seleccionado de fenilmetanol, difenilmetanol, trifenilmetanol y una mezcla de los mismos en un poliol precursor, aminando el poliol precursor para formar una polieteramina y alcoxilando la polieteramina con un óxido de alquileo para formar el alcoxilato de polieteramina de fórmula (1).

Se ha descubierto que el alcohol iniciador puede convertirse en un poliol precursor mediante por lo menos dos métodos diferentes. De acuerdo con un método, el poliol precursor puede prepararse por alcoxilación directa del alcohol iniciador usando óxidos de alquileo como óxido de etileno, óxido de propileno, óxido de butileno y mezclas de los mismos. Alternativamente, el poliol precursor puede prepararse mediante condensación directa del alcohol iniciador con éteres de poliglicol terminados en hidroxilo en presencia de un catalizador de ácidos. Las ventajas de este método particular incluyen evitar el manejo de materiales gaseosos tóxicos, como el óxido de etileno, y la realización de la reacción a presión atmosférica y a temperaturas relativamente bajas, como 50°C a 150°C , en algunas realizaciones, 80°C a 120°C . Como sabrá un experto en la técnica, cuando el alcohol iniciador se convierte en un poliol precursor como antes, generalmente se forma una mezcla de polioles precursores.

Por tanto, en una realización, el poliol precursor se prepara mediante la poliadición de óxido u óxidos de alquileo al alcohol iniciador. En otra realización, el poliol precursor se prepara haciendo reaccionar (condensando) el alcohol iniciador con polietilenglicol terminado en metilo (mPEG), polietilenglicol (PEG) u otros polialquilenglicoles (PAG) en presencia de un catalizador de ácidos. En otras realizaciones más, el difenilmetanol usado en la reacción anterior puede obtenerse a partir de benzofenona que se ha hidrogenado en presencia de un catalizador de hidrogenación.

En una realización particular en la que el poliol precursor se prepara mediante alcoxilación, dicha alcoxilación puede catalizarse mediante un catalizador de alcoxilación que incluye los bien conocidos por los expertos en la técnica. Los ejemplos incluyen, pero no se limitan a, bases fuertes como hidróxidos de metales alcalinos e hidróxidos de metales alcalinotérreos, ácidos de Bronsted o ácidos de Lewis como AlCl_3 , BF_3 y similares. Cuando se desean alcoxilatos con una distribución estrecha también pueden usarse catalizadores como hidrotalcita o DMC.

Además, la alcoxilación puede llevarse a cabo a temperaturas en un intervalo de aproximadamente 80°C a 250°C , como aproximadamente 100°C a 220°C . La presión puede estar entre la presión ambiente y 600 bar. Si se desea, el óxido de alquileo puede comprender una mezcla de gas inerte, por ejemplo aproximadamente del 5% al 60%.

Como se ha analizado con anterioridad, las unidades de óxido de etileno, óxido de propileno, óxido de butileno pueden disponerse dentro del compuesto de fórmula (1) de cualquier manera. Así, por ejemplo, las unidades estructurales x e y pueden disponerse en bloques. Por lo tanto, la alcoxilación puede llevarse a cabo usando un solo tipo de óxido de alquileo, así como una mezcla de óxidos de alquileo. Si, por ejemplo, se introduce una mezcla de dos o más óxidos de alquileo diferentes en la mezcla de reacción, esto generalmente lleva, si la reactividad de los óxidos de alquileo es esencialmente comparable, a cadenas de poliéter aleatorias en las que los componentes de la mezcla no están presentes en cualquier orden particular. Sin embargo, si los diferentes óxidos de alquileo se alimentan sucesivamente a la mezcla de reacción, es decir, un óxido de alquileo adicional destinado a la reacción sólo se alimenta cuando el alimentado anteriormente ha reaccionado por completo, los segmentos de poliéter están compuestos de bloques.

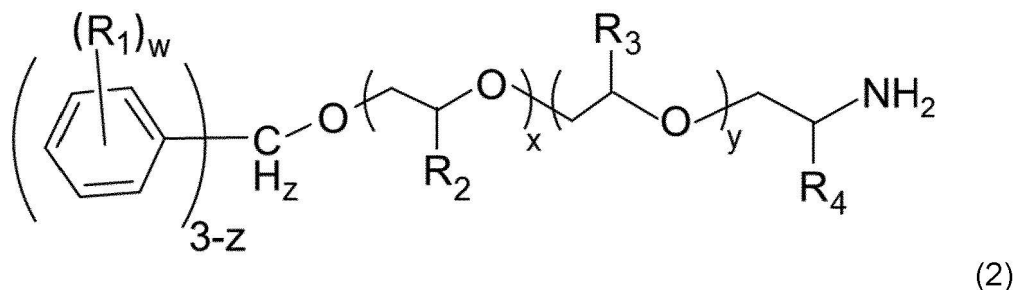
El grado de alcoxilación, es decir, la longitud de cadena media de las cadenas de poliéter de los alcoxilatos aromáticos de acuerdo con la divulgación y su composición (en otras palabras, los valores de x e y) pueden controlarse mediante la proporción de las cantidades molares del alcohol iniciador con el óxido u óxidos de alquileo empleados en su preparación, y mediante las condiciones de reacción. Por un lado, el poliol precursor puede comprender por lo menos o más de aproximadamente 4, en algunas realizaciones por lo menos o más de aproximadamente 10, en otras realizaciones particulares por lo menos o más de aproximadamente 30, y en otras realizaciones más por lo menos o más de aproximadamente 50 unidades de óxido de alquileo. Por otro lado, el poliol precursor puede comprender no más o menos de aproximadamente 100 o 70 o 40 o 10 unidades de óxido de alquileo.

El poliol precursor se usa luego como carga de alimentación en un paso de aminación reductora. En algunos casos, antes de la aminación reductora, el poliol precursor se neutraliza con ácido o adsorbente químico como, por ejemplo, ácido oxálico o silicato de magnesio, y se filtra para eliminar los materiales insolubles. El poliol precursor se

carga en una zona de aminación reductora donde se pone en contacto con un catalizador de aminación reductora, a veces denominado catalizador de hidrogenación-deshidrogenación, y se amina reductivamente en presencia de amoníaco e hidrógeno en condiciones de aminación reductora. Las condiciones de aminación reductora pueden incluir, por ejemplo, una temperatura dentro del intervalo de aproximadamente 150° C a aproximadamente 275° C y una presión dentro del intervalo de aproximadamente 3,45 MPa (500 psi) a aproximadamente 34,5 MPa (5000 psi) usándose en muchas realizaciones temperaturas dentro del intervalo de aproximadamente 180° C a aproximadamente 220° C y presiones dentro del intervalo de aproximadamente 10,3 MPa (1500 psi) a aproximadamente 17,2 MPa (2500 psi)

Puede usarse cualquier catalizador de hidrogenación adecuado, como los descritos en la Patente de Estados Unidos N° 3.654.370. En algunas realizaciones, el catalizador de hidrogenación puede comprender uno o más metales del grupo VIII B de la Tabla Periódica, como hierro, cobalto, níquel, rutenio, rodio, paladio o platino, mezclado con uno o más metales del grupo VI B de la Tabla Periódica como cromo, molibdeno o tungsteno. También puede incluirse un promotor del grupo IB de la Tabla Periódica, como el cobre. Como ejemplo, puede usarse un catalizador que comprende de aproximadamente el 60 por ciento en moles a aproximadamente el 85 por ciento en moles de níquel, de aproximadamente el 14 por ciento en moles a aproximadamente el 37 por ciento en moles de cobre y de aproximadamente el 1 por ciento en moles a aproximadamente el 5 por ciento en moles de cromo (como cromia), como un catalizador del tipo divulgado en la Patente de Estados Unidos N° 3.152.998. Como otro ejemplo, puede usarse un catalizador del tipo divulgado en la Patente de Estados Unidos N° 4.014.933 que contenga de aproximadamente el 70% en peso hasta aproximadamente el 95% en peso de una mezcla de cobalto y níquel y de aproximadamente el 5% en peso hasta aproximadamente el 30% en peso de hierro. Como otro ejemplo, puede usarse un catalizador del tipo divulgado en la Patente de Estados Unidos N° 4.152.353, que comprende níquel, cobre y un tercer componente que puede ser hierro, zinc, zirconio o una mezcla de los mismos, por ejemplo, un catalizador que contiene de aproximadamente el 20% en peso a aproximadamente el 9% en peso de níquel, de aproximadamente el 36% en peso a aproximadamente el 79% en peso de cobre y de aproximadamente el 1% en peso a aproximadamente el 15% en peso de hierro, zinc, zirconio o una mezcla de los mismos. Como otro ejemplo más, puede usarse un catalizador del tipo divulgado en la Patente de Estados Unidos N° 4.766.245 que comprenda de aproximadamente el 60% en peso a aproximadamente el 75% en peso de níquel y de aproximadamente el 25% en peso a aproximadamente el 40% en peso de aluminio.

Por tanto, el poliol precursor se amina para formar un compuesto que tiene la fórmula general (2)



donde z, w, x, y, R₂, R₃ y R₄ se definen como antes.

El compuesto de fórmula (2) puede encontrar uso en una variedad de aplicaciones, como un surfactante para formulaciones químicas de rendimiento y cuidado personal, como agente de curado para una resina curable o como reactivo en la producción de poliurea o poliuretano.

