



**INPI**  
INSTITUTO  
NACIONAL  
DA PROPRIEDADE  
INDUSTRIAL  
Assinado  
Digitalmente

**REPÚBLICA FEDERATIVA DO BRASIL**  
MINISTÉRIO DA ECONOMIA  
**INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL**

CARTA PATENTE Nº PI 0409279-1

O INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL concede a presente PATENTE DE INVENÇÃO, que outorga ao seu titular a propriedade da invenção caracterizada neste título, em todo o território nacional, garantindo os direitos dela decorrentes, previstos na legislação em vigor.

**(21) Número do Depósito:** PI 0409279-1

**(22) Data do Depósito:** 07/04/2004

**(43) Data da Publicação Nacional:** 11/04/2006

**(51) Classificação Internacional:** C11D 3/37; A61K 8/04; A61K 8/86; A61K 8/891; A61K 8/898; A61Q 19/00; A61Q 19/10; C08G 77/388; D06M 15/643; A61Q 5/00; A61Q 5/06; A61Q 5/12.

**(52) Classificação CPC:** C11D 3/3742; A61K 8/046; A61K 8/86; A61K 8/891; A61K 8/898; A61Q 19/00; A61Q 19/10; C08G 77/388; D06M 15/6436; A61Q 5/00; A61Q 5/004; A61Q 5/06; A61Q 5/12.

**(30) Prioridade Unionista:** DE 103 16 662.9 de 11/04/2003.

**(54) Título:** COMPOSTOS DE AMINO- E/OU AMÔNIO-POLISSILOXANO REATIVOS, SUAS APLICAÇÕES, FORMULAÇÃO COMPREENDENDO OS MESMOS, PROCESSOS DE PREPARAÇÃO DOS REFERIDOS COMPOSTOS E TRATAMENTO E/OU ACABAMENTO DE FIBRAS, BEM COMO AS REFERIDAS FIBRAS

**(73) Titular:** GE BAYER SILICONES GMBH & CO. KG., Sociedade Alemã. Endereço: Gebaeude V7, 51368 Leverkusen, ALEMANHA(DE)

**(72) Inventor:** HORST LANGE; ROLAND WAGNER; ANITA WITOSSEK; KARL-HEINZ STACHULLA; KARL-HEINZ SOCKEL; ANNETTE MOELLER.

**(87) Publicação PCT:** WO 2004/090007 de 21/10/2004

**Prazo de Validade:** 10 (dez) anos contados a partir de 23/02/2021, observadas as condições legais

**Expedida em:** 23/02/2021

Assinado digitalmente por:

**Liane Elizabeth Caldeira Lage**

Diretora de Patentes, Programas de Computador e Topografias de Circuitos Integrados

Relatório Descritivo da Patente de Invenção para  
**"COMPOSTOS DE AMINO- E/OU AMÔNIO-POLISSILOXANO REATIVOS, SUAS APLICAÇÕES, FORMULAÇÃO COMPREENDENDO OS MESMOS, PROCESSOS DE PREPARAÇÃO DOS REFERIDOS COMPOSTOS E TRATAMENTO E/OU ACABAMENTO DE FIBRAS, BEM COMO AS REFERIDAS FIBRAS".**

[0001] A presente invenção refere-se a compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano que apresentam grupos funcionais reativos e sais dos mesmos, especialmente copolímeros de polissiloxano poliquaternários e seus sais, processos para a sua preparação, seu emprego para o tratamento superficial de substratos, tais como fibras naturais e sintéticas ou substratos fibrosos, especialmente como plastificantes hidrofílicos resistentes à lavagem, bem como seu emprego em formulações cosméticas e formulações, que contêm os compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano reativos e seus sais.

[0002] Polissiloxanos contendo grupos amino são conhecidos como plastificantes têxteis (EP 441530).

[0003] A introdução de estruturas amino modificadas pelas unidades de óxido de etileno/óxido de propileno como cadeias laterais provoca um aperfeiçoamento do efeito de hidrofilia (US 5591880, US 5650529). As unidades de óxido de alquilenos permitem neste caso, o ajuste visado do balanço hidrofílico-hidrofóbico.

[0004] Além disso, foi proposto reagir siloxanos  $\alpha,\omega$ -epóxi modificados com óxidos de alquilenos  $\alpha,\omega$ -amino funcionalizados e aplicar estes produtos como plastificantes hidrofílicos (US 5807956, US 5981681).

[0005] Com o aperfeiçoamento dessa hipótese, foram descritos copolímeros por blocos, que se formam através da reação de siloxanos  $\alpha,\omega$ -epóxi modificados e óxidos de alquilenos  $\alpha,\omega$ -epóxi funcionalizados com aminas primárias (US 6475568). As aminas

primárias servem como elos de copulação entre as duas espécies de epóxi.

[0006] Para aperfeiçoar a substantividade, foram realizados ensaios para introduzir grupos de amônio quaternários em siloxanos modificados com óxido de alquilenos.

[0007] A reação de  $\alpha,\omega$ -diepóxidos com aminas terciárias na presença de ácidos fornece siloxanos  $\alpha,\omega$ -diquaternários livres de óxido de alquilenos, os quais podem ser empregados para fins de tratamento capilar (DE-PS 3719086).

[0008] Na US 6242554 são descritos derivados de siloxano  $\alpha,\omega$ -difuncionais, que em cada caso dispõem de uma unidade de amônio e óxido de alquilenos quaternária separada.

[0009] Quats de polissiloxano modificados com óxido de alquilenos rigorosamente do tipo de pente foram igualmente descritos (US 5098979, US 5153294, US 5166297). Os grupos hidroxila de polietersiloxanos substituídos do tipo de pente, isto é, nas cadeias laterais de polissiloxano, são transformados com epiclorohidrina ou ácido cloroacético nos derivados de halogênio correspondentes. Em seguida, realiza-se uma quaternização com aminas terciárias.

[00010] A reação de  $\alpha,\omega$ -diepoxissiloxanos com aminas di-terciárias na presença de ácidos fornece polissiloxanos poliquaternários em cadeia longa isentos de óxido de alquilenos (EP 282720). Compostos análogos à base de siloxanos substituídos com  $\alpha,\omega$ -cloropropila são descritos na DE 3340708. Derivados aromáticos, de preferência, à base de imidazol, são tratados na US 6240929. A utilização destas estruturas aromáticas poliquaternárias deve aperfeiçoar a resistência à lavagem de cabelos sob o efeito de xampus suaves.

[00011] Copolímeros de siloxano lineares, que contêm estruturas de óxido de alquilenos e quat, são reivindicados na DE 19817776.

[00012] Nenhuma das propostas tratadas todavia, apresentou

provas de uma solução satisfatória para o problema, de obter o toque macio possível através dos silicones e a acentuada hidrofília após o primeiro acabamento de um material têxtil, também quando este é exposto à corrosão de formulações de detergentes agressivos no decurso de repetidos processos de lavagem à temperatura eventualmente elevada.

[00013] Polissiloxanos poliquaternários são reivindicados na DE 100 51 258 como plastificantes para detergentes e na DE 100 36 533 adicionalmente, como plastificantes para o primeiro acabamento têxtil.

[00014] Nos relatórios WO 02/10256, WO 02/10257, WO 02/10259 da requerente, tratam-se os polissiloxanos poliquaternários modificados com óxido de alquilenos como plastificantes em detergentes e para o primeiro acabamento têxtil. De acordo com essas patentes, a hidrofília pode ser aumentada através da incorporação visada entre outros, de unidades de óxido de alquilenos e simultaneamente pode ser obtida uma excelente maciez e substantividade.

[00015] Nos relatórios DE 102 51 525.5 e DE 102 51 526.3 não publicados da requerente, propõe-se ajustar através da oligomerização das estruturas do quat entre os blocos de silicone, uma densidade de carga mais elevada, o que tem efeito positivo sobre a substantividade e a hidrofília.

[00016] Também foram propostas estruturas reticuladas e/ou ramificadas. De acordo com a US 6177511, uma reticulação é efetuada mediante combinação de aminossiloxanos com derivados de ácido acrílico polifuncionais em uma reação análoga à adição de Michael. Grupos amônio quaternários podem ser introduzidos como derivados de acrilato.

[00017] Poliquats de polissiloxano ramificados modificados com óxido de alquilenos foram sintetizados a partir de polissiloxanos



terminados em  $\alpha,\omega$ -OH e trialcoxissilanos mediante condensação. A estrutura de amônio quaternária é introduzida através do trialcoxissilano, sendo que o átomo de nitrogênio quaternário é substituído por unidades de óxido de alquilenos (US 5602224).

[00018] Em um relatório da requerente (DE 102 12 470.1) não publicado atinge-se através da incorporação visada de aminas tri- e polifuncionais ou aminas modificadas com óxido de alquilenos ou através da incorporação de agentes de alquilação tri- e polifuncionais, por exemplo, à base de epóxidos ou ésteres de ácido halogenocarboxílico nas estruturas de acordo com a WO 02/10256, WO 02/10257, WO 02/10259, uma ramificação/reticulação, que aumenta mais o nível de propriedades com respeito à substantividade, maciez e hidrofília.

[00019] Sistemas de siloxano reticulados são igualmente conhecidos. De acordo com a DE 42 11 256 os aminossiloxanos podem ser reticulados em emulsão com silanos ou siloxanos, que dispõem de pelo menos um grupo de anidrido de ácido carboxílico. A estabilidade da formulação e particularmente a hidrofília do acabamento não são satisfatórios. Alternativamente, a reticulação também pode ser obtida através da reação com epíclorohidrina ou diepóxidos (WO 01/27232).

[00020] Na US 46661577 e na US 2002 0028900 são descritas emulsões auto-reticuladoras à base de aminossiloxanos com estruturas de trialcoxissilila terminais, que são componente da estrutura do poliorganossiloxano. Essas estruturas no entanto, contêm apenas uma cadeia principal de poliorganossiloxano e por isso, não permitem nenhuma formação e ajuste sob medida da solubilidade, maciez, hidrofília e substantividade. O peso molecular não pode ser aumentado independente do tamanho da cadeia principal do polissiloxano ou de uma cadeia lateral de poliéter eventualmente presente.

[00021] Quats de silicone capazes de reticulação são descritos na DE 32 36 466. A reação de siloxanos terminados em OH com alcoxisilanos contendo estruturas de amônio quaternárias fornece produtos intermediários reativos, substituídos do tipo de pente, que devem reticular sozinhos ou com reagentes de reticulação adequados, tais como trialcoxisilanos, sobre a superfície da fibra para formar camadas resistentes à lavagem.

[00022] Nenhuma das soluções propostas fornece uma resposta para a pergunta, de como especialmente os compostos de polissiloxano poliquaternários descritos nas WO 02/10256, WO 02/10257, WO 02/10259 como plastificantes hidrofílicos permanentes para têxteis, podem ser significativamente mais aumentados em sua eficiência, especialmente na substantividade.

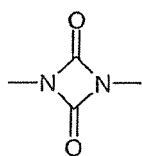
[00023] Assim, o objeto da invenção é descrever compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano hidrofílicos altamente eficientes, especialmente compostos de copolímeros de polissiloxano poliquaternários (quats de silicone), sua preparação e emprego como plastificantes hidrofílicos resistentes à lavagem para o primeiro acabamento têxtil, sendo que os quats de silicone emprestam aos tecidos após aplicação correspondente, um toque macio típico do silicone e uma acentuada hidrofília e este perfil de propriedades não desaparece também após a ação de formulações de detergentes durante repetidos processos de lavagem à temperatura eventualmente elevada. Um outro objeto da invenção é descrever o emprego destes quats de silicone como plastificantes separados após ou como plastificantes em formulações não ionogêneas ou à base de agentes tensoativos aniônicos/não ionogêneos para a lavagem de fibras e tecidos, como auxiliar na engomagem, agente para impedir ou anular enrugamentos de tecidos, bem como agente para o acabamento de papel.

[00024] A solução desta tarefa resulta também para os copolímeros de polissiloxano, que são empregados em formulações cosméticas para o cuidado da pele e cabelo e que desta maneira podem ser aperfeiçoados em sua substantividade. Igualmente a fixação de polímeros ativos em superfície das estruturas mencionadas acima sobre superfícies duras, é uma tarefa não satisfatoriamente resolvida, que desta maneira, sofre uma solução.

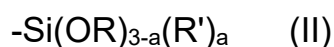
[00025] Surpreendentemente foi verificado, que a introdução de grupos reativos, estáveis em emulsões aquosas a 20°C em compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano, tais como por exemplo, copolímeros de polissiloxano poliquaternários, tais como são descritos, por exemplo, na WO 02/10256, WO 02/10257, WO 02/10259, DE 10036533, DE 100 36 522, EP-A-282720, US 6240929, DE 33 40 708 e nos pedidos de patentes alemães ainda não publicados DE 102 12 470.1, DE 102 51 525.5 e DE 102 51 526.3, leva de modo totalmente surpreendente no tratamento de fibras naturais ou sintéticas ou de substratos fibrosos (tal como, por exemplo, papel), a uma permanência nitidamente aumentada da hidrofília com toque macio inalterado das fibras.

[00026] A presente invenção põe portanto, à disposição:

composto de amino- e/ou amônio-polissiloxano e sais do mesmo, caracterizados pelo fato de apresentarem como grupos reativos pelo menos um grupo funcional, escolhido de grupos das fórmulas (I) e (II):



(I),



nas quais a é um número inteiro de 0 até 2 e R e R' podem ser iguais ou diferentes uns dos outros e em cada caso representam um radical orgânico.

[00027] Composto de amino- e/ou amônio-polissiloxano e sais do mesmo no sentido da invenção são compostos, que apresentam pelo menos um, de preferência, pelo menos dois, de modo ainda mais preferível mais do que quatro grupos amino e ou amônio e preferentemente pelo menos um, de modo mais preferível pelo menos dois, de modo mais preferível ainda pelo menos quatro blocos de poliorganossiloxano para cada molécula. De preferência, os compostos mencionados contêm pelo menos um, de preferência, pelo menos dois e de modo ainda mais preferível, pelo menos quatro grupos amônio quaternários para cada molécula. Os compostos consistem de preferência, em unidades repetidas, que contêm os grupos amino e/ou amônio mencionados e os blocos de poliorganossiloxano mencionados.

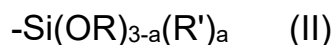
[00028] No caso dos grupos funcionais da fórmula (I) e (II) mencionados, trata-se de grupos reativos, que na ativação, isto é, ao agir a temperaturas convenientemente de pelo menos 40°C, de preferência, 60°C, de modo mais preferível, 80°C, de modo ainda mais preferível, pelo menos cerca de 100°C, reagem por exemplo, sob condensação, rearranjo molecular, reação de adição e/ou reação com um substrato, de preferência, com uma superfície da fibra ou sob reticulação ou reação com si mesmos.

[00029] No caso de compostos com os grupos da fórmula (II), a ativação dos grupos reativos pode ser causada em uma forma de execução preferida, com adição de ácidos ou bases, tal como é descrito abaixo.

[00030] Grupo reativo significa neste caso, portanto, grupos da fórmula (I) ou (II) nas moléculas de acordo com a invenção, que estão em condição eventualmente sob ativação, de formar ligações inter- ou intramoleculares, que aumentam o peso molecular, tal como por exemplo, uma reticulação, ou produzir ligações com o substrato.

[00031] Surpreendentemente, foi demonstrado que os grupos funcionais mencionados nos compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano de acordo com a invenção e seus sais são estáveis em emulsões aquosas a 20°C, de modo que eles são acentuadamente adequados para a aplicação dos compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano em emulsões aquosas. Assim, os grupos reativos aplicados de acordo com a invenção, mostram em água a 20°C um tempo de meia-vida convenientemente de pelo menos cerca de 20 dias, de preferência, pelo menos de cerca de 30 dias, mais preferentemente pelo menos de cerca de 40 dias. A presença ou a concentração dos grupos reativos nas emulsões aquosas, pode ser determinada com isso, de maneira conhecida, por exemplo, por métodos espectroscópicos infravermelhos ou de ressonância magnética nuclear. A reatividade dos grupos funcionais ou reativos pode ser aumentada pela presença de catalisadores. Catalisadores são ácidos ou bases. A aplicação dos catalisadores para a ativação é efetuada de preferência, na presença dos grupos reativos da fórmula (II) de forma conveniente imediatamente antes da aplicação, por exemplo, mediante adição dos catalisadores com uma mistura aquosa dos compostos de acordo com a invenção, que contém os substratos da fibra. Ácidos adequados incluem, por exemplo, ácidos inorgânicos, tal como, por exemplo, ácido clorídrico, ácido sulfúrico, ácido fosfórico e outros ou ácidos C1-C22-carboxílicos orgânicos. Bases adequadas incluem, por exemplo, bases inorgânicas, tais como hidróxidos de metal alcalino, hidróxidos de metal alcalino-terroso, amoníaco e bases orgânicas, tal como por exemplo, C1-C22 alquilamina.

[00032] No grupo funcional da fórmula (II)



a é um número inteiro de 0 até 2 e R e R' são iguais ou diferentes uns dos outros e representam em cada caso um radical

orgânico. "a" é 0, 1 ou 2, sendo que 0 é preferido. R' é preferentemente escolhido do grupo, que consiste em C<sub>1</sub> até C<sub>22</sub>-alquila, flúor-(C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>)-alquila e C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>-arila. De modo particularmente preferido, R' é metila. R é preferentemente escolhido do grupo, que consiste em C<sub>1</sub> até C<sub>22</sub>-alquila, C<sub>5</sub> até C<sub>10</sub>-cicloalquila, C<sub>7</sub> até C<sub>18</sub>-alquilarila, C<sub>7</sub> até C<sub>18</sub>-arilalquila e C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>-arila. De preferência, R é escolhido de grupos alquila secundários ou terciários ou de grupos estericamente exigentes, tal como bis(terc.-butil)fenila, ciclohexila. De modo particularmente preferido, R é igual à isopropila, sec.-butila, terc.-butila e sec.-amila.

[00033] O grupo da fórmula (I) é designado a seguir eventualmente como grupo uretodiona. O grupo da fórmula (II) é designado a seguir eventualmente como grupo alcóxissilila. De preferência, os compostos de acordo com a invenção contêm apenas grupos reativos da fórmula (I) ou apenas grupos reativos da fórmula (II). Mas de acordo com a invenção, também podem ser abrangidos compostos, que contêm tanto grupos reativos da fórmula (I), quanto também grupos reativos da fórmula (II). A escolha dos grupos preferidos é efetuada em função da aplicação. Preferentemente os compostos de acordo com a invenção, contêm o grupo reativo da fórmula (I). No caso dos compostos de acordo com a invenção, trata-se preferentemente daqueles compostos, que apresentam pelo menos três unidades, de preferência, pelo menos 4, de modo ainda mais preferido, pelo menos 6 unidades, selecionadas das unidades Q e V, nas quais Q é pelo menos um grupo amino e/ou amônio bi-, tri- e/ou tetravalente, que não está ligado através de um átomo de carbonil-carbono em V e V é pelo menos uma unidade orgânica, que está ligada com as unidades Q através do carbono, com a condição, de que pelo menos uma das unidades V contenha um radical poliorganossiloxano. De preferência, os compostos de acordo com a invenção contêm pelo menos dois, mais

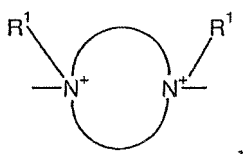
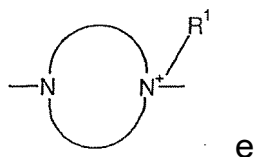
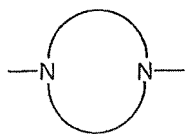
preferentemente pelo menos quatro, de modo ainda mais preferido, pelo menos seis unidades V, que contêm um radical poliorganossiloxano. Em uma outra forma de execução preferida, os compostos de acordo com a invenção contêm pelo menos duas, de preferência, pelo menos quatro, de modo ainda mais preferido, pelo menos seis unidades Q.

[00034] A unidade Q é escolhida do grupo, que consiste em:

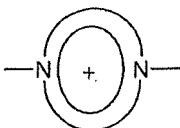
-NR<sup>1</sup>-,

-N<sup>+</sup>R<sup>1</sup><sub>2</sub>-,

um heterociclo com funcionalidade diamino, saturado ou insaturado, eventualmente substituído com outros substituintes das fórmulas:



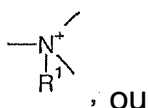
bem como um heterociclo com funcionalidade diamino, aromático, eventualmente substituído da fórmula:



um radical trivalente da fórmula:



um radical trivalente da fórmula:



, ou

um radical tetravalente da fórmula:



nas quais R<sup>1</sup> representa em cada caso hidrogênio ou um radical orgânico monovalente, o qual também permite também a presença de silício, quando há vários grupos R<sup>1</sup>, estes podem ser iguais ou diferentes uns dos outros. R<sup>1</sup> é preferentemente escolhido a partir de radicais R<sup>2</sup>.

[00035] As unidades Q não estão ligadas com os átomos de carbonil-carbono das unidades V. Preferentemente os compostos de acordo com a invenção, contêm como unidades Q, grupos amônio quaternários. Grupos amônio quaternários são átomos de nitrogênio carregados positivamente, que estão ligados com quatro átomos de carbono. A formação dos grupos amônio quaternários, que ainda são descritos mais detalhadamente abaixo, é efetuada convenientemente mediante alquilação com auxílio de epóxidos, compostos de halogenoalquila ou similares. A alquilação para a formação dos grupos amônio quaternários nos compostos de acordo com a invenção, é efetuada em geral, sob prolongamento de cadeia durante a formação de compostos oligômeros ou polímeros de acordo com a invenção, com o emprego de agentes de alquilação polifuncionais. No entanto, ela também pode ser efetuada após a formação da estrutura oligômera ou polímera dos compostos de acordo com a invenção, com introdução de agentes de alquilação monofuncionais. Os compostos de acordo com a invenção, apresentam preferentemente pelo menos dois, mais preferentemente pelo menos quatro, de modo ainda mais preferido, pelo menos seis grupos amônio quaternários.

