

República Federativa do Brasil

Ministério da Economia Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(21) BR 112021000548-0 A2

(22) Data do Depósito: 26/07/2019

(43) Data da Publicação Nacional: 06/04/2021

(54) Título: ANTIOXIDANTES POLIMÉRICOS DE AMINA

(51) Int. Cl.: C08G 18/28; C08G 18/48; C08G 101/00.

(30) Prioridade Unionista: 27/07/2018 US 62/711,456.

(71) Depositante(es): MILLIKEN & COMPANY.

(72) Inventor(es): SANJEEV K. DEY; MARK E. RAGSDALE.

(86) Pedido PCT: PCT US2019043700 de 26/07/2019

(87) Publicação PCT: WO 2020/023892 de 30/01/2020

(85) Data da Fase Nacional: 13/01/2021

(57) Resumo: A invenção refere-se a um composto de amina que compreende um átomo de nitrogênio, um átomo de hidrogênio ligado diretamente ao átomo de nitrogênio e dois grupos aromáticos ligados diretamente ao átomo de nitrogênio. Pelo menos um dos grupos aromáticos compreende pelo menos um substituinte polimérico ligado a ele, o substituinte polimérico compreendendo três ou mais unidades de monômero. Um método para produção de um polímero de poliuretano compreende as etapas de (a) prover um poliol; (b) prover um composto poli-isocianato; (c) prover o composto de amina descrito acima; (d) combinar o poliol, o composto poli-isocianato e o composto de amina para produzir uma mistura de reação; e (e) permitir que o poliol e o composto poli-isocianato reajam para produzir um polímero de poliuretano.

Relatório Descritivo da Patente de Invenção para "ANTIOXIDANTES POLIMÉRICOS DE AMINA".

CAMPO TÉCNICO DA INVENÇÃO

[001] A presente invenção refere-se a compostos de amina que exibem propriedades antioxidantes e ao uso dos mesmos como estabilizadores ou antioxidantes para materiais orgânicos. Mais especificamente, a invenção descreve compostos de amina secundários compreendendo um ou mais substituintes poliméricos.

ANTECEDENTES

Antioxidantes são uma classe de compostos usados para [002] estabilizar materiais (por exemplo, polímeros) que são suscetíveis à degradação oxidativa. Uma via potencial para tal degradação oxidativa é através da formação de radicais livres no material. Esses radicais livres podem se formar através de abstração de hidrogênio ou clivagem homolítica de ligações carbono-carbono quando o material é exposto a calor, oxigênio, ozônio ou radiação (por exemplo, luz ultravioleta). Existem duas classes principais de antioxidantes que são usados para sequestrar tais radicais livres e dessa maneira estabilizar o material. A primeira dessas classes são antioxidantes de fenol estericamente impedidos. Essa classe de antioxidantes goza de uso difundido devido à sua eficácia em sequestrar radicais e sua tendência a não descolorir os materiais aos quais eles são adicionados. A segunda dessas classes de antioxidantes são aminas aromáticas. Aminas aromáticas são geralmente mais eficazes em sequestrar radicais livres do que fenóis impedidos, mas os antioxidantes de amina aromáticos conhecidos são conhecidos descolorir os materiais aos quais eles são adicionados. Portanto, seu uso é geralmente limitado a materiais em que descoloração não é um problema, tais como produtos cheios com carbono. Ainda, aminas aromáticas podem migrar para fora do material com o tempo, apresentando riscos ambientais e outros. Essa tendência a migrar tem se tornado uma grande preocupação uma vez que as agências reguladoras aprovaram regulamentações mais rígidas sobre a migração de aditivos. Em resposta, alguns defendem reduzir os níveis de antioxidante nos materiais, mas tais reduções deixarão o material suscetível à degradação oxidativa e encurtarão sua vida.

[003] Portanto, permanece uma necessidade de compostos que exibam propriedades antioxidantes altamente eficazes e migração baixa. Os compostos descritos aqui são acreditados satisfazer essa necessidade.

BREVE SUMÁRIO DA INVENÇÃO

[004] Em uma primeira modalidade, a invenção provê um composto de amina compreendendo um átomo de nitrogênio, um átomo de hidrogênio ligado diretamente ao átomo de nitrogênio e dois grupos aromáticos ligados diretamente ao átomo de nitrogênio, em que pelo menos um dos grupos aromáticos compreende pelo menos um substituinte polímero ligado a ele, o substituinte polimérico compreendendo três ou mais unidades de monômero.

[005] Em uma segunda modalidade, a invenção provê um método para produção de um polímero de poliuretano, o método compreendendo as etapas de:

[006] prover um poliol;

[007] prover um composto poli-isocianato;

[008] prover um composto de amina compreendendo um átomo de nitrogênio, um átomo de hidrogênio ligado diretamente ao átomo de nitrogênio e dois grupos aromáticos diretamente ligados ao átomo de nitrogênio, em que pelo menos um dos grupos aromáticos compreende pelo menos um substituinte polimérico ligado a ele, o substituinte polimérico compreendendo três ou mais unidades de monômero;

[009] combinar o poliol, o composto poli-isocianato e o composto de amina para produzir uma mistura de reação; e

[0010] permitir que o poliol e o composto poli-isocianato reajam para produzir um polímero de poliuretano.

DESCRIÇÃO DETALHADA DA INVENÇÃO

[0011] As definições que seguem são providas para definir vários dos termos usados em todo o presente pedido.