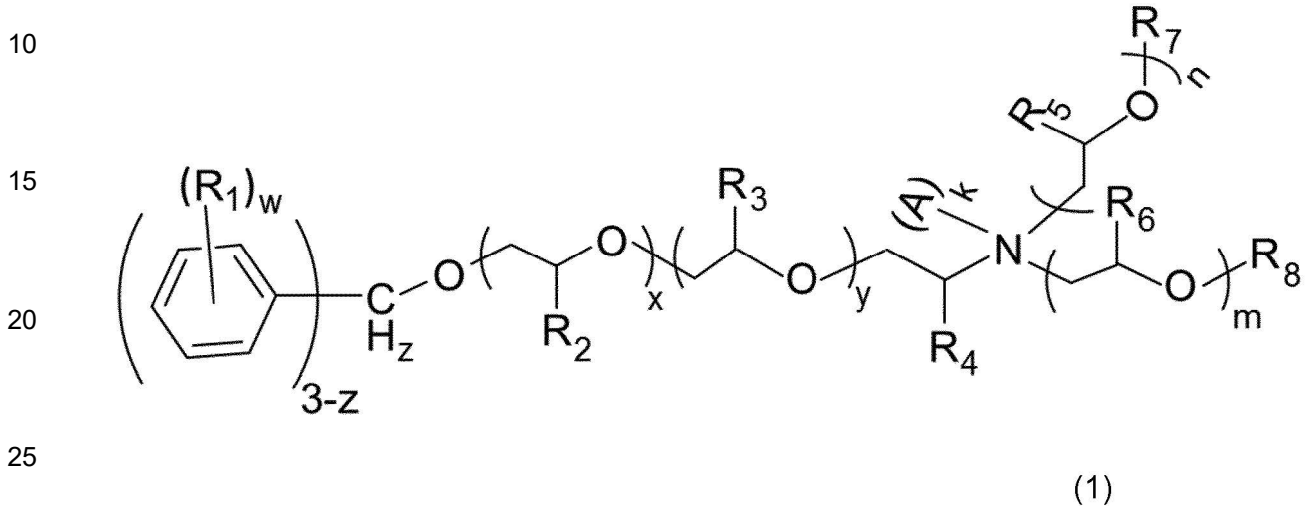
Luego, el compuesto de fórmula (2) puede alcoxilarse para formar el compuesto de fórmula (1) (es decir, donde m + n = por lo menos de 1 a 50). Los compuestos de alcoxilato de polietaramina de (1) pueden prepararse mediante métodos estándar conocidos para alcoxilar aminas (ver, por ejemplo, las Patentes de Estados Unidos N° 4.891.160 y 5.565.145 y al WO 1997/023546) y como se ha descrito anteriormente con respecto al alcohol iniciador. En general, el compuesto de fórmula (2) se hace reaccionar con un óxido de alquileo, opcionalmente en presencia de un catalizador de alcoxilación, a una temperatura de aproximadamente 40° C a aproximadamente 150° C. La cantidad de óxido de alquileo usada puede variar de aproximadamente 0,5 a aproximadamente 2 moles por mol del compuesto de fórmula (2). Como se ha descrito anteriormente, la unidad estructural m y n también pueden disponerse en bloques basados en la adición del óxido de alquileo a la mezcla de la reacción.

En realizaciones adicionales, el compuesto de alcoxilato de polietaramina de fórmula (1) puede convertirse en un sulfonato, carboxilato o fosfato mediante técnicas convencionales, como por reacción adicional con una fracción ácida y opcionalmente neutralizarse con una fuente de metal alcalino o metal alcalinotérreo.

En otras realizaciones adicionales más, el compuesto de alcoxilato de polietaramina de fórmula (1) puede

hacerse reaccionar con un ácido carboxílico sustituido con halógeno, como monocloroacetato, para formar una betaína, mientras que en otras realizaciones el compuesto de fórmula (1) puede hacerse reaccionar con un agente oxidante, como peróxido de hidrógeno o peróxido de benzoilo, para formar un óxido.

5 Como se ha descrito anteriormente, el compuesto de fórmula (1) puede encontrar uso en una variedad de composiciones. Por tanto, en una realización, se proporciona una composición que comprende un compuesto de alcoxilato de polieteramina que tiene la fórmula (1)



30 donde cada R_1 es independientemente hidrógeno, un grupo alquilo o un grupo cicloalquilo; cada R_2 , R_3 , R_4 , R_5 y R_6 es independientemente hidrógeno, metilo o etilo; R_7 y R_8 son independientemente hidrógeno, SO_3M , $COOM$ o PO_3M_2 ; M es hidrógeno, un catión soluble en agua, un metal monovalente o un catión de metal polivalente; A es metilo, etilo, oxígeno o CH_2COO ; w es un número entero de 0 a 3; z es 0, 1 o 2; x es un número entero de 0 a 100; y es un número entero de 0 a 100; m es un número entero de 0 a 50; n es un número entero de 0 a 50; k es 0 o 1; y en donde $x + y = 1$ a 100 y $m + n = 1$ a 50, en donde cuando z es 2, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ; cuando z es 1, w es 0, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ; y cuando z es 0, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} .

40 En otra realización más, la composición puede incluir además un solvente. De acuerdo con una realización, el solvente es agua y, en algunas realizaciones, agua desionizada. En otras realizaciones, puede usarse un solvente diferente además o en lugar del agua. Los ejemplos de tales solventes incluyen, pero no se limitan a, hidrocarburos (por ejemplo, pentano o hexano), halocarbonos (por ejemplo, freón 113), éteres (por ejemplo, éter etílico (Et_2O), tetrahidrofurano ("THF") o diglima (éter dimetílico de dietilenglicol)), nitrilos (por ejemplo, CH_3CN), o compuestos aromáticos (por ejemplo, benzotrifluoruro). Otros solventes ejemplares adicionales más incluyen lactatos, piruvatos y dioles. Los solventes también pueden incluir, pero no se limitan a, acetona, 1,4-dioxano, 1,3-dioxolano, acetato de etilo, ciclohexanona, acetona, 1-metil-2-pirididiona (NMP) y metiletilcetona. Otros solventes incluyen dimetilformamida, dimetilacetamida, N-metilpirrolidona, carbonato de etileno, carbonato de propileno, glicerol y derivados, naftaleno y versiones sustituidas, anhídrido de ácido acético, ácido propiónico y anhídrido de ácido propiónico, dimetilsulfona, benzofenona, difenilsulfona, fenol, m-cresol, sulfóxido de dimetilo, éter difenílico, terfenilo y similares. Otros solventes adicionales más incluyen éter propílico de propilenglicol (PGPE), 3-heptanol, 2-metil-1-pentanol, 5-metil-2-hexanol, 3-hexanol, 2-heptanol, 2-hexanol, 2,3-dimetil-3-pentanol, acetato de éter metílico de propilenglicol (PGMEA), etilenglicol, alcohol isopropílico (IPA), n-butil éter, propilenglicol n-butil éter (PGBE), 1-butoxi-2-propanol, 2-metil-3-pentanol, acetato de 2-metoxietilo, 2-butoxietanol, acetoacetato de 2-etoxietilo, 1-pentanol y éter metílico de propilenglicol. Los solventes enumerados anteriormente pueden usarse solos o en combinación.

55 En otra realización, la composición puede contener opcionalmente un dispersante. En ciertas realizaciones, el dispersante puede ser un compuesto iónico o no iónico. El compuesto iónico o no iónico puede comprender además un copolímero, un oligómero o un surfactante distinto del compuesto de alcoxilato de polieteramina de fórmula (1), solo o en combinación. El término copolímero, como se usa en la presente, se refiere a un compuesto polimérico que consiste en más de un compuesto polimérico como copolímeros de bloque, estrella, dendrímero o injertados. Los ejemplos de dispersante de copolímero no iónico incluyen compuestos poliméricos como los productos PLURONIC® L121, L123, L31, L81, L101 y P123 de copolímeros de tres bloques EO-PO-EO. El término oligómero, como se usa en la presente, se refiere a un compuesto polimérico que consiste en solo unas pocas unidades monoméricas. Los ejemplos de dispersantes de oligómeros iónicos incluyen los productos SMA® 1440 y 2625.

65 Los surfactantes útiles en la composición de la presente divulgación son bien conocidos e incluyen

compuestos aniónicos, no iónicos, catiónicos y anfóteros. En la composición pueden usarse combinaciones de más de uno de tales compuestos.

5 Los compuestos surfactantes aniónicos que pueden usarse incluyen, pero no se limitan a, sulfatos de alquilo, sulfonatos de benceno de alquilo, sulfonatos de α -olefina, tauratos de alquilo, sacrosinatos de alquilo, disulfonatos de difenilóxido de alquilo, sulfonatos de naftaleno de alquilo, sulfatos de éter de alquilo, sulfonatos de éter de alquilo, sulfosuccinatos, y otros surfactantes aniónicos conocidos para su uso en, por ejemplo, formulaciones químicas de rendimiento, incluyendo sulfatos de alquilo C_{8-16} lineales, sulfonatos de alquilo C_{8-16} , sulfonatos de alquilbenceno C_{8-16} y disulfonatos de difenilóxido de alquilo C_{8-16} , sal disódica del ácido sulfónico de decilsulfenoxibenceno/oxibisdecilbenceno, y octanosulfonato de sodio, dodecilsulfonato de sodio, laurilsulfato de sodio y combinaciones de los anteriores. Estos surfactantes están típicamente disponibles como sales de metales alcalinos, alcalinotérreos y de amonio de los mismos.