[00036] Em uma forma de execução preferida da invenção, a



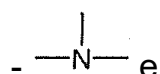
unidade V é escolhida a partir de pelo menos um radical hidrocarboneto polivalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 1000 átomos de carbono (sendo que os átomos de carbono do radical poliorganossiloxano eventualmente presente não são contados), que pode conter eventualmente um ou vários grupos, selecionados de

- -O- ,

- -C(O)-,

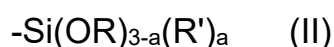
- -C(S)-,

- -NR<sup>2</sup>-, na qual R<sup>2</sup> representa hidrogênio, um radical hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 300 átomos de carbono, que pode conter um ou vários grupos escolhidos de -O-, -NH-, -C(O)- e -C(S) e que pode ser eventualmente substituído por um ou vários substituintes, escolhidos do grupo que consiste em um grupo hidroxila, de um grupo heterocíclico contendo preferentemente um ou vários átomos de nitrogênio, eventualmente substituído, radicais de poliéter, radicais de éster de poliéter, radicais poliorganossiloxanila e -Si(OR)<sub>3-a</sub>(R')<sub>a</sub>, em que a, R e R' são definidos tal como acima, sendo que quando há vários grupos -NR<sup>2</sup>-, que podem ser iguais ou diferentes e com a condição, de que o grupo -NR<sup>2</sup>- está ligado a um átomo de carbonil- e/ou tiocarbonil-carbono,



- radicais de poliorganossiloxano

e que pode ser eventualmente substituído por um ou vários grupos hidroxila e/ou grupos da fórmula (II)

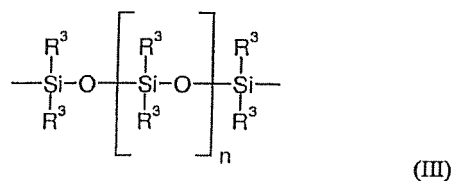


na qual a, R e R' são definidos tal como acima podem ser substituídos, e com a condição, de que pelo menos um radical V contenha pelo menos um radical poliorganossiloxano e no qual a

saturação terminal dos grupos Q e V polivalentes ligados uns com os outros é efetuada através de radicais orgânicos monovalentes. O grupo V contém especialmente as unidades das unidades U definidas abaixo.

[00037] A menção do grupo da fórmula (II) tanto como substituinte do grupo  $R^2$  quanto também do grupo V, significa que o grupo mencionado está ligado tanto como componente de um grupo terminal  $R^2$  através do nitrogênio amídico com a cadeia principal, quanto também pode estar ligado sobre um grupo alifático através de um átomo de carbono com a cadeia principal nos grupos V ou Q.

[00038] Nas unidades V mencionadas, o radical poliorganossiloxano mencionado é convenientemente um grupo bivalente da fórmula (III):



na qual  $R^3$  pode ser igual ou diferente e é escolhido do grupo, que consiste em  $C_1$  até  $C_{22}$  alquila, flúor( $C_3$ - $C_{10}$ )alquila,  $C_6$ - $C_{10}$ -arila e  $-W-Si(OR)_{3-a}(R')_a$ , em que R,  $R'$  e a são definidos tal como acima e W representa -O- ou um radical hidrocarboneto bivalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificado, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou vários grupos -C(O)-, -O-, -NH-, -S- e pode ser eventualmente substituído por grupos hidróxi e n representa 0 até 1000. Os compostos amino- e/ou amônio-polissiloxano de acordo com a invenção e sais dos mesmos, contêm convenientemente em média pelo menos uma, de preferência, pelo menos duas, de modo ainda mais preferível mais do que três das unidades V mencionadas, que contêm um radical poliorganossiloxano da fórmula (III).

[00039] De modo particularmente preferido, os compostos de

acordo com a invenção, que apresentam o grupo funcional da fórmula (II), mas nenhum grupo funcional da fórmula (I), contêm pelo menos três unidades V, que apresentam um radical poliorganossiloxano da fórmula (III). Esses compostos apresentam em consequência disto, pelo menos dois grupos Q, que se encontram entre as unidades V.

Caso os compostos de acordo com a invenção apresentem um grupo funcional da fórmula (I), então eles contêm pelo menos uma, de preferência, duas, de modo ainda mais preferido, pelo menos três unidades V, que apresentam um radical poliorganossiloxano da fórmula (III). "n" no radical poliorganossiloxano da fórmula (III) é preferentemente 20 até 200. Os radicais poliorganossiloxano nas unidades V podem ser iguais ou diferentes uns dos outros.

[00040] Os compostos de acordo com a invenção, contêm de preferência, pelo menos uma, de modo ainda mais preferido, pelo menos duas unidades da fórmula (IV)

-[Q-V]- (IV),

na qual Q e V são definidos tal como acima e a saturação terminal dos grupos Q e V é efetuada por um grupo orgânico monovalente.

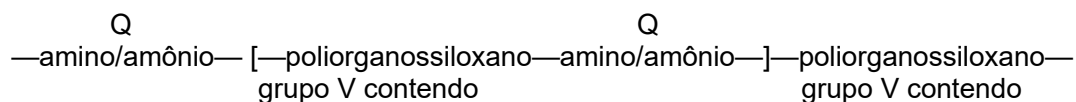
[00041] No caso dos compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano e sais dos mesmos de acordo com a invenção, pode tratar-se, por exemplo, de compostos de poliamino- e/ou poliamônio-polissiloxanos. Os compostos de poliamino- e/ou poliamônio-polissiloxanos são convenientemente compostos de copolímeros, que na cadeia principal do polímero apresentam unidades de repetição de amino e/ou amônio e unidades de repetição de polissiloxano. As unidades de amino contêm convenientemente átomos de nitrogênio secundários e/ou terciários (2 ou 3 radicais orgânicos no átomo de nitrogênio neutro). As unidades de amônio contêm átomos de nitrogênio secundários, terciários e/ou quaternários carregados

positivamente (2, 3 ou 4 radicais orgânicos no nitrogênio). Como unidades de repetição de amino e/ou amônio também podem servir radicais heterocíclicos ligados na cadeia do polímero através de dois átomos de nitrogênio.

[00042] No caso dos compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano e sais dos mesmos de acordo com a invenção, também pode tratar-se de compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano, que nos grupos laterais de um grupo poliorganossiloxano contêm grupos amino e/ou amônio que se ligam preferentemente a outros grupos poliorganossiloxano, isto é, que os grupos amino e/ou amônio não se encontram na cadeia principal de unidades de repetição de poliorganossiloxano.

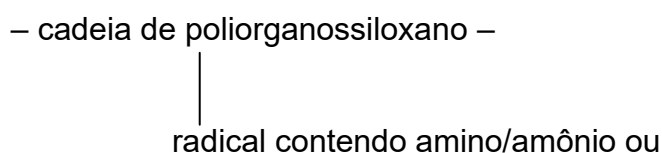
[00043] A diferença pode ser mostrada tal como segue:

composto de poliamino- e/ou poliamônio-polissiloxano com grupos V contendo siloxano  $\alpha,\omega$ -ligados:

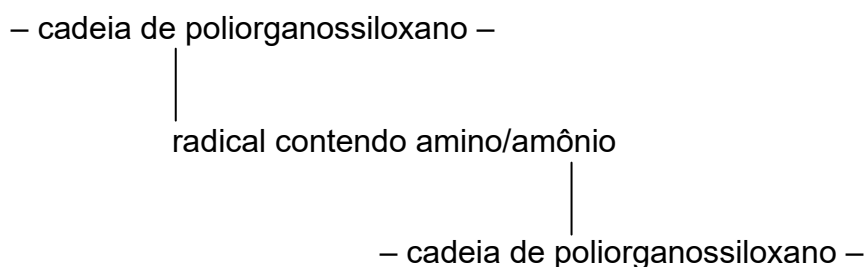


composto de amino- e/ou amônio-polissiloxano:

tipo (P1)



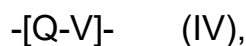
tipo (P2)



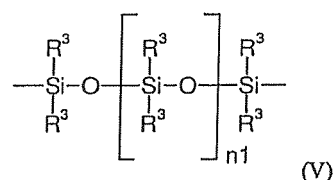
tipo (P3)

[00044] Nos compostos de poliamino- e/ou poliamônio-polissiloxano

de acordo com a invenção, que contêm preferentemente pelo menos duas unidades da fórmula (IV):

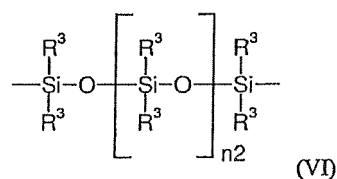


na qual Q e V são definidos tal como acima e a saturação terminal dos grupos Q e V é efetuada através de grupos orgânicos monovalentes, as unidades V são escolhidas por exemplo, do grupo, que consiste em  $V^1$ ,  $V^2$  e  $V^3$ .  $V^2$  é um grupo bivalente V, que é definido tal como acima e  $V^2$  contém pelo menos um radical polissiloxano em cadeia longa  $-Z^2-$  da fórmula (V)



na qual  $R^3$  é definido tal como acima e  $n_1$  representa 20 até 1000.

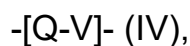
[00045]  $V^1$  é um grupo bivalente V, que é definido tal como acima, que não contém nenhum radical polissiloxano em cadeia longa  $-Z^2-$  da fórmula (V) e que pode conter eventualmente um radical polissiloxano em cadeia curta  $-Z^1-$  da fórmula (VI),



na qual  $R^3$  é definido tal como acima e  $n_2$  representa 0 até 19.

[00046]  $V^3$  é um grupo tri- ou polivalente V, que é definido tal como acima e  $V^3$  contém pelo menos uma unidade de organopolissiloxano tri- ou polivalente.

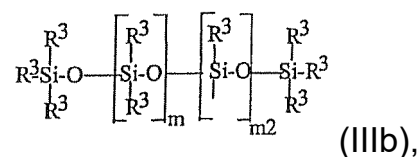
[00047] Os compostos de poliamino- e/ou poliamônio-polissiloxano de acordo com a invenção, que contêm pelo menos uma, preferentemente pelo menos duas unidades da fórmula (IV):



são convenientemente terminados através de grupos monofuncionais  $-Q-R^4$  e/ou  $-V-R^4$  como grupo terminal, no qual  $R^4$  representa um radical orgânico monovalente, de preferência, metila, hidrogênio ou hidroxila.

[00048] O grupo  $-V-R^4$  pode representar em uma forma de execução preferida, também um grupo siloxano, que não está ligado, com  $V^{2*}$  ou com o V restante através de um grupo  $R^3_2SiO$  (tipo P1), mas sim, está ligado com  $V^{2*}$  ou com V através de apenas uma unidade  $R^3SiO$ , isto é, um grupo lateral (tipo P2) e (P3)).

[00049] Este copolímero apresenta por conseguinte, de preferência, 2 unidades da fórmula (IIIb) como grupo terminal, que limitam as unidades de repetição V e Q, sendo que V e Q apresentam as composições mencionadas.



na qual  $R^3$ , m e  $m_2$  são definidos tal como acima.

[00050] Os poliamino- e/ou poliamônio-polissiloxanos de acordo com a invenção, que contêm pelo menos uma unidade da fórmula (IV), também devem incluir o caso, no qual há apenas uma unidade  $-[Q-V]-$ , de modo que também possam estar abrangidos os compostos das fórmulas  $R^4-V-[Q-V]-R^4$  ou  $R^4-[Q-V]-Q-R^4$ . Então, preferem-se copolímeros terminados em polidialquilsiloxano, nos quais uma unidade bivalente V entre duas unidades Q contém pelo menos uma unidade contendo uretodiona.

[00051] Exemplos de tais polímeros, mas sem unidades estruturais contendo uretodiona, encontram-se na WO 02/10256.

[00052] No caso desses compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano com 2 unidades da fórmula (IIIb), que se ligam aos radicais  $V^{2*}$  independentes, trata-se preferentemente de estruturas do tipo P1 e P2.

[00053] No caso do poliamino- e/ou poliamônio-polissiloxano de acordo com a invenção, que contêm pelo menos uma unidade da fórmula (IV), trata-se, por exemplo, de copolímeros de polissiloxano lineares da fórmula geral (IV'):

-[Q-V]- (IV'),

na qual Q é definido tal como acima, V representa pelo menos um grupo  $V^1$  e/ou pelo menos um grupo  $V^2$ , sendo que  $V^1$  e  $V^2$  são definidos tal como acima.

[00054] Nas fórmulas gerais (IV) ou (IV'), a razão molar dos grupos  $V^1$  e  $V^2$  nos compostos polissiloxano  $V^2/V^1$  pode assumir um valor em si desejável. De acordo com a invenção, inclui-se também o caso, no qual o composto polissiloxano das fórmulas (IV) ou (IV') só contém unidades  $V^2$ , o composto polissiloxano portanto, apresenta a fórmula -[Q- $V^2$ ]-. Também o caso, no qual o composto polissiloxano só contém unidades  $V^1$ , é abrangido de acordo com a invenção. Neste caso, as unidades  $V^1$  no entanto, têm que conter unidades de siloxano  $Z^1$ .

[00055] Em uma forma de execução preferida da invenção, o composto polissiloxano das fórmulas (IV) ou (IV') contém no entanto, tanto unidades  $V^2$  quanto também unidades  $V^1$ .

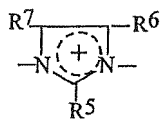
[00056] A razão molar dos grupos  $V^1$  e  $V^2$  nos compostos de polissiloxano das fórmulas gerais (IV) ou (IV') pode ser ajustada de acordo com a solução desta tarefa desejada, tal como maciez, hidrofília e substantividade, dos compostos de acordo com a invenção. Em uma forma de execução preferida da invenção, a razão dos grupos  $V^1$  para  $V^2$  é de aproximadamente 1 : 1, sendo que em uma forma de execução particularmente preferida,  $V^1$  não contém polissiloxano  $Z^1$  e simultaneamente estão presentes dois diferentes radicais  $V^1$ , por exemplo, hexametileno e poliéter terminado em bis-alquila, tal como é apresentado no exemplo 3. A formação de tais compostos de poliamino- ou politetraorgano-amônio lineares foi descrita, por

exemplo, na WO 02/10257, WO 02/10259, EP 282720 ou US 5.981.681. De modo particular, preferem-se as estruturas de poliamino- ou poliamônio-polissiloxano da WO 02/10259 e da WO 02/10257, às quais com isso, é feita referência expressa nos polímeros de polissiloxano definidos nas reivindicações 1 e que pertencem ao conteúdo de publicação do presente pedido. Em uma outra forma de execução dos compostos de poliamino- ou poliamônio-polissiloxano da fórmula (IV) ou (IV'),  $V^2/V^1$  é diferente de 1, de preferência,  $V^2/V^1 < 1$ , de modo mais preferido,  $< 0,9$ , de modo mais preferido ainda,  $V^2/V^1$  satisfaz a relação  $0,0005 < V^2/V^1 < 0,5$ .

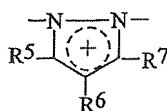
[00057] O grupo  $R^4$  é preferentemente escolhido dos grupos  $R^2$ .

[00058] Em uma forma de execução preferida da invenção, o radical bivalente Q nas fórmulas (IV) ou (IV') é escolhido do grupo, que consiste em:

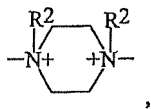
uma unidade imidazol quaternizada da estrutura



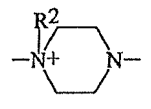
de uma unidade pirazol quaternizada da estrutura



de uma unidade de piperazina duplamente quaternizada da estrutura

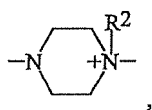


de uma unidade de piperazina monoquaternizada da estrutura

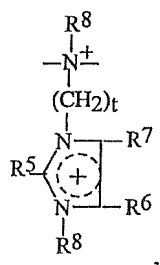


de uma unidade de piperazina monoquaternizada da estrutura

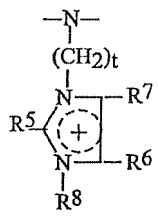




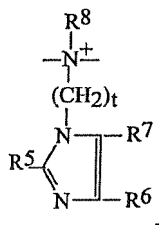
de uma unidade duplamente quaternizada da estrutura



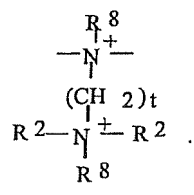
de uma unidade monoquaternizada da estrutura



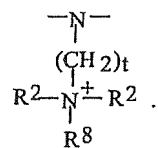
de uma unidade monoquaternizada da estrutura



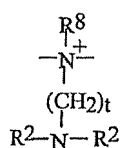
de uma unidade duplamente quaternizada da estrutura



de uma unidade monoquaternizada da estrutura



e de uma unidade monoquaternizada da estrutura



nas quais

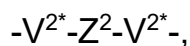
t é de 2 até 10,

$R^2$  é definido tal como acima e quando há vários radicais  $R^2$ , esses podem ser iguais ou diferentes e dois radicais  $R^2$  formam juntos com o átomo de nitrogênio um heterociclo com cinco até sete elos, que pode apresentar eventualmente adicionalmente um ou mais átomos de nitrogênio, oxigênio e/ou enxofre,

$R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  podem ser iguais ou diferentes e são escolhidos do grupo, que consiste em: hidrogênio, halogênio, grupo hidroxila, grupo nitro, grupo ciano, grupo tiol, grupo carboxila, grupo alquila, grupo monohidróxi-alquila, grupo polihidroxialquila, grupo tioalquila, grupo cianoalquila, grupo alcóxi, grupo acila, grupo acetilóxi, grupo cicloalquila, grupo arila, grupo alquilarila e grupos do tipo  $-NHR^w$ , nos quais  $R^w$  representa H, grupo alquila, grupo monohidroxialquila, grupo polihidroxialquila, grupo acetila, grupo ureído e em cada caso dois dos radicais  $R^5$ ,  $R^6$  e  $R^7$  vizinhos podem formar penta- até hepta-anéis aromáticos com os átomos de carbono que os ligam ao heterociclo e

$R^8$  apresenta o significado de  $R^2$ , sendo que  $R^8$  e  $R^2$  podem ser iguais ou diferentes.

[00059] Em uma forma de execução preferida dos compostos polissiloxano da fórmula (IV) ou (IV') como componente b1),  $V^2$  representa um grupo da fórmula



na qual  $Z^2$  é definido tal como acima e  $V^{2*}$  representa um radical hidrocarboneto bivalente em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 40 átomos de carbono, que pode conter eventualmente um ou mais grupos,

escolhidos de -O-, -CONH-, -CONR<sup>2</sup>, nos quais R<sup>2</sup> é definido tal como acima, -C(O)- e -C(S) e o radical V<sup>2\*</sup> pode ser eventualmente substituído por um ou mais grupos hidroxila.

[00060] Na forma de execução citada acima, o copolímero de polissiloxano linear de acordo com a invenção, pode apresentar as seguintes unidades de repetição:

-[V<sup>2\*</sup>-Z<sup>2</sup>-V<sup>2\*</sup>-Q]-, de preferência, junto com -[V<sup>1</sup>-Q]-.

[00061] A razão molar das unidades de repetição -[V<sup>2\*</sup>-Z<sup>2</sup>-V<sup>2\*</sup>-Q]- para -[V<sup>1</sup>-Q]-, isto é, a razão V<sup>2</sup>/V<sup>1</sup> pode, tal como foi citado acima, ser ajustado de forma adequada e por exemplo, perfazer 1, em uma das formas de execução no entanto, ela é preferentemente diferente de 1, mais preferentemente < 0,5. No último caso, os copolímeros de poliamino- ou poliamônio-polissiloxano lineares mencionados -[Q-V]- contêm obrigatoriamente blocos, que contêm ligados uns com os outros mais do que uma unidade -[V<sup>1</sup>-Q]-.

[00062] Tal como ainda é detalhadamente elucidado abaixo no contexto com o processo para a preparação dos copolímeros de polissiloxano lineares descritos acima, as seqüências em forma de bloco, que apresentam mais do que uma unidade -[V<sup>1</sup>-Q]- ligadas umas com as outras, podem ser ligadas conforme o modo de preparação, regularmente com as unidades V<sup>2</sup>-Q ou irregularmente com as unidades V<sup>2</sup>-Q.

[00063] Isto significa o seguinte:

[00064] No composto regular, no qual, por exemplo, um pré-polímero correspondente ao grupo -Q-[V<sup>1</sup>-Q]<sub>x</sub>- é reagido com unidades de monômeros correspondentes ao V<sup>2</sup> na razão molar de 1:1, os copolímeros de polissiloxano lineares podem ser preparados tal como segue:

-{V<sup>2</sup>-Q-[V<sup>1</sup>-Q]<sub>x</sub>}-.

x pode ser com isso, 2 até 2000 e é o valor médio da

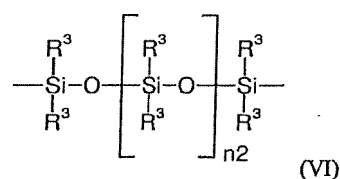
divisão. Os copolímeros de polissiloxano lineares representados pela fórmula  $-\{V^2-Q-[V^1-Q]_x\}-$ , são caracterizados pelo fato de que eles essencialmente não apresentam unidades  $-V^2-Q-$  ligadas umas com as outras ou em outras palavras, duas unidades  $-V^2-Q-$  estão sempre interrompidas por pelo menos uma unidade  $-V^1-Q-$ .

