

 (19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2009-0098814 (43) 공개일자 2009년09월17일
(51) Int. Cl. <i>A01N 25/30</i> (2006.01) <i>A61K 8/58</i> (2006.01) <i>C02F 1/54</i> (2006.01) <i>C07F 7/08</i> (2006.01) (21) 출원번호 10-2009-7012079 (22) 출원일자 2007년12월11일 심사청구일자 없음 (85) 번역문제출일자 2009년06월11일 (86) 국제출원번호 PCT/US2007/025273 (87) 국제공개번호 WO 2008/073397 국제공개일자 2008년06월19일 (30) 우선권주장 11/953,167 2007년12월10일 미국(US) 60/869,432 2006년12월11일 미국(US)	(71) 출원인 모멘티브 퍼포먼스 머티리얼즈 인크. 미합중국, 뉴욕 12211, 알바니, 코포레이트 우즈 블레바드 22 (72) 발명자 리더맨, 마크, 디. 미국, 코네티컷 06907, 스탬포드, #2, 하이뷰 애 비뉴 36 폴리셀로, 조지, 에이. 미국, 뉴욕 10652, 오씨닝, 칼람 애비뉴 13 (뒷면에 계속) (74) 대리인 정태련

전체 청구항 수 : 총 51 항

(54) 가수분해 저항성 유기변성 실릴화 이온성 계면활성제들

(57) 요약

본 발명은 식 「 $(R^1)(R^2)(R^3)Si-R^4-Si(R^5)(R^6)(R^7)$ 」을 갖는 실란을 포함하여 구성되는 조성물들을 제공하며, 상기 식에서, R^1 , R^2 , R^3 , R^5 , 및 R^6 은, 1 내지 6의 1가 탄화수소 라디칼들, 아릴, 및 하나의 아릴 기를 포함하는 7 내지 10의 탄소들의 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고; R^4 는 1 내지 3의 탄소들의 탄화수소 기이며; R^7 은 하나의 음이온성, 양이온성 또는 양성이온성(zwitterionic) 치환기를 포함하여 구성된다. 본 발명의 실란들은, 폭넓은 pH 범위에 걸쳐 가수분해에 대한 저항성을 나타낸다.

(72) 발명자

펑, 웬킹, 엔.

중국, 상하이 201203, 무단 로드 넘버 399, 룸 402

젠, 리펑

중국, 상하이 201204, 푸둥, 리안시 로드, #8 룸
501 126

웨그너, 로랜드

독일, 본 53227, 히메리츠웨그 60

라자라만, 수레쉬, 케이.

미국, 뉴욕 12550, 뉴버그, 웨슬리 코트 7

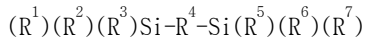
시아, 지준

중국, 상하이 201204, 푸둥, 덩시양 로드 910

특허청구의 범위

청구항 1

하기 식을 갖는 실란을 포함하여 구성되는, 조성물.



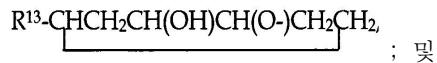
[상기 식에서,

R^1 , R^2 , R^3 , R^5 , 및 R^6 은, 1 내지 6의 1가 탄화수소 라디칼들, 아릴, 및 하나의 아릴 기를 포함하는 7 내지 10의 탄소들의 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되며;

R^4 는 1 내지 3의 탄소들의 탄화수소 기이고;

R^7 은 R^8-R^A , R^9-R^C , 및 $R^{10}-R^Z$ 이며;

R^8 은 $R^{11}(O)_t(R^{12})_u(O)_v-$,



$R^{14}O(C_2H_4O)_a(C_3H_6O)_b(C_4H_8O)_c-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되며;

위에서, R^{11} 및 R^{12} 는, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고; R^{13} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이며; R^{14} 는 1 내지 6의 탄소들의 2가 선형 또는 가지형 탄화수소 기이고; 첨자들 t, u 및 v 는 0 또는 1이고;

첨자들 a, b 및 c 는 0 또는 양수(positive)이며, 다음의 관계들을 충족시키고:

$$a \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq a + b + c \leq 10;$$

R^A 는, $-SO_3M^K$, $-C(=O)CH_2CH(R^{15})COO-M^K$; $-PO_3HM^K$; $-COOM^K$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{15} 는 H 또는 $-SO_3M^K$ 이고;

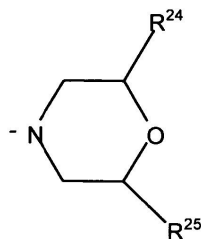
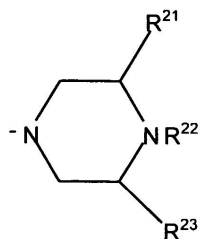
M^K 는, Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , NH_4^+ , Li^+ , 및 2 내지 4의 탄소들의 알킬 기들을 포함하여 구성되는 모노(mono)-, 다이(di)- 및 트리알킬아민들 또는 2 내지 4의 탄소들의 알킬 기들을 포함하여 구성되는 모노-, 다이- 및 트리알카놀아민들로부터 유도되는 1가 암모늄 이온들로 구성되는 군으로부터 선택되는 양이온이며;

R^9 는, $R^{16}(O)_w(R^{17})_x-$ 및 $R^{18}O(C_2H_4O)_d(C_3H_6O)_e(C_4H_8O)_fCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼 이고; 여기서, R^{16} 및 R^{17} 은, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되며; R^{18} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이고; 첨자들 w 및 x 는 0 또는 1 이며;

첨자들 d, e 및 f 는 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시키며:

$$d \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq d + e + f \leq 10;$$

R^c 는, $N(R^{19})(R^{20})$,



및



로 구성되는 군으로부터 선택되고,

위에서, R^{19} 및 R^{20} 은, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, $R^{26}N(R^{29})(R^{30})$, 및 $-R^{27}O(C_2H_4O)_g(C_3H_6O)_h(C_4H_8O)_iR^{28}$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되며;

첨자들 g, h 및 i 는 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시키며:

$$g \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq g + h + i \leq 10;$$

R^{21} , R^{23} , R^{24} , R^{25} 는, H, 및 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼들로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고;

R^{22} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 $-R^{31}O(C_2H_4O)_j(C_3H_6O)_k(C_4H_8O)_lR^{32}$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며;

첨자들 j, k 및 l 은 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시키며:

$$j \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq j + k + l \leq 10;$$

R^{26} 은, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼, 또는 $R^{33}O(C_2H_4O)_m(C_3H_6O)_n(C_4H_8O)_oR^{34}$ 이고;

첨자들 m, n 및 o 는, 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시키고:

$$m \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq m + n + o \leq 10;$$

R^{29} 및 R^{30} 은, H, 또는 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되며;

R^{27} , R^{31} 및 R^{33} 은, 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고;

R^{28} 은, H, 1 내지 6의 탄소들의 1가 탄화수소 라디칼 및 $N(R^{40})(R^{41})$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며;

R^{32} 및 R^{34} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 $R^{37}N(R^{38})(R^{39})$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고; 여기서, R^{37} 은, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼이며;

R^{35} , R^{36} , R^{38} 및 R^{39} 는, H, 및 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼들로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고;

R^{10} 은, $R^{40}(O)_y(R^{41})_z-$ 및 $R^{42}O(C_2H_4O)_p(C_3H_6O)_q(C_4H_8O)_rCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{40} 및 R^{41} 은, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으

로 선택되고;

R^{42} 는, 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이며;

첨자들 y 및 z 은 0 또는 1 이고;

첨자들 p , q 및 r 는 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시키고:

$p \geq 1$ 이면서 $1 \leq p + q + r \leq 10$;

R^Z 은, $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$, $-N-(R^{46})(R^{47})_y R^{48} COO(M^K)_\delta$,

$-N^+(R^{49})(R^{50})R^{51} OP(=O)(A)(B)$ 또는,

$(-C(=O)N(R^{52})R^{53} N-(R^{54})(R^{55}))^+ -(R^{56} OP(=O)(A)(B))(X^-)_\epsilon$ 이며;

여기서, R^{43} , R^{44} , R^{46} , R^{47} , R^{49} , R^{50} , R^{52} , R^{54} 및 R^{55} 는, H; 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼; 및 2 내지 4의 탄소들의 알킬 기들을 포함하여 구성되는 알카놀아민 기;로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고; R^{45} 는 3 내지 4의 탄소들의 2가 기이며;

첨자들 α , β , γ 및 δ 는, 다음의 관계들을 조건으로 하여 0 또는 1 이고:

$\alpha + \beta = 1$ 그리고 $\gamma + \delta = 1$;

R^{48} 및 R^{51} 은 독립적으로 1 내지 4의 탄소들의 2가 기이며;

R^{53} 및 R^{56} 은 각기 독립적으로 2 내지 4의 탄소들의 2가 기이고;

A 및 B 는, O^- 및 OM^K 로부터 선택되며; X 는 Cl, Br, 및 I 로 구성되는 군으로부터 선택되는 음이온이고; 그리고 첨자 ϵ 는 0, 1 또는 2 임]

청구항 2

제1항에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 메틸인, 조성물.

청구항 3

제2항에 있어서, R^7 이 R^8-R^A 인, 조성물.

청구항 4

제3항에 있어서, R^A 가 $-SO_3M^K$ 인, 조성물.

청구항 5

제3항에 있어서, R^A 가 $-COOM^K$ 인, 조성물.

청구항 6

제2항에 있어서, R^7 이 R^9-R^C 인, 조성물.

청구항 7

제6항에 있어서, R^C 가 $N(R^{19})(R^{20})$ 인, 조성물.

청구항 8

제2항에 있어서, R^7 이 $R^{10}-R^Z$ 인, 조성물.

청구항 9

제8항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$ 인, 조성물.

청구항 10

제8항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{46})(R^{47})_x R^{48} COO(M^K)_\delta$ 인, 조성물.

청구항 11

불연속성 상(discontinuous phase)이 물을 포함하여 구성되고, 연속성 상(continuous phase)이 제1항의 실란을 포함하여 구성되는, 수용성 에멀전.

청구항 12

제11항에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 메틸인, 조성물.

청구항 13

제12항에 있어서, R^7 이 R^8-R^A 인, 조성물.

청구항 14

제13항에 있어서, R^A 가 $-SO_3 M^K$ 인, 조성물.

청구항 15

제13항에 있어서, R^A 가 $-COO M^K$ 인, 조성물.

청구항 16

제12항에 있어서, R^7 이 R^9-R^C 인, 조성물.

청구항 17

제16항에 있어서, R^C 가 $N(R^{19})(R^{20})$ 인, 조성물.

청구항 18

제12항에 있어서, R^7 이 $R^{10}-R^Z$ 인, 조성물.

청구항 19

제18항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$ 인, 조성물.

청구항 20

제18항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{46})(R^{47})_x R^{48} COO(M^K)_\delta$ 인, 조성물.

청구항 21

불연속성 상이 제1항의 실란을 포함하여 구성되고, 연속성 상이 물을 포함하여 구성되는, 수용성 에멀전.

청구항 22

제21항에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 메틸인, 조성물.

청구항 23

제22항에 있어서, R^7 이 R^8-R^A 인, 조성물.

청구항 24

제23항에 있어서, R^A 가 $-SO_3M^K$ 인, 조성물.

청구항 25

제23항에 있어서, R^A 가 $-COOM^K$ 인, 조성물.

청구항 26

제22항에 있어서, R^7 이 R^9-R^C 인, 조성물.

청구항 27

제26항에 있어서, R^C 가 $N(R^{19})(R^{20})$ 인, 조성물.

청구항 28

제22항에 있어서, R^7 이 $R^{10}-R^Z$ 인, 조성물.

청구항 29

제28항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{43})(R^{44})_aR^{45}SO_3(M^K)_\beta$ 인, 조성물.

청구항 30

제28항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{46})(R^{47})_yR^{48}COO(M^K)_\delta$ 인, 조성물.

청구항 31

불연속성 상이 비-수용성 수산기 용제(non-aqueous hydroxylic solvent)를 포함하여 구성되고, 연속성 상이 제1 항의 실란을 포함하여 구성되는, 비-수용성 에멀전.

청구항 32

제31항에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 메틸인, 조성물.

청구항 33

제32항에 있어서, R^7 이 R^8-R^A 인, 조성물.

청구항 34

제33항에 있어서, R^A 가 $-SO_3M^K$ 인, 조성물.

청구항 35

제33항에 있어서, R^A 가 $-COOM^K$ 인, 조성물.

청구항 36

제32항에 있어서, R^7 이 R^9-R^C 인, 조성물.

청구항 37

제36항에 있어서, R^C 가 $N(R^{19})(R^{20})$ 인, 조성물.

청구항 38

제32항에 있어서, R^7 이 $R^{10}-R^Z$ 인, 조성물.

청구항 39

제38항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$ 인, 조성물.

청구항 40

제38항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{46})(R^{47})_y R^{48} COO(M^K)_\delta$ 인, 조성물.

청구항 41

불연속성 상이 제1항의 실란을 포함하여 구성되고, 연속성 상이 비-수용성 수산기 유기 용제를 포함하여 구성되는, 비-수용성 에멀전.

청구항 42

제41항에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 이 메틸인, 조성물.

청구항 43

제42항에 있어서, R^7 이 R^8-R^A 인, 조성물.

청구항 44

제43항에 있어서, R^A 가 $-SO_3M^K$ 인, 조성물.