15 Los compuestos surfactantes no iónicos que pueden usarse incluyen, pero no se limitan a, alcoxilatos, amidas de ácidos grasos N-sustituídos, óxidos de amina, ésteres, surfactantes a base de azúcares, surfactantes poliméricos y mezclas de los mismos. Los ejemplos de alcoxilatos son compuestos como alcoholes no aromáticos, aminas, amidas, ácidos grasos o ésteres de ácidos grasos que han sido alcoxilados con de 1 a 50 equivalentes. Para la alcoxilación puede emplearse óxido de etileno y/u óxido de propileno, habitualmente óxido de etileno. Ejemplos de amidas de ácidos grasos N-sustituídos son glucamidas de ácidos grasos o alcanolamidas de ácidos grasos. Los ejemplos de ésteres son ésteres de ácidos grasos, ésteres de glicerol o monoglicéridos. Los ejemplos de surfactantes a base de azúcares son sorbitán, sorbitán etoxilado, sacarosa y ésteres de glucosa. Los ejemplos de surfactantes poliméricos son homo- o copolímeros de vinilpirrolidona,

25 También pueden usarse compuestos surfactantes catiónicos que incluyen surfactantes cuaternarios, por ejemplo, compuestos de amonio cuaternario con uno o dos grupos hidrófobos, o sales de aminas primarias de cadena larga.

30 Los compuestos surfactantes anfóteros que pueden usarse incluyen, pero no se limitan a, betaínas, alquilimidazolininas, cocoanfopropionatos, cocoanfodipropionato disódico (también conocido como carboxilato de cocoimidazolina), o combinaciones de los mismos.

35 Opcionalmente, dependiendo de la aplicación pueden añadirse a la composición otros aditivos conocidos, además de los descritos anteriormente. Estos aditivos pueden incluir, pero no se limitan a, colorantes, enzimas, agentes humectantes, agentes antiespumantes, agentes tampón, agentes de ajuste de pH, agentes espesantes, emulsionantes, agentes antirayado, mejoradores, agentes quelantes o secuestrantes, hidrotopos, agentes antimicrobianos, perfumes, herbicidas, pesticidas, fungicidas, antioxidantes, aditivos antidesgaste, modificadores de fricción, mejoradores del índice de viscosidad, depresores del punto de fluidez, inhibidores de la corrosión, portadores o rellenos sólidos, coloides protectores, agentes de adhesión, humectantes, repelentes, atrayentes, estimulantes de la alimentación, compatibilizadores, bactericidas, agentes anticongelantes, inhibidores de la cristalización, agentes de pegajosidad, aglutinantes, conservantes, clarificadores, fertilizantes, estabilizadores de UV, sales, agentes densificantes, particulados de grava, gases, reticulantes, inhibidores de hidratos termodinámicos, inhibidores de hidratos cinéticos, agentes estabilizadores de arcilla y mezclas de los mismos.

45 De acuerdo con otra realización, se proporciona una composición que comprende el compuesto de fórmula (1) anterior y en donde la composición está sustancialmente libre de alcoxilatos de amina de sebo, alcoxilatos de alquilfenol y alcoxilatos de poliarilfenol.

50 En otra realización más, se proporciona un producto envasado que comprende: a) un recipiente que tiene por lo menos una salida; y b) una composición que comprende el compuesto de fórmula (1).

55 De acuerdo con una realización, el producto envasado de la presente divulgación comprende un recipiente que tiene un medio de cierre, como una tapa, cubierta, chapa o tapón para sellar el recipiente. En otra realización, el recipiente sellado también tiene una boquilla o boca de vertido. El recipiente sellado puede tener la forma de un cilindro, ovalado, círculo, rectángulo, bote, tina, cuadrado o jarra y contiene la composición de la presente divulgación.

60 El recipiente puede estar hecho de cualquier material, como acero, vidrio, aluminio, cartón, hojalata, plásticos, incluyendo pero no limitados a, polietileno de alta densidad (HDPE), polipropileno (PP), cloruro de polivinilo (PVC), tereftalato de polietileno (PET), polipropileno orientado (OPP), polietileno (PE) o poliamida e incluyendo mezclas, laminados u otras combinaciones de estos.

65 En otra realización, se proporciona una composición concentrada que comprende el compuesto de fórmula (1) que puede diluirse adicionalmente en agua y/u otros solventes para formar una solución acuosa. Una composición concentrada de la presente divulgación, o "concentrado", permite diluir el concentrado hasta la concentración y el pH deseados. Un concentrado también permite una vida útil más prolongada y un transporte y almacenamiento más fáciles. Por tanto, en una realización se proporciona una composición concentrada que contiene el compuesto de

fórmula (1) de la presente divulgación y agua y/u otro solvente y opcionalmente uno o más aditivos descritos anteriormente. Para el concentrado, la cantidad de agua (y en algunas realizaciones, agua desionizada) y/o solvente puede ser, por ejemplo, de aproximadamente el 0,5 a aproximadamente el 50% en peso, sobre la base del peso total del concentrado. Por consiguiente, la cantidad del compuesto de fórmula (1) (y aditivos opcionales si los hay) contenida en el concentrado puede variar de aproximadamente el 50 % en peso hasta el 99,5 % en peso, sobre la base del peso total del concentrado. Como se ha indicado con anterioridad, el concentrado puede diluirse adicionalmente con agua y, en algunas realizaciones, agua desionizada y/o solvente para formar la solución acuosa.

La composición que incluye el compuesto de alcoxilato de polietilamina de fórmula (1) de la presente divulgación puede usarse en una variedad de aplicaciones y formulaciones incluyendo, pero no limitadas a, formulaciones químicas de rendimiento y formulaciones para el cuidado personal.

Por tanto, en una realización se proporciona una formulación química de rendimiento que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación química de rendimiento en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,01% en peso a aproximadamente 40% en peso, sobre la base del peso total de la formulación química de rendimiento. En otra realización, se proporciona una formulación química de rendimiento que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación química de rendimiento en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,1% en peso a aproximadamente el 30% en peso, sobre la base del peso total de la formulación química de rendimiento. En otra realización más, se proporciona una formulación química de rendimiento que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación química de rendimiento en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,5% en peso a aproximadamente el 20% en peso sobre la base del peso total de la formulación química de rendimiento. En otra realización más, se proporciona una formulación química de rendimiento que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación química de rendimiento en una cantidad que varía de aproximadamente el 1% en peso a aproximadamente el 10% en peso, sobre la base del peso total de la formulación química de rendimiento.

Por consiguiente, en otra realización más, se proporciona una formulación para el cuidado personal que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación para el cuidado personal en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,01% en peso a aproximadamente el 40% en peso, sobre la base del peso total de la formulación química de rendimiento. En otra realización, se proporciona una formulación química de rendimiento que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación para el cuidado personal en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,1% en peso a aproximadamente el 30% en peso, sobre la base del peso total de la formulación para el cuidado personal. En otra realización más, se proporciona una formulación para el cuidado personal que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación para el cuidado personal en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,5% en peso a aproximadamente el 20% en peso, sobre la base del peso total de la formulación de cuidado personal. En otra realización más, se proporciona una formulación para el cuidado personal que contiene la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en la formulación para el cuidado personal en una cantidad que varía de aproximadamente el 1% en peso a el aproximadamente el 10% en peso, sobre la base del peso total de la formulación para el cuidado personal.

En una realización particular, se proporciona un concentrado emulsionable agroquímico que contiene un componente activo agroquímico, un solvente y la composición que comprende el compuesto de fórmula (1).

Los ejemplos de componentes agroquímicos activos incluyen, pero no se limitan a, pesticidas, fungicidas, herbicidas, insecticidas, alguicidas, molusquicidas, acaricidas, rodenticidas, reguladores del crecimiento o repelentes de insectos. En una realización particular, el componente activo agroquímico incluye un insecticida, como Malatión, Clorpirifos, Cipermetrina y Cloropirina, un herbicida, como Trifluralina, 2,4-D Ester, MCPA Isooctiléster, Metolacoloro, Acetocoloro, Triclopir y Roundup®, o un fungicida, como Mefenoxam y Etridiazol. El componente o componentes activos agroquímicos pueden estar presentes en el concentrado emulsionable agroquímico en una cantidad de por lo menos aproximadamente el 5% p/p, o por lo menos aproximadamente el 7,5% p/p, o por lo menos aproximadamente el 10% p/p, donde p/p significa el peso del componente activo agroquímico presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico. En otra realización, el componente o componentes activos agroquímicos pueden estar presentes en el concentrado emulsionable agroquímico en una cantidad menor de aproximadamente el 80% p/p, o menor de aproximadamente el 70% p/p, o menor de aproximadamente el 60% p/p, o incluso menor de aproximadamente el 50% p/p, donde p/p significa el peso del componente activo agroquímico presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico.