[00065] No composto irregular, no qual, por exemplo, monômeros correspondentes às unidades Q são reagidos com unidades de monômeros correspondentes ao  $V^1$  e unidades de monômeros correspondentes ao  $V^2$  na razão de  $Q/(V^1 + V^2)$  com, por exemplo,  $V^2/V^1 < 1$ , de preferência,  $< 0,5$ , de 1:1, os copolímeros de polissiloxano lineares podem ser representados tal como segue:

$-Q-(V^1, V^2)-$ ,

na qual V representa a razão  $V^2/V^1 < 1$ , ou  $< 0,5$ . Com isso, os grupos  $V^1$  e  $V^2$  são divididos estatisticamente sobre a cadeia do copolímero. Diferentemente do copolímero de polissiloxano linear preparado através do composto regular, este copolímero também pode apresentar unidades  $-Q-V^2$  vizinhas.

[00066] Em uma forma de execução preferida do composto polissiloxano da fórmula (IV) ou (IV') empregado de acordo com a invenção, o grupo  $V^1$  é escolhido a partir de radicais hidrocarboneto bivalentes, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturados, insaturados ou aromáticos com até 400 átomos de carbono, que podem conter eventualmente um ou mais grupos, escolhidos de  $-O-$ ,  $-CONH-$ ,  $-CONR^2$ , nos quais  $R^2$  é definido tal como acima,  $-C(O)-$ ,  $-C(S)-$  e  $-Z^1-$ , sendo que  $-Z^1-$  representa um grupo da fórmula



na qual

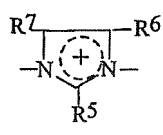
$R^3$  representa de preferência,  $C_1$ - $C_{18}$ -alquila, que pode ser

eventualmente substituída com um ou mais átomos de flúor ou é fenila e  $n_2$  é definido tal como acima.

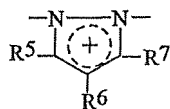
[00067] Em uma outra forma de execução preferida dos compostos polissiloxano da fórmula (IV) ou (IV'), o grupo Q é escolhido de:



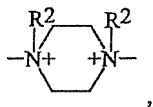
de uma unidade imidazol quaternizada da estrutura



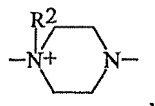
de uma unidade pirazol da estrutura



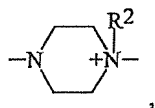
de uma unidade piperazina duplamente quaternizada da estrutura



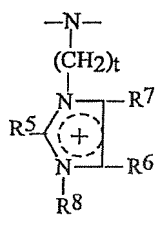
de uma unidade piperazina monoquaternizada da estrutura



de uma unidade piperazina monoquaternizada da estrutura



de uma unidade monoquaternizada da estrutura



nas quais  $R^2$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  e  $R^8$  são definidos tal como acima.

[00068] Em uma outra forma de execução preferida dos compostos polissiloxano lineares da fórmula (IV'), como da presente invenção, a razão  $V^2/V^1$  molar preenche a relação

$$0,0005 < V^2/V^1 < 0,5, (= 2 < V^1/V^2 < 2000),$$

de forma mais preferida, a relação

$$0,005 < V^2/V^1 < 0,4, (= 2,5 < V^1/V^2 < 200),$$

de forma ainda mais preferida, a relação

$$0,01 < V^2/V^1 < 0,3, (= 3,3 < V^1/V^2 < 100).$$

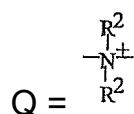
[00069] Preferentemente, nas fórmulas (IV) e (IV'):

$R^3$  é  $C_1$  até  $C_{18}$  alquila, especialmente metila, etila, trifluorpropila e fenila,

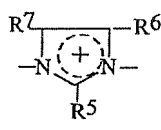
$n_1$  é 20 até 400, de modo particularmente preferido, 20 até 300, especialmente 20 até 200. Em uma outra forma de execução preferida,  $n_1$  está entre 20 e 50 ou entre 80 e 200. O número  $n_1$  é o grau de polimerização médio de  $M_a$  das unidades de diorganossilóxi no grupo  $Z^2$ .

$n_2$  é 0 até 15, de modo particularmente preferido, 0 até 10, especialmente 0 até 5, de modo mais especial, 0. O número  $n_2$  é o grau de polimerização médio de  $M_n$  das unidades de diorganossilóxi no grupo  $Z^1$ .

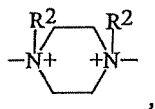
[00070]  $V^{2*}$  é um radical  $C_3$  até  $C_{16}$  hidrocarboneto bivalente em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou um radical  $C_8$  até  $C_{20}$  hidrocarboneto aromático, que pode conter eventualmente um ou mais grupos, escolhidos de -O-, -CONH-, -CONR<sup>2</sup>, -C(O)-, -C(S)- e que pode ser substituído por um ou mais grupos OH, em que  $R^2$  é definido tal como acima.



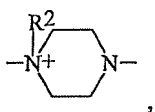
uma unidade imidazol quaternizada da estrutura



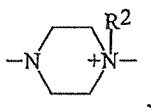
uma unidade piperazina duplamente quaternizada da estrutura



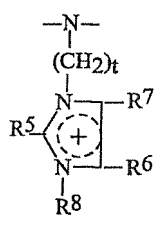
uma unidade piperazina monoquaternizada da estrutura



uma unidade piperazina monoquaternizada da estrutura



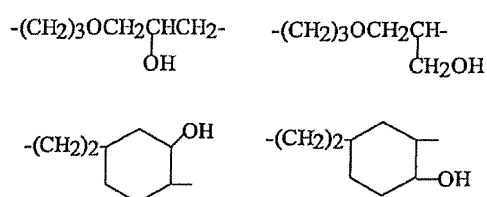
uma unidade monoquaternizada da estrutura

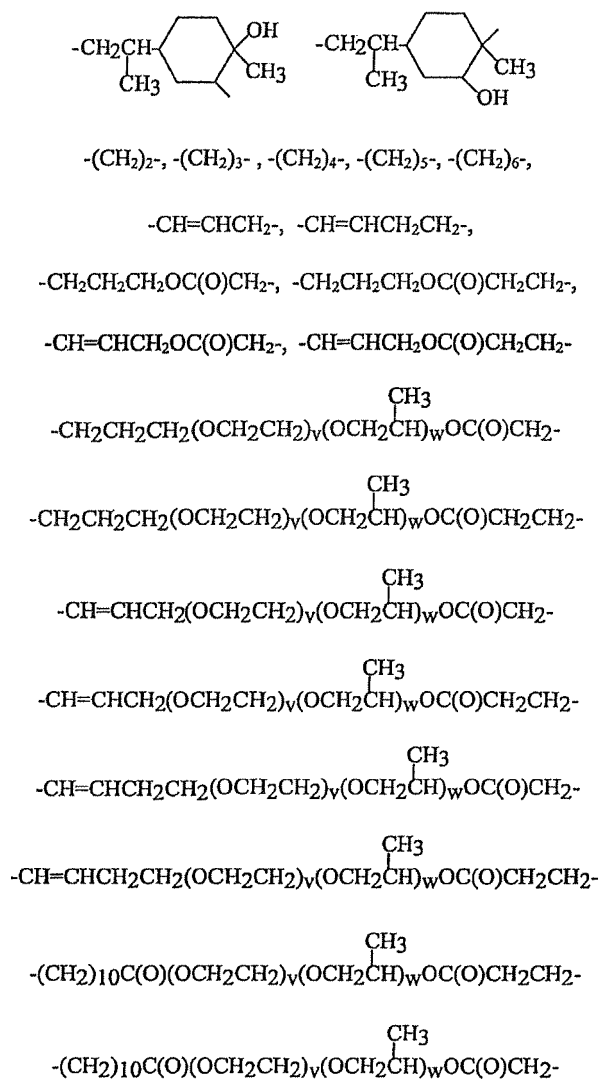


nas quais  $R^2$ ,  $R^4$ ,  $R^5$ ,  $R^6$ ,  $R^7$  e  $R^8$  são definidos tal como acima.

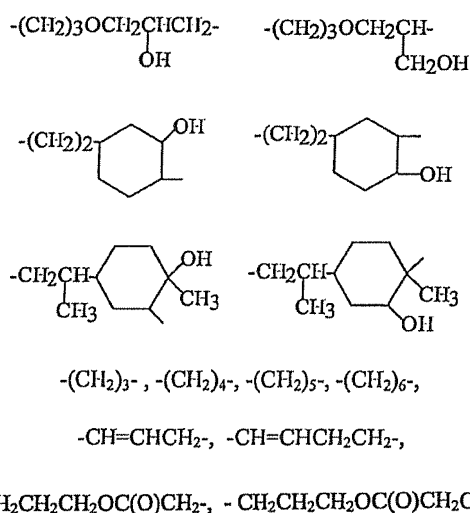
[00071] De modo particularmente preferido,

[00072]  $V^{2*}$  representa um radical hidrocarboneto bivalente em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 16 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos, escolhidos de -O-, -CONH-, -CONR<sup>2</sup>, nos quais  $R^2$  é definido tal como acima, -C(O)-, -C(S)- e pode ser substituído com um ou vários grupos hidroxila. De modo ainda mais preferido,  $-V^{2*}$  é escolhido de grupos das fórmulas:





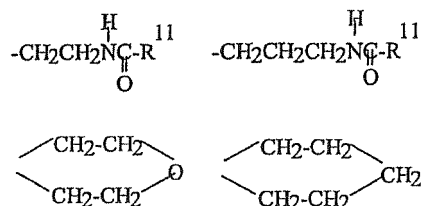
com  $v+w \geq 0$ ,



$R^2$  representa de preferência, H,  $-\text{CH}_3$ ,  $-\text{CH}_2\text{CH}_3$  -  $(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$ ,

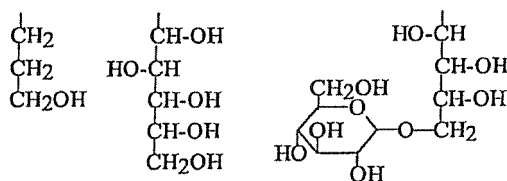


$-(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$ ,  $-(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$ ,  $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ,

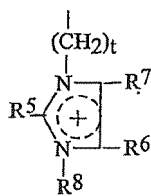


com

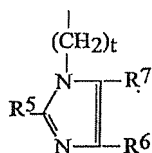
$\text{R}^{11}$  sendo um radical  $\text{C}_1$  até  $\text{C}_{18}$  hidrocarboneto em cadeia linear, cíclica ou ramificada, que pode conter um ou mais grupos, escolhidos de  $-\text{O}-$ ,  $-\text{NH}-$ ,  $-\text{C}(\text{O})-$  e  $-\text{C}(\text{S})-$  e que pode ser substituído por um ou vários grupos  $\text{OH}$ , radicais  $\text{C}_5$  até  $\text{C}_{17}$  hidrocarboneto especialmente insubstituídos, que derivam dos ácidos graxos correspondentes ou então, radicais  $\text{C}_3$  até  $\text{C}_{17}$  hidroxilados, que podem ser reconduzidos aos ácidos carboxílicos hidroxilados, especialmente aos ácidos sacarídeo-carboxílicos e de modo muito especial, representam



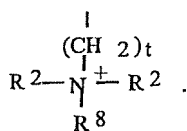
[00073] Além disso,  $\text{R}^2$  representa preferentemente:



, na qual  $t$ ,  $\text{R}^5$  até  $\text{R}^8$  são definidos tal como acima,



, na qual  $t$ ,  $\text{R}^5$  até  $\text{R}^7$  são definidos tal como acima,



, na qual  $t$ ,  $\text{R}^2$  e  $\text{R}^8$  são definidos tal como acima.

$\text{V}^1$  representa de preferência,

- $-R^9-$ , na qual  $R^9$  representa um radical hidrocarboneto bivalente, saturado ou insaturado uma ou mais vezes, em cadeia linear ou ramificada com dois até 25 átomos de carbono,
- $-(CH_2)_u C(O)O-[(CH_2CH_2O)_q-(CH_2CH(CH_3)O)_r]-C(O)(CH_2)_u-$
- $-(CH_2)_u C(O)O-R^9-O-C(O)(CH_2)_u-$ , na qual  $R^9$  é definido tal como acima,
- $-(CH_2)_u-R^{10}-(CH_2)_u-$ , na qual  $R^{10}$  é um grupo aromático,
- $-[CH_2CH_2O]_q-[CH_2CH(CH_3)O]_r-CH_2CH_2-$ ,
- $-CH(CH_3)CH_2O[CH_2CH_2O]_q-[CH_2CH(CH_3)O]_r-CH_2CH(CH_3)-$ ,
- $-CH_2CH(OH)CH_2-$ ,
- $-CH_2CH(OH)(CH_2)_2CH(OH)CH_2-$ ,
- $-CH_2CH(OH)CH_2OCH_2CH(OH)CH_2OCH_2CH(OH)CH_2-$  e
- $-CH_2CH(OH)CH_2O-[CH_2CH_2O]_q-[CH_2CH(CH_3)O]_r-CH_2CH(OH)CH_2-$ ,

em que

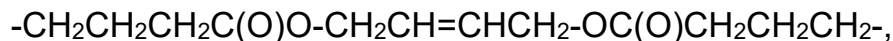
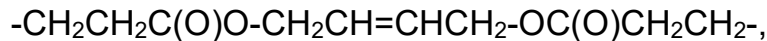
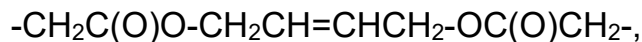
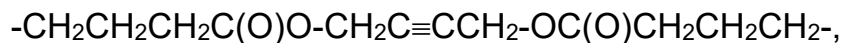
$u$  é de 1 até 3,

$q$  e  $r$  são de 0 até 200, de preferência, de 0 até 100, mais preferentemente de 0 até 70 e de modo particularmente preferido, 0 até 40 e

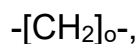
$q + r > 0$ .

[00074] Variantes preferidas de  $V^1$  são estruturas da fórmula:

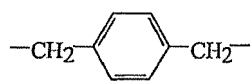
- $-CH_2C(O)O-[CH_2CH_2O]_q-[CH_2CH(CH_3)O]_r-C(O)CH_2-$ ,
  - $-CH_2CH_2C(O)O-[CH_2CH_2O]_q-[CH_2CH(CH_3)O]_r-C(O)CH_2CH_2-$ ,
  - $-CH_2CH_2CH_2C(O)O-[CH_2CH_2O]_q-[CH_2CH(CH_3)O]_r-C(O)CH_2CH_2CH_2-$ ,
- unidades de alquilenos, alquilenos, alquilenos esterificados, especialmente as estruturas
- $-CH_2C(O)O-[CH_2]_o-OC(O)CH_2-$ ,
  - $-CH_2CH_2C(O)O-[CH_2]_o-OC(O)CH_2CH_2-$ ,
  - $-CH_2CH_2CH_2C(O)O-[CH_2]_o-OC(O)CH_2CH_2CH_2-$ ,
  - $-CH_2C(O)O-CH_2C\equiv CCH_2-OC(O)CH_2-$ ,
  - $-CH_2CH_2C(O)O-CH_2C\equiv CCH_2-OC(O)CH_2CH_2-$ ,



unidades de alquilenos, alquênilenos, alquinilenos e arila, especialmente as estruturas:



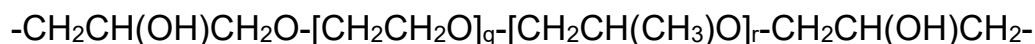
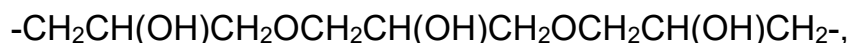
com  $o = 2$  até  $6$ ,



unidades de óxido de polialquilenos, especialmente das estruturas



com unidades mono-, di- ou polihidróxi funcionais, especialmente das estruturas

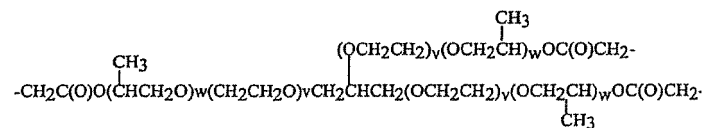


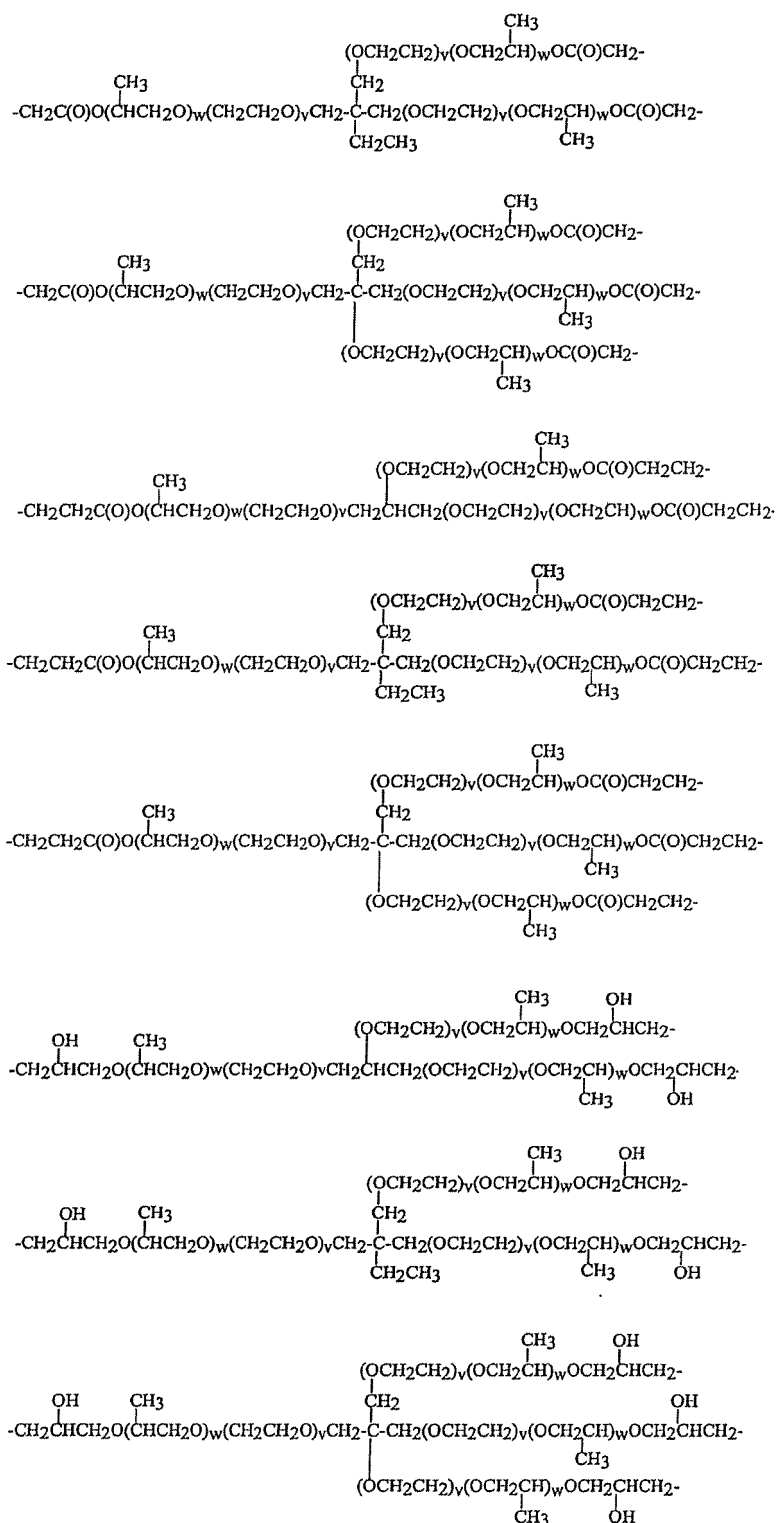
com  $q = 0$  até  $200$ ,

$r = 0$  até  $200$ .

[00075] De preferência,  $q$  é  $1$  até  $50$ , especialmente  $2$  até  $50$ , especialmente  $1$  até  $20$ , de modo muito especial,  $1$  até  $10$ , bem como  $1$  ou  $2$ ,  $r$  é  $0$  até  $100$ , especialmente  $0$  até  $50$ , especialmente  $0$  até  $20$ , de modo muito especial,  $0$  até  $10$ , bem como  $0$  ou  $1$  ou  $2$ .

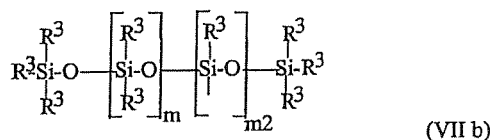
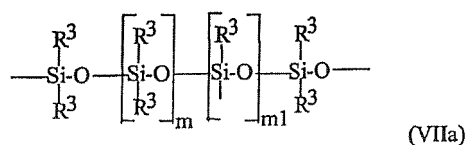
[00076] A unidade de reticulação  $V^3$  pode ser isenta de silicone. Exemplos dos mesmos incluem:



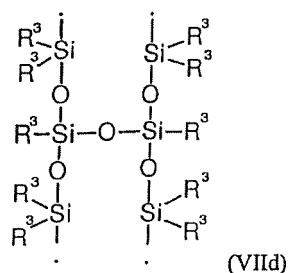
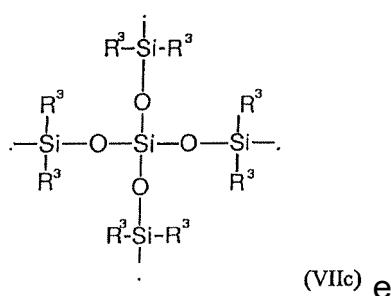


com  $v+w \geq 0$ .

[00077] A unidade de reticulação  $V^3$  pode conter uma unidade de organopolissiloxano tri- ou polivalente, tal como, por exemplo:

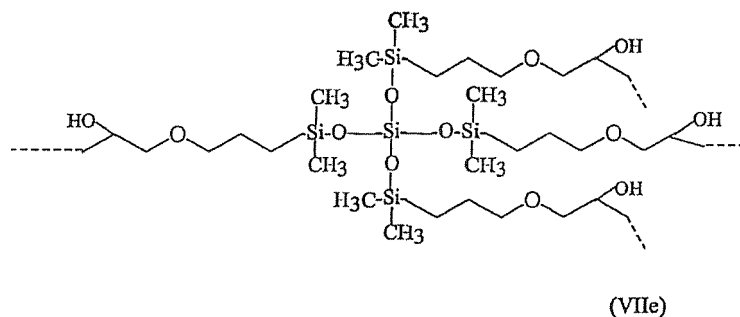


nas quais  $\text{R}^3$  é definido tal como acima,  $m$  é 0 até 1000 e  $m^1 \geq 1$  e  $m^2 \geq 3$ ,



nas quais  $\text{R}^3$  em cada caso é definido tal como acima.