청구항 45

제43항에 있어서, R^A 가 $-COOM^K$ 인, 조성물.

청구항 46

제42항에 있어서, R^7 이 R^9-R^C 인, 조성물.

청구항 47

제46항에 있어서, R^C 가 $N(R^{19})(R^{20})$ 인, 조성물.

청구항 48

제42항에 있어서, R^7 이 $R^{10}-R^Z$ 인, 조성물.

청구항 49

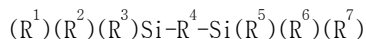
제48항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$ 인, 조성물.

청구항 50

제48항에 있어서, R^Z 이 $-N-(R^{46})(R^{47})_y R^{48} COO(M^K)_\delta$ 인, 조성물.

청구항 51

하기 식을 갖는 실란을 포함하여 구성되고, 상기 실란이 가수분해에 대한 강화된 저항성을 갖는, 조성물.



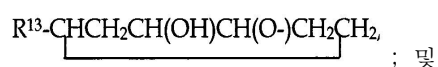
[상기 식에서,

R^1 , R^2 , R^3 , R^5 , 및 R^6 은, 1 내지 6의 1가 탄화수소 라디칼들, 아틸, 및 하나의 아틸 기를 포함하는 7 내지 10의 탄소들의 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되며;

R^4 는 1 내지 3의 탄소들의 탄화수소 기이고;

R^7 은 R^8-R^A , R^9-R^C , 및 $R^{10}-R^Z$ 이며;

R^8 은 $R^{11}(O)_t(R^{12})_u(O)_v-$,



$R^{14}O(C_2H_4O)_a(C_3H_6O)_b(C_4H_8O)_c-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되며;

위에서, R^{11} 및 R^{12} 는, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고; R^{13} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이며; R^{14} 는 1 내지 6의 탄소들의 2가 선형 또는 가지형 탄화수소 기이고; 첨자들 t, u 및 v 는 0 또는 1이고;

첨자들 a, b 및 c 는 0 또는 양수(positive)이며, 다음의 관계들을 충족시키고:

$$a \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq a + b + c \leq 10;$$

R^A 는, $-SO_3M^K$, $-C(=O)CH_2CH(R^{15})COO-M^K$; $-PO_3HM^K$; $-COOM^K$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{15} 는 H 또는 $-SO_3M^K$ 이고;

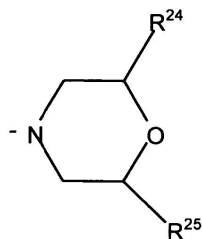
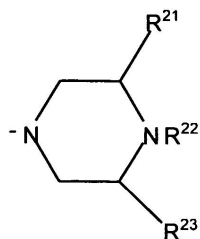
M^K 는, Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , NH_4^+ , Li^+ , 및 2 내지 4의 탄소들의 알킬 기들을 포함하여 구성되는 모노(mono)-, 다이(di)- 및 트리알킬아민들 또는 2 내지 4의 탄소들의 알킬 기들을 포함하여 구성되는 모노-, 다이- 및 트리알카놀아민들로부터 유도되는 1가 암모늄 이온들로 구성되는 군으로부터 선택되는 양이온이며;

R^9 는, $R^{16}(O)_w(R^{17})_x-$ 및 $R^{18}O(C_2H_4O)_d(C_3H_6O)_e(C_4H_8O)_fCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이고; 여기서, R^{16} 및 R^{17} 은, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되며; R^{18} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이고; 첨자들 w 및 x 는 0 또는 1 이며;

첨자들 d, e 및 f 는 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시키며:

$$d \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq d + e + f \leq 10;$$

R^c 는, $N(R^{19})(R^{20})$,



및



로 구성되는 군으로부터 선택되고,

위에서, R^{19} 및 R^{20} 은, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, $R^{26}N(R^{29})(R^{30})$, 및 $-R^{27}O(C_2H_4O)_g(C_3H_6O)_h(C_4H_8O)_iR^{28}$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되며;

첨자들 g, h 및 i 는 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시키며:

$$g \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq g + h + i \leq 10;$$

R^{21} , R^{23} , R^{24} , R^{25} 는, H, 및 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼들로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고;

R^{22} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 $-R^{31}O(C_2H_4O)_j(C_3H_6O)_k(C_4H_8O)_lR^{32}$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며;

첨자들 j, k 및 l 은 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시키며:

$$j \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq j + k + l \leq 10;$$

R^{26} 은, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼, 또는 $R^{33}O(C_2H_4O)_m(C_3H_6O)_n(C_4H_8O)_oR^{34}$ 이고;

첨자들 m, n 및 o 는, 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시키고:

$$m \geq 1 \text{ 이면서 } 1 \leq m + n + o \leq 10;$$

R^{29} 및 R^{30} 은, H, 또는 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되며;

R^{27} , R^{31} 및 R^{33} 은, 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고;

R^{28} 은, H, 1 내지 6의 탄소들의 1가 탄화수소 라디칼 및 $N(R^{40})(R^{41})$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며;

R^{32} 및 R^{34} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 $R^{37}N(R^{38})(R^{39})$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고; 여기서, R^{37} 은, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼이며;

R^{35} , R^{36} , R^{38} 및 R^{39} 는, H, 및 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼들로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고;

R^{10} 은, $R^{40}(O)_y(R^{41})_z-$ 및 $R^{42}O(C_2H_4O)_p(C_3H_6O)_q(C_4H_8O)_rCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{40} 및 R^{41} 은, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으

로 선택되고;

R^{42} 는, 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이며;

첨자들 y 및 z 은 0 또는 1 이고;

첨자들 p , q 및 r 는 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시키고:

$p \geq 1$ 이면서 $1 \leq p + q + r \leq 10$;

R^Z 은, $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$, $-N-(R^{46})(R^{47})_y R^{48} COO(M^K)_\delta$,

$-N^+(R^{49})(R^{50})R^{51} OP(=O)(A)(B)$ 또는,

$(-C(=O)N(R^{52})R^{53} N-(R^{54})(R^{55}))^+ -(R^{56} OP(=O)(A)(B))(X^-)_\epsilon$ 이며;

여기서, R^{43} , R^{44} , R^{46} , R^{47} , R^{49} , R^{50} , R^{52} , R^{54} 및 R^{55} 는, H; 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼; 및 2 내지 4의 탄소들의 알킬 기들을 포함하여 구성되는 알카놀아민 기;로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되고; R^{45} 는 3 내지 4의 탄소들의 2가 기이며;

첨자들 α , β , γ 및 δ 는, 다음의 관계들을 조건으로 하여 0 또는 1 이고:

$\alpha + \beta = 1$ 그리고 $\gamma + \delta = 1$;

R^{48} 및 R^{51} 은 독립적으로 1 내지 4의 탄소들의 2가 기이며;

R^{53} 및 R^{56} 은 각기 독립적으로 2 내지 4의 탄소들의 2가 기이고;

A 및 B 는, O^- 및 OM^K 로부터 선택되며; X 는 Cl, Br, 및 I 로 구성되는 군으로부터 선택되는 음이온이고; 그리고 첨자 ϵ 는 0, 1 또는 2 임]

명세서

기술분야

<1> 관련 출원들에 대한 상호참조사항

<2> 본 출원은 2006년 12월 11일자로 출원된 미국 예비 특허출원 제60/869,432호에 대한 우선권을 주장한다.

<3> 발명의 분야

<4> 본 발명은, 폭넓은 pH 범위에 걸쳐 가수분해에 대한 저항성을 나타내는 실란 조성물들(silane compositions)에 관한 것이다. 더욱 구체적으로는, 본 발명은, 약 2의 pH 내지 약 12의 pH 사이에서 가수분해에 대한 저항성을 갖는 그러한 가수분해-저항성 실란들에 관한 것이다.

배경기술

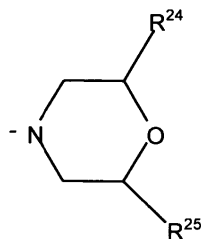
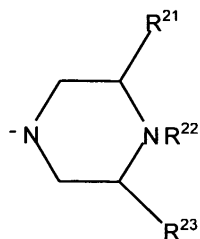
<5> 바람직한 변화를 가져오기 위하여 생물과 무생물 모두의 표면들에 액체 조성물들을 국부적으로 도포(application) 하는 것은 습윤(wetting), 스프레딩(spreading), 기포 형성(foaming), 세척력 등을 제어하는 과정들을 포함한다. 트리실록산-형 화합물들은, 활성 성분들을 처리되고 있는 표면으로 운반하는 것을 증진시키기 위해 수용액들에서 사용될 때, 바람직한 효과를 달성하기 위해 이러한 과정들의 제어를 가능하게 하는데 유용한 것으로 밝혀져 있다. 그러나, 트리실록산 화합물들은 다소 산성인 pH 6 내지 아주 약간 염기성인 pH 7.5까지의 좁은 pH 범위에서만 사용될 수 있다. 이러한 좁은 pH 범위 밖에서는, 트리실록산 화합물들이 가수분해에 대해 안정적이지 않아서 급속한 분해를 겪는다.

발명의 상세한 설명

<6> 발명의 요약

- <7> 본 발명은 하기 일반식을 갖는 하나의 계면활성제로서 유용한 실란 화합물 또는 그 조성물들을 제공하며:
- <8> $(R^1)(R^2)(R^3)Si-R^4-Si(R^5)(R^6)(R^7)$
- <9> 상기 식에서,
- <10> R^1, R^2, R^3, R^5 , 및 R^6 은, 1 내지 6의 1가 탄화수소 라디칼들, 아틸, 및 하나의 아틸 기를 포함하는 7 내지 10의 탄소들의 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되며;
- <11> R^4 는 1 내지 3의 탄소들의 탄화수소 기이다.
- <12> R^7 은 R^8-R^A , R^9-R^C , 및 $R^{10}-R^Z$ 이고;
- <13> R^8 은 $R^{11}(O)_t(R^{12})_u(O)_v-$,
- <14>
$$R^{13}-\underbrace{CHCH_2CH(OH)CH(O)-CH_2CH_2}_{\text{; 및}}$$
- <15> $R^{14}O(C_2H_4O)_a(C_3H_6O)_b(C_4H_8O)_c-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되며;
- <16> 위에서, R^{11} 및 R^{12} 는, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고; R^{13} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이며; R^{14} 는 각기 선택적으로 가지형일(branched) 수 있는, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 기이고; 첨자들 t, u 및 v 는 0 또는 1이다. 첨자들 a, b 및 c 는 0 또는 양수(positive)이며, 그리고 다음의 관계들을 충족시킨다:
- <17> $a \geq 1$ 이면서 $1 \leq a + b + c \leq 10$.
- <18> R^A 는, $-SO_3M^K$, $-C(=O)CH_2CH(R^{15})COO-M^K$; $-PO_3HM^K$; $-COOM^K$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{15} 는 H 또는 $-SO_3M^K$ 이고; M^K 는, Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , NH_4^+ , Li^+ , 및 2 내지 4의 탄소들의 모노(mono)-, 다이(di)- 및 트리알킬아민들 또는 2 내지 4의 탄소들의 모노-, 다이- 및 트리알카놀아민들로부터 유도되는 1가 암모늄 이온들로 구성되는 군으로부터 선택되는 양이온이다.
- <19> R^9 는, $R^{16}(O)_w(R^{17})_x-$ 및 $R^{18}O(C_2H_4O)_d(C_3H_6O)_e(C_4H_8O)_fCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼 이고; 여기서, R^{16} 및 R^{17} 은, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되며; R^{18} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이고; 첨자들 w 및 x 는 0 또는 1 이다. 첨자들 d, e 및 f 는 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시킨다:
- <20> $d \geq 1$ 이면서 $1 \leq d + e + f \leq 10$.

<21> R^c 는, $N(R^{19})(R^{20})$,



및



<22>

<23>로부터 선택되고,

<24> 위에서, R^{19} 및 R^{20} 은, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, $R^{26}N(R^{29})(R^{30})$, 및 $-R^{27}O(C_2H_4O)_g(C_3H_6O)_h(C_4H_8O)_iR^{28}$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다. 첨자들 g, h 및 i 는 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<25> $g \geq 1$ 이면서 $1 \leq g + h + i \leq 10$.

<26> R^{21} , R^{23} , R^{24} , R^{25} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택된다.

<27> R^{22} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 또는 $-R^{31}O(C_2H_4O)_j(C_3H_6O)_k(C_4H_8O)_lR^{32}$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 첨자들 j, k 및 l 은 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<28> $j \geq 1$ 이면서 $1 \leq j + k + l \leq 10$.

<29> R^{26} 은, 질소, 황, 산소 또는 그 조합들(combinations)을 포함하는 하나의 헤테로고리형 기(heterocyclic group)로 선택적으로 치환된, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼, 또는 $R^{33}O(C_2H_4O)_m(C_3H_6O)_n(C_4H_8O)_oR^{34}$ 이며; 첨자들 m, n 및 o 는, 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<30> $m \geq 1$ 이면서 $1 \leq m + n + o \leq 10$.

<31> R^{29} 및 R^{30} 은, H, 또는 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다.

<32> R^{27} , R^{31} 및 R^{33} 은, 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다.

<33> R^{28} 은, H, 1 내지 6의 탄소들의 1가 탄화수소 라디칼 및 $N(R^{40})(R^{41})$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이다.