Los ejemplos de solventes incluyen, pero no se limitan a, los descritos anteriormente. En otra realización, el solvente puede ser un hidrocarburo, éter, fenol, glicol, lactona, hidrocarburo clorado, hidrocarburo aromático, hidrocarburo nitrado, éster dibásico, monoéster como acetato de etilo, acetato de butilo, 3-etoxi-propionato de etilo,

acetato de éter metílico de propilenglicol, acetato de éter butílico de propilenglicol, acetato de éter metílico de dipropilenglicol, acetato de éter butílico de dipropilenglicol y un éster cíclico como butirolactona, compuestos orgánicos que contienen azufre, dimetilsulfóxido (DMSO) y sulfolano, metiletilcetona (MEK), 5-metil-2-hexanona (MIAK), metilisobutilcetona y metilisoamilbutona, un glicol éter como éter metílico de propilenglicol (PM), éter metílico de dipropilenglicol (DPM) o éter n-butílico de dipropilenglicol (DPNB), éter butílico de etilenglicol (EB) y éter butílico de dipropilenglicol (DB), un alcohol como metanol, etanol, propanol, butanol, alcohol bencílico, una amida y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, el solvente puede estar presente en el concentrado emulsionable agroquímico en una cantidad de por lo menos el 10% p/p, o por lo menos aproximadamente el 15% p/p, o incluso por lo menos aproximadamente el 20% p/p, donde p/p significa el peso del solvente presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico. En otras realizaciones, el solvente puede estar presente en el concentrado emulsionable agroquímico en una cantidad de menos de aproximadamente el 80% p/p, o menos de aproximadamente el 70% p/p o incluso menos de aproximadamente el 60% p/p, donde p/p significa el peso del solvente presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico.

En otra realización, la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado emulsionable agroquímico en una cantidad de por lo menos el 1% p/p, o por lo menos el 5% p/p, o por lo menos el 7,5% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico. En otra realización, la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado emulsionable agroquímico en una cantidad de menos de aproximadamente el 20% p/p, o de menos de aproximadamente el 15% p/p, o de menos de aproximadamente el 10% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico. En otra realización, la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado emulsionable agroquímico en una cantidad que varía de aproximadamente el 1% p/p a aproximadamente el 20% p/p, o de aproximadamente el 2% p/p a aproximadamente el 20% p/p, o de aproximadamente el % p/p a aproximadamente el 10% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el total peso del concentrado emulsionable agroquímico

El concentrado emulsionable agroquímico puede comprender opcionalmente uno o más aditivos descritos anteriormente en una cantidad de hasta aproximadamente el 20% p/p, donde p/p significa el peso de los aditivos presentes en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico. En una realización particular, los aditivos pueden elegirse entre inhibidores de la cristalización, emulsionantes, surfactantes distintos del compuesto de fórmula (1), agentes de suspensión, colorantes, antioxidantes, agentes de espumación, absorbentes de luz, auxiliares de mezclado, antiespumantes, agentes complejantes, sustancias neutralizantes o modificadores del pH y tampones, inhibidores de la corrosión, fragancias, agentes humectantes, mejoradores de la absorción, micronutrientes, plastificantes, deslizantes, lubricantes, dispersantes, anticongelantes y/o microbicidas.

En otra realización particular, se proporciona un concentrado de suspensión agroquímica que comprende un componente activo agroquímico, agua y la composición que comprende el compuesto de fórmula (1).

En una realización, el concentrado de suspensión agroquímica puede comprender por lo menos aproximadamente el 1% p/p, o por lo menos aproximadamente el 2% p/p, o incluso por lo menos aproximadamente el 5% p/p, del componente o componentes agroquímicos activos, donde p/p significa el peso del componente o componentes activos agroquímicos presentes en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica. En otra realización, el concentrado de suspensión agroquímica puede comprender menos de aproximadamente el 70% p/p, o menos de aproximadamente el 60% p/p, menos de aproximadamente el 50% en peso o menos de aproximadamente el 40% en peso del componente o componentes agroquímicos activos, donde p/p significa el peso del componente o componentes activos agroquímicos presentes en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica.

En otra realización, el concentrado de suspensión agroquímica puede contener por lo menos aproximadamente el 10% p/p de agua, o por lo menos aproximadamente el 20% p/p, o incluso por lo menos aproximadamente el 40% p/p de agua, donde p/p significa el peso del agua presente en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica. En otra realización, el concentrado de suspensión agrícola puede comprender menos de aproximadamente el 90% p/p de agua, o menos de aproximadamente el 80% p/p, o incluso menos de aproximadamente el 75% p/p de agua, donde p/p significa el peso de agua presente en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica.

En otra realización más, la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado de suspensión agroquímica en una cantidad de por lo menos el 0,5% p/p, o por lo menos el 1% p/p, o por lo menos el 2,5% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula

(1) presente en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica. En otra realización, la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado de suspensión agroquímica en una cantidad de menos de aproximadamente el 10% p/p, o menos de aproximadamente el 7,5% p/p, o menos de aproximadamente el 5% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica. En otra realización, la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado de suspensión agroquímica en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,01% p/p a aproximadamente el 10% p/p, o de aproximadamente el 0,75% p/p a aproximadamente el 7,5% p/p, o de aproximadamente el 1% p/p a aproximadamente el 5% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el total peso del concentrado de suspensión agroquímica.

La suspensión agroquímica puede contener opcionalmente uno o más aditivos descritos anteriormente en una cantidad de hasta el 20% p/p, donde p/p significa el peso de los aditivos presentes en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica.

La composición que comprende el compuesto de fórmula (1) también puede ser útil como aditivo para combustibles en una composición de combustible. En tales realizaciones, la composición de combustible, que incluye el compuesto de fórmula (1) y un combustible, es útil para alimentar un motor de combustión interna o un quemador de llama abierta. La composición de combustible también puede contener uno o más aditivos de rendimiento adicionales. En algunas realizaciones, la composición de combustible puede incluir el compuesto de fórmula (1) en una cantidad menor y el combustible en una cantidad mayor. En otras realizaciones más, el compuesto de fórmula (1) puede añadirse directamente a la composición de combustible o puede añadirse a la composición de combustible como un componente de un concentrado de aditivo para combustible.

Los combustibles adecuados para su uso no están demasiado limitados. En general, el combustible normalmente es líquido en condiciones ambientales, por ejemplo, temperatura ambiente (20° C a 30° C), o normalmente es líquido en condiciones de funcionamiento. El combustible puede ser un combustible de hidrocarburos, un combustible no de hidrocarburos o una mezcla de los mismos.

El combustible de hidrocarburos puede ser un destilado de petróleo, incluyendo la gasolina según se define en la especificación D4814 de la ASTM, o un combustible diésel, según se define en la especificación D975 de la ASTM. En una realización, el combustible es gasolina, y en otra realización el combustible es gasolina sin plomo. En otra realización más, el combustible líquido es un combustible diésel. El combustible de hidrocarburos puede ser un hidrocarburo preparado mediante un proceso de gas a líquido para incluir, por ejemplo, hidrocarburos preparados mediante un proceso como el proceso Fischer-Tropsch. En algunas realizaciones, el combustible es un combustible diésel, un combustible biodiésel o una combinación de los mismos.

El combustible también puede incluir aceites combustibles más pesados, como los aceites combustibles número 5 y número 6, que también se denominan aceites combustibles residuales, aceites combustibles pesados y/o aceites combustibles de horno. Tales combustibles pueden usarse solos o mezclados con otros combustibles, típicamente más ligeros, para formar mezclas con viscosidades más bajas. También se incluyen los combustibles búnker, que generalmente se usan en motores marinos. Estos tipos de combustibles tienen viscosidades altas y pueden ser sólidos en condiciones ambientales, pero son líquidos cuando se calientan y se suministran al motor o quemador que está alimentando.

El combustible no de hidrocarburos puede ser una composición que contiene oxígeno, a menudo denominado oxigenado, que incluye alcoholes, éteres, cetonas, ésteres de ácidos carboxílicos, nitroalcanos o mezclas de los mismos. Los combustibles no de hidrocarburos pueden incluir metanol, etanol, metil t-butil éter, metiletilcetona, aceites transesterificados y/o grasas de plantas y animales tales como éster metílico de colza y éster metílico de soja, y nitrometano.

Las mezclas de combustibles de hidrocarburos y no de hidrocarburos pueden incluir, por ejemplo, gasolina y metanol y/o etanol, combustible diésel y etanol, y combustible diésel y un aceite vegetal transesterificado como éster metílico de colza y otros combustibles bioderivados. En una realización, el combustible es una emulsión de agua en un combustible de hidrocarburos, un combustible no de hidrocarburos o una mezcla de los mismos.

El combustible generalmente está presente en la composición de combustible en una cantidad mayor que generalmente es de más de aproximadamente el 90% en peso, o de más de aproximadamente el 95% en peso, o en otras realizaciones de más de aproximadamente el 97% en peso, o de más de aproximadamente el 99,5% en peso, o de más de aproximadamente el 99,9% en peso, o incluso de más de aproximadamente el 99,99% en peso, sobre la base del peso total de la composición de combustible.

La composición que comprende el compuesto de fórmula (1) generalmente está presente en la composición de combustible en una cantidad menor que generalmente es de menos de aproximadamente el 10% en peso, o de

menos de aproximadamente el 1% en peso, o de menos de aproximadamente el 0,5% en peso e incluso de menos de aproximadamente el 0,1% en peso (1000 ppmp) (partes por millón en peso) sobre la base del peso total de la composición de combustible.