[00078] Um exemplo de uma unidade de reticulação  $\text{V}^3$  contendo  $\text{Z}^3$  é, por exemplo:



[00079] Os compostos de amino- e/ou amônio polissiloxano de acordo com a invenção, podem ser convenientemente preparados através de um processo, no qual

a) pelo menos um composto amina, escolhido a partir de

um composto diamina e/ou de um composto monoamina primário e/ou secundário, é reagido com um composto orgânico multi-, de preferência, difuncional capacitado para a reação com as funções amino do composto amina, sendo que a razão molar das funções amino do composto amina mencionado para os grupos funcionais do composto orgânico multi-, de preferência, difuncional mencionado, importa de cerca de 0,5 até 2 ou

b) pelo menos dois moles de um composto amina (1), escolhido a partir de um composto diamina (1) e/ou de um composto monoamina primário e/ou secundário (1), são reagidos com um mol de um composto orgânico (1), multi-, de preferência, difuncional, capacitado para a reação com as funções amino do composto amina, com formação de um composto diamina (2) (monômero) e o composto diamina (2) (monômero) em seguida, é reagido com pelo menos um outro composto orgânico (2) multi-, de preferência, difuncional, capacitado para a reação com as funções amino do composto diamina (2), eventualmente na presença de outros compostos amina (2), em que a estequiometria das funções amino e dos grupos funcionais capacitados para a reação com funções amino no último estágio da reação importa em cerca de 1:1 e os compostos orgânicos (1) e (2) podem ser iguais ou diferentes uns dos outros ou

c) um composto amina, escolhido a partir de um composto diamina (1) e/ou de um composto monoamina primário e/ou secundário, é reagido com um composto orgânico (1) multi-, de preferência, difuncional, capacitado para a reação com as funções amino dos compostos amina com formação de um composto diamina (2) (oligômero terminado em amino), sendo que a razão molar das funções amino do composto amina mencionado para os grupos funcionais do composto orgânico (1) multi-, de preferência, difuncional citado, importa em cerca de 1 até 2, em seguida, o composto diamina

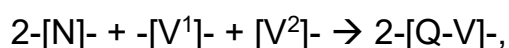
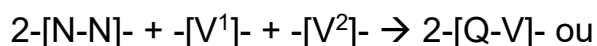
(2) obtido (oligômero terminado em amino) é reagido com pelo menos um composto orgânico (2) multi- de preferência, difuncional capacitado para a reação com as funções amino dos compostos diamina, sendo que a estequiometria das funções amino e dos grupos funcionais capacitados para a reação com as funções amino no último estágio da reação importa em cerca de 1:1 e os compostos orgânicos (1) e (2) podem ser iguais ou diferentes ou

d) um composto amina (1), escolhido a partir de um composto diamina e/ou de um composto monoamina primário ou secundário, é reagido com um composto orgânico (1) multi-, de preferência, difuncional, capacitado para a reação com as funções amino do composto amina, com formação de um composto orgânico (2) multi-, de preferência, difuncional, capacitado para a reação com funções amino (oligômero difuncional), em que a razão molar das funções amino do composto amina mencionado para os grupos funcionais do composto orgânico (1) multi-, de preferência, difuncional mencionado, importa em cerca de 0,5 até 1, em seguida, o composto orgânico (2) (oligômero difuncional) é reagido com pelo menos um composto amina (2), escolhido a partir de um composto diamina e/ou de um composto monoamina primário ou secundário, eventualmente na presença de um ou vários compostos orgânicos (3) multi-, de preferência, difuncionais capacitados para a reação com funções amino, sendo que a estequiometria das funções amino e dos grupos funcionais capacitados para a reação com funções amino no último estágio da reação importa em cerca de 1:1,

sendo que eventualmente monoaminas monofuncionais, de preferência, terciárias ou monoaminas adequadas, não capacitadas para a propagação de cadeias e/ou compostos monofuncionais, capacitados para a reação com funções amino podem ser acrescentados como agentes de ruptura de cadeia e onde funções

amino eventualmente presentes nos produtos obtidos podem ser depois protonadas ou quaternizadas.

[00080] Com relação aos compostos da fórmula (IV) com as unidades Q e V, as variantes dos processos mencionadas podem ser mostradas por exemplo, tal como segue:



sendo que

-[N-N]- é uma diamina, que também pode incluir uma diamina -[N-V<sup>1</sup>-N]- contendo V<sup>1</sup> ou uma diamina -[N-V<sup>2\*</sup>-Z<sup>2</sup>-V<sup>2\*</sup>-N]- contendo V<sup>2</sup> e -[V<sup>1</sup>]- e -[V<sup>2</sup>]- devem representar monômeros correspondentes às unidades de repetição V<sup>1</sup> e V<sup>2</sup>

e -[N]- representa uma monoamina primária ou secundária adequada para a propagação da cadeia.

[00081] A partir das unidades -[N-N]- e/ou -[N]- forma-se com isso, pelo menos uma unidade de amônio quaternário Q, em que a quaternização, dependendo do tipo do composto, pode ser efetuada entre unidades de -[N-N]- ou -[N]- e unidades -[V]- eventualmente também após a polimerização, em um estágio separado.

[00082] Exemplos preferidos de -[N-N]- tal como são descritos abaixo ainda mais detalhadamente, piperazina, imidazol, unidades de diamina -[N-V<sup>1</sup>-N]- preferidas incluem, por exemplo: polimetilenodiaminas, tal como, hexametilenodiamina, poliéteres terminados em  $\alpha,\omega$ -diamino, tal como, por exemplo, Jeffaminas e outras.

[00083] Unidades de diamina -[N-V<sup>2\*</sup>-Z<sup>2</sup>-V<sup>2\*</sup>-N]- preferidas incluem, por exemplo, produtos de reação de  $\alpha,\omega$ -dihidrogenopolidialquilsiloxano com alilaminas.

[00084] Exemplos preferidos de -[N]- tais como ainda são detalhadamente descritos abaixo, por exemplo, dimetilamina.



[00085] O emprego de diaminas  $-\text{[N-N]}-$  é em si preferido.

[00086] Monômeros  $-\text{[V}^1\text{]}-$  preferidos incluem, por exemplo, epíclorohidrina, bisepóxidos, cloretos de ácido biscoxílicos, diisocianatos ou bisacrilatos. De preferência, também podem ser reagidas misturas dos monômeros  $-\text{[V}^1\text{]}-$  mencionados, tais como, por exemplo, misturas de epíclorohidrina, éster bis-cloroalquílico ou bisepóxidos.

[00087] Monômeros  $-\text{[V}^2\text{]}-$  preferidos são monômeros da fórmula  $-\text{[V}^{2*}\text{-Z}^2\text{-V}^{2*}\text{]}-$ , em que  $\text{Z}^2$  é definido tal como acima e  $-\text{[V}^{2*}\text{]}-$  representa um grupo correspondente à unidade de repetição  $\text{V}^{2*}$  funcionalizado. Monômeros  $-\text{[V}^2\text{]}-$  preferidos para a formação das unidades de repetição  $\text{V}^2$  são especialmente polidialquilsiloxanos  $\alpha,\omega$ -diepóxi terminados.

[00088] Uma outra variante, que pode ser efetuada tanto com diaminas,  $-\text{[N-N]}-$ , quanto também com monoaminas  $-\text{[N]}-$  adequadas, é definida tal como segue:

estágio 1):  $-\text{[N-N]}- + -\text{[V}^2\text{]}- \text{ ou } -\text{[V}^1\text{]}- \rightarrow -\text{[N-N-V}^1\text{-N-N]}- \text{ ou } -\text{N-N-V}^2\text{-N-N]}-$

estágio 2.1):  $-\text{[N-N-V}^2\text{-N-N]}- + -\text{[V}^1\text{]}- + -\text{[N-N]}- \rightarrow \text{QV}^2\text{QV}^1\text{Q ou QVQV}^2\text{QVQV}^1\text{QVQ},$

estágio 2.2):  $-\text{[N-N-V}^1\text{-N-N]}- + -\text{[V}^2\text{]}- + -\text{[N-N]}- \rightarrow \text{QV}^1\text{QV}^2\text{Q ou QVQV}^1\text{QVQV}^2\text{QVQ}$

[00089] Com relação às unidades de monômeros  $-\text{[N-N]}-$ ,  $-\text{[V}^1\text{]}-$  e  $-\text{[V}^2\text{]}-$  preferentemente empregadas, vale o dito acima.

[00090] Uma outra variante é a seguinte:

estágio 1):  $2-\text{[N]}- + -\text{[V}^2\text{]}- \text{ ou } -\text{[V}^1\text{]}- \rightarrow -\text{[N-V}^1\text{-N]}- \text{ ou } -\text{[N-V}^2\text{-N]}-$

estágio 2.1):  $-\text{[N-V}^2\text{-N]}- + -\text{[V}^1\text{]}- + -\text{[N]}- \rightarrow \text{QV}^2\text{QV}^1,$

estágio 2.2):  $-\text{[N-V}^1\text{-N]}- + -\text{[V}^2\text{]}- + -\text{[N]}- \rightarrow \text{QV}^1\text{QV}^2\text{Q},$

sendo que esta variação tal como citado acima, só pode ser efetuada com monoaminas primárias ou secundárias e com relação às unidades de monômeros  $-\text{[N]}-$ ,  $-\text{[V}^1\text{]}-$  e  $-\text{[V}^2\text{]}-$  preferentemente

aplicadas, vale o dito acima.

[00091] Uma outra variante pode ser mostrada esquematicamente, por exemplo, tal como segue:

estágio 1):  $-[\text{N-N}]^- + -[\text{V}^1]^- \rightarrow -[\text{N-N}-(\text{V}^1\text{-N-N})_x]^-$

estágio 2):  $-[\text{N-N}-(\text{V}^1\text{-N-N})_x]^- + -[\text{V}^2]^- \rightarrow$

sendo que com relação às unidades de monômeros  $-\text{[N-N]}^-$ ,  $-\text{[V}^1\text{]}^-$  e  $-\text{[V}^2\text{]}^-$  preferentemente aplicadas, vale o dito acima.

[00092] Uma outra variante pode ser mostrada esquematicamente, por exemplo, tal como segue:

estágio 1):  $-\text{[N]}^- + -[\text{V}^1]^- \rightarrow -[\text{N}-(\text{V}^1\text{-N})_x]^-$

estágio 2):  $-\text{[N}-(\text{V}^1\text{-N})_x]^- + -[\text{V}^2]^- \rightarrow$

sendo que com relação às unidades de monômeros  $-\text{[N]}^-$ ,  $-\text{[V}^2\text{]}^-$  e  $-\text{[V}^3\text{]}^-$  preferentemente aplicadas, vale o dito acima.

[00093] Uma outra variante pode ser mostrada esquematicamente por exemplo, tal como segue:

estágio 1):  $x+1 -[\text{V}^1]^- + x -[\text{N-N}]^- \rightarrow -[\text{V}^1-(\text{N-N-V}^1)_x]^-$

estágio 2):  $-\text{[V}^1-(\text{N-N-V}^1)_x]^- + -[\text{V}^2]^- \rightarrow$

sendo que com relação às unidades de monômeros  $-\text{[N-N]}^-$ ,  $-\text{[V}^1\text{]}^-$  e  $-\text{[V}^2\text{]}^-$  preferentemente aplicadas, vale o dito acima.

[00094] Uma outra variante pode ser mostrada esquematicamente, por exemplo, tal como segue:

estágio 1):  $x+1 -[\text{V}^1]^- + x -[\text{N}]^- \rightarrow -[\text{V}^1-(\text{N-V}^1)_x]^-$

estágio 2):  $-\text{[V}^1-(\text{N-V}^1)_x]^- + -[\text{V}^2]^- \rightarrow$

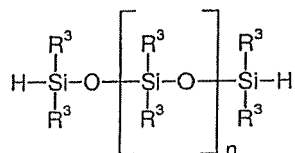
sendo que com relação às unidades de monômeros  $-\text{[N]}^-$ ,  $-\text{[V}^1\text{]}^-$  e  $-\text{[V}^2\text{]}^-$  preferentemente aplicadas, vale o dito acima.

[00095] Para todas as variantes mostradas esquematicamente acima, vale que também podem ser aplicadas misturas de monoaminas  $-\text{[N]}^-$  e diaminas  $-\text{[N-N]}^-$ .

[00096] De modo particularmente preferido, os grupos funcionais dos compostos difuncionais, capacitados para a reação com funções

amino, são escolhidos do grupo que consiste em grupos epóxi e grupos halogenoalquila.

[00097] Como ponto de partida para as sínteses dos copolímeros de polissiloxano lineares de acordo com a invenção, preferem-se siloxanos  $\alpha,\omega$ Si-H funcionalizados da estrutura geral



na qual  $\text{R}^3$  tem o significado indicado acima e  $n$  dependendo da unidade de repetição  $\text{V}^1$  ou  $\text{V}^2$  desejável, é  $n_2$  ou  $n_1$ , que são definidos tal como acima. Desde que não sejam obteníveis comercialmente, estes siloxanos podem ser preparados segundo processos conhecidos, por exemplo, através de equilíbrio (Silicones, Chemie und Technologie, Vulkan-Verlag, Essen 1989, página 82-84).

[00098] A introdução preliminar dos elementos estruturais  $\text{V}^{2*}$  e Q pode ser efetuada, por exemplo, por dois processos.

[00099] Por um lado, é possível ligar inicialmente as estruturas insaturadas portando funções amino terciárias, por exemplo, N,N-dimetilalilamina, através de hidrossililação diretamente com o siloxano na posição  $\alpha,\omega$ . Este processo é geralmente conhecido (B. Marciniec, Comprehensive Handbook on Hydrosilylation, Pergamon Press, Oxford 1992, página 122-124).

[000100] Por outro lado, prefere-se produzir produtos intermediários  $\alpha,\omega$ -funcionalizados inicialmente através de hidrossililação, os quais a seguir, podem ser transformados em estruturas amino  $\alpha,\omega$ -diterciárias ou diretamente nas estruturas de amônio quaternárias de acordo com a invenção. Substâncias de partida adequadas para a produção de estágios intermediários reativos são, por exemplo, alquenos ou alquinas halogenados, especialmente cloreto de alila, brometo de alila, cloropropina e clorobutina, ésteres de ácido halogenocarboxílico

insaturados, especialmente éster alílico de ácido cloroacético, éster propargílico de ácido cloroacético, éster alílico de ácido 3-cloropropiônico e éster propargílico de ácido 3-cloropropiônico e alquenos epóxi funcionais, por exemplo, óxido de vinilciclohexeno e éter alilglicídico.

[000101] A execução geral de hidrosilações com representantes dos grupos de substâncias mencionados é igualmente conhecida (B. Marciniec, *Comprehensive Handbook on Hydrosilylation*, Pergamon Press, Oxford 1992, página 116-121, 127-130, 134-137, 151-155).

[000102] Em um próximo estágio os estágios intermediários reativos podem ser levados à reação a seguir, com compostos portando funções amino secundárias. Representantes adequados são N,N-dialquilaminas, por exemplo, dimetilamina, dietilamina, dibutilamina, dietanolamina e N-metilglucamina, aminas secundárias cíclicas, por exemplo, morfolina e piperidina, aminoamidas portando funções amino secundárias, por exemplo, os produtos de reação de dietilenotriamina ou dipropilenotriamina com lactonas, tais como,  $\gamma$ -butirolactona,  $\delta$ -lactona de ácido glucônico e lactona de ácido glucopiranossilarabônico (DE-OS 4318536, exemplos 11a, 12a, 13a) ou diaminas secundárias-terciárias, tal como, por exemplo, N-metilpiperazina. É especialmente preferível, utilizar derivados de imidazol ou pirazol correspondentes, especialmente imidazol e pirazol para a introdução das funções amino terciárias.

[000103] Como participantes dos derivados epóxido preferentemente aplicados em uma forma de execução, prestam-se particularmente as diaminas secundárias-terciárias mencionadas, bem como também imidazol e pirazol. Desta maneira, as alquilações podem ser dirigidas de forma regiosseletiva e sem gasto adicional de átomos de nitrogênio portadores de átomos de hidrogênio.

[000104] Para assegurar uma transformação quantitativa dos

grupamentos reativos em estruturas amino terciárias, as amins são empregadas em uma proporção de  $1 \leq \Sigma$  grupos amino secundários : grupos reativos  $\leq 10$ , de preferência, 1 até 3, especialmente 1 até 2, de modo muito especial, 1. Excessos de amina têm que ser eventualmente removidos.

[000105] A ligação dos aminossiloxanos  $\alpha,\omega$ -diterciários descritos acima com as unidades de monômeros  $-[V^1]-$  correspondentes a  $V^1$  ou uma unidade de pré-polímero  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  leva à formação de unidades de amônio quaternárias e pode ser novamente efetuada por dois processos vantajosos.

[000106] Por um lado, prefere-se produzir separadamente um pré-condensado difuncional, poli-quaternário, hidrofílico  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$ , que em um momento apropriado é unido com o aminossiloxano  $\alpha,\omega$ -diterciário e reage para formar o copolímero de siloxano poli-quaternário.

[000107] A preparação de pré-polímeros difuncionais, altamente carregados com diferentes comprimentos de cadeia  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  é descrita, por exemplo, na WO 99/14300 (exemplos 1 até 7, tabela 11). Com base na razão molar de  $V^1$  e da amina que serve de base a Q, pode ser produzido um pré-polímero terminado por grupos amino conforme a natureza ou terminado por outros grupos reativos.

[000108] No caso da ligação de um pré-polímero terminado por grupos amino  $-[N-(V^1-N)_x]-$  com a função amina de uma estrutura aminossiloxano  $\alpha,\omega$ -diterciária, pode utilizar-se por exemplo, um monômero difuncional, quaternizado  $-[V^1]-$  correspondente à unidade de repetição  $V^1$ , escolhido por exemplo, de bisepóxidos, epiclorohidrina, compostos de bishalogenoalquila. Com isso, não precisa ser mencionado que podem resultar diferentes grupos  $V^1$  no pré-polímero e no elo de ligação entre o pré-polímero e a estrutura do aminossiloxano  $\alpha,\omega$ -diterciária.

[000109] No caso de um pré-polímero terminado com grupos reativos com relação aos grupos amino, tal como  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$ , pode ser efetuada uma ligação direta à função amina da estrutura do aminossiloxano  $\alpha,\omega$ -diterciária sem outro ligador, isto é, unidades de transição ou intermediárias ligadoras, pois na síntese do pré-polímero já foi aplicado um excesso do componente produtor de  $V^1$ .

[000110] Alternativamente à preparação separada de um pré-polímero  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$ , a formação de blocos altamente carregados pode ser efetuada paralelamente à incorporação no copolímero. Isto significa, que o aminossiloxano  $\alpha,\omega$ -diterciário é previamente introduzido junto com os componentes de partida para formar o  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$ , isto é, por exemplo,  $-[V^1]-$  e mono- ou diaminas do significado acima citado de  $-[N]-$  e/ou  $-[N-N]-$  e levados à reação.

[000111] Finalmente, é possível dosar passo a passo o aminossiloxano  $\alpha,\omega$ -diterciário com unidade de siloxano em cadeia longa  $Z^2$  ou com unidade de siloxano em cadeia curta  $Z^1$  ou o siloxano  $\alpha,\omega$ -difuncional  $-[V^{2*}-Z^2-V^{2*}]-$  ou  $-[V^1]-$  nos componentes previamente introduzidos para formar  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  durante um espaço de tempo ou então inversamente, acrescentar esses componentes passo a passo ao aminossiloxano  $\alpha,\omega$ -diterciário ou ao siloxano  $\alpha,\omega$ -difuncional.

[000112] Uma preparação padrão de pré-polímeros terminados por grupos amino, tal como, por exemplo,  $-[N-(V^1-N)_x]-$  abre a possibilidade, de efetuar a formação de copolímeros diretamente com estágios intermediários reativos adequados, por exemplo, derivados de epóxi.

[000113] Igualmente é preferível, introduzir previamente juntos os estágios intermediários reativos e os componentes de partida para a formação de  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  e em seguida, levá-los à reação.

[000114] Finalmente, é possível, dosar passo a passo os estágios intermediários reativos aos componentes previamente introduzidos

para a formação de  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  durante um espaço de tempo ou então inversamente, acrescentar esses componentes passo a passo aos estágios intermediários reativos.

[000115] Independente da escolha de um dos processos de reação descritos acima e da pergunta estreitamente ligada com isso, se as unidades de amino terminam inicialmente o siloxano ou então o pré-polímero, a estequiometria total é selecionada de modo tal, que a soma das funções amino e dos grupos capazes de reagir com as mesmas importa em cerca de 1:1.

[000116] No âmbito da invenção é possível, desviar dessa estequiometria total preferida. No entanto, depois são obtidos produtos, que não apresentam mais o máximo comprimento possível do bloco hidrofílico altamente carregado  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  em função dos participantes da reação, mas sim, deixam adicionalmente um excesso de um componente de partida não reagido.

[000117] Além da estequiometria total da reação tratada acima, a escolha do(s) componente(s) formadores da unidades de repetição  $V^1$  é muito significativa para o perfil de propriedades dos produtos.

[000118] A introdução de unidades de alquilenos, alquênulos, alquínulos e arila é efetuada preferentemente partindo dos halogenetos correspondentes, especialmente cloretos e brometos. Representantes exemplares são 1,6-diclorohexano, 1,4-diclorobut(2)-eno, 1,4-diclorobut(2)-ino e 1,4-bis(clorometil)benzeno.