<34> R^{32} 및 R^{34} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 $R^{37}N(R^{38})(R^{39})$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되며; 여기서, R^{37} 은, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼이다. R^{35} , R^{36} , R^{38} 및 R^{39} 는, H, 및 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼들로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다.

<35> R^{10} 은, $R^{40}(O)_y(R^{41})_z-$ 및 $R^{42}O(C_2H_4O)_p(C_3H_6O)_q(C_4H_8O)_rCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{40} 및 R^{41} 은, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고; R^{42} 는, 2 내지 4의 탄소

원자들의 2가 탄화수소 기이며; 첨자들 y 및 z 은 0 또는 1 이다. 첨자들 p, q 및 r 는 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<36> $p \geq 1$ 이면서 $1 \leq p + q + r \leq 10$.

<37> R^z 은, $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$, $-N-(R^{46})(R^{47})_\gamma R^{48} COO(M^K)_\delta$,

<38> $-N^+(R^{49})(R^{50})R^{51} OP(=O)(A)(B)$ 또는,

<39> $(-C(=O)N(R^{52})R^{53}N-(R^{54})(R^{55}))^+-(R^{56}OP(=O)(A)(B))(X^-)_\epsilon$ 이고;

<40> 여기서, R^{43} , R^{44} , R^{46} , R^{47} , R^{49} , R^{50} , R^{52} , R^{54} 및 R^{55} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 2 내지 4의 탄소들의 알카놀아민 기로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다. R^{45} 는 3 내지 4의 탄소들의 2가 기이고; 첨자들 α , β , γ 및 δ 는, $\alpha + \beta$ 는, 1 로 구성되는 군으로부터 선택되고, 그리고 $\gamma + \delta$ 는, 1 로 구성되는 군으로부터 선택되는 관계하에서, 0 또는 1 이다.

<41> R^{48} 및 R^{51} 은 독립적으로 1 내지 4의 탄소들의 2가 기이다.

<42> R^{53} 및 R^{56} 은 각기 독립적으로 2 내지 4의 탄소들의 2가 기이다.

<43> A 및 B 는, O⁻ 및 O^M로부터 선택되고; X 는 Cl, Br, 및 I 로 구성되는 음이온들의 군으로부터 선택되는 음이온이며; 그리고 첨자 ϵ 는 0, 1 또는 2 이다.

<44> 본 발명의 특히 유용한 구체예들은 화학종(species)에 대한 다음의 선택들로 예시된다: R^1 , R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 메틸이고; R^4 는 $-CH_2CH_2-$ 또는 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; R^{11} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; R^{12} 는 $-CH_2CH(OH)CH_2-$ 이며; R^{13} 은 $-CH_2CH_2-$ 이고; R^{14} 는 $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH(CH_3)CH_2CH_2-$, 또는 $-CH_2CH(CH_3)CH_2-$ 이며; a, b 및 c = 0 이고; t = 1, u = 1, v = 0 이고; R^{15} = H 이며; M^K 는 Na^+ , K^+ 또는 NH_4^+ 이고; R^{16} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; R^{17} 은 $-CH_2CH(OH)CH_2-$ 이고; R^{18} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; d, e, 및 f = 0 이고; w = 1 이며, x = 1 이고; R^{19} 및 R^{20} 은 H, 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필 또는 $-R^{27}O(C_2H_4O)_g(C_3H_6O)_h(C_4H_8O)_iR^{28}$ 이며; R^{27} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; g 는 1 - 5 이며, h 및 i = 0 이고; R^{27} 은 H 또는 메틸이며; R^{21} 및 R^{23} 은 H 이고; R^{22} = H, 메틸 또는 $-R^{31}O(C_2H_4O)_j(C_3H_6O)_k(C_4H_8O)_lR^{32}$ 이며; R^{31} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; j 는 1 - 5 이며, k 및 l = 0 이고; R^{32} 는 H 또는 메틸이며; R^{24} 및 R^{25} 는 H 이고; R^{40} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; R^{41} 은 $-CH_2CH(CH_3)CH_2-$ 이고;

<45> y 및 z = 1 이며; R^{42} 는 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; p 는 1 - 5 이며, q 및 r = 0 이고; R^{43} 및 R^{44} 는 H 또는 메틸이며; R^{45} 는 $-CH_2CH_2CH_2-$ 또는 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 이고; M^K = Na^+ , K^+ 또는 NH_4^+ 이며;

<46> R^{46} 및 R^{47} 은 H 또는 메틸이고; R^{48} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 또는 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 이며;

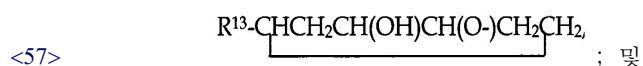
<47> R^{49} 및 R^{50} 은 H 또는 메틸이고; 그리고 R^{52} , R^{54} 및 R^{55} 는 H 또는 메틸이다.

실시예

<48> 발명의 상세한 설명

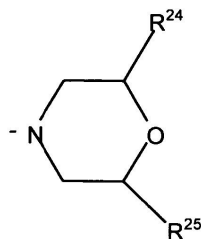
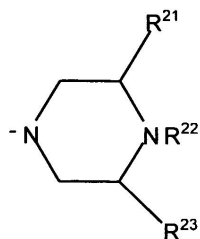
<49> 본 명세서에 사용된, 화학량론적 첨자들(stoichiometric subscripts)의 정수 값들은 분자 종들(molecular species)을 의미하며, 화학량론적 첨자들의 비-정수 값들은 분자량 평균 베이스, 수 평균 베이스(number average basis) 또는 몰 분율 베이스(mole fraction basis)에 근거한 분자 종들의 혼합물을 의미한다.

- <50> 본 발명은 하기 일반식을 갖는 하나의 계면활성제로서 유용한 실란 화합물 또는 그 조성물들을 제공하며:
- <51> $(R^1)(R^2)(R^3)Si-R^4-Si(R^5)(R^6)(R^7)$
- <52> 상기 식에서,
- <53> R^1, R^2, R^3, R^5 , 및 R^6 은, 1 내지 6의 1가 탄화수소 라디칼들, 아틸, 및 하나의 아틸 기를 포함하는 7 내지 10의 탄소들의 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고;
- <54> R^4 는 1 내지 3의 탄소들의 탄화수소 기이다.
- <55> R^7 은 R^8-R^A , R^9-R^C , 및 $R^{10}-R^Z$ 이고;
- <56> R^8 은 $R^{11}(O)_t(R^{12})_u(O)_v-$,



- <58> $R^{14}O(C_2H_4O)_a(C_3H_6O)_b(C_4H_8O)_c-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되며;
- <59> 위에서, R^{11} 및 R^{12} 는, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고; R^{13} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이며; R^{14} 는 각기 선택적으로 가지형일 수 있는, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 기이고; 첨자들 t, u 및 v 는 0 또는 1이다. 첨자들 a, b 및 c 는 0 또는 양수(positive)이며, 그리고 다음의 관계들을 충족시킨다:
- <60> $a \geq 1$ 이면서 $1 \leq a + b + c \leq 10$.
- <61> 위에서, R^A 는, $-SO_3M^K$, $-C(=O)CH_2CH(R^{15})COO-M^K$; $-PO_3HM^K$; $-COOM^K$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{15} 는 H 또는 $-SO_3M^K$ 이고; M^K 는, Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , NH_4^+ , Li^+ , 및 2 내지 4의 탄소들의 모노(mono)-, 다이(di)- 및 트리알킬아민들 또는 2 내지 4의 탄소들의 모노-, 다이- 및 트리알카놀아민들로부터 유도되는 1가 암모늄 이온들로 구성되는 군으로부터 선택되는 양이온이다.
- <62> R^9 는, $R^{16}(O)_w(R^{17})_x-$ 및 $R^{18}O(C_2H_4O)_d(C_3H_6O)_e(C_4H_8O)_fCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이고; 여기서, R^{16} 및 R^{17} 은, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되며; R^{18} 은 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이고; 첨자들 w 및 x 는 0 또는 1 이다.
- <63> 첨자들 d, e 및 f 는 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시킨다:
- <64> $d \geq 1$ 이면서 $1 \leq d + e + f \leq 10$.

<65> R^c 는, $N(R^{19})(R^{20})$,



및



<66>

<67>로부터 선택되고,

<68> 위에서, R^{19} 및 R^{20} 은, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, $R^{26}N(R^{29})(R^{30})$, 및 $-R^{27}O(C_2H_4O)_g(C_3H_6O)_h(C_4H_8O)_iR^{28}$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다. 첨자들 g, h 및 i 는 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<69> $g \geq 1$ 이면서 $1 \leq g + h + i \leq 10$.

<70> R^{21} , R^{23} , R^{24} , R^{25} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택된다.

<71> R^{22} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 또는 $-R^{31}O(C_2H_4O)_j(C_3H_6O)_k(C_4H_8O)_lR^{32}$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 첨자들 j, k 및 l 은 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<72> $j \geq 1$ 이면서 $1 \leq j + k + l \leq 10$.

<73> R^{26} 은, 질소, 황, 산소 또는 그 조합들을 포함하는 하나의 헤테로고리형 기로 선택적으로 치환된, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼, 또는 $R^{33}O(C_2H_4O)_m(C_3H_6O)_n(C_4H_8O)_oR^{34}$ 이며; 첨자들 m, n 및 o 는, 0 또는 양수이고, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<74> $m \geq 1$ 이면서 $1 \leq m + n + o \leq 10$.

<75> R^{29} 및 R^{30} 은, H, 또는 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다.

<76> R^{27} , R^{31} 및 R^{33} 은, 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다.

<77> R^{28} 은, H, 1 내지 6의 탄소들의 1가 탄화수소 라디칼 및 $N(R^{40})(R^{41})$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이다.

<78> R^{32} 및 R^{34} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 $R^{37}N(R^{38})(R^{39})$ 로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택되며; 여기서, R^{37} 은, 1 내지 6의 탄소들의 2가 탄화수소 라디칼이다.

<79> R^{35} , R^{36} , R^{38} 및 R^{39} 는, H, 및 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼들로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다.

<80> R^{10} 은, $R^{40}(O)_y(R^{41})_z-$ 및 $R^{42}O(C_2H_4O)_p(C_3H_6O)_q(C_4H_8O)_rCH_2CH(OH)CH_2-$ 로 구성되는 군으로부터 선택되는 1가 라디칼이며; 여기서, R^{40} 및 R^{41} 은, 각기 하나 또는 그보다 많은 OH 라디칼들로 선택적으로 치환될 수 있는, 1 내지 4

의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기로 구성되는 군으로부터 각기 독립적으로 선택되고; R^{42} 는, 2 내지 4의 탄소 원자들의 2가 탄화수소 기이며; 첨자들 y 및 z 은 0 또는 1 이다. 첨자들 p , q 및 r 는 0 또는 양수이며, 다음의 관계들을 충족시킨다:

<81> $p \geq 1$ 이면서 $1 \leq p + q + r \leq 10$.

<82> R^z 은, $-N-(R^{43})(R^{44})_a R^{45} SO_3(M^K)_\beta$, $-N-(R^{46})(R^{47})_y R^{48} COO(M^K)_\delta$,

<83> $-N^+(R^{49})(R^{50})R^{51} OP(=O)(A)(B)$ 또는,

<84> $(-C(=O)N(R^{52})R^{53} N-(R^{54})(R^{55}))^+-(R^{56} OP(=O)(A)(B))(X^-)_\epsilon$ 이고;

<85> 여기서, R^{43} , R^{44} , R^{46} , R^{47} , R^{49} , R^{50} , R^{52} , R^{54} 및 R^{55} 는, H, 1 내지 4의 탄소들의 가지형 또는 선형 1가 탄화수소 라디칼, 및 2 내지 4의 탄소들의 알카놀아민 기로 구성되는 군으로부터 독립적으로 선택된다. R^{45} 는 3 내지 4의 탄소들의 2가 기이고; 첨자들 α , β , γ 및 δ 는, $\alpha + \beta$ 는, 1 로 구성되는 군으로부터 선택되고, 그리고 $\gamma + \delta$ 는, 1 로 구성되는 군으로부터 선택되는 관계하에서, 0 또는 1 이다.

<86> R^{48} 및 R^{51} 은 독립적으로 1 내지 4의 탄소들의 2가 기이다.

<87> R^{53} 및 R^{56} 은 각기 독립적으로 2 내지 4의 탄소들의 2가 기이다.

<88> A 및 B 는, O^- 및 OM^K 로부터 선택되고; X 는 Cl, Br, 및 I 로 구성되는 음이온들의 군으로부터 선택되는 음이온이며; 그리고 첨자 ϵ 는 0, 1 또는 2 이다.