5 En una realización, la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) es parte de un concentrado de aditivo para combustible. Tales concentrados de aditivos para combustible que contienen la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) son composiciones que también pueden contener uno o más aditivos de desempeño así como alguna cantidad de combustible, un aceite portador o un solvente de algún tipo. Estos concentrados de aditivos para combustibles pueden luego añadirse a otras composiciones como una manera
10 conveniente de manipular y suministrar los aditivos, dando como resultado la composición de combustible final descrita anteriormente. El concentrado de aditivo para combustibles puede, en general, contener el compuesto de fórmula (1) en una cantidad de aproximadamente el 0,1% en peso a aproximadamente el 80% en peso, o de aproximadamente el 0,5% en peso a aproximadamente el 60% en peso, sobre la base del peso total del concentrado de aditivo para combustibles.

15 Los aditivos de rendimiento adicionales pueden incluir, pero no se limitan a: un antioxidante como un fenol impedido o un derivado del mismo y/o una diarilamina o un derivado de la misma; un inhibidor de la corrosión; y/o un aditivo detergente/dispersante, como un detergente adicional que contenga poliéteramina o nitrógeno, incluyendo, pero no limitados a, detergentes/dispersantes de amina PIB, detergentes/dispersantes de succinimida y otros
20 detergentes/dispersantes de sales cuaternarias, incluyendo las sales de imida de amonio cuaternarias, es decir un detergente que contiene un grupo imida y una sal de amonio cuaternario.

25 Los aditivos de rendimiento adicionales también pueden incluir: un mejorador del flujo frío como un copolímero esterificado de anhídrido maleico y estireno y/o un copolímero de etileno y acetato de vinilo; un inhibidor de espuma y/o agente antiespumante como un fluido de silicona; un desemulsionante tal como un alcohol polialcoxilado; un agente lubricante como un ácido carboxílico graso; un desactivador de metales como un triazol aromático o un derivado del mismo, incluyendo pero no limitados a, benzotriazol; y/o un aditivo de recesión del asiento de válvula como una sal de sulfosuccinato de metal alcalino.

30 Los aditivos de rendimiento adicionales también pueden incluir un biocida; un agente antiestático, un descongelante, un fluidificante como un aceite mineral y/o poli(alfaolefina) y/o poliéter, y un mejorador de la combustión como un mejorador de octano o cetano.

35 Cada uno de los aditivos de rendimiento adicionales puede añadirse directamente al concentrado de aditivo para combustibles y/o a la composición de combustible, pero generalmente se mezclan con el aditivo para combustibles para formar el concentrado de aditivo para combustibles, que luego se mezcla con el combustible para dar como resultado una composición de combustible.

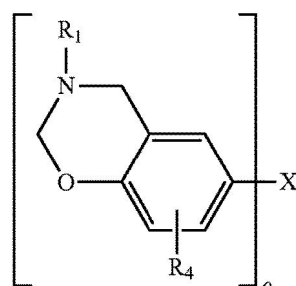
40 El concentrado de aditivo para combustibles también puede incluir un aceite portador. Los ejemplos incluyen aquellos aceites de grado de viscosidad "Solvent Neutral (SN) 500 a 2000", aceites portadores sintéticos a base de polímeros de olefina que tienen un peso molecular de aproximadamente 400 a 1800, especialmente a base de polibuteno o poliisobuteno (hidrogenado o no hidrogenado) y polialfaolefinas. o poliolefinas internas y aceites portadores sintéticos a base de fenoles o alcoholes alcoxilados de cadena larga.

45 El concentrado de aditivo para combustibles también puede comprender un solvente. El solvente proporciona un concentrado de aditivo para combustibles homogéneo y facilita la transferencia y manipulación de la composición de concentrado de aditivo para combustibles. En algunas realizaciones, el solvente es un hidrocarburo alifático, hidrocarburos aromáticos o una mezcla de los mismos.

50 Los hidrocarburos alifáticos incluyen varias fracciones de punto de ebullición de nafta y queroseno que tienen una mayoría de componentes alifáticos. Los hidrocarburos aromáticos incluyen benceno, tolueno, xilenos y varias fracciones de punto de ebullición de nafta y queroseno que tienen una mayoría de componentes aromáticos. En una realización, el solvente puede estar presente en el concentrado de aditivo para combustibles en una proporción de aproximadamente el 1,0% en peso a aproximadamente el 90% en peso, en otra realización de aproximadamente el
55 25% a aproximadamente el 85% en peso, y en otra realización más, de aproximadamente el 40% en peso a aproximadamente el 80% en peso, sobre la base del peso total del concentrado de aditivo para combustibles.

60 En otra realización más, el compuesto de fórmula (1) puede usarse como un agente de curado para curar una resina curable. La resina curable puede ser una resina de benzoxazina, una resina epoxi, una resina de episulfuro, una resina de oxetano, una resina de (met)acrilato, una resina de cianato o una mezcla de las mismas. La composición curable puede ser una composición curable de una parte o una composición curable de múltiples partes (por ejemplo, dos partes) donde la primera parte incluye la resina curable y la segunda parte incluye el compuesto de fórmula (1), y la composición curable se forma combinando la primera parte y la segunda parte.

65 Las resinas de benzoxazina incluyen aquellos compuestos que tienen una estructura general:



donde o es un número entero de 1 a 4; cada R_1 es un grupo alquilo sustituido o no sustituido, un grupo alquenilo sustituido o no sustituido, un grupo arilo sustituido o no sustituido, un grupo heteroarilo sustituido o no sustituido, un grupo carbocíclico sustituido o no sustituido, o un grupo heterocíclico sustituido o no sustituido; cada R_4 es independientemente hidrógeno, un grupo alquilo, un grupo alquenilo o un grupo arilo; y X es un enlace directo (cuando o es 2), un grupo alquilo sustituido o no sustituido, un grupo arilo sustituido o no sustituido, un grupo heteroarilo sustituido o no sustituido, S, S=O, O=S=O o C=O. Los sustituyentes incluyen, pero no se limitan a, grupos hidroxilo, alquilo, alcoxi, mercapto, heterocíclico, arilo, heteroarilo, halógeno, ciano, nitro, nitrona, amino, amido, acilo, oxiacilo, carboxilo, carbamato, sulfonilo, sulfonamida y sulfurilo.

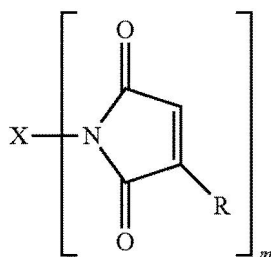
La resina epoxídica puede incluir, pero no se limita a, bisfenoles glicidilados (como bisfenol A o E o F o S diglicidil éter), bifenilos glicidilados y versiones hidrogenadas de los mismos; resinas epoxi cicloalifáticas; anilinas glicidiladas; e hidroxianilinas glicidiladas.

Los episulfuros incluyen, pero no se limitan a, análogos de azufre de una o más resinas epoxídicas descritas anteriormente.

Los oxetanos pueden incluir, pero no se limitan a, anillos que contienen oxígeno de cuatro miembros de una o más resinas epoxi descritas anteriormente.

Las resinas de (met)acrilato pueden incluir aquellos compuestos representados por la fórmula general $H_2C=CGCO_2R^6$ donde G es hidrógeno, halógeno o un grupo alquilo C_1-C_4 y R^6 es grupos alquilo, alquenilo, cicloalquenilo, alcarilo, o arilo, cualquiera de los cuales puede estar opcionalmente sustituido o interrumpido según sea el caso con silano, silicio, oxígeno, halógeno, carbonilo, hidroxilo, éster, ácido carboxílico, urea, uretano, carbonato, amina, amida, azufre, sulfonato y sulfona.

Las resinas de maleimida, que pueden estar en forma líquida o sólida, incluyen aquellos compuestos que tienen la estructura general:



donde m es un número entero de 1 a 3, X es una especie ramificada de alquilo o alqueno que tiene por lo menos 12 átomos de carbono y cada R es independientemente hidrógeno o un grupo alquilo C_1-C_4 .

Las resinas de éster de cianato incluyen aquellos compuestos que tienen la estructura general $R^{10}-(OC\equiv N)_d$ donde d es un número entero de 1 a 10 y R^{10} es un radical hidrocarburo aromático C_6-C_{200} o mixto aromático-alifático que contiene un miembro o miembros seleccionados del grupo que consiste en oxígeno, nitrógeno, halógeno, azufre, fósforo, boro, silicio, hidrógeno y mezclas de los mismos.

La composición curable también puede incluir aditivos auxiliares habituales como, pero no limitados a, un estabilizador, extensor, relleno, agente de refuerzo, pigmento, colorante, plastificante, agente de pegajosidad, caucho, acelerador, diluyente o cualquier mezcla de los mismos.

La composición curable típicamente incluirá la resina curable en una cantidad de aproximadamente el 10-90% en peso, o aproximadamente el 20-80% en peso o aproximadamente el 25-70% en peso, o aproximadamente el 30-65% en peso o incluso aproximadamente el 35%-55% en peso, sobre la base del peso total de la composición curable. La composición curable también puede incluir el compuesto de fórmula (1) en una cantidad de

aproximadamente el 1-35% en peso, o aproximadamente el 2-30% en peso, o aproximadamente el 3-25% en peso o aproximadamente el 5-20% en peso, sobre la base del peso total de la composición curable.