[000119] As unidades de óxido de polialquilenos podem ser igualmente introduzidas através dos compostos  $\alpha,\omega$ -dihalogênicos. Estes são acessíveis a partir dos óxidos de alquilenos oligômeros e polímeros da composição geral



na qual q e r apresentam os significados indicados acima, por exemplo, mediante cloração dos grupos hidroxila com  $SOCl_3$

(Organikum, Organisch-chemisches Grundpraktikum, 17<sup>a</sup> edição, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1988, página 189-190).

[000120] Unidades mono-, di- ou polihidróxi funcionais podem ser introduzidas como grupo  $V^1$  partindo de derivados de epóxido.

[000121] Exemplos comerciais são 1-cloro-2,3-epoxipropano, o éter glicerol-1,3-bis-glicidílico e éter dietilenoglicoldiglicidílico e éter neopentilglicol-diglicidílico. Desde que não sejam disponíveis comercialmente, os diepóxidos desejados podem ser sintetizados, por exemplo, através da reação dos dióis correspondentes com 1-cloro-2,3-epoxipropano com condições alcalinas.

[000122] Está no âmbito da invenção, a introdução de cadeias de siloxano  $Z^1$  na estrutura de  $V^1$ . Disto resulta entre outros, a possibilidade de empregar diversas cadeias de siloxano longas para a formação da molécula total. Uma variante preferida é incorporar em  $V^1$  cadeias de siloxano  $Z^1$  com um limite de comprimento da cadeia  $n_2 = 0$  até 19, de preferência, 0 até 15, de modo particularmente preferido, 0 até 10, especialmente 0 até 5, de modo mais especial, 0. Materiais de partida adequados para a incorporação são por exemplo, os  $\alpha,\omega$ -diepóxidos correspondentes.

[000123] Na reação de epóxidos com aminas primárias ou secundárias deve-se observar, que para alquilações de grupos amino terciárias deve ser acrescentado um mol de  $H^+$  por mol de epóxido/amina terciária.

[000124] A escolha das aminas adequadas como componentes de partida para a formação de Q na unidade de repetição  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  determina igualmente em grande volume, a estrutura molecular. O emprego de aminas diterciárias, por exemplo, N,N,N',N'-tetrametiletilenodiamina, N,N,N',N'-tetrametiltetrametilenodiamina, N,N,N',N'-tetrametilhexametilenodiamina, N,N'-dimetilpiperazina, leva a produtos, nos quais cada átomo de nitrogênio da unidade de repetição é quaternizado.



[000125] O emprego de diaminas secundárias-terciárias, por exemplo, N-metil-piperazina, abre o caminho para unidades de repetição  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$ , nas quais há estruturas de amina ou amônio terciárias e quaternárias na razão de 1 : 1. Uma quaternização posterior parcial ou total das estruturas amina terciárias remanescentes representa uma variante preferida para ajustar uma alta densidade desejável dos grupos amônio quaternários. As aminas aromáticas correspondentes imidazol ou pirazol levam a produtos com uma carga de localizada.

[000126] Ao aplicar diaminas primárias-terciárias, por exemplo, N,N-dimetilpropilenodiamina e 1-(3-aminopropil)imidazol, especialmente em combinação com diepóxidos, podem formar-se estruturas em forma de pente, para as quais é selecionável o grau de quaternização durante a alquilação definitiva. Fundamentalmente, podem ser ajustados graus de quaternização em média, de menos do que um grupo amônio quaternário por unidade de repetição  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$ . No entanto, é preferível, quaternizar pelo menos um átomo de nitrogênio por unidade de repetição.

[000127] Partindo de aminas dissecundárias, por exemplo, de piperazina, N,N'-bis(2-hidroxietil)-hexametilenodiamina, N,N'-bis(2-hidroxipropil)-hexametilenodiamina, fundamentalmente também as unidades de repetição  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$  podem ser sintetizadas com uma taxa média menor do que um grupo amônio quaternário. As aminas dissecundárias fornecem neste caso, inicialmente copolímeros de siloxano modificados com amino politerciário ou então, pré-polímeros, que em uma reação definitiva podem ser parcial ou totalmente quaternizados para formar  $-[V^1-(Q-V^1)_x]-$ . Mas também nesta variante prefere-se quaternizar pelo menos um átomo de nitrogênio por unidade de repetição.

[000128] Como reagentes de quaternização adequados, podem ser

tomados em consideração os grupos de substâncias geralmente conhecidos tais como halogenetos de alquila, éster de ácido halogenocarboxílico, derivados de epóxido na presença de  $H^+$  de sulfatos de dialquila, especialmente sulfato de dimetila.

[000129] A preparação de aminas dissecundárias comercialmente disponíveis é efetuada em uma forma de execução preferida partindo de aminas diprimárias correspondentes, por exemplo, hexametilenodiamina mediante alquilação com epóxidos, tais como, por exemplo, óxido de etileno, óxido de propileno, éter isopropilglicidílico com utilização de diversas velocidades de reação das aminas primárias e secundárias.

[000130] Já foi demonstrado, que no âmbito da invenção há a possibilidade, de introduzir cadeias de siloxano  $Z^1$  na estrutura de  $V^1$ . Como materiais de partida adequados mencionaram-se, por exemplo, os estágios intermediários reativos de  $\alpha,\omega$ -diepóxidos.

[000131] Como ânions  $\Lambda^-$  que neutralizam das cargas positivas resultantes dos grupos amônio podem ser tomados em consideração de preferência, os íons formados durante a quaternização, tais como íons de halogeneto, especialmente cloreto e brometo, sulfatos de alquila, especialmente metossulfato, carboxilatos, especialmente acetato, propionato, octanoato, decanoato, dodecanoato, tetradecanoato, hexadecanoato, octadecanoato, oleato, sulfonas, especialmente toluenossulfonato. No entanto, através da troca de íons, também podem ser introduzidos outros ânions. São citados, por exemplo, ânions orgânicos, tais como carboxilatos de poliéter e sulfatos de poliéter.

[000132] A introdução do grupo funcional da fórmula (I), que é elucidado pormenorizadamente abaixo, abrange, por exemplo:

a) a reação de diisocianatos, contendo o grupo funcional da fórmula (I), com pelo menos um mol de uma diamina (1) com formação

de uma diamina monômera, oligômera ou polímera (2), que contém o grupo funcional da fórmula (I),

b) a reação de um mol de um diisocianato, contendo o grupo funcional da fórmula (I), com pelo menos um mol de um composto orgânico multi- de preferência, difuncional, capacitado para a reação com os grupos isocianato e grupos amino (1), com formação de um composto orgânico monômero, oligômero ou polímero, multi- de preferência, difuncional, capacitado para a reação com grupos amino (2), contendo o grupo da fórmula (I),

c) a reação de um mol de um diisocianato, contendo o grupo funcional da fórmula (I), com pelo menos um mol de um composto orgânico multi- de preferência, difuncional, capacitado para a reação com os grupos isocianato (1), com formação de um composto multi-, de preferência, difuncional, orgânico, monômero, oligômero ou polímero (2), contendo grupo funcional da fórmula (I) e grupos terminais capacitados para a reação com grupos isocianato, transformação do composto orgânico (2) mencionado em um composto orgânico monômero, oligômero ou polímero multi- de preferência, difuncional, capacitado para a reação com grupos amino (3)

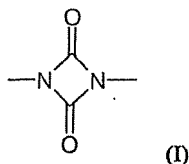
e aplicação dos compostos obtidos, contendo o grupo da fórmula (I) nos processos a) até d) do processo descrito acima.

[000133] A introdução dos grupos funcionais da fórmula (II), que é elucidada detalhadamente abaixo, abrange, por exemplo, a reação de um composto amina, escolhido de um composto diamina e/o de um composto monoamina primário, secundário ou terciário contendo a unidade da fórmula (II) e/ou a reação de um composto orgânico multi-, de preferência, difuncional, contendo a unidade da fórmula (II).

[000134] No processo para a preparação dos compostos de acordo com a invenção, os grupos funcionais dos compostos multi-, de preferência, difuncionais, capacitados para a reação com funções

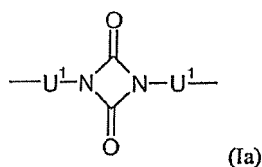
amino, são preferentemente escolhidos do grupo, que consiste em grupos epóxi e grupos halogenoalquila.

[000135] Os compostos de acordo com a invenção, que contêm um grupo funcional da fórmula (I)



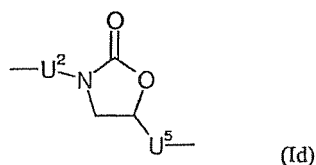
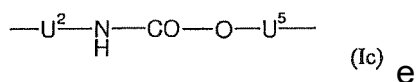
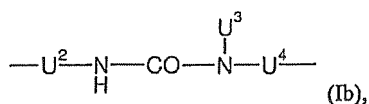
apresentam o grupo mencionado da fórmula (I) convenientemente em um grupo V.

[000136] Os compostos de acordo com a invenção, que apresentam o grupo funcional da fórmula (I), contêm preferentemente a unidade da fórmula (Ia)



na qual

[000137] U<sup>1</sup> é escolhido do grupo, que consiste em radicais bivalentes das fórmulas:



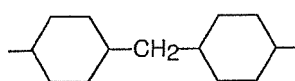
nas quais

[000138] U<sup>2</sup> está ligado com o átomo de nitrogênio do grupo funcional da fórmula (I) e

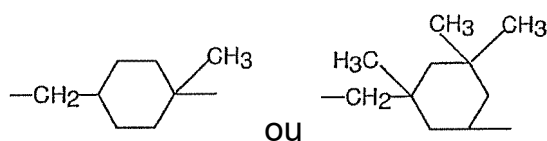
[000139] U<sup>2</sup> representa um radical hidrocarboneto bivalente, em

cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100, de preferência, até 30 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O-,

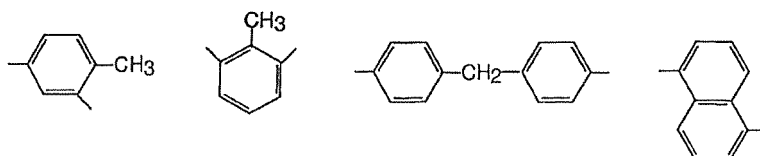
[000140]  $U^2$  é preferentemente um radical hidrocarboneto bivalente em cadeia linear com até 15 átomos de carbono, por exemplo, hexametileno, radicais hidrocarboneto cíclicos bivalentes com até 15 átomos de carbono, por exemplo, à base de estruturas de bis-ciclohexil-metano



radicais hidrocarbonetos ramificados, bivalentes com até 15 átomos de carbono, por exemplo, à base de estruturas de metilciclohexila ou isoforona



radicais hidrocarbonetos aromáticos, bivalentes com até 15 átomos de carbono, por exemplo, à base de estruturas de 2,4-toluíla, 2,6-toluíla, bis-fenil-metano e naftileno.



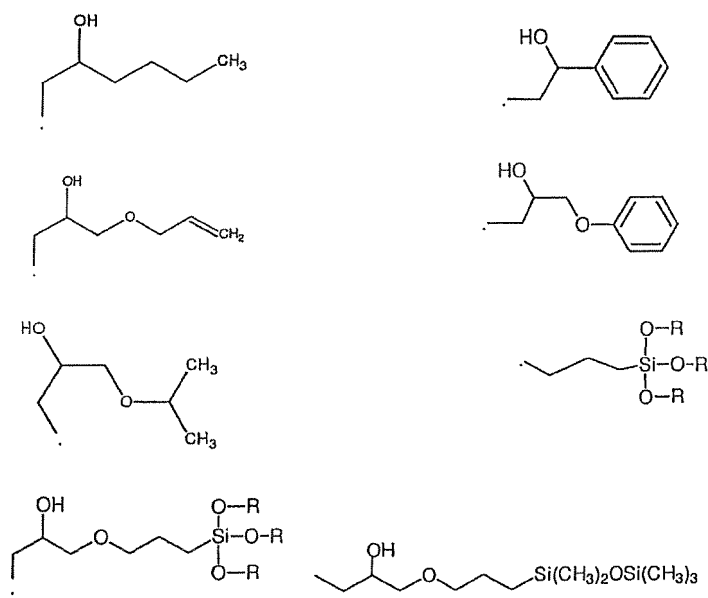
[000141]  $U^3$  pode representar hidrogênio ou um radical hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100, de preferência, até 30 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O- e que pode ser substituído por OH,

[000142]  $U^4$  e  $U^5$  representam radicais hidrocarboneto bivalentes em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturados, insaturados ou aromáticos, com até 1000, de preferência, até 200, de modo mais

preferido ainda até 100 átomos de carbono, que podem conter eventualmente um ou mais grupos, escolhidos a partir de -O-, -C(O)-,  $\text{—}\overset{\text{I}}{\text{N}}\text{—}$ , -NR<sup>2</sup>-, na qual R<sup>2</sup> é definido tal como acima e que podem ser eventualmente substituídos por um ou mais grupos hidroxila, com a condição, de que os grupos  $\text{—}\overset{\text{I}}{\text{N}}\text{—}$  e -NR<sup>2</sup>- se ligam a um átomo de carbonilcarbono.

[000143] U<sup>3</sup> além disso, pode ser formado de grupos -W-Si(OR)<sub>3</sub>-a(R<sup>\*</sup>)<sub>n</sub>, na qual R, R<sup>\*</sup> e a são definidos tal como acima e W representa um radical hidrocarboneto bivalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -C(O)-, -O-, -NH-, -S- e que pode ser eventualmente substituído por grupos hidróxi.

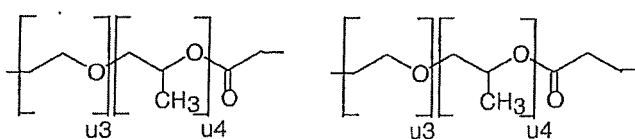
[000144] U<sup>3</sup> representa de preferência, um radical hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado com até 15 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupamentos -O- e átomos de silício e pode ser substituído por OH, por exemplo, metila, etila, propila, butila, hexila bem como por radicais das seguintes fórmulas



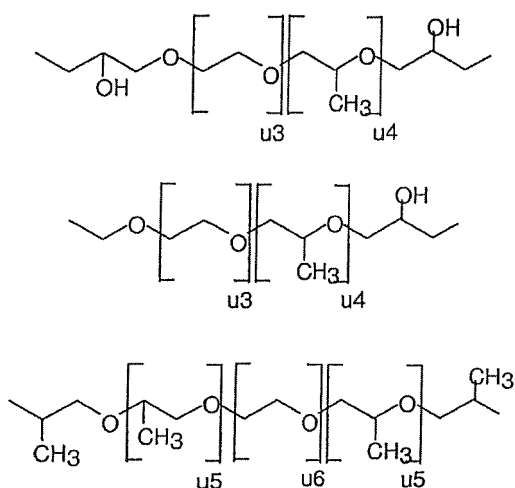
nas quais os radicais U<sup>3</sup>, que contêm grupos

trialcoxissilila, levam a compostos, que apresentam tanto grupos funcionais da fórmula (I), quanto também a grupos funcionais da fórmula (II).

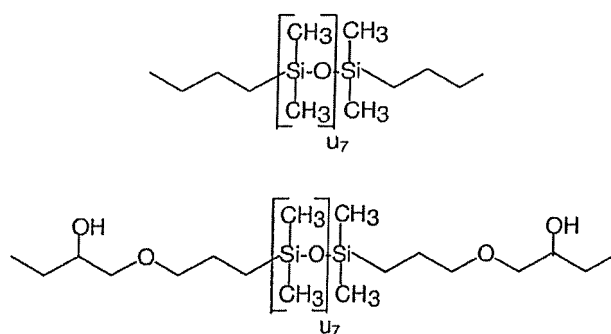
[000145]  $U^4$  e  $U^5$  representam grupos, tais como unidades alquilenos, por exemplo, dimetileno, trimetileno, hexametileno ou unidades de éster de alquilenos, especialmente derivados de alcanodióis, alquenodióis, alquinodióis e de óxidos de polialquilenos esterificados, por exemplo,



ou unidades de óxido de oligoalquilenos, por exemplo,



ou unidades contendo polissiloxano, por exemplo,



com

$u_3$  sendo 0 até 100,

$u_4$  sendo 0 até 100,

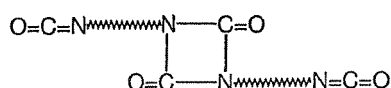
$u_3 + u_4$  sendo  $\geq 1$ ,

$u_5$  sendo 1 até 100,

$u_6$  sendo 1 até 100,

$u_1$  sendo 1 até 300.

[000146] Para a introdução das unidades de acordo com a fórmula I nos copolímeros de polissiloxano poliquaternários de acordo com a invenção, monômeros que dispõem de sub estruturas uretodiona preferentemente do tipo



são inicialmente adequadamente pré-funcionalizados.

[000147] A linha ondulada que se trata fundamentalmente de espaçadores livremente selecionáveis, isto é, de grupos  $U^2$  pelo menos bivalentes, que se ligam, entre a estrutura da uretodiona e os grupos isocianato. Isto inclui entre outros, que se encontra outros grupos isocianato reativos nas moléculas de partida.

[000148] Essas moléculas de partida são obtidas através da dimerização de diisocianatos preferíveis correspondentes (H.J. Laas, R. Halpaap, J. Pedain, Journal f. Prakt. Chemie 336[1994], 185-200; H.J. Laas, R. Halpaap, J. Pedain, Farbe+Lack 100[1994], 330-336) e são obteníveis comercialmente pela Bayer AG Leverkusen sob a designação do tipo DESMODUR®. Diisocianatos particularmente preferidos são hexametilendiisocianato, isoforonodiisocianato, bis-(4-isocianato-ciclohexil)-metano, toluileno-2,4-diisocianato, toluileno-2,6-diisocianato, bis-(4-isocianatofenil)metano, naftaleno-1,5-diisocianato, 1-isocianato-1-metil-4(3)-isocianato-metilciclohexano, 5-metil-1,9-diisocianatononano, 2,4-dimetil-1,8-diisocianato-octano, 2-metil-1,5-diisocianatopentano e 2-etil-1,4-diisocianatobutano.

[000149] De acordo com as fórmulas I(b) até I(d), a ligação das



estruturas uretodiona com a molécula restante é efetuada através de grupos uréia, uretano e oxazolidinona, que se ligam a ou são levados para um grupo U<sup>4</sup> ou U<sup>5</sup>.

[000150] U<sup>4</sup> ou U<sup>5</sup> é formado pela reação de pré-estágios de U<sup>4</sup> ou U<sup>5</sup> tal como compostos difuncionais do tipo aminoalquila, hidroxialquila e epoxialquila com isocianato, sendo que de acordo com a definição, eventualmente apenas uma parte da molécula dos pré-estágios que reagem com os grupos isocianato é representada pela unidade U<sup>4</sup> ou U<sup>5</sup> ou V e a parte restante, quando ela representa, por exemplo, um grupo amino, que não é levado à reação com isocianato, isto é, não se tornou uma unidade transformada em um grupo ureído, cai sob a definição de Q.

[000151] No caso dos compostos amino difuncionais, que reagem com os diisocianatos contendo uretodiona preferidos, trata-se, por exemplo, de compostos diamino diprimários, tais como etilenodiamina, 1,2-propilenodiamina, 1,3-propilenodiamina e 1,6-hexanodiamina,

- compostos diamino alquila diprimários contendo siloxano, tais como siloxanos em cadeia linear substituídos por  $\alpha,\omega$ -aminopropila,

- diaminopoliéteres diprimários do tipo do óxido de etileno e/ou do óxido de propileno, tal como as Jeffamine<sup>®</sup> da série ED (Hunstman Corp.),

- compostos diaminoalquila primários-secundários, tal como por exemplo, 2-hidroxietiletenodiamina, N(2-aminoetil)piperazina,

- compostos de diaminoalquila primários-secundários contendo silício, tal como por exemplo, alcoxissilanos substituídos por aminoetilaminopropila da série Dynasilan<sup>®</sup> (Degussa),

- compostos de diaminoalquila dissecundários, tal como, por exemplo, piperazina,

- compostos diaminoalquila dissecundários contendo

siloxano, tais como os produtos de reação de siloxanos em cadeia linear substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila com aminas primárias monofuncionais,

- compostos diaminoalquila dissecundários contendo grupos silila, tais como, por exemplo, os produtos de reação de poliéteres substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila (tipos DER® Dow Chemicals) com alcoxissilanos substituídos por aminopropila ou por aminoetilaminopropila (série Dynasilan® Degussa) ou os produtos de reação de aminas diprimárias com alcoxissilanos epóxi funcionalizados (GLYMO Silan® Degussa),

- diaminopoliéteres dissecundários do tipo do óxido de etileno e/ou do óxido de propileno, tais como os produtos de reação de poliéteres substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila (tipos DER® Dow Chemicals) com aminas primárias monofuncionais ou os produtos de reação de diaminopoliéteres diprimários do tipo do óxido de etileno e/ou do óxido de propileno, tal como as Jeffamine® da série ED (Hunstman Corp.) com epóxidos monofuncionais,

- compostos diaminoalquila primários-terciários, tal como N,N-dimetilpropilenodiamina e N-(3-aminopropil)imidazol,

- compostos diaminoalquila secundários-terciários, tal como N-metilpiperazina.