<89> 본 발명의 특히 유용한 구체예들은 화학종에 대한 다음의 선택들로 예시된다: R^1 , R^2 , R^3 , R^5 및 R^6 은 메틸이고; R^4 는 $-CH_2CH_2-$ 또는 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; R^{11} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; R^{12} 는 $-CH_2CH(OH)CH_2-$ 이며; R^{13} 은 $-CH_2CH_2-$ 이고; R^{14} 는 $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH(CH_3)CH_2CH_2-$, 또는 $-CH_2CH(CH_3)CH_2-$ 이며; a , b 및 $c = 0$ 이고; $t = 1$, $u = 1$, $v = 0$ 이며; $R^{15} = H$ 이고; M^K 는 Na^+ , K^+ 또는 NH_4^+ 이며; R^{16} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; R^{17} 은 $-CH_2CH(OH)CH_2-$ 이며; R^{18} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; d , e , 및 $f = 0$ 이며; $w = 1$ 이고, $x = 1$ 이며; R^{19} 및 R^{20} 은 H, 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필 또는 $-R^{27}O(C_2H_4O)_g(C_3H_6O)_h(C_4H_8O)_iR^{28}$ 이고; R^{27} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; g 는 1 - 5 이고, h 및 $i = 0$ 이며; R^{27} 은 H 또는 메틸이고; R^{21} 및 R^{23} 은 H 이며; $R^{22} = H$, 메틸 또는 $-R^{31}O(C_2H_4O)_j(C_3H_6O)_k(C_4H_8O)_lR^{32}$ 이고; R^{31} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; j 는 1 - 5 이고, k 및 $l = 0$ 이며; R^{32} 는 H 또는 메틸이고; R^{24} 및 R^{25} 는 H 이며; R^{40} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이고; R^{41} 은 $-CH_2CH(CH_3)CH_2-$ 이며;

<90> y 및 $z = 1$ 이고; R^{42} 는 $-CH_2CH_2CH_2-$ 이며; p 는 1 - 5 이고, q 및 $r = 0$ 이며; R^{43} 및 R^{44} 는 H 또는 메틸이고; R^{45} 는 $-CH_2CH_2CH_2-$ 또는 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 이며; $M^K = Na^+$, K^+ 또는 NH_4^+ 이고;

<91> R^{46} 및 R^{47} 은 H 또는 메틸이며; R^{48} 은 $-CH_2CH_2CH_2-$ 또는 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 이고;

<92> R^{49} 및 R^{50} 은 H 또는 메틸이며; 그리고 R^{52} , R^{54} 및 R^{55} 는 H 또는 메틸이다.

<93> 본 발명의 조성물을 제조하는 하나의 방법은, 다음 식의 하나의 분자를:

<94> $(R^1)(R^2)(R^3)Si-R^4-Si(R^5)(R^6)(R^7)$

<95> [상기 식에서, R^7 는 H 이고, 상기 식의 정의들과 관계들은 뒤에 정의되며, 위에 정의된 것들과 일치함]

<96> 하이드로실릴화 조건들(hydrosilylation conditions) 하에, 알릴 글리시딜 에테르 또는 비닐 사이클로헥센 옥사

이드(이들은 본 명세서에 구체적인 예로서 포함되며, 다른 가능한 올레핀적으로 변성된 에폭시 성분들을 한정하기 위해 기술된 것이 아님)와 같은 올레핀적으로 변성된(olefinically modified) 에폭시-포함 모이어티(moiety)와 반응시키는 것이며, 하나의 아민-포함 기와의 다음 반응이 뒤따른다.

<97> 에폭시-변성 카르보실란들은, 본 발명의 카르보실란의 하이드라이드 (SiH) 중간생성물(intermediate)에 올레핀적으로 변성된 (즉, 비닐, 알릴 또는 메탈릴) 에폭시 기를 그래프트하기(graft) 위해 하이드로실릴화 반응을 사용하여 직접적으로(straightforwardly) 제조된다.

<98> 에폭시-치환(substituted) 실란들을 제조하기에 적합한 귀금속 촉매들이 또한 이 분야에 잘 알려져 있으며, 로듐, 루테튬, 팔라듐, 오스뮴, 이리듐 및/또는 백금의 착물들(complexes)을 포함하여 구성된다. 이러한 SiH-올레핀 첨가 반응을 위한 여러 유형의 백금 촉매들이 공지되어 있으며, 그러한 백금 촉매들이 본 발명의 조성물들을 만들기 위해 사용될 수 있다. 백금 화합물은, 본 명세서의 참고문헌을 이루는 미국 특허 제3,159,601호에 기술되어 있는, 식 $(PtCl_2Olefin)$ 및 $H(PtCl_3Olefin)$ 을 갖는 것들로부터 선택될 수 있다. 다른 백금 함유 물질들은, 본 명세서의 참고문헌을 이루는 미국 특허 제3,220,972호에 기술된 알코올들, 에테르들, 알데하이드들 및 그 혼합물들로 구성되는 부류(class)로부터 선택된 하나의 멤버(member)를 백금 1 그램당 2 몰까지 갖는, 염화백금산(chloroplatinic acid)의 착물일 수 있다. 본 발명에 유용한 또 다른 군의 백금 함유 물질들은, 미국 특허 제3,715,334호; 제3,775,452호 및 제3,814,730호 (Karstedt)에 기술되어 있다. 이 기술분야에 관한 부가적인 배경은 J.L. Spier의, "Homogeneous Catalysis of Hydrosilation by Transition Metals" [Advances in Organometallic Chemistry, volume 17, 407 내지 447 페이지, F.G.A. Stone 및 R. West editors, "Academic Press" 출판 (뉴욕, 1979년)]에서 찾을 수 있다. 이 분야의 통상의 지식을 가진 자들은 백금 촉매의 유효량(effective amount)을 쉽게 결정할 수 있다. 일반적으로 유효량은 전체 실란 조성물의 약 0.1 내지 50 ppm(parts per million)의 범위내에 있다.

<99> **본 발명의 조성물들을 위한 용도들:**

<100> A. 농약 - 농업, 원예, 잔디, 관상식물 및 산림

<101> 수많은 농약 용도들이 잎 표면들에 습윤(wetting) 및 스프레딩(spreading)을 제공하기 위해 스프레이 혼합물에 보조제를 첨가할 것을 필요로 한다. 종종 보조제는 계면활성제이며, 이 계면활성제는 젖게 하기 어려운 잎 표면들에 스프레이 방울 보존성을 증가시키는 것과 같은 다양한 기능들을 수행할 수 있고, 스프레이 커버범위(coverage)를 개선시키기 위해 또는 제조제를 식물 표피로 침투시키기 위해 스프레딩을 강화할 수 있다. 이러한 보조제들은 탱크-사이드(tank-side) 첨가제로서 제공되거나, 농약 포물레이션들(pesticide formulations)의 하나의 성분으로서 사용된다.

<102> 농약들을 위한 일반적인 용도들은, 농업, 원예, 잔디, 관상식물, 가정 및 정원, 수의학 및 산림 용도들을 포함한다.

<103> 본 발명의 농약 조성물들은 적어도 하나의 농약을 또한 포함하는데, 여기서 본 발명의 실란은, 0.005%와 2% 사이에서 최종 사용 농도로 만들기엔 충분한 양으로, 하나의 농축물로서 또는 탱크 믹스(tank mix)에서 희석된 상태로, 존재한다. 선택적으로 농약 조성물은 부형제들, 보조계면활성제들(cosurfactants), 용제들, 발포제어제들, 용착 촉진제들(deposition aids), 흐름 억제제들(drift retardants), 생물학적 약제들, 미량영양소들, 비료들 및 그 동등물을 포함할 수 있다. "농약"이라는 용어는, 해충 구제를 위해 사용되는 화합물, 예컨대, 귀약들, 살충제들, 진드기 구제제들(miticides), 살균제들, 및 제조제들을 의미한다. 사용될 수 있는 농약들의 실례가 되는 예들은, 성장 조절제들, 광합성 저해제들, 색소 저해제들, 유사분열 장애물질들(mitotic disrupters), 지방질 생합성 저해제들, 세포벽 저해제들, 및 세포막 파괴제들(cell membrane disrupters)을 포함하되 이에 한정되지 않는다. 본 발명의 조성물들에 사용되는 농약의 양은 사용된 농약의 유형에 따라 달라진다. 본 발명의 조성물들과 함께 사용될 수 있는 농약 화합물들의 더 구체적인 예들은, 제조제들 및 성장 조절제들, 예컨대, 페녹시 아세트산들, 페녹시 프로피온산들, 페녹시 부티르산들(butyric acids), 벤조산들, 트리아진들 및 s-트리아진들, 치환된 우레아들, 우라실들, 벤타존, 테스메디팜, 메타졸, 펜메디팜, 피리데이트, 아미트룰, 클로마존, 플루리돈, 노르플루라존, 다이니트로아닐린들, 이소프로팔린, 오리잘린, 펜다이메탈린, 프로디아아민, 트리플루랄린, 글리포세이트, 설폰일우레아들, 이미다졸리논들, 클레소딤(clethodim), 다이클로포프(diclofop)-메틸, 페녹사프로프-에틸, 플루아지포프-p-부틸, 할록시포프-메틸, 퀴잘로포프, 세톡시딤, 다이클로베닐, 이속사벤 및 바이피리딜리움 화합물들이나, 이에 한정되지 않는다.

<104> 본 발명과 함께 사용될 수 있는 살균제 조성물들은, 알디모프, 트리데모프, 도데모프, 다이메토모프; 플루실라

졸, 아자코나졸, 사이프로코나졸, 에폭시코나졸, 퍼코나졸(furconazole), 프로피코나졸, 테부코나졸 및 그 동등물; 이마잘릴, 티오파네이트, 베노밀 카벤다짐, 클로로티알로닐, 다이클로란, 트리플옥시스트로빈, 플루옥시스트로빈, 다임옥시스트로빈(dimoxystrobin), 아족시스트로빈, 퍼카라닐, 프로클로라즈, 플루셀파미드, 파목사돈, 캡탄, 마네브, 만코제브, 도디신, 도딘, 및 메탈락실을 포함하되 이에 한정되지 않는다.

<105> 본 발명의 조성물과 함께 사용될 수 있는 살충제, 살유충제, 진드기 살충제 및 살란제(ovacide) 화합물들은, 바실러스 투린지엔시스, 스피노사드, 아바멕틴, 도라멕틴, 레피멕틴, 피레트린스, 카바릴, 프리미카브, 알디카브, 메토밀, 아미트라즈, 봉산, 클로르다이메포름, 노발루론, 비스트리플루론, 트리플루루론, 다이플루루벤주론, 이미다클로프리드, 다이아지논, 아세페이트, 엔도설판, 켈레반, 다이메토에이트, 아진포스-에틸, 아진포스-메틸, 이족사티온(izoxathion), 클로르피리포스, 클로펜테진, 람다-사이할로트린, 퍼메트린, 비펜트린, 사이피메트린 및 그 동등물을 포함하되 이에 한정되지 않는다.

<106> 농약은 액체 또는 고체일 수 있다. 만약, 고체라면, 도포에 앞서 용제, 또는 본 발명의 실란에 용해될 수 있는 것이 바람직하며, 실란이 그러한 용해성을 위한 용제, 또는 계면활성제의 역할을 할 수 있거나 부가적인 계면활성제들이 이 기능을 수행할 수 있다.

<107> 농업 부형제들:

<108> 이 분야에서 공지된 완충제들, 방부제들 및 다른 표준 부형제들이 또한 이 조성물에 포함될 수 있다.

<109> 용제들이 또한 본 발명의 조성물들에 포함될 수 있다. 이러한 용제들은 실온에서 액체 상태이다. 그 예들은, 물, 알코올들, 방향족 용제들, 오일들 (즉, 미네럴 오일, 식물성유, 실리콘 오일 등), 식물성유들의 하급(lower) 알킬 에스테르들, 지방산들, 케톤들, 글리콜들, 폴리에틸렌 글리콜들, 다이올들, 파라피닉스(paraffinics) 등을 포함한다. 구체적인 용제들은, 2,2,4-트리메틸, 1-3-펜탄 다이올 및 그 알콕실화 (특히, 에톡실화) 버전들 [본 명세서의 참고문헌을 이루는 미국 특허 제5,674,832호에 설명되어 있음], 또는 N-메틸-피릴리돈일 것이다.

<110> 보조계면활성제들:

<111> 또한, 미국 특허 제5,558,806호에 기술되어 있는 슈퍼스프레딩을 방해하지 않는 짧은 사슬 소수성물질들(hydrophobes)을 가지는, 다른 보조계면활성제들이 본 발명에 참고로 포함된다.

<112> 본 발명에 유용한 보조계면활성제들은, 비이온성, 양이온성, 음이온성, 양쪽성(amphoteric), 양성이온성(zwitterionic), 폴리머 계면활성제들, 또는 그들의 여하한 혼합물을 포함한다.

<113> 계면활성제들은, 탄화수소 베이스, 실리콘 베이스 또는 플루오로카본(fluorocarbon) 베이스인 것이 일반적이다.

<114> 유용한 계면활성제들은, 알콕실레이트들, 특히, 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드, 부틸렌 옥사이드, 및 그 혼합물들의 코폴리머들을 포함하는 블록 코폴리머들(block copolymers)을 함유하는 에톡실레이트들; 알킬아릴알콕실레이트들, 특히, 알킬 페놀 에톡실레이트를 포함하는 에톡실레이트들 또는 프로폭실레이트들 및 그들의 유도체들; 아릴아릴알콕실레이트들, 특히, 에톡실레이트들 또는 프로폭실레이트들, 및 그들의 유도체들; 아민 알콕실레이트들, 특히, 아민 에톡실레이트들; 지방산 알콕실레이트들; 지방성(fatty) 알코올 알콕실레이트들; 알킬 설포네이트들; 알킬 벤젠 및 알킬 나프탈렌 설포네이트들; 황산화 지방성 알코올들(sulfated fatty alcohols), 아민들 또는 산 아마이드들; 소듐 이세티오네이트의 산 에스테르들; 소듐 설포숙시네이트(sodium sulfosuccinate)의 에스테르들; 황산화 또는 술폰화 지방산 에스테르들; 석유 설포네이트들; N-아실 사르코시네이트들; 알킬 폴리글리코사이드들; 알킬 에톡실화(ethoxylated) 아민들; 등을 포함한다.