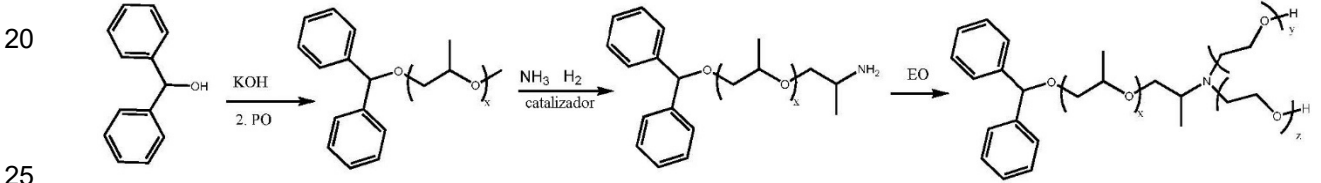
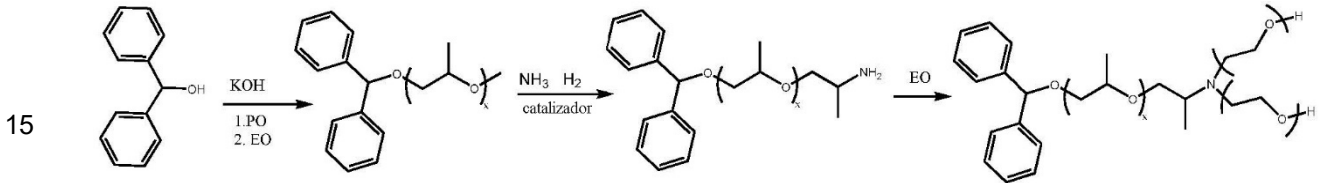
EJEMPLOS

5

Ejemplo 1. Síntesis usando difenilmetanol como alcohol iniciador.

A continuación se describen de manera general los procesos para preparar un alcoxilato de polieteramina de benzhidrido de acuerdo con la presente divulgación:

10



25

Por ejemplo, se usó óxido de propileno para alcoxilar difenilmetanol (x = aproximadamente 4) y luego se usó óxido de etileno para alcoxilar la poliéteramina (m+n = 5).

30

Más específicamente, se cargaron 1,59 kg (3,5 libras) de benzhidrol y 50 g de metóxido de potasio en un reactor y se calentaron a 100° C mientras se aplicaba vacío para eliminar cualquier agua o metanol. Luego se aumentó la temperatura a 125° C y se añadieron 2,00 kg (4,4 lbs) de óxido de propileno a una velocidad que mantuvo la temperatura entre 125°-135° C. Cuando se hubo completado la adición de óxido de propileno, la reacción se digirió durante 1 hora adicional a 130° C y, finalmente, la reacción se separó con nitrógeno durante 30 minutos para eliminar cualquier óxido de propileno sin reaccionar. Luego, el propoxilato de benzhidrol se aminó de manera reductora con H₂ y NH₃ en un reactor continuo a 190° C con un catalizador heterogéneo para producir la amina. Se cargaron 2,03 kg (4,48 libras) de la amina en un reactor y se calentó a 120° C y se cargaron 0,43 kg (0,95 libras) de óxido de etileno a una velocidad para mantener la temperatura entre 145° -150° C para etoxilar la amina. Luego, el reactor se enfrió a 90° C y se añadieron a la reacción 8 g de KOH y se hicieron reaccionar 0,64 kg (1,42 lbs) adicionales de óxido de etileno para llevar los moles de óxido de etileno por grupo amino a 5. La reacción finalmente se separó con nitrógeno a 140° C durante 30 min para eliminar cualquier óxido de etileno sin reaccionar para proporcionar el etoxilato de poliéteramina de benzhidrido como un líquido viscoso amarillo. Este surfactante se añadió a una formulación de glifosato-isopropilamina al 10% (480 g/l de glifosato-IPA) y la formulación resultante era transparente y fluida, y no gelificó cuando se añadió al agua a la velocidad de uso recomendada. Cualquier espuma formada en esta dilución tras la agitación se disipó rápidamente en 5 segundos o menos, lo cual es una ventaja sobre la química adyuvante de etoxilato de seboamina estándar usada para el glifosato que forma una espuma persistente tras agitación.

35

40

45

Luego, se prepararon una serie de 20 benzhidril eteraminas diferentes y sus etoxilatos como antes y se evaluaron en formulaciones de glifosato-IPA de 480 g/l. Específicamente, se mezclaron 1,5 g del compuesto de la invención con 10,0 g de glifosato IPA al 62% y 3,6 g de agua desionizada para crear las formulaciones deseadas. El punto de enturbiamiento de cada formulación se muestra a continuación en la Tabla 1.

50

Tabla 1

	moles EO después de la aminación de (punto de enturbiamiento en °C)				
moles PO antes de la aminación	2	5	10	15	20
2	96	74	73	52	n/A
3	100	98	79	63	32
4	100	93	79	64	42
6	73	80	74	64	48

55

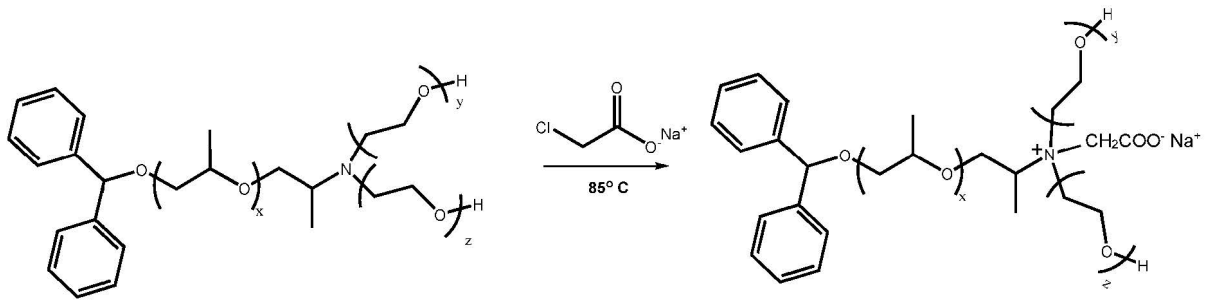
60

Como se muestra en la Tabla 1, los compuestos de la invención pueden usarse para formular concentrados de glifosato que tienen puntos de enturbiamiento altos, lo cual es importante para la estabilidad durante el almacenamiento.

65

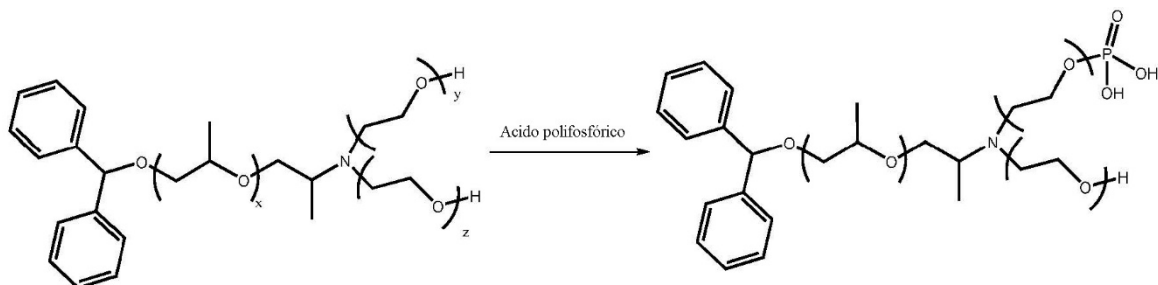
Luego se evaluó el alcoxilato de polietaramina de benzhidrido inicialmente preparado con anterioridad como un adyuvante para mejorar la eficacia del glifosato en una prueba de campo. Los etoxilatos de amina de sebo son el adyuvante estándar usado para el glifosato, pero están bajo presión reguladora en todo el mundo por su toxicidad percibida. En este ensayo, se añadió un 0,5% p/p de cada compuesto a un tanque rociador que contenía la concentración recomendada de glifosato. Como se muestra en las Figuras 1 y 2, el compuesto de la invención (Ejemplo 1) aumenta la eficacia de eliminación de malas hierbas del glifosato por lo menos tan bien como la química bien establecida del etoxilato de amina de sebo (TAE).

Ejemplo 2. Betaína



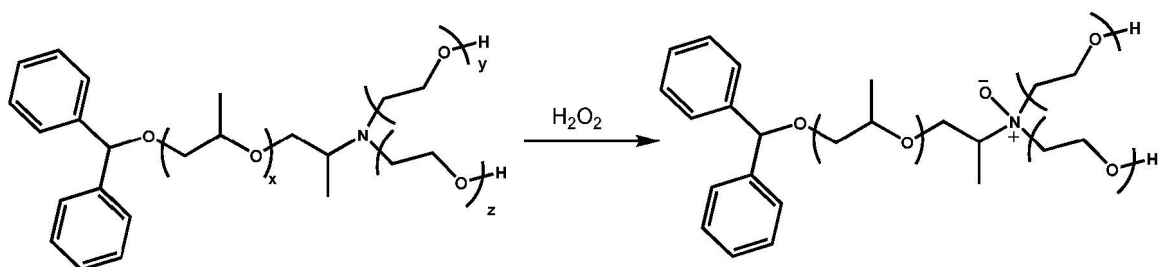
El etoxilato de benzhidrido eteramina del Ejemplo 1 se hizo reaccionar adicionalmente para crear un surfactante de betaína de acuerdo con lo anterior. Se mezclaron 100,5 g de la amina (Nº de amina 1,49 meq/g) con 17,4 g de cloroacetato de sodio y 180 g de H₂O y la reacción se calentó a 85° C durante 7 horas. El producto resultante tenía un índice de amina de 0,36 meq/g, lo que indica que la amina se convirtió en betaína con una relación de conversión del 75%. Se descubrió que el producto de betaína era soluble en agua a pH neutro, mientras que la amina original no lo era. Este surfactante se añadió a una formulación de glifosato-isopropilamina al 10% (480 g/l de glifosato-IPA) y la formulación resultante era transparente y fluida, y no gelificaba cuando se añadía al agua a la velocidad de uso recomendada.