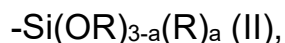
[000152] No caso dos compostos hidróxi difuncionais, que reagem com os diisocianatos contendo uretodiona preferidos, trata-se, por exemplo, de aminas terciárias hidróxi funcionalizadas, que são obtidas mediante mono-/oligoalcoxilação de moléculas correspondentes, que apresentam funções amino secundárias, tais como 2-hidroxietyl-dimetilamina, N-(2-hidroxietyl)-N'-metil-piperazina e -ésteres hidróxi funcionalizados de ácidos halogenocarboxílicos, especialmente monoésteres de ácidos monohalogenocarboxílicos com dióis, de modo muito especial, do ácido cloroacético e ácido 3-cloropropiônico, tal

como, por exemplo,  $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OC(O)CH}_2\text{Cl}$ , epóxidos hidróxi funcionalizados, tal como glicidol.

[000153] No caso dos compostos epóxi difuncionais, que reagem com os diisocianatos contendo uretodiona preferidos, trata-se por exemplo, dos diepóxidos à base de óxidos de alquilenos, especialmente do tipo do óxido de etileno e/ou do óxido de propileno, tal como poliéteres substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila do tipo DER<sup>®</sup> (Dow Chemicals), polidiorganossiloxanos em cadeia linear substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila ou  $\alpha,\omega$ -ciclohexilóxi.

[000154] Os grupos  $\text{U}^4$  e  $\text{U}^5$  estão ligados através de estruturas funcionais, de preferência, à base de ésteres, unidades de hidroxialquila, com as unidades de amina ou de amônio quaternárias Q e são ligados através de unidades Q bem como de outras unidades V, com a molécula restante. Isto significa, que os grupos  $\text{U}^4$  ou  $\text{U}^5$  durante a reação de ligação por um lado, podem atuar alquilando, tal como no caso das unidades de éster e hidroxialquila. Os grupos  $\text{U}^2$ ,  $\text{U}^3$ ,  $\text{U}^4$  e  $\text{U}^5$  são incluídos assim, na definição de V, eles são estruturas parciais de V.

[000155] Em uma forma de execução, os compostos da fórmula (IV) de acordo com a invenção, apresentam em pelo menos um dos grupos V e/ou Q, um grupo da fórmula (II)

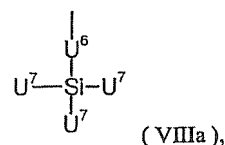


na qual a, R e R' são definidos tal como acima.

[000156] Uma outra forma de execução dos compostos de acordo com a invenção, é caracterizada pelo fato, de conter pelo menos uma unidade Q, que contém um radical  $\text{R}^1$ , que apresenta um grupo da fórmula (II).

[000157] Uma outra forma de execução dos compostos de acordo com a invenção, é caracterizada pelo fato de apresentar pelo menos uma unidade V, que contém um grupo da fórmula (II).

[000158] Em uma outra forma de execução dos compostos de acordo com a invenção, eles contêm uma unidade Q com pelo menos um radical R<sup>1</sup> da fórmula (VIIIa)

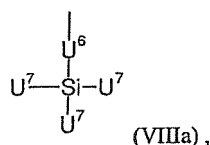


na qual

U<sup>6</sup> representa um radical hidrocarboneto bivalente em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter eventualmente um ou mais grupos, escolhidos a partir de -O-, -C(O)-, -NH- e -NU<sup>8</sup> ou que pode ser eventualmente substituído por um ou mais grupos hidroxila, sendo que U<sup>8</sup> representa hidrogênio ou um radical hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O- e pode ser substituído por OH, com a condição, de que -NH- e -NU<sup>8</sup> está ligado a um átomo de carbonilcarbono e/ou tiocarbonil-carbono e

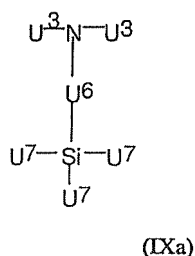
U<sup>7</sup> representa um radical hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 20 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O- e pode ser substituído por OH, com a condição, de que os radicais U<sup>7</sup> podem ser iguais ou diferentes e pelo menos um radical U<sup>7</sup> por átomo de silício está ligado ao átomo de silício através de -O-.

[000159] Os grupos funcionais das fórmulas (VIII) podem aparecer como radical R<sup>1</sup> nas unidades Q, como U<sup>3</sup>, R<sup>2</sup> ou radicais ligados através de CH, amida, éster, éter ou como radicais R<sup>3</sup> nas unidades V,

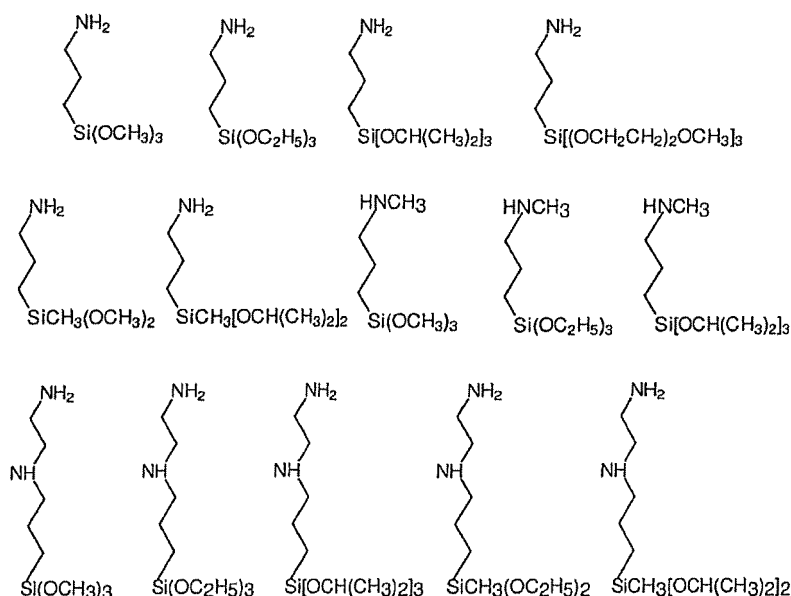


[000160] Os grupos, que apresentam as fórmulas (VIII), podem ser

introduzidos, por exemplo, com o emprego de silanos contendo grupos amino primários, secundários, terciários da fórmula (IX), tal como, por exemplo,



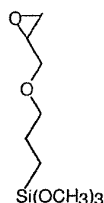
na qual  $\text{U}^3$ ,  $\text{U}^6$  e  $\text{U}^7$  são definidos tal como acima. De acordo com o grau de alquilação ou do momento da adição, eles podem atuar na co- ou terpolimerização como interruptores da cadeia do polímero, especialmente quando se trata de aminas terciárias. Ao empregar silanos contendo grupos amino primários e/ou vários grupos amino para este fim, deve observar-se a estequiometria de toda a reação. Exemplos de materiais preferidos são



[000161] A estrutura do grupo amino decide sobre o modo de ligação com a molécula do polímero, enquanto que através da amostra de substituição no átomo de silício pode ser controlada a velocidade da hidrólise no meio aquoso e a densidade final da rede. Em geral, os substituintes alcóxi mais volumosos levam a um retardamento da

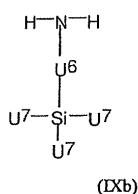
hidrólise em meio aquoso. A introdução parcial de substituintes alquila não hidrolisáveis reduz a funcionalidade da densidade da rede e com isso, a extensão da reticulação.

[000162] Aminossilanos dos tipos apresentados ou estão disponíveis comercialmente (Dynasilane® Degussa) ou podem ser transformados, por exemplo, através de troca basicamente catalítica de grupos alcóxi no átomo de silício, nos materiais desejados. Além disso, é possível obter silanos de partida especiais através de alquilação de amoníaco ou de aminas primárias com, por exemplo, silanos epóxi funcionalizados tais como

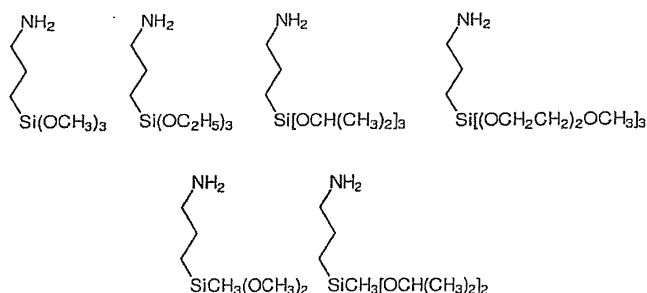


ou do derivado de ciclohexilóxi análogo.

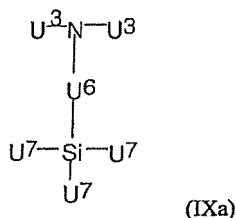
[000163] Substâncias de partida preferidas são além disso, silanos contendo grupos amino primários, monofuncionais (IXb):



[000164] Eles atuam como prolongadores de cadeia, quando a reação de formação do polímero é efetuada como dupla alquilação do átomo de nitrogênio para a propagação da cadeia. Isso é possibilitado pelo grau de alquilação ou por um ajuste adequado da estequiometria total da reação de formação do polímero. São exemplos:



[000165] Substâncias de partida preferidas são além disso, silanos contendo grupos amino terciários (IXa):



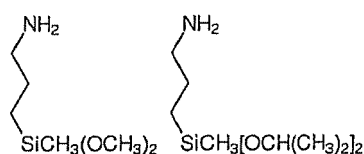
[000166] Eles atuam como interruptores da cadeia do polímero, quando no decurso da reação de formação do polímero pode ser efetuada uma quaternização do grupo amino terciário. Silanos de partida adequados, particularmente derivados metilados, podem ser obtidos através da hidrossililação de, por exemplo, N,N-dimetilalilamina com H-silanos correspondentes. Alternativamente, é possível reagir silanos epóxi funcionalizados como



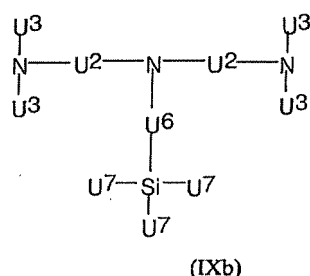
ou o derivado de ciclohexilóxi análogo como produto de reação com aminas secundárias, tal como dimetilamina ou com aminas metiladas mais complexas, tal como N-metilpiperazina.

[000167] A reação de isocianatossilanos, tal como 3-isocianatopropiltrietoxissilano (ABCR GmbH) com diaminas primárias-terciárias, por exemplo, N,N-dimetilpropilenodiamina e N-(3-aminopropil)imidazol, diaminas secundárias-terciárias, por exemplo, N-metilpiperazina, aminas hidroxifuncionais, por exemplo, 2-hidroxi-etildimetilamina e aminas mais complexas, tal como N-(2-hidroxi-etil)-N'-metil-piperazina leva igualmente aos silanos de partida desejáveis.

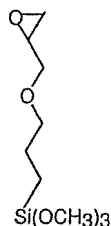
[000168] Igualmente é possível, transformar silanos que apresentam funções amino primárias ou secundárias, tal como



com epóxidos monofuncionais, nas estruturas terciárias desejáveis. Finalmente, é possível, após a conclusão da reação de formação do polímero da fórmula (IX) através de alquilação de agentes de alquilação adequados, transformar grupos amino eventualmente quaternizáveis em grupos amônio quaternizados. Outras substâncias de partida são silanos contendo grupos amino tris-terciários:



na qual  $U^2$ ,  $U^3$ ,  $U^6$  e  $U^7$  são definidos tal como acima. Os compostos (IX) podem atuar tal como todas as aminas di- ou polivalentes, como prolongadores de cadeia de polímero, quando são reagidos com um agente de alquilação di- ou polivalente, isto é, quando no decorrer da reação de formação do polímero pode realizar-se uma quaternização de dois grupos amino terciários. Silanos de partida adequados, particularmente derivados N-metilados, podem ser obtidos preferentemente através da alquilação de triaminas, que dispõem de duas funções amino terciárias e de uma função amino secundária, com silanos epóxi funcionalizados como



ou com o derivado ciclohexilóxi análogo. Um exemplo de uma triamina preferida é a N,N,N',N'-tetrametildipropilenotriamina

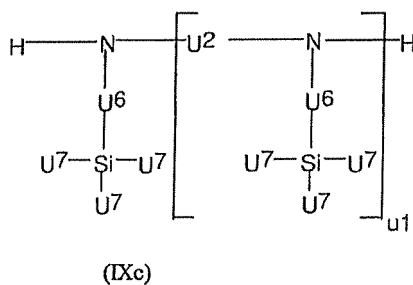


(Jeffcat® ZR50B, Huntsman Corp.). O emprego de componentes amino N-metilados, especialmente de estruturas N,N-dimetila assegura, que a incorporação seguinte desses monômeros na molécula do polímero se realiza praticamente de forma regioseletiva nos átomos de nitrogênio metilados.

[000169] É igualmente possível, reagir triaminas, tal como N,N,N',N'-tetrametildipropilenotriamina com isocianatossilanos monofuncionais, por exemplo, 3-isocianatopropil-trietiloxissilano (ABCR GmbH). Neste caso, o silano de partida então formado, dispõe de dois grupos amino terciários e de um grupamento de uréia.

[000170] Tais isocianatossilanos abrem igualmente a possibilidade, de utilizar as aminas diterciárias com função hidroxila adicional como base da amina. São exemplos os derivados de óxido de etileno ou de óxido de propileno correspondentes, tais como N,N-bis-(3-dimetilaminopropil-)N-isopropanolamina (Jeffcat® ZR50, Huntsman Corp.) e éter N,N,N'-trimetil-N'-hidroxiethylbisaminoetilico (Jeffcat® ZF10, Huntsman Corp.). Como resultado de uma tal pré-funcionalização, obtêm-se aminas diterciárias, que ligam o grupamento silano através de uma estrutura uretano.

[000171] Para a formação de estruturas silano principalmente oligomerizadas, preferem-se como substância de partida as oligoestruturas terminadas em  $\alpha,\omega$ -NH.



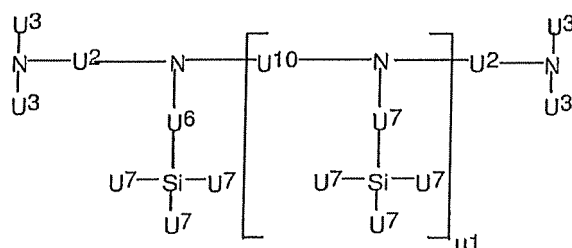
na qual  $\text{U}^2$ ,  $\text{U}^6$ ,  $\text{U}^7$  são definidos tal como acima e  $\text{u}_1$  é zero até 10.

[000172] Para sua síntese, os aminossilanos primários

monofuncionais, tal como 3-aminopropilssilanos e derivados de diepóxi, por exemplo, diepóxidos à base de óxidos de alquilenos, especialmente do tipo do óxido de etileno e/ou do óxido de propileno, tal como poliéteres substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila do tipo DER® (Dow Chemicals) e siloxanos em cadeia linear substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila ou por  $\alpha,\omega$ -ciclohexilóxi, representam os materiais de partida preferidos. Através da graduação visada da estequiometria entre o componente aminossiloxano que reage de modo difuncional e diepóxido pode ser produzido um pré-polímero (IXc) em uma reação de oligomerização, o qual é terminado em  $\alpha,\omega$ -NH e que pode ser incluído no processo de polimerização seguinte. Para atingir esta terminação  $\alpha,\omega$ -NH é necessário um excesso de componente aminossiloxano.

[000173] Para a formação de estruturas principalmente oligomerizadas (IXd), o conceito apresentado acima para a produção de oligoestruturas é variado de modo tal, que na quantidade definida, de preferência, adicionada precocemente, os diaminossilanos secundários-terciários são incorporados ao processo de oligomerização.

[000174] Neste caso, trata-se de silanos, que são preferentemente obtidos através da reação de diaminas primárias-terciárias, tais como N,N-dimetilpropilenodiamina e N-(3-aminopropil)imidazol com epoxissilanos, por exemplo, do tipo da glicidila e ciclohexilóxi. Esses diaminossilanos secundários-terciários são acrescentados ao sistema binário, constituído de silano monoprímario-amino-funcional e derivado de diepóxi e conduzem determinados pela reatividade e ordem cronológica, pois reagem de modo monofuncional, a um pré-polímero, o qual termina na posição  $\alpha,\omega$  através de grupos amino terciários, de preferência, por grupos N,N-dimetila e está representado na seguinte fórmula:

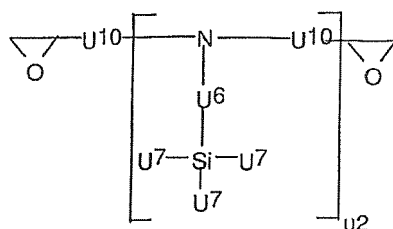


(IXd)

na qual U<sup>3</sup>, U<sup>6</sup> e U<sup>7</sup> e  $u_1$  são definidos tal como acima e U<sup>10</sup> é um radical orgânico bivalente.

[000175] Esses grupos amino terciários terminais podem ser finalmente utilizados no processo de polimerização para o prolongamento da cadeia.

[000176] Para a formação das estruturas de silano principalmente oligomerizadas (Xa) apresentam-se como substância de partida as oligoestruturas terminadas em  $\alpha,\omega$ -epóxi



(Xa)

na qual U<sup>3</sup>, U<sup>6</sup>, U<sup>7</sup>, U<sup>10</sup> são definidos tal como acima e  $u_2$  é 1 até 10.

[000177] Para a síntese de (Xa) o conceito apresentado acima é modificado de forma tal, que através do ajuste visado da estequiometria entre o componente aminossilano que reage de modo difuncional e o diepóxido forma-se um condensado durante a reação de oligomerização, o qual é terminado em  $\alpha,\omega$ -epóxi e que pode ser incluído no processo de polimerização seguinte. Para a obtenção desta terminação  $\alpha,\omega$ -epóxi, é necessário um excesso de diepóxido.

[000178] Materiais de partida preferidos são novamente os aminossilanos primários monofuncionais, tais como 3-aminopropilsilanos e

derivados de diepóxi, por exemplo, diepóxidos à base de óxidos de alquilenos, especialmente do tipo do óxido de etileno e/ou do tipo de óxido de propileno, tais como poliéteres substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila do tipo DER® (Dow Chemicals) e siloxanos em cadeia linear substituídos por  $\alpha,\omega$ -glicidila ou  $\alpha,\omega$ -ciclohexilóxi.

[000179] A preparação destes pré-polímeros contendo sililalcóxi leva não apenas a um forte aumento das unidades de amina ou de amônio das unidades amino ou amônio neste segmento, mas sim, também uma alta concentração das unidades de alcoxissilila reticuláveis. Com isso, a substantividade e a hidrofília podem ser intermediadas notavelmente por estes blocos de polímeros.

[000180] Os monômeros necessários para a ligação das subestruturas de uretodiona da fórmula (I) e as subestruturas de silano da fórmula (II) de acordo com a invenção, dispõem preferentemente de grupos alquiláveis dos tipos

- amina primária,
  - amina secundária,
  - amina terciária,
- e grupos alquiladores dos tipos
- éster de ácido halogenocarboxílico,
  - epóxido.

[000181] Para a introdução eficaz desses monômeros na molécula do polímero deve ser incluída sua taxa molar de grupos alquiláveis ou grupos alquiladores no balanço total molar da reação de formação do polímero. Particularidades sobre estes balanços são apresentados, por exemplo, na WO 02/10256, WO 02/10257, WO 02/10259 e DE 100 36 533, DE 100 36 522, EP 282720, US 6240929, DE 33 40 708, DE 102 12 470.1, DE 102 51 525.5 e DE 102 51 526.3.

[000182] Para as reações totais de acordo com a invenção, vale de preferência, essencialmente  $\Sigma \text{mol amina}$  (primária+secundária+terciária)

=  $\Sigma$ mol de grupos alquiladores.

[000183] De acordo com o tipo de reação de formação do polímero tencionado, pode ser incluído neste caso, um grupo amino mono-, di- ou trivalente. Aminas secundárias podem aparecer de forma mono- ou divalente.

[000184] São possíveis divergências desse balanço total molar. Vantajosamente, as divergências de um balanço total molar equilibrado podem ser utilizadas para a produção de materiais com grupos terminais específicos. Assim, por exemplo, os grupos terminais de amino podem ser produzidos através do excesso molar visado de monômeros de amino. As subestruturas de uretodiona da fórmula (I) e as subestruturas de silano da fórmula (II) de acordo com a invenção, participam da formação total do polímero em 0,01 até 50 % em mol. Preferem-se 0,01 até 30 % em mol, de modo muito preferido, 1 até 30 % em mol, especialmente 1 até 10 % em mol e 10 até 30 % em mol.

[000185] A incorporação das subestruturas reativas das fórmulas (I) e/ou (II) de acordo com a invenção, possibilita uma ativação controlada das moléculas do polímero no caso de aplicação. Assim, é possível, ativar as estruturas de uretodiona termicamente e/ou cataliticamente e na presença de grupos funcionais sobre superfícies de substrato. Adicionalmente, a densidade das estruturas de uretodiona na molécula do polímero e sua natureza química, por exemplo, sua origem de diisocianatos alifáticos ou aromáticos são os parâmetros, que podem ser utilizados para o controle da ativação. As estruturas de alcoxissilila ou alcoxissiloxano de acordo com a invenção, podem ser ativadas, por exemplo, mediante adição de água, alterações do valor do pH, aumentos de temperatura e grupos funcionais nas superfícies do substrato. Através da densidade dos grupamentos silila e particularmente a constituição química dos grupos alcóxi, o grau da reticulação e a velocidade da ativação podem ser controlados ou

regulados, por exemplo, mediante hidrólise visada.

[000186] Assim, a vantagem essencial das moléculas de polímero modificadas através das subestruturas das fórmulas (I) e (II) reativas funcionais, de que elas podem ser pré-formuladas e armazenadas antes do caso de aplicação a ser esperado. Somente após a ativação no caso de aplicação positivo, a substantividade muito alta dos polímeros modificados de acordo com a invenção, torna-se totalmente eficaz através do aumento do peso molecular, reticulação, fixação ou regrampeamento do substrato ou reação com grupos funcionais na superfície do substrato.