<115> 구체적인 예들은, 알킬 아세틸렌(acetylenic) 다이올들 (SURFONYL-Air Products), 피릴로돈 베이스 계면활성제들 (예를 들어, SURFADONE-LP 100-ISP), 2-에틸 헥실 설페이트, 이소데실 알코올 에톡실레이트들 (예를 들어, RHODASURF DA 530-Rhodia), 에틸렌 다이아민 알콕실레이트들 (TETRONICS-BASF), 및 에틸렌 옥사이드/프로필렌 옥사이드 코폴리머들 (PLURONICS - BASF) 및 제미니 형(Gemini type) 계면활성제들(Rhodia)을 포함한다.

<116> 바람직한 계면활성제들은 에틸렌 옥사이드/프로필렌 옥사이드 코폴리머들 (EO/PO); 아민 에톡실레이트들; 알킬 폴리글리코사이드들; 옥소-트리데실 알코올 에톡실레이트들 등을 포함한다.

<117> 바람직한 구체예에서, 본 발명의 화학농약(agrochemical) 조성물은, 하나 또는 그보다 많은 화학농약 성분들을 더 포함하여 구성된다. 적합한 화학농약 성분들은 제초제들, 살충제들, 성장 조절제들, 살균제들, 진드기 구제제들, 진드기 살충제들, 비료들, 생물학적 약제들, 식물 영양물들(plant nutritionals), 미량영양소들, 살생물

제들, 파라피닉 미네랄 오일, 메틸화 시드 오일들(metylated seed oils) [즉, 메틸소이에이트 또는 메틸카놀레 이트], 식물성유들 (예컨대, 소이빈 오일 및 카놀라 오일), 물 컨디셔닝제들(water conditioning agents), 예컨대, Choice[®] (Loveland Industries, Greeley, CO) 및 Quest (Helena Chemical, Collierville, TN), 변성 클레이들, 예컨대, Surround[®] (Englehard Corp.), 발포제어제들, 계면활성제들, 습윤제들, 분산제들, 유화제들, 용착 촉진제들(deposition aids), 안티드리프트(antidrift) 성분들, 및 물을 포함하나 이에 한정되지 않는다.

<118> 적합한 화학농약 조성물들은, 하나 또는 그보다 많은 상기 성분들을 본 발명의 실란과, 탱크-믹스로서 또는 "인-캔(in-can)" 포물레이션으로서, 혼합하는 것과 같은, 이 분야에 공지된 방식으로 결합함(combining)으로써 만들어진다. "탱크-믹스"라는 용어는, 사용하는 순간에, 물 또는 오일과 같은 스프레이 매질(spray medium)에 적어도 하나의 화학농약을 첨가하는 것을 의미한다. "인-캔"이라는 용어는 적어도 하나의 화학농약 성분을 함유하는 포물레이션 또는 농축물(concentrate)을 의미한다. "인-캔" 포물레이션은, 그 다음에, 사용하는 순간에, 일반적으로 탱크-믹스에서, 사용 농도로 희석될 수 있거나 희석되지 않은 상태로 사용될 수 있다.

<119> 본 발명의 실란 조성물들은, 농업 에멀전들(agricultural emulsions)에 사용될 수 있다. 여러 유형들의 에멀전들이 다양한 퍼스널 케어(personal care) 조성물들로서 다음에 설명되어 있다.

<120> B. 코팅들

<121> 일반적으로 코팅 포물레이션들은 유상화, 성분들의 상용화(compatibilization), 평평화(leveling), 흐름(flow), 및 표면 결함 감소의 목적을 위해 습윤제 또는 계면활성제를 필요로 할 것이다. 또한, 이러한 첨가제들은, 경화되거나 건조된 필름에, 개선된 내마모성, 블로킹 방지성(antiblocking), 친수성, 및 소수성 특성들과 같은 개선들을 제공할 수 있다. 코팅 포물레이션들은 용제형(solvent-borne) 코팅들, 수용성(water-borne) 코팅들 및 분말 코팅들로서 존재할 수 있다.

<122> 코팅 성분들은 건축 코팅들, 자동차 코팅들 및 코일 코팅들과 같은 OEM 제품 코팅들, 산업적 보존 코팅들과 같은 특수 목적 코팅들 및 선박 코팅들로서 사용될 수 있다. 코팅 기재들(substrates)을 위한 전형적인 합성 수지 유형들은 폴리에스테르들, 폴리우레탄들, 폴리카보네이트들, 아크릴릭스(acrylics) 및 에폭시들을 포함한다.

<123> C. 퍼스널 케어(personal care)

<124> 하나의 바람직한 구체예에서, 본 발명의 실란은, 퍼스널 케어 조성물의 100 pbw(중량부: parts by weight) 당, 0.1 내지 99 pbw, 더욱 바람직하게는 0.5 pbw 내지 30 pbw, 그리고 더욱 더 바람직하게는 1 내지 15 pbw의 실란과, 1 pbw 내지 99.9 pbw, 더욱 바람직하게는 70 pbw 내지 99.5 pbw, 그리고 더욱 더 바람직하게는 85 pbw 내지 99 pbw의 퍼스널 케어 조성물을 포함하여 구성된다.

<125> 본 발명의 실란 조성물들은 퍼스널 케어 에멀전들, 예컨대, 로션들과 크림들에 사용될 수 있다. 일반적으로 공지된 바와 같이, 에멀전들은 적어도 두 개의 혼합되지 않는 상들(phases)을 포함하여 구성되는데, 그 중의 하나는 연속성(continuous)이며 다른 하나는 불연속성이다. 또한, 에멀전들은 다양한 점성도들을 갖는 액체들 또는 고체들일 수 있다. 또한, 에멀전들의 입자 크기는, 그들을 마이크로에멀전들(microemulsions)이 되게 할 수 있으며, 입자 크기들이 충분히 작을 때, 마이크로에멀전들은 투명할 수 있다. 또한, 에멀전들의 에멀전들을 제조하는 것이 또한 가능하며, 이들은 일반적으로 복합(multiple) 에멀전들로 알려져 있다. 이러한 에멀전들은:

<126> 1) 불연속성 상이 물을 포함하여 구성되고, 연속성 상이 본 발명의 실란을 포함하여 구성되는, 수용성 에멀전들;

<127> 2) 불연속성 상이 본 발명의 실란을 포함하여 구성되고, 연속성 상이 물을 포함하여 구성되는, 수용성 에멀전들;

<128> 3) 불연속성 상이 비-수용성 수산기 용제(non-aqueous hydroxylic solvent)를 포함하여 구성되고, 연속성 상이 본 발명의 실란을 포함하여 구성되는, 비-수용성 에멀전들; 그리고

<129> 4) 불연속성 상이 본 발명의 실란을 포함하여 구성되고, 연속성 상이 비-수용성 수산기 유기 용제를 포함하여 구성되는, 비-수용성 에멀전들;일 수 있다.

<130> 하나의 실리콘 상을 포함하여 구성되는 비-수용성 에멀전들은, 그 공개물들이 명확히 본 명세서의 참고문헌을 이루는, 미국 특허 제6,060,546호 및 미국 특허 제6,271,295호에 기술되어 있다.

<131> 본 명세서에 사용된 "비-수용성 수산기 유기 화합물"이라는 용어는, 실온, 예를 들어, 약 25℃, 그리고 약 1 기

압에서 액체인, 알코올들, 글리콜들, 폴리하이드릭 알코올들(polyhydric alcohols) 및 폴리머 글리콜들 및 그 혼합물들을 예로 들 수 있는, 수산기(hydroxyl)-포함 유기 화합물들을 의미한다. 비-수용성 유기 수산기 용제들은, 실온, 예를 들어, 약 25°C, 그리고 약 1 기압에서 액체인, 알코올들, 글리콜들, 폴리하이드릭 알코올들 및 폴리머 글리콜들 및 그 혼합물들을 포함하여 구성되는 수산기-포함 유기 화합물들로 구성되는 군으로부터 선택된다. 비-수용성 수산기 유기 용제는, 에틸렌 글리콜, 에탄올, 프로필 알코올, 이소-프로필 알코올, 프로필렌 글리콜, 다이프로필렌 글리콜, 트리프로필렌 글리콜, 부틸렌 글리콜, 이소-부틸렌 글리콜, 메틸 프로판 다이올, 글리세린, 소르비톨, 폴리에틸렌 글리콜, 폴리프로필렌 글리콜 모노 알킬 에테르들, 폴리옥시알킬렌 코폴리머들 및 그 혼합물들로 구성되는 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

<132> 실리콘 유일 상(silicone only phase), 실리콘 상을 포함하여 구성되는 무수 혼합물, 실리콘 상을 포함하여 구성되는 함수 혼합물, 물-인-오일(water-in-oil) 에멀전, 오일-인-물 에멀전, 또는 두 개의 비-수용성 에멀전들이나 그 변형들(variations)의 어느 하나로부터 일단 원하는 형태가 달성되면, 그 결과로 얻은 물질은 대개 개선된 용착(deposition) 특성들과 우수한 촉감(feel) 특성들을 갖는 크림 또는 로손이다. 그것은 헤어 케어, 스킨 케어, 땀 억제제들, 자외선차단제들, 화장품들, 색조 화장품들, 방충제들(insect repellants), 비타민 및 호르몬 캐리어들, 방향제 캐리어들(fragrance carrier) 및 그 동등물을 위한 포물레이션들로 블렌딩될(blended) 수 있다.

<133> 본 발명의 실란 그리고 그로부터 유도된 본 발명의 실리콘 조성물들이 사용될 수 있는 퍼스널 케어 용도들은, 방취제들, 땀 억제제들, 땀 억제제/방취제들, 면도 제품들(shaving products), 스킨 로손들, 모이스처라이저들(moisturizers), 토너들, 목욕 제품들, 클렌징 제품들, 헤어 케어 제품들, 예컨대, 샴푸들, 컨디셔너들, 무스들, 스타일링 젤들, 헤어 스프레이들, 헤어 염색제들, 헤어 컬러 제품들, 헤어 탈색제들(hair bleaches), 웨이빙(waving) 제품들, 헤어 스트레이트너들(hair straighteners), 매니큐어 제품들, 예컨대, 네일 광택제, 네일 광택 제거제, 네일 크림들 및 로손들, 큐티클 소프트너들(cuticle softeners), 보호 크림들, 예컨대, 자외선차단제, 방충제 및 항노화 제품들, 색조 화장품들, 예컨대, 립스틱들, 파운데이션들, 웨이스 파우더들, 아이 라이너들, 아이 섀도우들, 블러쉬들, 메이크업, 마스크라들, 그리고 실리콘 성분들이 일반적으로 첨가되는 다른 퍼스널 케어 포물레이션들을, 피부에 도포될 의약 조성물들의 국부적 도포를 위한 약물 전달 시스템들(drug delivery systems)과 함께 포함하되 이에 한정되지 않는다.

<134> 바람직한 구체예에서, 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 하나 또는 그보다 많은 퍼스널 케어 성분들을 더 포함하여 구성된다.

<135> 적합한 퍼스널 케어 성분들은, 예를 들어, 연화제들, 모이스처라이저들, 보습제들(humectants), 예를 들어, 비스무스 옥시클로라이드 및 티타늄 다이옥사이드 코팅 운모와 같은 진주광택(pearlescent) 안료들을 포함하는 안료들, 착색제들, 방향제들, 살생물제들, 방부제들, 산화방지제들, 향균제들, 향진균제들, 땀 억제제들, 엑스폴리언트들(exfoliants), 호르몬들, 효소들, 의약 화합물들, 비타민들, 염들, 전해물들, 알코올들, 폴리올들, 자외선 복사를 위한 흡수제들(absorbing agents for ultraviolet radiation), 식물성 추출물들, 계면활성제들, 실리콘 오일들, 유기 오일들, 왁스들, 필름 형성제들(film formers), 예를 들어, 폼드 실리카 또는 함수 실리카와 같은 농화제들(thickening agents), 예를 들어, 활석, 카올린, 전분, 변성 전분, 운모와 같은 미립자 필러들, 나일론, 예를 들어, 벤토나이트 및 유기-변성 클레이들과 같은 클레이들을 포함한다.

<136> 적합한 퍼스널 케어 조성물들은, 예를 들어, 하나 또는 그보다 많은 상기 성분들을 실란과, 혼합하는 것과 같은, 이 분야에 공지되어 있는 방식으로, 결합시킴으로써 만들어진다. 적합한 퍼스널 케어 조성물들은, 하나의 단일 상의 형태일 수 있거나, 오일-인-물, 물-인-오일을 포함하는 에멀전, 그리고 무수(anhydrous) 에멀전들의 형태일 수 있으며, 여기서, 실리콘 상(phase)은 예를 들어, 오일-인 물-인-오일 에멀전들(oil-in water-in-oil emulsions)과 물-인-오일-인 물-에멀전들(water-in-oil-in water-emulsions)과 같은 복합 에멀전들 뿐 아니라 불연속성 상 또는 연속성 상의 어느 하나일 수 있다.