Ejemplo 3. Éster de fosfato



En este ejemplo (esquema de reacción mostrado anteriormente), se hicieron reaccionar 94 g del etoxilato de benzhidrido amina del Ejemplo 1 con 6 g de ácido polifosfórico a 120° C durante 2 horas usando un mezclador de rotor/estator de alto cizallamiento para generar el éster de fosfato. La titulación del producto mostró un punto de inflexión y el índice de acidez final se midió a 75 mg/g KOH, que está cerca del valor teórico de 77 mg/g KOH, mostrando una fosfatación eficiente de los grupos alcohol. Este surfactante se añadió a una formulación de glifosato-isopropilamina al 10% (480 g/l de glifosato-IPA) y la formulación resultante era transparente y fluida, y no gelificaba cuando se añadía al agua a la velocidad de uso recomendada.

Ejemplo 4. N-óxido



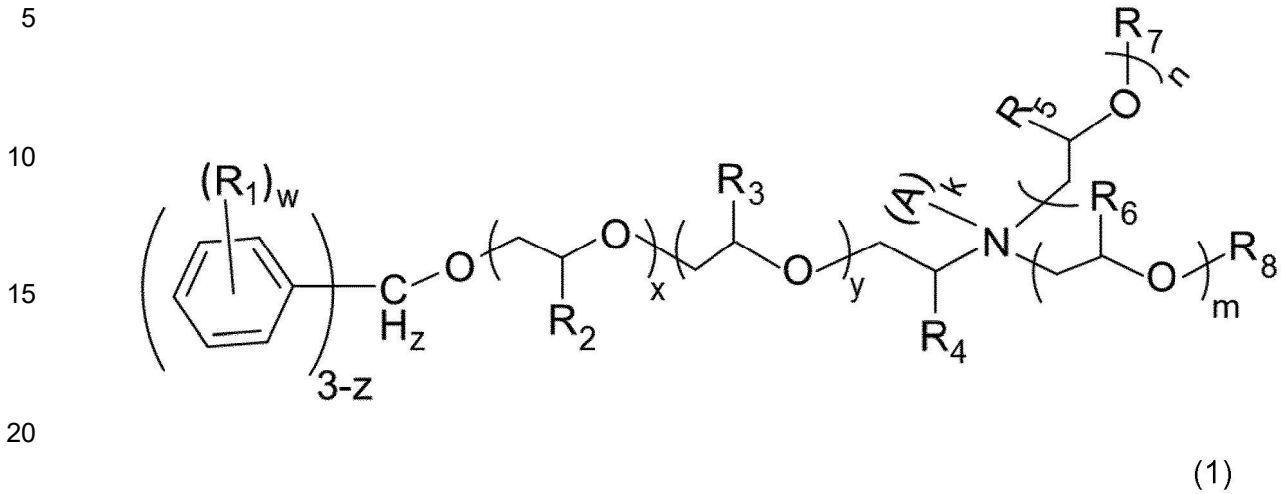
5 El etoxilato de benzhidrilo eteramina del Ejemplo 1 se hizo reaccionar adicionalmente para sintetizar un surfactante de N-óxido de acuerdo con lo anterior. Se mezclaron 100,5 g de la amina (Nº de amina 1,49 meq/g) con 180 g de H₂O y la reacción se calentó a 60° C y luego se añadieron 14,5 g de H₂O₂ al 35% durante más de 2 horas. La reacción se calentó además a 60° C durante 4 horas y el producto resultante tenía un índice de amina de 0,26 meq/g, lo que indica que la amina se convirtió en el N-óxido con una proporción de conversión del 83%. Se descubrió que el producto de N-óxido era soluble en agua a pH neutro, mientras que la amina original no lo era. Este surfactante se añadió a una formulación de glifosato-isopropilamina al 10% (480 g/l de glifosato-IPA) y la formulación resultante era transparente y fluida, y no gelificaba cuando se añadía al agua a la velocidad de uso recomendada.

10 Aunque lo anterior está dirigido a varias realizaciones de la presente divulgación, pueden idearse otras realizaciones y realizaciones adicionales de la divulgación sin apartarse del alcance básico de la misma, y el alcance de la misma está determinado por las reivindicaciones que siguen.

15

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto de alcoxilato de polieteramina que tiene la fórmula (1)



25 donde cada R_1 es independientemente hidrógeno, un grupo alquilo o un grupo cicloalquilo; cada R_2 , R_3 , R_4 , R_5 y R_6 son independientemente hidrógeno, metilo o etilo; R_7 y R_8 son independientemente hidrógeno, SO_3M , $COOM$ o PO_3M_2 ; M es hidrógeno, un catión soluble en agua, un metal monovalente o un catión de metal polivalente; A es metilo, etilo, oxígeno o CH_2COO ; w es un número entero de 0 a 3; z es un número entero de 0 a 2; x es un número entero de 0 a 100; y es un número entero de 0 a 100; m es un número entero de 0 a 50; n es un número entero de 0 a 50; k es 0 o 1; y en donde $x + y = 1$ a 100 y $m + n = 1$ a 50,

en donde

30 cuando z es 2, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ;

cuando z es 1, w es 0, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ; y

35 cuando z es 0, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} .

2. El compuesto de la reivindicación 1, en donde $x + y = 1$ a 10.

3. El compuesto de la reivindicación 2, en donde R_4 es metilo o etilo y R_2 y R_3 se eligen de tal manera que los grupos x y los grupos y sean grupos de bloque de óxido de etileno, óxido de propileno y óxido de butileno.

4. El compuesto de la reivindicación 1, en donde $m + n = 2$ a 50 y cada R_5 y R_6 es independientemente hidrógeno o metilo y los grupos oxialquileno m y n están dispuestos en grupos de bloques de óxido de etileno y óxido de propileno.

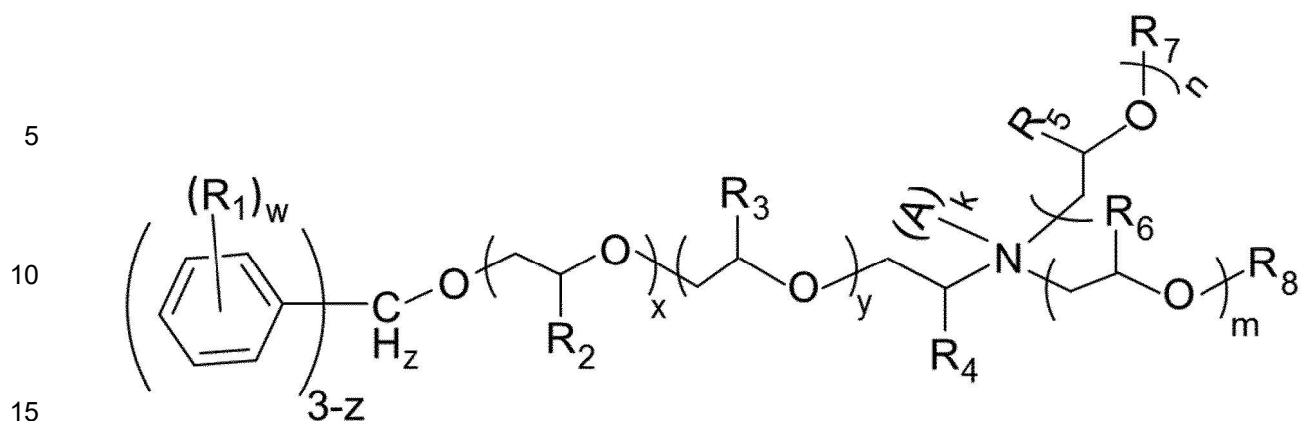
45 5. Un método para preparar un compuesto de alcoxilato de polieteramina que tiene la fórmula (1) de acuerdo con la reivindicación 1 que comprende los pasos de: hacer reaccionar un alcohol iniciador seleccionado de fenilmetanol, difenilmetanol, trifenilmetanol y una mezcla de los mismos con óxido de etileno, óxido de propileno, óxido de butileno o una mezcla de los mismos para formar un poliol precursor; aminorar el poliol precursor para formar una polieteramina; y alcoxilar la polieteramina con un óxido de alquileno para formar el alcoxilato de polieteramina de fórmula (1).

50 6. El método de la reivindicación 5, en donde el método comprende además el paso de hacer reaccionar el compuesto de alcoxilato de polieteramina de fórmula (1) con una fracción ácida y opcionalmente neutralizar con una fuente de metal alcalino, metal alcalinotérreo, amina o amoniaco.

55 7. El método de la reivindicación 5, en donde el método comprende además el paso de hacer reaccionar el compuesto de alcoxilato de polieteramina de fórmula (1) con un ácido carboxílico sustituido con halo o un óxido.