[000187] As reações de formação do polímero são preferentemente efetuadas em água, solventes orgânicos polares ou em misturas dos dois componentes mencionados. Por exemplo, são adequados álcoois, especialmente metanol, etanol, i-propanol e n-butanol, glicóis, tal como etilenoglicol, dietilenoglicol, trietilenoglicol, os éteres metílico, etílico e butílico dos glicóis mencionados, 1,2-propilenoglicol e 1,3-propilenoglicol, cetonas, tais como acetona e metiletilcetona, ésteres, tais como acetato de etila, acetato de butila e acetato de 2-etil-hexila, éteres, tais como tetrahidrofurano e compostos nitro, tal como nitrometano. A escolha do solvente varia essencialmente de acordo com a solubilidade dos participantes da reação, da temperatura de reação tencionada e de uma reatividade eventualmente presente, que perturba a reação.

[000188] As reações são efetuadas na faixa de 20°C até 130°C, de preferência, 40°C até 100°C.

[000189] Uma limitação do peso molecular é causada, por exemplo, através da interrupção final resultante na reação entre epóxidos e água ou álcool eventualmente presente no sistema de reação ou alternativamente, através do emprego adicional de aminas terciárias, tais como triálquilaminas ou a adição de compostos monofuncionais

reativos com relação aos grupos amino. Isto significa, que os polímeros de poliorganossiloxano, além dos grupos terminais naturalmente resultantes da reação dos materiais de partida monômeros, também apresentam aqueles dos agentes de interrupção de cadeia monofuncionais, tais como trialkilaminas e outros e, por exemplo, dos grupos terminais de amônio, amino, éter ou hidróxi resultantes dos mesmos.

[000190] Os compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano de acordo com a invenção, permitem além disso, a preparação de formulações, que contêm pelo menos um desses compostos.

[000191] Com isso, também podem ser preparadas formulações, que contêm pelo menos um solvente. Estes solventes são escolhidos entre água e solventes orgânicos, tal como compostos C<sub>1</sub>-C<sub>22</sub>-alifáticos ou compostos C<sub>6</sub>-C<sub>8</sub>-aromáticos, de preferência, C<sub>1</sub>-C<sub>22</sub>-álcoois, ésteres e/ou éteres.

[000192] As formulações apresentam-se especialmente na forma de uma emulsão aquosa, preferentemente na forma de uma microemulsão aquosa. Microemulsões são emulsões, nas quais a fase dispersa apresenta partículas com um tamanho médio de 10 até 250 nm. Com isso, os próprios polímeros de acordo com a invenção, podem servir como emulsificante.

[000193] Formulação de detergente, contendo pelo menos um dos compostos de acordo com a invenção, especialmente aqueles com agentes tensoativos não ionogêneos e/ou aniônicos e formulações cosméticas.

[000194] Os próprios compostos ou formulações de acordo com a invenção, podem ser novamente aplicados para a preparação de outras formulações seguintes para o acabamento ou tratamento de fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos e para a aplicação cosmética, que são adequados para o tratamento ou aplicação de

fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos, inclusive papel e em aplicações cosméticas.

[000195] A invenção inclui com isso, também processos para o tratamento e/ou acabamento de fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos, que utilizam o tratamento umectante de fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos e eventualmente a ativação com pelo menos um dos compostos de acordo com a invenção. O termo papel inclui velos, polpas, camadas ou revestimentos, que em seguida são aplicados em esfregões ou lenços e panos de limpeza, para aperfeiçoar as propriedades de uso, tal como toque, hidrofília ou estabilidade e rigidez.

[000196] Estes processos abrangem o contato, tal como imersão, enxágüe, borrifação e transmissões de transferência (estampagem ou compressão), extrusão ou calandragem.

[000197] A invenção abrange portanto, além disso, também fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos inclusive papel, que foram tratados com pelo menos um dos compostos de acordo com a invenção e produtos preparados a partir dos mesmos, tais como têxteis, papéis, velos bem como peças moldadas revestidas com superfícies metálicas de laca ou de material plástico. As superfícies tornam-se mais hidrofílicas, mais umedecíveis ou antiestáticas e têm apesar disso, um toque siliconado, macio.

[000198] Os copolímeros de polissiloxano quaternizados modificados conforme a invenção, pelas subestruturas (I) e (II), podem ser aplicados por isso, também vantajosamente em formulações cosméticas para o cuidado da pele e cabelo, tal como produtos "Rinse-off", por exemplo, xampus 2-em-1, loções para o corpo e enxágües para o cabelo para o pós-tratamento de cabelos após a limpeza ou o tingimento ou do pré-tratamento de cabelos antes do alvejamento dos cachos ou desondulamento, bem como os chamados produtos "Leave-



in" tais como tratamentos de cabelo, cremes de tratamento, cremes para pentear, géis capilares, produtos para o penteado do cabelo, fixadores de cabelo, sprays de cabelo, sprays com bomba, agentes de ondulação com secador e fixadores com secador. Os materiais de acordo com a invenção, causam um aperfeiçoamento das forças para pentear por via úmida e das forças para pentear a seco, um aumento do volume de cabelo e do brilho, bem como uma redução da lavagem de corantes de ou do cabelo tonalizado ou tingido. Para aplicações cosméticas aplicam-se de preferência, polímeros com as unidades estruturais da fórmula (II).

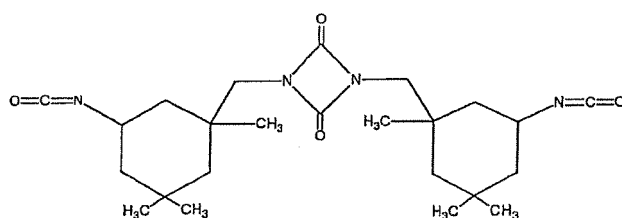
[000199] Os copolímeros de polissiloxano quaternizados modificados conforme a invenção, através das subestruturas reativas da fórmula (I) e (II), podem ser aplicados além disso, vantajosamente em polimentos para o tratamento e acabamento de superfícies duras, em formulações para a secagem de automóveis e de outras superfícies duras após lavagem mecânica, para o acabamento de tecidos e fibras têxteis, como plastificantes separados após a lavagem de têxteis com formulações de detergentes aniônicos/não ionogêneos, como plastificantes em formulações à base de agentes tensoativos aniônicos/não ionogêneos para a lavagem de tecidos, como auxiliares para a engomagem, agentes para evitar ou anular enrugamentos de tecidos e agentes para o tratamento de papel antes e após a desidratação. Os copolímeros quaternários de acordo com a invenção, permitem influenciar em amplos limites o poder de umidificação em comparação com água e sujeira, as propriedades eletrostáticas e o poder de limpeza. Nas fibras aumentam, por exemplo, as importantes propriedades cosméticas tais como brilho, volume e capacidade de pentear ou maciez, rigidez e estabilidade, sendo que eles podem ser fixados durante um longo período sobre o substrato.

### Exemplos

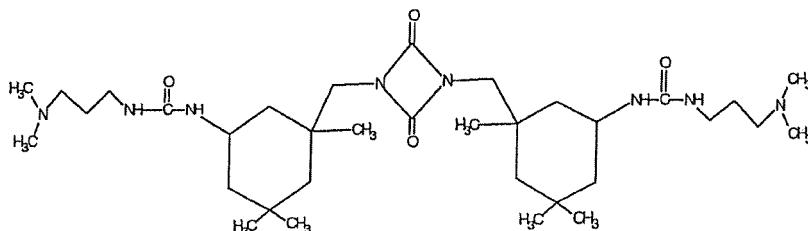
[000200] Os exemplos abaixo devem elucidar a invenção detalhadamente, sem no entanto, limitá-la.

### Exemplo 1

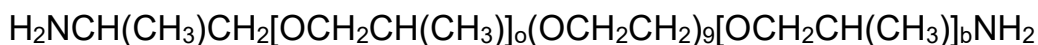
1a) Em um balão tritubulado de 500 ml dissolvem-se à temperatura ambiente 0,705 g (6,9 mmoles) de N,N-dimetil-1,3-propanodiamina em 50 ml de isopropanol. Em seguida, gotejam-se 1,81 g (16 % de taxa de NCO; 6,9 mmoles de -NCO) do dímero de isofoironodiisocianato da estrutura



dentro de poucos minutos de modo tal, que seja mantida sempre uma solução límpida. Após a conclusão do gotejamento, a solução é aquecida durante 1 hora a 60°C. Forma-se uma amina diterciária da estrutura



1b) 4 g de água desionizada, 1,04 g (17,27 mmoles) de ácido acético, 3,45 g (17,27 mmoles) de ácido dodecanóico, 1,78 g (20,72 mmoles de grupos amino terciários) de N,N,N',N'-tetrametil-1,6-hexanodiamina e 2,19 g (6,9 mmoles de grupos amino primários) de um derivado de óxido de alquilenos obtível sob o nome comercial Jeffamin® ED 600 da estrutura

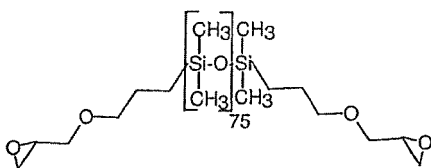


com  $a+b = 3,6$ ,

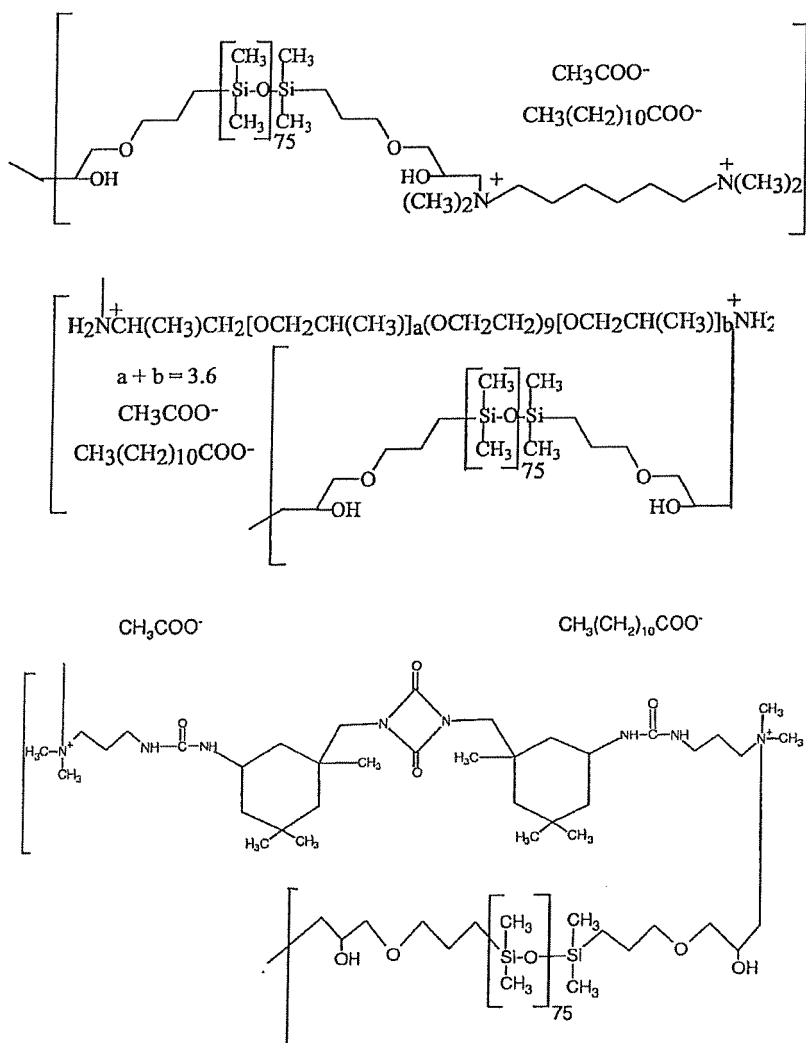
são dissolvidos em 50 g de isopropanol.

[000201] 1c) 100 g (34,54 mmoles de grupos epóxido) de um

diepóxido da estrutura



são previamente introduzidos em um balão tritubulado. Em seguida, sob agitação, gotejam-se totalmente as soluções 1a) e 1b). Após a conclusão da adição todo o preparado é aquecido durante 10 horas a 80-82°C. São obtidos 204,6 g de uma solução turva amarelada (taxa do corpo sólido, 52,5 %), que contém um polímero, que entre outros, contém as unidades estruturais



## Exemplo 2

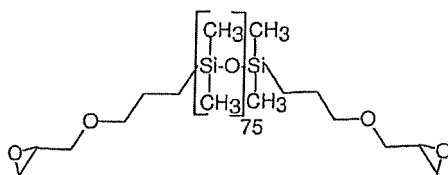
[000202] 2a) 4 g de água desionizada, 1,04 g (17,27 mmoles) de

ácido acético, 3,45 g (17,27 mmoles) de ácido dodecanóico, 2,38 g (27,64 mmoles) de grupos amino terciários) de N,N,N',N'-tetrametil-1,6-hexanodiamina e 1,09 g (3,46 mmoles) de grupos amino primários) de um derivado de óxido de alqueno obtenível sob o nome comercial Jeffamin® ED 600 da estrutura

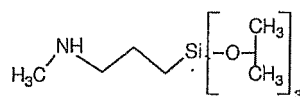
$\text{H}_2\text{NCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2[\text{OCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)]_a(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_9[\text{OCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)]_b\text{NH}_2$ ,  
com  $a+b = 3,6$ ,

são dissolvidos em 50 ml de isopropanol.

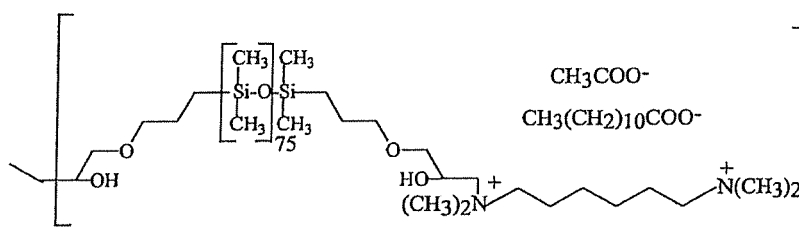
[000203] 2b) 100 g (34,54 mmoles de grupos epóxido) de um diepóxido da estrutura

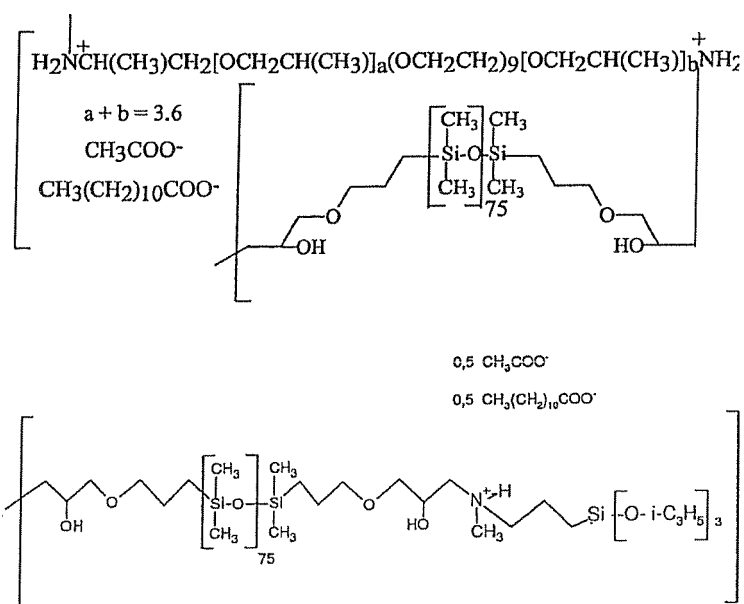


são dissolvidos em um balão tritubulado de 500 ml em 100 ml de isopropanol. São gotejados 1,61 g (59,5 % de taxa ativa, 3,45 mmoles de grupos  $\text{NHCH}_3$ ) de uma solução isopropanólica de um aminossilano da estrutura



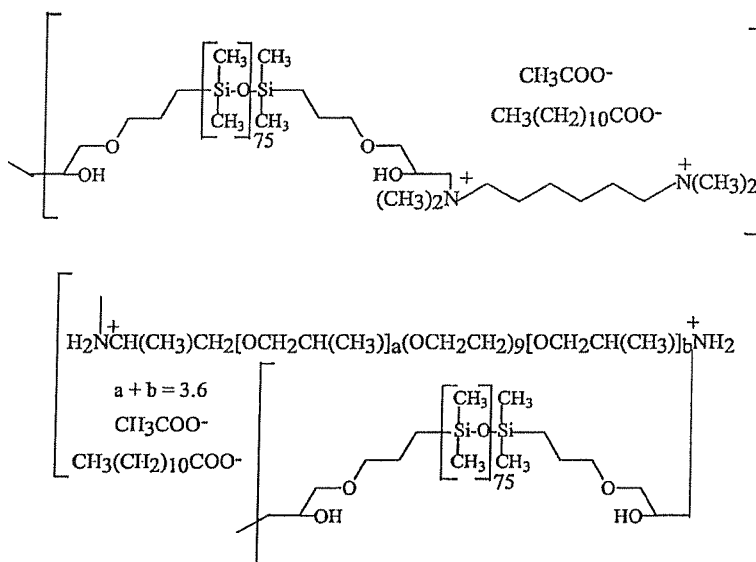
e o preparado é aquecido a seguir, durante 8 horas a 80°C. Em seguida, a solução 2a) é totalmente gotejada e todo o preparado é aquecido durante 10 horas a 82-84°C. São obtidos 204,7 g de uma solução límpida (taxa do corpo sólido, 51,3 %), que contém um polímero com as unidades estruturais





### Exemplo 3

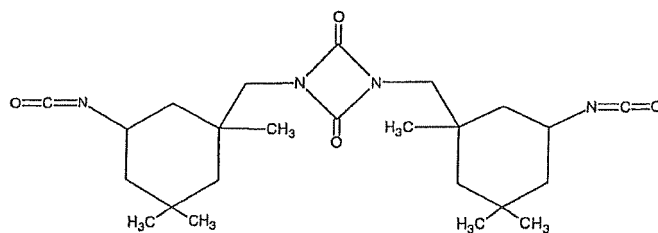
[000204] Em analogia com o exemplo 1 e 2, sintetiza-se um polímero com 82,7 % de taxa ativa em solução, a qual não contém os grupos reativos (I) e (II) de acordo com a invenção e apresenta entre outros os seguintes elementos estruturais.



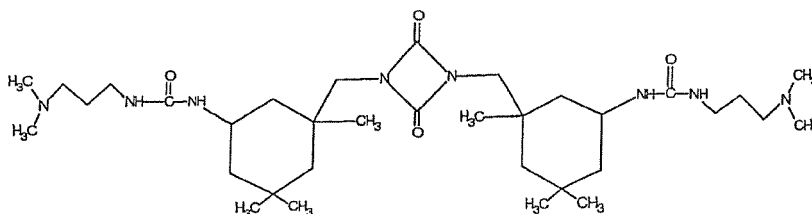
### Exemplo 4

[000205] 4a) Em um balão tritubulado de 500 ml dissolvem-se à temperatura ambiente 1,76 g (17,26 mmoles) de N,N-dimetil-1,3-propanodiamina em 50 ml de isopropanol. Em seguida, gotejam-se 4,53 g (16 % de taxa de NCO; 17,26 mmoles de -NCO) do dímero de

isoforonodiisocianato da estrutura

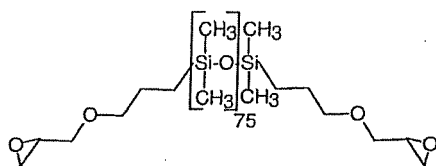


dentro de poucos minutos de modo tal, que seja mantida sempre uma solução límpida. Após a conclusão do gotejamento a solução é aquecida durante uma hora a 60°C. Forma-se a amina diterciária da estrutura

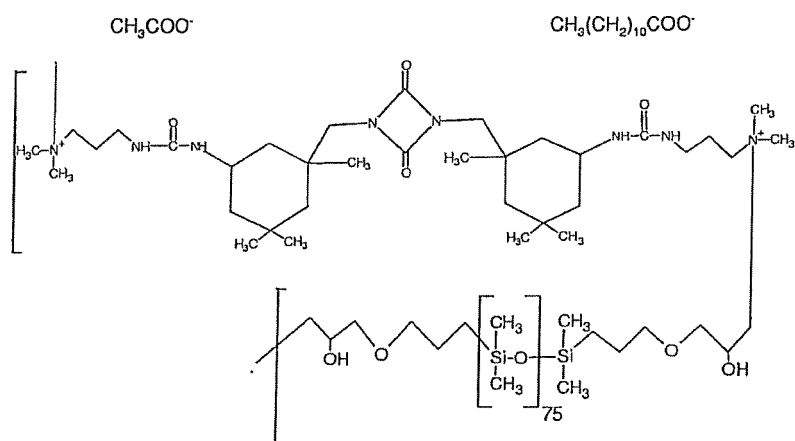


[000206] 4b) 6 g de água desionizada e 3,45 g (17,26 mmoles) de ácido dodecanóico são acrescentados à solução 1a) e a mistura é agitada durante 5 minutos.