<137> 하나의 유용한 구체예에서, 땀 억제제 조성물은 본 발명의 실란과 하나 또는 그보다 많은 활성 땀 억제제들을 포함하여 구성된다. 적합한 땀 억제제들은, 예를 들어, 인체에 처방전 없이 사용하기 위한(for over-the-counter human use) 땀 억제제 약물 제품들에 관한 미국 식약청(Food and Drug Administration)의 1993년 10월 10일자 모노그래프(Monograph)에 열거되어 있는 카테고리 I 활성 땀 억제제 성분들을 포함하는데, 예를 들면, 알루미늄 할라이드들, 알루미늄 하이드록시할라이드들, 예컨대, 알루미늄 클로로하이드레이트; 그리고 지르코늄 옥시할라이드들 및 지르코늄 하이드록시할라이드들과의 그 착물들 또는 그 혼합물들, 예컨대, 알루미늄-지르코늄 클로로하이드레이트, 알루미늄 지르코늄 글리신 착물들, 예컨대, 알루미늄 지르코늄 테트라클로로하이드렉스 글리

(gly)와 같은 것들이다.

<138> 다른 유용한 구체예에서, 스킨 케어 조성물은, 실란, 및 하나의 운반수단(vehicle), 예컨대, 실리콘 오일 또는 유기 오일을 포함하여 구성된다. 스킨 케어 조성물은, 선택적으로, 연화제들, 예컨대, 트리글리세라이드 에스테르들, 왁스 에스테르들, 지방산들의 알킬 또는 알케닐 에스테르들 또는 폴리하이드릭 알코올 에스테르들 그리고 스킨 케어 조성물들에 일반적으로 사용되는 하나 또는 그보다 많은 공지된 성분들, 예컨대, 안료들; 비타민 A, 비타민 C 및 비타민 E와 같은 비타민들; 자외선차단제 또는 선블록 화합물들, 예컨대, 티타늄 다이옥사이드, 산화아연, 옥시벤존, 옥틸메톡시 신나메이트, 부틸메톡시 다이벤조일름(dibenzoylm) 에탄, p-아미노벤조산 및 옥틸 다이메틸-p-아미노벤조산과 같은 것들을 더 포함할 수 있다.

<139> 다른 유용한 구체예에서, 예를 들어, 립스틱, 메이크업과 같은 색조 화장품 조성물, 또는 마스크라 조성물은, 실란, 및 착색제, 예컨대, 안료, 수용성 염료 또는 지용성 염료를 포함하여 구성된다.

<140> 다른 유용한 구체예에서, 본 발명의 조성물들은 방향 물질들과 함께 사용된다. 이러한 방향 물질들은, 방향 화합물들, 캡슐화된(encapsulated) 방향 화합물들일 수 있거나, 또는 순수(neat) 화합물들이거나 캡슐화된, 방향 방출(fragrance releasing) 화합물들일 수 있다. 본 발명의 조성물들과 특히 상용가능한(compatible) 것들은, 그 전체가 명확히 본 명세서의 참고문헌을 이루는, 미국 특허 제6,046,156호; 제6,054,547호; 제6,075,111호; 제6,077,923호; 제6,083,901호; 및 제6,153,578호에 개시되어 있는, 방향-방출 규소-함유 화합물들이다.

<141> 본 발명의 조성물들의 용도들은, 퍼스널 케어 조성물들에 한정되지 않으며, 본 발명의 조성물들로 처리된 왁스들, 광택제들 및 직물들과 같은 다른 제품들이 또한 고려된다.

<142> D. 홈 케어(Home Care)

<143> 본 발명의 실란 조성물들은, 세탁 세제 및 섬유 유연제, 주방세제들(dishwashing liquids), 목재 및 가구 광택제, 마루 광택제, 욕조 및 타일 클리너들, 변기 클리너들, 경표면(hard surface) 클리너들, 윈도우 클리너들, 김서림 방지제들, 배수구 클리너들, 자동-식기 세척제들 및 쉬팅제들(sheeting agents), 카펫트 클리너들, 애벌 빨래 스팟터들(prewash spotters), 녹 클리너들 및 스케일 제거제들을 포함하는 홈 케어 용도들에 유용하다.

<144> E. 오일 및 가스

<145> 본 발명의 실란 조성물들은, 탈유화(demulsification)를 포함하는 오일 및 가스 처리 용도들에 유용하다.

<146> F. 수 처리(Water Treatment)

<147> 본 발명의 실란을 포함하여 구성되는 조성물들은, 상업용 및 산업용 개방 순환 냉각수 탑들(open recirculating cooling water towers), 폐쇄 냉각수 시스템들, 냉각수 도관들, 열 교환기들, 콘덴서들(condensers), 관류형(once-through) 냉각 시스템들, 저온살균기들(Pasteurizers), 공기 세정기들(air washers), 열 교환 시스템들, 에어 컨디셔닝 / 가습기들 / 제습기들(dehumidifiers), 수압식 살균기들(hydrostatic cookers), 안전 및/또는 소방수 보호 저장 시스템들(safety and/or fire water protection storage systems), 습식 세정장치들(water scrubbers), 처리정들(disposal wells), 여과와 정화제들을 포함하는 유입수 시스템들, 폐수 처리, 폐수 처리 탱크들, 도관들, 여과층들, 소화기들(digesters), 정화제들, 오수조들(holding ponds), 침강 라군들(settling lagoons), 수로들(canals), 악취 제어기(odor control), 이온 교환 수지 층들(beds), 멤브레인 여과, 역 삼투, 마이크로- 및 울트라-여과 [냉각탑 용도들, 열 교환기들 및 공정수(process water) 시스템들에서 바이오필름들의 제거를 도움] 등을 포함하는 용도들에 유용하다.

<148> G. 펄프 및 종이

<149> 본 발명의 실란 조성물들은, 펄프화 공정(pulping process)을 위한 습윤제들 및 페이퍼보드 거품제거제들(paperboard defoamers)과 같은 펄프 및 종이 처리 용도들에 유용하다.

<150> 본 발명의 조성물들은, 6 내지 7.5의 pH 범위를 넘어서 가수분해에 대한 강화된 저항성을 나타낸다. 가수분해에 대한 강화된 저항성은, 다양한 시험들에 의해 증명될 수 있으나, 본 명세서에 사용된 "가수분해에 대한 강화된 저항성"은, 용액이 6 보다 낮은 pH를 갖는 수성 산성 조건들(aqueous acidic conditions)에 24 시간의 기간 동안 노출된 후에 또는 용액이 7.5 보다 높은 pH를 갖는 수성 염기성 조건들(aqueous basic conditions)에 24 시간의 기간 동안 노출된 후에, 본 발명의 가수분해-저항성 조성물의 50 몰 퍼센트 이상이 변화하지 않거나 반응하지 않은 채로 남아있는 것을 의미한다. 산성 조건들 하에서, 본 발명의 조성물들은 48 시간 이상의 기간 동안 5 또는 그보다 낮은 pH에서 최초 농도의 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타내고; 구체적으로 본 발명의 조성물들

은 2주 이상의 기간 동안 5 또는 그보다 낮은 pH에서 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타내며; 더욱 구체적으로 본 발명의 조성물들은 1 개월 이상의 기간 동안 5 또는 그보다 낮은 pH에서 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타내고; 그리고 가장 구체적으로 본 발명의 조성물들은 6 개월 이상의 기간 동안 5 또는 그보다 낮은 pH에서 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타낸다. 염기성 조건들 하에서, 본 발명의 조성물들은 2 주 이상의 기간 동안 8 또는 그보다 높은 pH에서 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타내고; 구체적으로 본 발명의 조성물들은 4 주 이상의 기간 동안 8 또는 그보다 높은 pH에서 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타내며; 더욱 구체적으로 본 발명의 조성물들은 6 개월 이상의 기간 동안 8 또는 그보다 높은 pH에서 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타내고; 그리고 가장 구체적으로 본 발명의 조성물들은 1 년 이상의 기간 동안 8 또는 그보다 높은 pH에서 50 몰 퍼센트 이상의 잔존을 나타낸다.

실험

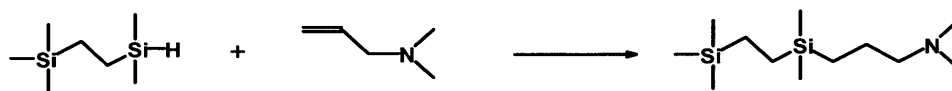
본 발명의 실란 조성물들을 위한 하이드라이드 중간생성물들(hydride intermediates)을 비교를 위한 조성물들과 함께 다음의 실시예들에 기술된 바와 같이 제조하였다.

제조 실시예 1

N, N-다이메틸 아미노프로필 펜타메틸 카르보다이실란 (도 1).

16.0 g의 펜타메틸 카르보다이실란과 20 μ L의 백금 1,3-다이비닐-1,1,3,3-테트라메틸다이록산(tetramethyldiloxane) 착물 (크실렌에서 0.3 중량% 용액)을 100 mL들이 Schlenk 플라스크에 넣었다. 이 혼합물을 90°C로 가열하고, 9.35 g의 N,N-다이메틸 알릴 아민을 20분 내에 한 방울씩(dropwise) 첨가하였다. 첨가 후에, 반응 온도를 3시간 동안 90°C로 유지하고, ^1H NMR로 반응을 모니터링하였다(monitored). 진공 하에 용제를 제거한 후에, 혼합물을 감압(reduced pressure)하에 증류시키고, 17.0 g의 무색 오일을 109-111 °C/15 mmHg에서 수집하였다.

도 1. 아미노 실란 중간생성물 1의 제조를 위한 반응 시퀀스

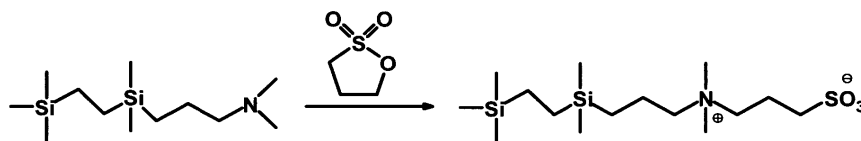


제조 실시예 2

3-((3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로필)-다이메틸-아미노)-프로판-1-설포네이트 (도 2).

2.0 g의 N,N-다이메틸 아미노프로필 펜타메틸 카르보다이실란 1 및 1.10 g의 1,3-프로판술포를 15 mL의 드라이 (dry) THF에 용해시켰다. 이 혼합물을 밤새 환류시키기 위해 가열하였다. 용제를 제거한 후에, 3.03 g의 흰색 고형물을 얻었다.

도 2. 실란 2의 제조를 위한 반응 시퀀스(sequence)

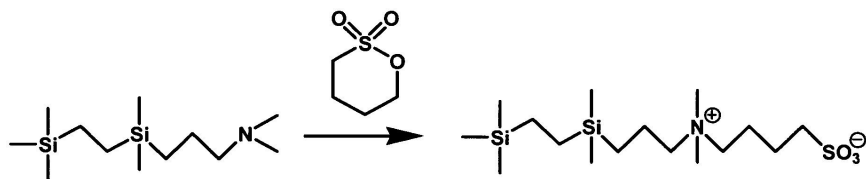


제조 실시예 3

4-((3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로필)-다이메틸-아미노)-부탄-1-설포네이트 (도 3).

2.45 g의 N,N-다이메틸 아미노프로필 펜타메틸 카르보다이실란 1 및 1.40 g의 1,4-부탄술포를 10 mL의 드라이 THF에 용해시켰다. 이 혼합물을 밤새 환류시키기 위해 가열하였다. 용제를 제거한 후에, 2.94 g의 흰색 고형물을 얻었다.

도 3. 실란 3의 제조를 위한 반응 시퀀스

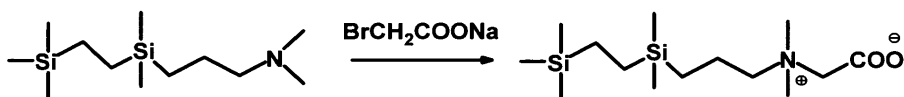


제조 실시예 4

3-((3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로필)-다이메틸-아미노)-아세테이트 (도 4).

2.45 g의 N,N-다이메틸 아미노프로필 펜타메틸 카르보다이실란 1 및 1.61 g의 소듐 2-브로모아세테이트를 20 ml의 무수 에탄올(absolute ethanol)에 용해시켰다. 이 현탁액(suspension)을 모든 소듐 2-브로모아세테이트가 사라질 때까지 밤새 환류시키기 위해 가열하였다. 용제를 제거한 후에, 잔류물을 헥산으로 세척하고 여과하여, 4.0 g의 흰색 고형물을 얻었다.

도 4. 실란 4의 제조를 위한 반응 시퀀스

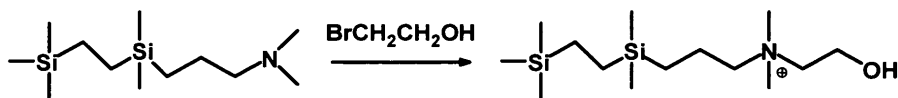


제조 실시예 5

3-((3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로필)-다이메틸-아미노)-에탄올 (도 5).

2.45 g의 N,N-다이메틸 아미노프로필 펜타메틸 카르보다이실란 1 및 1.37 g의 2-브로모에탄올을 15 ml의 무수 에탄올에 용해시켰다. 이 혼합물을 16 시간 동안 환류시키기 위해 가열하였다. 용제를 제거한 후에, 잔류물을 2 시간 동안 100°C/0.1 mmHg의 진공상태로 만들었다(vacuumed). 3.33 g의 흰색 고형물을 얻었다.