8. Una composición que comprende un compuesto de alcoxilato de polieteramina que tiene la fórmula (1)

60



(1)

20 donde cada R_1 es independientemente hidrógeno, un grupo alquilo o un grupo cicloalquilo; cada R_2 , R_3 , R_4 , R_5 y R_6 son independientemente hidrógeno, metilo o etilo; R_7 y R_8 son independientemente hidrógeno, SO_3M , $COOM$ o PO_3M_2 ; M es hidrógeno, un catión soluble en agua, un metal monovalente o un catión de metal polivalente; A es metilo, etilo, oxígeno o CH_2COO ; w es un número entero de 0 a 3; z es un número entero de 0 a 2; x es un número entero de 0 a 100; y es un número entero de 0 a 100; m es un número entero de 0 a 50; n es un número entero de 0 a 50; k es 0 o 1; y en donde $x + y = 1$ a 100 y $m + n = 1$ a 50 y un solvente

25 en donde

cuando z es 2, w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ;

30 cuando z es 1, w es 0; w es 1 y R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} , o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ;

cuando z es 0, w es 1 y un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} ; o w es 2 y por lo menos un R_1 es un grupo alquilo o cicloalquilo C_4-C_{14} .

35 9. Un producto envasado que comprende: a) un recipiente que tiene por lo menos una salida; y b) la composición de la reivindicación 9.

40 10. Una composición concentrada que comprende de aproximadamente el 50% en peso del compuesto de fórmula (1) de acuerdo con la reivindicación 1 y de aproximadamente el 0,5% en peso a aproximadamente el 50% en peso de agua y opcionalmente uno o más aditivos, donde el % en peso se basa en el peso total de la composición concentrada.

45 11. Una formulación química de rendimiento o una formulación para el cuidado personal que comprende la composición de la reivindicación 8, en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,01% en peso a aproximadamente el 40% en peso, sobre la base del peso total de la formulación química de rendimiento.

50 12. Un concentrado emulsionable agroquímico que comprende un componente agroquímico activo, un solvente y la composición de la reivindicación 8, en donde el compuesto de fórmula (1) está presente en una cantidad que varía de aproximadamente el 1% p/p a aproximadamente el 20% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado emulsionable agroquímico sobre el peso total del concentrado emulsionable agroquímico.

55 13. Un concentrado de suspensión agroquímica que comprende un componente agroquímico activo, agua y la composición de la reivindicación 8, en donde la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado de suspensión agroquímica en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,01% p/p a aproximadamente el 10% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado de suspensión agroquímica sobre el peso total del concentrado de suspensión agroquímica.

60 14. Un concentrado líquido soluble agroquímico que comprende un ingrediente activo agroquímico disuelto, agua y la composición de la reivindicación 8, en donde la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) puede estar presente en el concentrado líquido soluble agroquímico en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,01% a aproximadamente el 20% p/p, donde p/p significa el peso de la composición que comprende el compuesto de fórmula (1) presente en el concentrado líquido soluble de agroquímico sobre el peso total del concentrado líquido soluble agroquímico.

65

15. Un concentrado de aditivo para combustibles que comprende la composición de la reivindicación 8, uno o más aditivos de rendimiento y por lo menos uno de un combustible, un aceite portador o un solvente.

16. Una composición curable que comprende el compuesto de fórmula (1) de la reivindicación 1 y una resina curable.

5

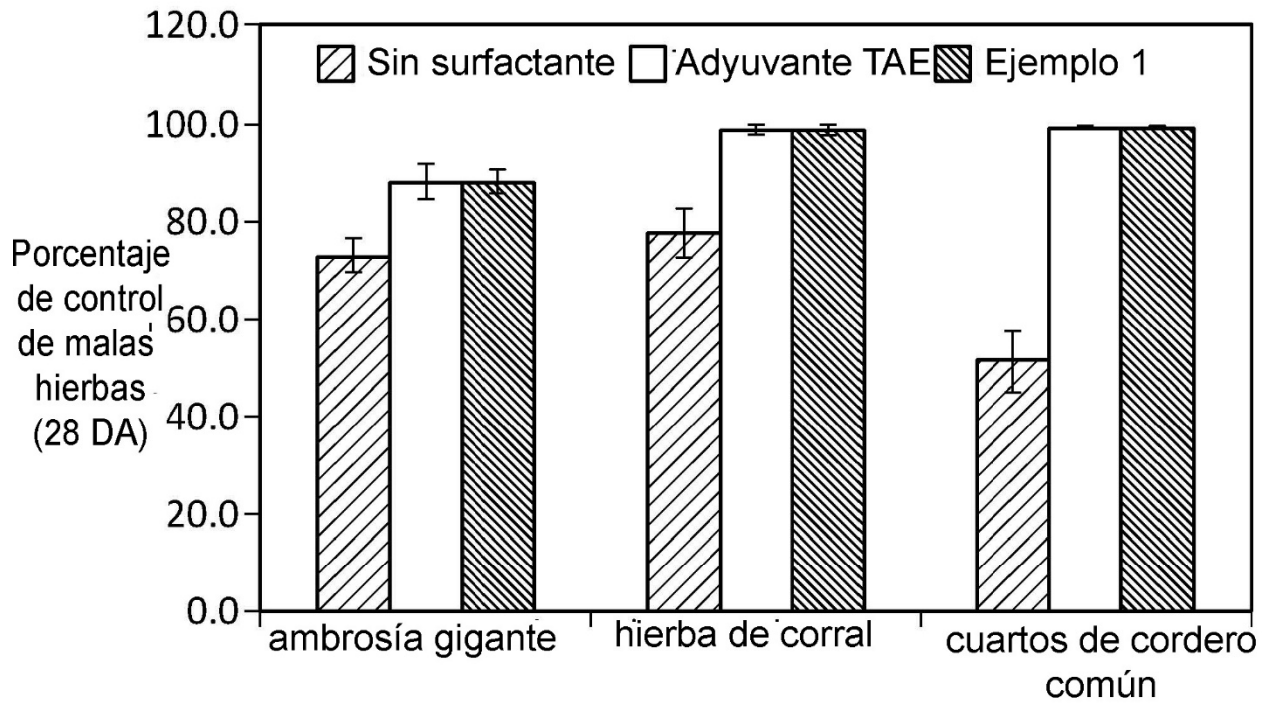


FIG. 1

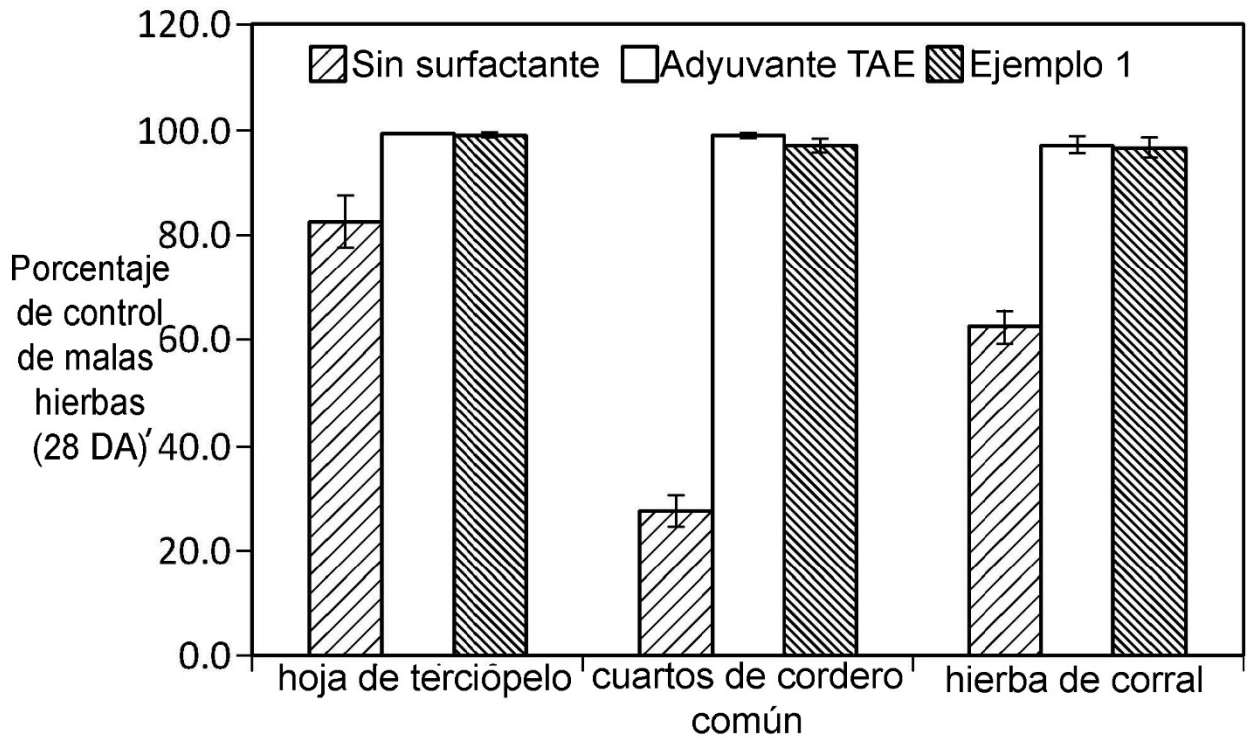


FIG. 2