[000207] 4c) 50 g (17,26 mmoles) de grupos epóxido) de um diepóxido da estrutura



são previamente introduzidos em um balão tritubulado. Em seguida, sob agitação, goteja-se completamente a mistura 1b). Após a conclusão da adição todo o preparado é aquecido durante 11 horas a 80-82°C. Depois de um tempo de reação de 6 horas a solução inicialmente turva torna-se límpida. São obtidos 99 g de uma solução límpida, amarelo-clara (taxa do corpo sólido, 56,5 %), que contém um polímero entre outros, com as unidades estruturais



### Exemplo 5

[000208] Partindo dos polissiloxanos quaternários de acordo com os exemplos 1 até 3, foram preparados três concentrados de microemulsão da seguinte composição:

Formulação 1 (F1)	Formulação 2 (F2)	Formulação 3 (F3)
uretodiona de acordo com a invenção	silano de acordo com a invenção	não de acordo com a invenção
61,9 g de quat do exemplo 1	54,4 g de quat do exemplo 2	52,0 g de quat do exemplo 3
11,6 g de Renex <sup>®</sup> 36	10,0 g de Renex <sup>®</sup> 36	15,48 g de Renex <sup>®</sup> 36
3,3 g de Renex <sup>®</sup> 30	2,9 g de Renex <sup>®</sup> 30	4,45 g de Renex <sup>®</sup> 30
5,4 g de Crodet <sup>®</sup> S40	4,7 g de Crodet <sup>®</sup> S40	7,25 g de Crodet <sup>®</sup> S40
0,75 g de ácido acético	0,64 g de ácido acético	1,0 g de ácido acético
0,56 g de acetato de sódio	0,48 g de acetato de sódio	0,75 g de acetato de sódio
20,6 g de água destilada	17,7 g de água destilada	19,07 g de água destilada

Renex<sup>®</sup> 36 nome comercial dos ICI Surfactants; álcool tridecílico-EO<sub>12</sub>-OH

Renex<sup>®</sup> 30 nome comercial dos ICI Surfactants; álcool tridecílico-EO<sub>6</sub>-OH

Crodet<sup>®</sup> S40 nome comercial da Croda GmbH; ácido esteárico-EO<sub>40</sub>-OH

[000209] Esses três concentrados de microemulsão a aproximadamente 40 % foram uniformemente diluídos com água para um teor de quat de silicone de respectivamente 11 %. Destas microemulsões transparentes a 11 % retiraram-se em cada caso 6 g (quantidade de quat de silicone absoluto 0,66 g), misturaram-se intensamente com 6000 ml de água e eventualmente aditivos e utilizaram-se as seguintes condições marginais para o acabamento têxtil de acordo com o processo Jet:

tipo de Jet: Mathis Labor-Jumbo-Jet

bomba Jet: estágio 6 (o maior cisalhamento possível)

quantidade de água no Jet: 6000 ml

acabamento: 20 minutos a 40°C

têxtil: 300 g de jérsei de algodão alvejado e tratado com aclarador ótico

[000210] As tiras de jérsei de algodão acabadas com as formulações F1, F2 ou F3 foram secadas durante 15 minutos a 100°C na estufa de secagem de ar circulante.

[000211] A seguir, as tiras de jérsei de algodão foram divididas e peças individuais foram submetidas a têmperas adicionais citadas na tabela abaixo.

Nenhuma têmpera adicional	45 seg./120°C	120 seg./120°C	45 seg./150°C	120 seg./150°C
F1-1	F1-2	F1-3	F1-4	F1-5
F2-1	F2-2	F2-3	F2-4	F2-5
F3-1	F3-2	F3-3	F3-4	F3-5

[000212] As peças de jérsei de algodão individuais foram lavadas então cinco vezes durante 20 minutos a 40°C com um detergente fino sem silicato (1,7 g de detergente/litro de banho de lavagem).

[000213] Em seguida, 5 voluntários independentes um do outro, determinaram a ordem das peças de jérsei de algodão com respeito à maciez.



[000214] Dentre os três grupos F1-1 até F1-5, F2-1 até F2-5 e F3-1 até F3-5, determinou-se inicialmente como tiras de jérsei mais macias, o F1-5, F2-1 e F3-4.

[000215] Essas três tiras selecionadas foram submetidas a uma avaliação pelos 5 voluntários em uma comparação direta, onde a peça de tecido mais macia obteve a nota 1 e a peça de tecido mais dura, a nota 3.

[000216] Paralelamente a isso, determina-se como medida para a hidrofília, o tempo de gotejamento-penetração. Os resultados estão reunidos na seguinte tabela.

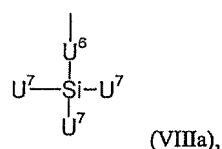
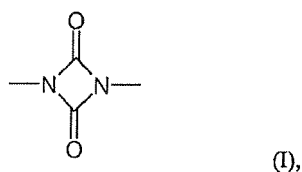
Peça de tecido	Ø nota de maciez (5 voluntários)	Tempo de gotejamento-penetração (segundos)
F1-5	1,2	2
F2-1	1,8	2
F3-4	3,0	1

\* tempo de gotejamento-penetração

[000217] Os dados para a maciez das peças de tecido F1-5 e F2-1 após 5 ciclos de lavagem confirmam, que a incorporação dos elementos estruturais de acordo com a invenção, aperfeiçoa mais a permanência do acabamento têxtil e com isso, a maciez. Adicionalmente, o caráter fortemente hidrofílico do acabamento pode ser mantido.

## REIVINDICAÇÕES

1. Compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano ou sais dos mesmos, caracterizados pelo fato de que apresentam pelo menos três unidades selecionadas das unidades Q e V, conforme definido abaixo, e possuem pelo menos um grupo funcional escolhido de grupos das fórmulas (I) e (VIIIa):



em que

U<sup>6</sup> representa um radical hidrocarboneto bivalente em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos, escolhidos a partir de -O-, -C(O)-, -NH- e -NU<sup>8</sup> ou que pode ser eventualmente substituído por um ou mais grupos hidroxila, sendo que U<sup>8</sup> representa hidrogênio ou um radical hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O- e pode ser substituído por OH, com a condição, de que -NH- e -NU<sup>8</sup> está ligado a um átomo de carbonilcarbono e/ou tiocarbonil-carbono e

U<sup>7</sup> representa um radical hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 20 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O- e pode ser substituído por OH,

com a condição, de que os radicais U<sup>7</sup> podem ser iguais ou diferentes e pelo menos um radical U<sup>7</sup> por átomo de silício está ligado

ao átomo de silício através de -O-;

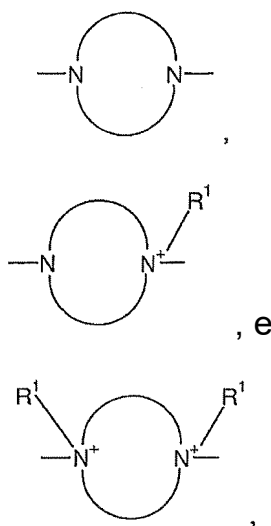
em que o grupo de formula (VIIIa) está contido no resíduo  $R^1$  da unidade Q como definida abaixo,

em que Q é um grupo amino e/ou amônio bi-, tri- e/ou tetravalente, que não está ligado a V através de um átomo de carbonilcarbono, que é selecionado do grupo que consiste em

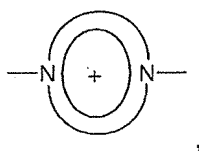
-NR<sup>1</sup>-,

-N<sup>+</sup>R<sup>1</sup><sub>2</sub>-,

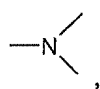
um heterociclo com funcionalidade diamino saturado ou insaturado, eventualmente substituído com outros substituintes, das fórmulas:



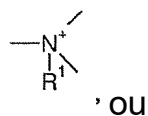
um heterociclo com funcionalidade diamino aromático, eventualmente substituído da fórmula:



um radical trivalente da fórmula:



um radical trivalente da fórmula:



, ou

um radical tetravalente da fórmula



em que R<sup>1</sup> é hidrogênio ou um radical orgânico monovalente,  
em que Q não se liga a um átomo de carbono de carbonila,  
V é pelo menos uma unidade orgânica, que está ligada às  
unidades Q através de um átomo de carbono,

com a condição de que pelo menos uma das unidades V  
contenha um radical poliorganossiloxano,

em que V é selecionado a partir de pelo menos um radical  
hidrocarboneto divalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada,  
saturado, insaturado ou aromático com até 1000 átomos de carbono,  
sendo que os átomos de carbono do radical poliorganossiloxano  
opcionalmente presente não são contados, que pode conter  
opcionalmente um ou mais grupos, escolhidos a partir de

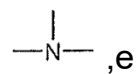
-O-,

-C(O)-,

-C(S)-,

-NR<sup>2</sup>-, no qual R<sup>2</sup> representa hidrogênio, um radical  
hidrocarboneto monovalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada,  
saturado, insaturado ou aromático com até 300 átomos de carbono,  
que pode conter um ou mais grupos escolhidos de -O-, -NH-, -C(O)- e  
-C(S)- e que pode ser opcionalmente substituído por um ou mais  
substituintes, escolhidos do grupo, que consiste em um grupo hidro-  
xila, de um grupo heterocíclico opcionalmente substituído, radicais de  
poliéter, radicais de ésteres de poliéter, radicais poliorganossiloxanila,  
sendo que quando há vários grupos -NR<sup>2</sup>-, estes podem ser iguais ou  
diferentes e com a condição, de que o grupo -NR<sup>2</sup>- se liga a um átomo

de carbonil- e/ou tiocarbonil-carbono,

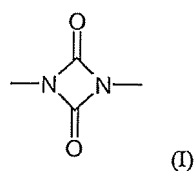


radicais poliorganossiloxano,

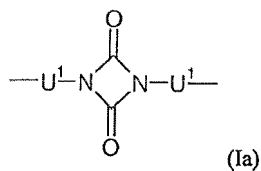
e podem ser opcionalmente substituídos por um ou mais grupos hidroxila,

e em que os grupos polivalentes Q e V ligados uns com os outros são saturados terminalmente através de radicais orgânicos monovalentes;

em que pelo menos um dos grupos V apresenta um grupo funcional da fórmula (I)

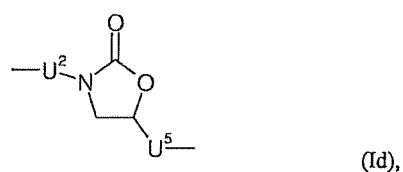
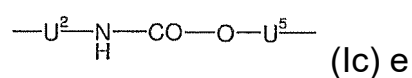
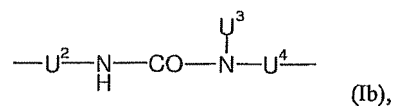


e em que os compostos contêm pelo menos um grupo funcional (I) da fórmula (Ia)



na qual

$\text{U}^1$  é escolhido do grupo, que consiste em radicais bivalentes das fórmulas:



nas quais

$U^2$  está ligado com o átomo de nitrogênio do grupo funcional da fórmula (I), e

$U^2$  representa um radical hidrocarboneto bivalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O-,

$U^3$  representa hidrogênio ou radical hidrocarboneto monovalente em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -O- e pode ser substituído por OH, consiste em  $-W-Si(OR)_{3-a}(R')_a$ , na qual R, R' são definidos tal como acima e  $a = 0$  até 2 e W representa um radical hidrocarboneto bivalente em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -C(O)-, -O-, -NH-, -S- e que pode ser eventualmente substituído por grupos hidróxi,

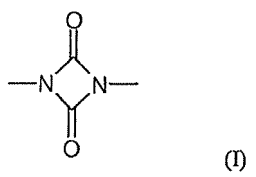
$U^4$  e  $U^5$  representam radicais hidrocarboneto bivalentes em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturados, insaturados ou aromáticos, com até 1000 átomos de carbono, que podem conter eventualmente um ou mais grupos, escolhidos a partir de -O-, -C(O)-,  $-\overset{|}{N}-$ ,  $-NR^2-$ , na qual  $R^2$  é definido tal como acima e que podem ser eventualmente substituídos por um ou mais grupos hidroxila, com a condição, de que os grupos  $-\overset{|}{N}-$  e  $-NR^2-$  estão ligados a um átomo de carbono de carbonila;

em que os grupos  $U^4$  e  $U^5$  são ligados através de grupos funcionais baseados em ésteres ou unidades de hidroxialquila com as unidades amina ou amônio quaternário Q; e

em que os grupos  $U^2$ ,  $U^3$ ,  $U^4$  e  $U^5$  são estruturas V parciais.

2. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que apresenta pelo menos um grupo funcional da

fórmula (I):



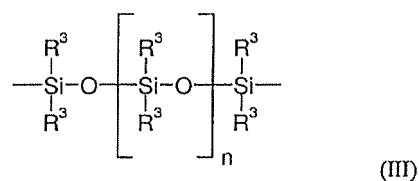
3. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que apresenta pelo menos duas unidades V, que contêm um radical poliorganossiloxano.

4. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que apresenta pelo menos duas unidades Q.

5. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que apresenta pelo menos um grupo amônio quaternário.

6. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que apresenta pelo menos dois grupos amônio quaternários.

7. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o radical poliorganossiloxano contido em pelo menos uma das unidades V é um grupo bivalente da fórmula (III)



na qual  $R^3$  pode ser igual ou diferente e é escolhido do grupo, que consiste em  $C_1$  até  $C_{22}$ -alquila, flúor( $C_3$ - $C_{10}$ )-alquila,  $C_6$ - $C_{10}$ -arila e  $-W-Si(OR)_{3-a}(R')_a$ , na qual  $a$  é 0, 1 ou 2 e  $R'$  é selecionado do grupo que consistem em  $C_1$  até  $C_{22}$ -alquila, flúor( $C_3$ - $C_{10}$ )-alquila,  $C_6$ - $C_{10}$ -arila e  $-R$  é selecionado do grupo que consiste em  $C_1$  até  $C_{22}$ -alquila,  $C_5$  a  $C_{10}$ -cicloalquila,  $C_7$  a  $C_{18}$ -alquiarila,  $C_7$  a  $C_{18}$ -arilalquila e  $C_6$ - $C_{10}$ -arila, e  $W$  representa  $-O-$  ou um radical hidrocarboneto bivalente, em cadeia linear, cíclica ou ramificada, saturado, insaturado

ou aromático com até 100 átomos de carbono, que pode conter um ou mais grupos -C(O)-, -O-, -NH-, -S- e que pode ser opcionalmente substituído por hidróxi e n = 0 até 1000.

8. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que apresenta pelo menos dois grupos V, que contêm um radical poliorganossiloxano.

9. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que contém pelo menos uma unidade da fórmula (IV):



na qual Q e V são definidos tal como acima e a saturação terminal dos grupos Q e V é efetuada por grupos orgânicos monovalentes.

10. Composto de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que apresenta pelo menos duas unidades de repetição da fórmula (IV).

11. Processo para a preparação do composto de amino e/ou amônio-polissiloxano como definido na reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que:

a) pelo menos um composto amina, escolhido a partir de um composto diamina e/ou de um composto monoamina primário e/ou secundário, é reagido com um composto orgânico multifuncional capacitado para a reação com as funções amino do composto amina, sendo que a razão molar das funções amino do composto amina mencionado para os grupos funcionais do composto orgânico multifuncional mencionado, importa de cerca de 0,5 até 2 ou

b) pelo menos dois moles de um composto amina (1), escolhido a partir de um composto diamina (1) e/ou de um composto monoamina primário e/ou secundário (1), são reagidos com um mol de um composto (1) orgânico, multifuncional, capacitado para a reação com as funções amino do composto amina, com formação de um



composto diamina (2) (monômero) e o composto diamina (2) (monômero) em seguida, é reagido com pelo menos um outro composto orgânico (2) multifuncional, capacitado para a reação com as funções amino do composto diamina (2), eventualmente na presença de outros compostos amina (2), em que a estequiometria das funções amino e dos grupos funcionais capacitados para a reação com funções amino no último estágio da reação importa em cerca de 1:1 e os compostos orgânicos (1) e (2) podem ser iguais ou diferentes uns dos outros ou

c) um composto amina, escolhido a partir de um composto diamina (1) e/ou de um composto monoamina primário e/ou secundário, é reagido com um composto orgânico (1) multifuncional, capacitado para a reação com as funções amino do composto amina com formação de um composto diamina (2) (oligômero terminado em amino), sendo que a razão molar das funções amino do composto amina mencionado para os grupos funcionais do composto orgânico (1) multifuncional citado, é de cerca de 1 até 2, em seguida, o composto diamina (2) obtido (oligômero terminado em amino) é reagido com pelo menos um composto orgânico (2) multifuncional capacitado para a reação com as funções amino dos compostos diamina, sendo que a estequiometria das funções amino e dos grupos funcionais capacitados para a reação com as funções amino no último estágio da reação é de cerca de 1:1 e os compostos orgânicos (1) e (2) podem ser iguais ou diferentes ou

d) um composto amina (1), escolhido a partir de um composto diamina e/ou de um composto monoamina primário ou secundário, é reagido com um composto orgânico (1) multifuncional, capacitado para a reação com as funções amino do composto amina, com formação de um composto orgânico (2) multifuncional, capacitado para a reação com funções amino (oligômero difuncional), em que a

razão molar das funções amino do composto amina mencionado para os grupos funcionais do composto orgânico (1) multifuncional mencionado, importa em cerca de 0,5 até 1, em seguida, o composto orgânico (2) (oligômero difuncional) é reagido com pelo menos um composto amina (2), escolhido a partir de um composto diamina e/ou de um composto monoamina primário ou secundário, eventualmente na presença de um ou vários compostos orgânicos (3) multifuncionais capacitados para a reação com funções amino, sendo que a estequiometria das funções amino e dos grupos funcionais capacitados para a reação com funções amino no último estágio da reação importa em cerca de 1:1,

sendo que ao longo do qual, se apropriado, monoaminas monofuncionais, ou monoaminas adequadas incapazes de propagação de cadeias e/ou compostos monofuncionais capazes de reagir com funções amino podem ser acrescentados como agentes de terminação de cadeia e ao longo do qual, quaisquer funções amino presentes nos produtos obtidos podem ser subsequentemente protonadas ou quaternizadas.

12. Processo de acordo com a reivindicação 11, caracterizado pelo fato de que a introdução do grupo funcional da fórmula (I) compreende:

a) a reação de diisocianatos, contendo o grupo funcional da fórmula (I), com pelo menos um mol de uma diamina (1) com formação de uma diamina monômera, oligômera ou polímera (2), que contém o grupo funcional da fórmula (I) ou

b) a reação de um mol de um diisocianato, contendo o grupo funcional da fórmula (I), com pelo menos um mol de um composto orgânico (1) multifuncional, capacitado para a reação com os grupos isocianato e grupos amino, para formar um composto orgânico monômero, oligômero ou polímero (2) multifuncional, capacitado para a

reação com grupos amino, contendo o grupo da fórmula (I) ou

c) a reação de um mol de um diisocianato, contendo o grupo funcional da fórmula (I), com pelo menos um mol de um composto orgânico (1) multifuncional, capacitado para a reação com os grupos isocianato, com formação de um composto orgânico, monômero, oligômero ou polímero, multifuncional, contendo o grupo funcional da fórmula (I) e grupos terminais capacitados para a reação com grupos isocianato, transformação do composto orgânico (2) mencionado em um composto orgânico (3) monômero, oligômero ou polímero multifuncional capacitado para a reação com grupos amino

e aplicação dos compostos obtidos, contendo o grupo da fórmula (I), nos processos a) até d) como definidos na reivindicação 11.

13. Processo de acordo com a reivindicação 11 ou 12, caracterizado pelo fato de que a introdução do grupo funcional da fórmula (VIIIa) compreende a reação de um composto amina, escolhido a partir de um composto diamina e/ou de um composto monoamina primário, secundário ou terciário, contendo a unidade da fórmula (VIIIa) e/ou a reação de um composto orgânico, multifuncional, contendo a unidade da fórmula (VIIIa).

14. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 11 a 13, caracterizado pelo fato de que os grupos funcionais dos compostos multifuncionais, capacitados para a reação com funções amino, são escolhidos a partir do grupo que consiste em grupos epóxi e grupos halogenoalquila.

15. Formulação, caracterizada pelo fato de que compreende pelo menos um composto como definido na reivindicação 1, e compreende pelo menos um solvente selecionado dentre água e solventes orgânicos.

16. Formulação de acordo com a reivindicação 15, caracterizada pelo fato de que está na forma de uma emulsão aquosa.

17. Formulação de acordo com a reivindicação 16, caracterizada pelo fato de que está na forma de uma microemulsão aquosa.

18. Aplicação dos compostos como definidos em qualquer uma das reivindicações 1 a 10, caracterizada pelo fato de que é na preparação de formulações cosméticas, detergentes ou para o tratamento superficial de substratos.

19. Formulação de detergente, caracterizada pelo fato de que compreende pelo menos um composto como definido na reivindicação 1.

20. Formulação de detergente de acordo com a reivindicação 19, caracterizada pelo fato de que compreende agentes tensoativos não ionogênicos e/ou aniônicos.

21. Formulação cosmética, caracterizada pelo fato de que compreende pelo menos um composto como definido na reivindicação 1.

22. Aplicação dos compostos como definidos na reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que é para a preparação de formulações para o acabamento ou tratamento de fibras naturais, fibras sintéticas ou substratos fibrosos.

23. Processo para o tratamento e/ou acabamento de fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos, caracterizado pelo fato de que compreende o tratamento umedecedor de fibras naturais ou sintéticas ou dos substratos fibrosos e, eventualmente ativação, com as formulações como definidas em qualquer umas das reivindicações 15 a 17.

24. Fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos, caracterizadas pelo fato de que são tratadas com as formulações conforme definidas em qualquer uma das reivindicações 15 a 17.

## RESUMO

Patente de Invenção: **"COMPOSTOS DE AMINO- E/OU AMÔNIO-POLISSILOXANO REATIVOS, SUAS APLICAÇÕES, FORMULAÇÃO COMPREENDENDO OS MESMOS, PROCESSOS DE PREPARAÇÃO DOS REFERIDOS COMPOSTOS E TRATAMENTO E/OU ACABAMENTO DE FIBRAS, BEM COMO AS REFERIDAS FIBRAS"**.

A presente invenção refere-se aos compostos de amino-e/ou amônio-polissiloxano que apresentam grupos funcionais reativos e sais dos mesmos, especialmente copolímeros de polissiloxano poliquaternários e seus sais, processos para a sua preparação, sua aplicação para o tratamento superficial de substratos, tais como fibras naturais ou sintéticas ou substratos fibrosos, especialmente como plastificantes hidrofílicos resistentes à água, bem como sua aplicação em formulações cosméticas e formulações, que contêm os compostos de amino- e/ou amônio-polissiloxano reativos e seus sais.