도 5. 실란 5의 제조를 위한 반응 시퀀스

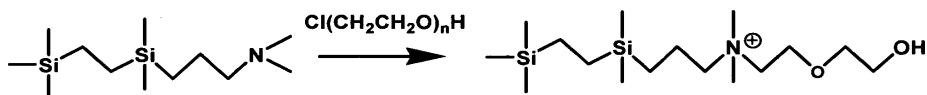


제조 실시예 6

3-((3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로필)-다이메틸-아미노-에톡시)-에탄올 (도 6).

2.45 g의 N,N-다이메틸 아미노프로필 펜타메틸 카르보다이실란 1 및 1.37 g의 2-클로로에톡시 에탄올을 10 ml의 무수 에탄올에 용해시켰다. 이 혼합물을 20 시간 동안 환류시키기 위해 가열하였다. 용제를 제거한 후에, 잔류물을 2시간 동안 100°C/0.1 mmHg의 진공상태로 만들었다. 2.58 g의 옅은 노란색(light yellow) 고형물을 얻었다.

도 6. 실란 6 (n=2)의 제조를 위한 반응 시퀀스

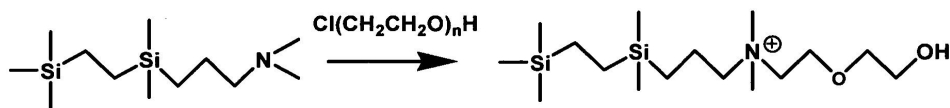


제조 실시예 7

3-((3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로필)-다이메틸-아미노-에톡시-에톡시)-에탄올 (도 7).

1.96 g의 N,N-다이메틸 아미노프로필 펜타메틸 카르보다이실란 1 및 1.26 g의 2-(2-클로로에톡시) 에톡시에탄올을 10 ml의 무수 에탄올에 용해시켰다. 이 혼합물을 20 시간 동안 환류시키기 위해 가열하였다. 용제를 제거한 후에, 잔류물을 2시간 동안 100°C/0.1 mmHg의 진공상태로 만들었다. 1.38 g의 옅은 노란색 고형물을 얻었다.

도 7. 실란 7 (n=3)의 제조를 위한 반응 시퀀스

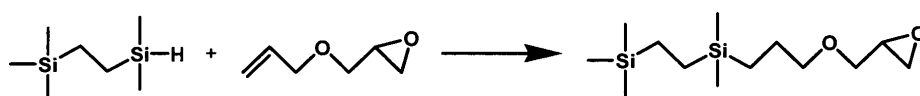


제조 실시예 8

2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 (도 8).

자석 교반기, 환류 응축기, 및 N₂ 유입구가 구비된 100 mL들이 RB 3-목 플라스크에 펜타메틸 다이카르보다이실란 (12.8 g; 80 mMol) 및 윌킨슨 촉매(Wilkinson's catalyst) (30 ppm)를 넣었다. 이 혼합물을 교반하고 90℃로 가열하였다. 2-알릴옥시메틸-옥시란 (10 g; 87.6 mMol)을 첨가 갈때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 90℃를 유지하였다. 반응이 진행된 후에 NMR이 뒤따랐다. 과량의 2-알릴옥시메틸-옥시란을 감압 증류(vacuum distillation)로 제거하였다.

도 8. 실릴화 계면활성제 중간생성물 8의 제조를 위한 반응 시퀀스

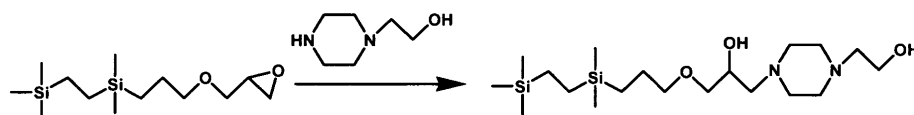


제조 실시예 9

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-[4-(2-하이드록시-에틸)-피페라진-1-일]-프로판-2-올 (도 9).

2-피페라진-1-일-에탄올 (0.95 g; 7.28 mMol) 및 20 mL의 에탄올을 자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 갈때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 반응이 완결된 후에, 로토바프(rotovap)에 의해 에탄올을 제거하였다(stripped off). 이 혼합물을 진공 하에 증류시켰다.

도 9. 실란 9의 제조를 위한 반응 시퀀스

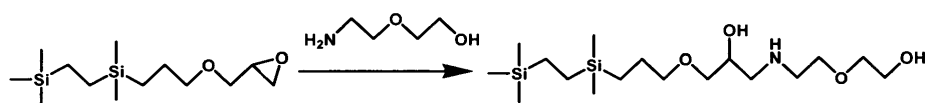


제조 실시예 10

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-[2-(2-하이드록시-에톡시)-에틸아미노]-프로판-2-올 (도 10).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 2-(2-아미노-에톡시)-에탄올 (3.83 g; 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 갈때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프(rotovap)에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들과 과량의 원료를 제거하였다.

도 10. 실란 10의 제조를 위한 반응 시퀀스



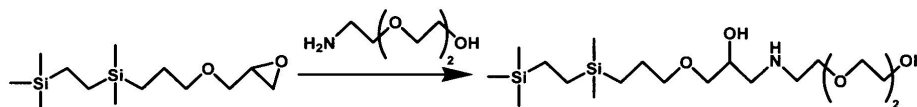
제조 실시예 11

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-[2-(2-하이드록시-에톡시)-에톡시)-에틸아미노]-

프로판-2-올 (도 11).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 2-[2-(2-아미노-에톡시)-에톡시]-에틸아민 (5.40 g; 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프(rotovap)에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들과 과량의 원료를 제거하였다.

도 11. 실란 11의 제조를 위한 반응 시퀀스

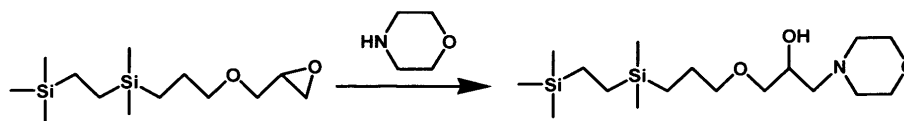


제조 실시예 12

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-모르폴린-4-일-프로판-2-올 (도 12).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 모르폴린 (0.634 g; 7.28 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

도 12. 실란 12의 제조를 위한 반응 시퀀스

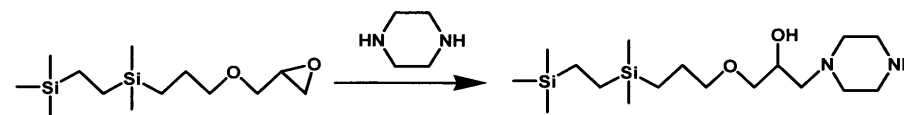


제조 실시예 13

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-피페라진-1-일-프로판-2-올 (도 13).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 피페라진 (3.14 g; 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다. 승화(sublimation)에 의해 과량의 피페라진을 제거하였다.

도 13. 실란 13의 제조를 위한 반응 시퀀스

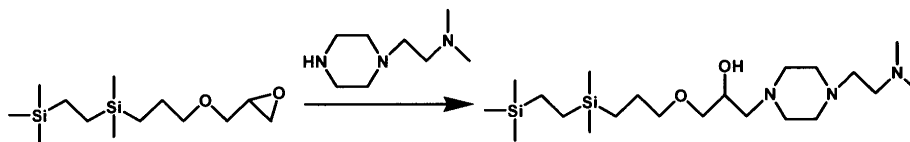


제조 실시예 14

1-[4-(2-다이메틸아미노-에틸)-피페라진-1-일]-3-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-프로판-2-올 (도 14).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 다이메틸-(2-피페라진-1-일-에틸)-아민 (1.14 g; 7.28 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

도 14. 실란 14의 제조를 위한 반응 시퀀스

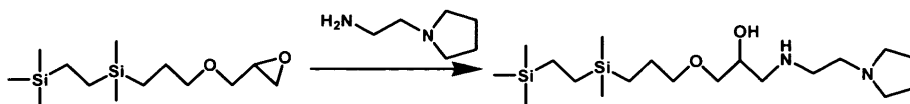


제조 실시예 15

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-(2-피롤리딘-1-일-에틸아미노)-프로판-2-올 (도 15).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 2-피롤리딘-1-일-에틸아민 (4.16 g; 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 갈때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들과 과량의 2-피롤리딘-1-일-에틸아민을 제거하였다.

도 15. 실란 15의 제조를 위한 반응 시퀀스

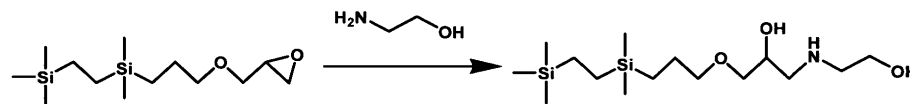


제조 실시예 16

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-(2-하이드록시-에틸아미노)-프로판-2-올 (도 16).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 2-아미노-에탄올 (2.22 g; 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 갈때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들과 과량의 2-아미노-에탄올을 제거하였다.

도 16. 실란 16의 제조를 위한 반응 시퀀스

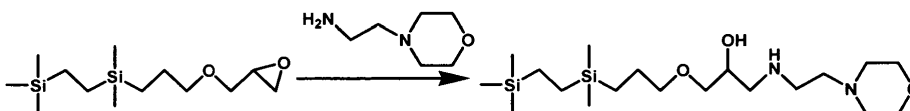


제조 실시예 17

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-(2-모르폴린-4-일-에틸아미노)-프로판-2-올 (도 17).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 2-모르폴린-4-일-에틸아민 (4.74 g; 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 갈때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들과 과량의 2-모르폴린-4-일-에틸아민을 제거하였다.

도 17. 실란 17의 제조를 위한 반응 시퀀스

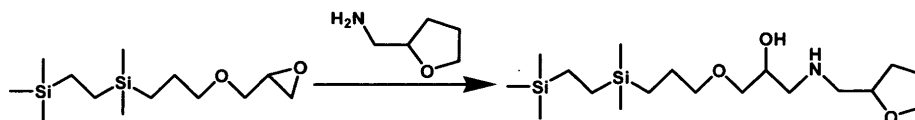


제조 실시예 18

<239> 1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-[(테트라하이드로-푸란-2-일메틸)-아미노]-프로판-2-올 (도 18).

<240> 자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 C-(테트라하이드로-푸란-2-일)-메틸아민 (3.68 g; 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들과 과량의 C-(테트라하이드로-푸란-2-일)-메틸아민을 제거하였다.

<241> 도 18. 실란 18의 제조를 위한 반응 시퀀스



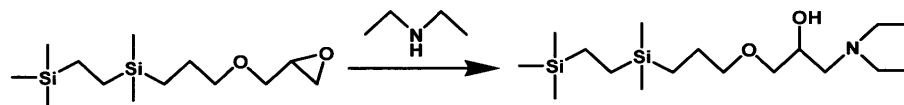
<242>

<243> 제조 실시예 19

<244> 1-다이에틸아미노-3-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-프로판-2-올 (도 19).

<245> 자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 다이에틸아민 (2.66 g, 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 60℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 8 시간 동안 60℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올과 다이에틸 아민을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

<246> 도 19. 실란 19의 제조를 위한 반응 시퀀스



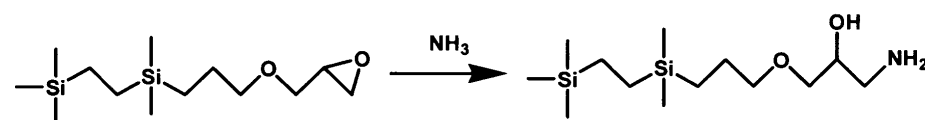
<247>

<248> 제조 실시예 20

<249> 1-아미노-3-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-프로판-2-올 (도 20).

<250> 자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 수용성 암모늄 하이드록사이드 (25 %; 10 g, ~150 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 50℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 8 시간 동안 50℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올과 물을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

<251> 도 20. 실란 20의 제조를 위한 반응 시퀀스



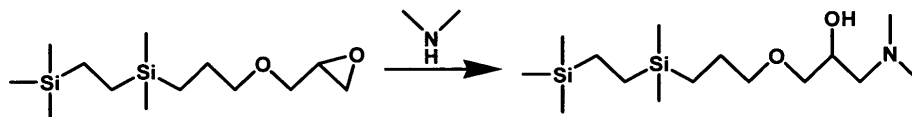
<252>

<253> 제조 실시예 21

<254> 1-다이메틸아미노-3-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-프로판-2-올 (도 21).

<255> 자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 수용성 다이메틸아민 (25 %; 10 g, 다이메틸 아민 ~55 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 50℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 8 시간 동안 50℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올, 물 및 과량의 다이메틸 아민을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

도 21. 실란 21의 제조를 위한 반응 시퀀스

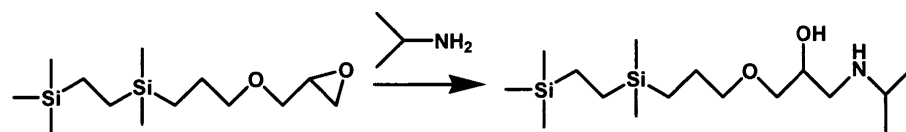


제조 실시예 22

1-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-3-이소프로필아미노-프로판-2-올 (도 22).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 이소프로필아민 (2.15 g, 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 60℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 8 시간 동안 60℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올과 이소프로필아민을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

도 22. 실란 22의 제조를 위한 반응 시퀀스

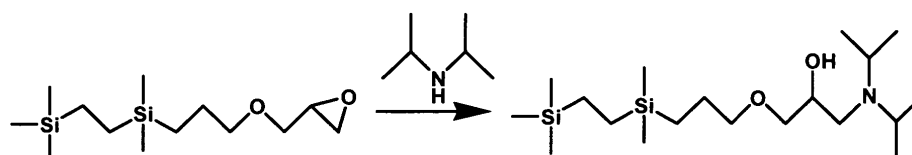


제조 실시예 23

1-다이이소프로필아미노-3-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-프로판-2-올 (도 23).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 다이이소프로필아민 (3.68 g, 36.4 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 60℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 8 시간 동안 60℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올과 다이이소프로필아민을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

도 23. 실란 23의 제조를 위한 반응 시퀀스

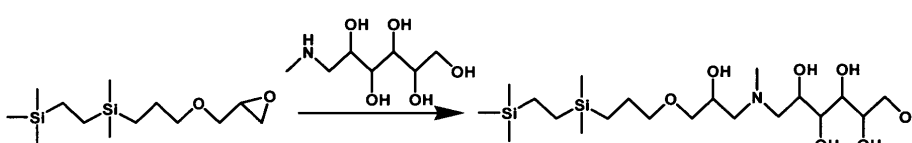


제조 실시예 24

6-[(3-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시}-2-하이드록시-프로필)-메틸-아미노]-헥산-1,2,3,4,5-펜타올 (도 24).

자석 교반기가 구비된 100 mL들이 RB 플라스크에 N-메틸-D-글루카민 (1.42 g; 7.28 mMol) 및 40 mL의 에탄올을 넣었다. 이 혼합물을 교반하고, 70℃로 가열하였다. 10 g의 에탄올과 혼합된 2-{3-[다이메틸-(2-트리메틸실라닐-에틸)-실라닐]-프로폭시메틸}-옥시란 8 (2 g; 7.28 mMol)을 첨가 깔때기에 넣고, 플라스크에 한 방울씩 첨가하였다. 이 혼합물을 교반하고, 추가로 4 시간 동안 70℃로 유지하였다. 로토바프에 의해 에탄올을 제거하였다. 이 혼합물을 진공 하에 증류시켜 불순물들을 제거하였다.

도 24. 실란 24의 제조를 위한 반응 시퀀스



- <273> 비교 샘플 (A)는, 8.5 폴리옥시에틸렌 반복 단위들(repeat units)을 포함하는 트리실록산 에톡실화(ethoxylated) 계면활성제이다. 이 제품(product)은 "GE Advanced Materials (Wilton, CT)"로부터 Silwet[®] L-77로서 상업적으로 구입가능하다.
- <274> 또한, 비교 샘플 OPE (10 폴리옥시에틸렌 단위들을 포함하는, 옥틸페놀에톡실레이트)는 비-실리콘 유기 계면활성제이다. 이 제품은, "Dow Chemical Company (Midland, MI)"로부터 Triton[®] X-100으로서 구입가능하다.
- <275> 실시예 1
- <276> 이 실시예는, 수용성 표면 장력을 감소시켜 계면활성제들로서의 유용성을 나타내는, 본 발명의 실란 조성물들의 능력을 보여준다. 표면 장력은, 매달린 물방울 분석(pendant drop analysis)을 사용하여 측정하였다. 다양한 성분들의 용액들을 물 (탈이온수), 2M NH₄Cl 용액, 또는 10 중량% NaCl 용액에 0.1 중량%로 제조하였다.
- <277> 표 1은, 이러한 독특한 조성물들의 용액들이 종래의 계면활성제에 비해 표면 장력의 큰 감소를 가져옴을 나타낸다.
- <278> 본 발명의 조성물들은 또한 비교를 위한 트리실록산 계면활성제 (A)와 유사한 스프레딩 특성들도 제공한다. 또한, 본 발명의 실란들은, 종래의 유기 계면활성제 제품 OPE에 비해 개선된 스프레딩을 제공한다.
- <279> 스프레딩은, 계면활성제 용액의 10 µL 방울 하나를 폴리스티렌 페트리 접시들(Petri dishes) (Fisher Scientific)에 가하고, 50%와 70% 사이의 상대 습도에서 (22℃ 내지 25℃에서) 30초 후에 스프레드 직경(spread diameter)(mm)을 측정함으로써 결정되었다. 이 용액은 재현가능한 부피의 방울들을 제공하기 위해 자동식 피펫으로 가하였다. 밀리포어 여과 시스템(Millipore filtration system)에 의해 더 정제된 탈이온수를 계면활성제 용액들을 제조하기 위해 사용하였다.

표 1

- <280> 표면 장력 및 스프레딩 특성들

I.D.	표면 장력 (mN/m)	스프레드 직경 (mm)		
		계면활성제 0.1 중량%		
		탈이온수	2M NH ₄ Cl	10% NaCl
2	31.4	5	nd	17
4	23.6	4	nd	40
5	45.0	4	nd	33
6	27.9	4	nd	10
7	27.4	4	nd	nd
9	22.6	44	33	nd
10	22.0	45	42	nd
11	22.3	34	8	nd
12	23.5	7	40	nd
13	22.3	9	30	nd
14	23.1	29	18	nd
15	22.8	14	16	nd
16	22.6	14	35	nd
17	22.2	36	36	nd
18	23.8	8	36	nd
19	22.9	4	40	nd
20	22.7	6	45	nd
21	21.9	6	50	nd
22	20.7	5	37	nd
23	Insol	4	50	nd
24	22.7	11	30	nd
A	20.9	53	nd	nd
OPE	31.8	9	nd	nd

<281> 실시예 2

<282> 산성 및 염기성 조건들 ($\leq \text{pH } 5$ 및 $\geq \text{pH } 9$) 하에서 급속 가수분해(rapid hydrolysis)에 처해지는, 종래의 실록산 베이스 계면활성제들과 달리, 본 발명의 실란들은, 종래의 트리실록산 알콕실레이트들 (비교예 A)에 비해 가수분해에 대한 증가된 저항성을 제공한다. 가수분해의 아티팩트(artifact)는 시간이 경과함에 따른 스프레딩 특성들의 감소로서 관찰된다. 따라서, 본 발명의 실란들의 용액들을 비교를 위한 계면활성제들과 함께 바람직한 사용 레벨들과 pH에서 제조하였다. 가수분해에 대한 저항성을 설명하기 위해 시간의 함수로서 스프레딩을 결정하였다.

<283> 표 2는, pH 3 내지 pH 10의 pH 범위에 걸쳐 가수분해의 함수로서 시간이 흐름에 따라 감소되는 스프레딩 성능을 나타내는, 종래의 유기변성 트리실록산 에톡실레이트 계면활성제의 하나의 실험을 설명한다. 여기서, 샘플 (A)의 0.4 중량% 용액을 pH 3, 4, 5 및 10에서 제조하였다. 스프레딩은, 계면활성제 용액의 10 μL 방울 하나를 폴리아세테이트 필름 (USI, "Crystal Clear Write on Film")에 가하고, 50%와 70% 사이의 상대 습도에서 (22°C 내지 25°C에서) 30초 후에 스프레드 직경(mm)을 측정함으로써 결정하였다. 이 용액을 재현가능한 부피의 방울들을 제공하기 위해 자동식 피펫으로 가하였다. 밀리포어 여과 시스템에 의해 더 정제된 탈이온수를 계면활성제 용액들을 제조하기 위해 사용하였다.

표 2

<284> 스프레딩 특성들에 대한 pH의 영향과 시간의 대비

시간	스프레드 직경 (mm)				
	제품	pH 3	pH 4	pH 5	pH 10
0 시간	A	34	28	29	27
1 시간	A	39	37	27	33
2 시간	A	36	30	33	33
4 시간	A	41	28	28	29
6 시간	A	16	27	27	28
8 시간	A	12	31	29	27
24 시간	A	12	32	25	25
48 시간	A	10	41	25	33
5 일	A	7	30	26	36
7 일	A	6	17	28	25
14 일	A	7	7	37	15

<285> 실시예 3

<286> 표 3은, 샘플 4의, 슈퍼스프레더(superspreader)가, pH 4 내지 pH 11의 pH 범위에 걸쳐 종래의 트리실록산 에톡실레이트 계면활성제 [제품 (A)]에 비해 개선된 가수분해에 대한 저항성을 가지는, 본 발명의 실란의 하나의 실험을 설명한다. 상술한 바와 같이, 시간에 따른 스프레딩 특성들을 모니터링함으로써 가수분해에 대한 저항성을 관찰하였다. 여기서, 계면활성제의 0.1 중량% 용액을 pH 4, 5, 9 및 11에서 10 중량% NaCl을 포함하는 증류수로 제조하였다. 스프레딩은, 계면활성제 용액의 10 μL 방울 하나를 폴리스티렌 페트리 접시들 (Fisher Scientific)에 가하고, 50%와 70% 사이의 상대 습도에서 (22°C 내지 25°C에서) 30초 후에 스프레드 직경(mm)을 측정함으로써 결정되었다. 이 용액을 재현가능한 부피의 방울들을 제공하기 위해 자동식 피펫으로 가하였다.

표 3

<287> 스프레딩 특성들에 대한 pH의 영향과 시간의 대비

	스프레드 직경 (mm)				
시간	샘플	pH 4	pH 5	pH 9	pH 11
0 시간	4	43	44	43	44
24 시간	4	43	44	42	42
192 시간	4	46	45	42	42
2 주	4	46	45	41	41
1 개월	4	46	45	40	43
2 개월	4	45	46	42	41

<288> 실시예 4

<289> 표 4는, 샘플 5의, 슈퍼스프레더가, pH 4 내지 pH 11의 pH 범위에 걸쳐 종래의 트리실록산 에톡실레이트 계면활성제 [제품 (A)]에 비해 개선된 가수분해에 대한 저항성을 가지는, 본 발명의 실란의 하나의 실례를 설명한다. 상술한 바와 같이, 시간에 따른 스프레딩 특성들을 모니터링함으로써 가수분해에 대한 저항성을 관찰하였다. 여기서, 계면활성제의 0.1 중량% 용액을 pH 4, 5, 9 및 11에서 10 중량% NaCl을 포함하는 증류수로 제조하였다. 스프레딩은, 계면활성제 용액의 10 μ L 방울 하나를 폴리스티렌 페트리 접시들 (Fisher Scientific)에 가하고, 50%와 70% 사이의 상대 습도에서 (22 $^{\circ}$ C 내지 25 $^{\circ}$ C에서) 30초 후에 스프레드 직경(mm)을 측정함으로써 결정되었다. 이 용액을 재현가능한 부피의 방울들을 제공하기 위해 자동식 피펫으로 가하였다.

표 4

<290> 스프레딩 특성들에 대한 pH의 영향과 시간의 대비

	스프레드 직경 (mm)				
시간	샘플	pH 4	pH 5	pH 9	pH 11
0 시간	5	18	18	20	21
24 시간	5	19	18	22	25
192 시간	5	19	18	21	24
2 주	5	22	20	24	26
1 개월	5	19	20	24	24
2 개월	5	22	23	24	26

<291> 진술한 실시예들은 단지 본 발명을 설명한 것이며, 본 발명의 단지 몇몇 특징들만을 설명하는 역할을 한다. 첨부된 특허청구범위들은 본 발명의 권리범위를 착상된 만큼 널리 주장하기 위한 것이며, 본 명세서의 실시예들은 모든 가능한 여러가지 구체예들로부터 선택된 구체예들을 설명한 것이다. 따라서, 첨부된 특허청구범위들이 본 발명의 특징들을 설명하는데 이용된 실시예들의 선택에 의해 제한되지 않아야 한다는 것이 출원인의 의도이다. 특허청구범위에 사용된, 용어 "포함하여 구성된다(comprises)"와 논리상 이 용어의 문법적인 변형들 역시, 예를 들어, "~로 주로 구성되는(consisting essentially of)" 그리고 "~로 구성되는(consisting of)"과 같은 변화하고 달라지는 범위의 용어들을 포함하나 이에 한정되지 않는다. 필요에 따라, 범위들이 제시되었으나, 이러한 범위들은 그 사이의 모든 하위범위들(sub-ranges)을 포함한다. 그러한 범위들은, 상이한 쌍을 이루는 숫자적 제한들(differing pairwise numerical limitations)로 구성되는 마쿠쉬(Markush) 그룹(들)로 볼 수 있으며, 그러한 그룹(들)은 그 하위 경계 및 상위 경계들에 의해 완전히 정의되는데, 통상의 방식으로 하위 경계들로부터 상위 경계들까지 숫자적으로 증가한다. 이러한 범위들 내의 변형들은 이 분야의 통상의 기술을 가진 자에게 자명함이 예상될 것이며, 이미 공중의 소유로 되지 않은 경우, 그러한 변형들은 가능한 한 첨부된 특허청구범위에 의해 커버되는 것으로 해석되어야 한다. 언어의 부정밀성 때문에 현재로서 고려되지 않은, 동등물 및 대체물들을 과학 및 기술의 진보가 가능하게 할 것임이 또한 예상되며, 이러한 변형들 또한 가능한 한 첨부된 특허청구범위로 커버되는 것으로 해석되어야 한다. 본 명세서에 참조된 모든 미국 특허들(및 특허출원들)은 상세히 기술

된 것처럼 그 전체가 명확히 본 명세서의 참고문헌을 이룬다.