[0012] Como aqui usado, o termo "grupos alquila substituídos" se refere a grupos funcionais univalentes derivados de alcanos substituídos através da remoção de um átomo de hidrogênio de um átomo de carbono do alcano. Nessa definição, o termo "alcanos substituídos" se refere a compostos derivados de hidrocarbonetos acíclicos não ramificados ou ramificados em que (1) um ou mais dos átomos de hidrogênio do hidrocarboneto são substituídos com um átomo não hidrogênio (por exemplo, um átomo de halogênio) ou um grupo não alquila funcional (por exemplo, grupo hidróxi, grupo arila, grupo heteroarila) e/ou (2) a cadeia carbono-carbono do hidrocarboneto é interrompida por um átomo de oxigênio (como em um éter), um átomo de nitrogênio (como em uma amina) ou um átomo de enxofre (como em um sulfeto).

[0013] Como aqui usado, o termo "grupos arila substituídos" se refere a grupos funcionais univalentes derivados de arenos substituídos pela remoção de um átomo de hidrogênio de um átomo de carbono. Nessa definição, o termo "arenos substituídos" se refere a compostos derivados de hidrocarbonetos aromáticos monocíclicos e policíclicos em que um ou mais dos átomos de hidrogênio do hidrocarboneto são substituídos com um átomo não hidrogênio (por exemplo, um átomo de halogênio) ou um grupo funcional (por exemplo, um grupo hidróxi, um grupo carbóxi, um grupo alquila, um grupo heteroarila).

[0014] Em uma primeira modalidade, a invenção provê um composto de amina secundário. O composto de amina secundário compreende um átomo de nitrogênio amina e um átomo de hidrogênio

ligados diretamente ao átomo de nitrogênio amina. O composto de amina secundário compreende ainda dois grupos não hidrogênio ligados diretamente ao átomo de nitrogênio amina. Os grupos não hidrogênio ligados diretamente ao nitrogênio amina podem ser qualquer grupo orgânico adequado, tal como um grupo hidrocarbila ou grupo hidrocarbila substituído. Preferivelmente, pelo menos um dos grupos não hidrogênio ligados diretamente ao átomo de nitrogênio amina compreende pelo menos um substituinte polimérico ligado a ele. Como aqui usado, o termo "substituinte polimérico" se refere a um substituinte compreendendo três ou mais unidades de monômero. Em tal substituinte polimérico, as unidades de monômero podem ser iguais ou diferentes. Ainda, pelo menos duas das unidades de monômero são preferivelmente conectadas em série. Por exemplo, o substituinte polimérico pode ser ligado a um grupo de ligação de nitrogênio, com as unidades de monômero sendo distribuídas dentre uma ou duas das valências do grupo de ligação de nitrogênio (a terceira valência provendo uma ligação ao grupo aromático). Preferivelmente, o substituinte polimérico compreende três ou mais unidades de monômero conectadas em série.

[0015] Em uma modalidade preferida, o composto de amina secundário compreende pelo menos um grupo aromático ligado diretamente ao átomo de nitrogênio amina. Mais preferivelmente, o composto de amina secundário compreende dois grupos aromáticos ligados diretamente ao átomo de nitrogênio amina. Em tal modalidade, os grupos aromáticos podem ser iguais ou diferentes. O(s) grupo(s) aromático(s) ligado(s) ao átomo de nitrogênio amina pode(m) ser qualquer grupo(s) aromáticos adequados. Preferivelmente, o(s) grupo(s) aromático(s) é/são independentemente selecionados do grupo consistindo em grupos fenila, grupos naftila, grupos piridinila, grupos pirimidinila, grupos triazinila, grupos pirrolila, grupos furanila e grupos

tiofenila, cada um dos quais pode ser não substituído ou substituído com um ou mais grupos não hidrogênio. Em uma modalidade preferida, o composto de amina secundário compreende pelo menos um grupo fenila (não substituído ou substituído) ligado ao átomo de nitrogênio amina. Mais preferivelmente, o grupo fenila é substituído com um substituinte polimérico como descrito abaixo. Em uma outra modalidade preferida, o composto de amina secundário compreende pelo menos um grupo aromático selecionado do grupo consistindo em piridin-3-ila, pirimidin-5-ila e 1,3,5-triazin-2-ila, cada uma das quais pode ser substituída ou substituída com um grupo não hidrogênio. Mais preferivelmente, o grupo piridin-3-ila, pirimidin-5-ila ou 1,3,5-triazin-2-ila é substituído com um substituinte polimérico como descrito abaixo.

[0016] Grupos fenila adequados incluem aqueles de Fórmula (I) abaixo:

(I)

$$R^6$$
 R^7
 R^8
 R^8
 R^8

[0017] Na estrutura de Fórmula (I), um de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 e R^6 é uma ligação direta ao átomo de nitrogênio amina e o restante de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , R^5 e R^6 são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^w . Cada R^w é independentemente selecionado do grupo consistindo em $-(CH_2)_n-O-R^a$, $-(CH_2)_n-C(O)O-R^a$, $-(CH_2)_n-NR^aR^b$, $-(CH_2)_n-C(O)-N(H)-(CH_2)_m-NR^aR^b$, $-(CH_2)_n-C(O)-N(H)-(CH_2)_m-NR^aR^b$, $-(CO)R^a$, $-(CO)R^a$, -(CO)CO, -(CO)CO,

—OC(O)NRªR♭, —S(O)₂Rª, —S(O)₂ORª, —S(O)₂NRªR♭, —NRªC(O)R♭, —NRªC(O)OR♭, —NRªC(O)SR♭, —NRªC(O)NRԵR¢, —P(O)₂Rª, —P(O)(ORª)₂, —P(O)(ORª)O⁻, onde a variável n é um inteiro de 0 a 10 (preferivelmente de 0 a 4, mais preferivelmente 0 a 2 e sobretudo preferivelmente 2), a variável m é um inteiro de 1 a 10 (preferivelmente 1 a 4 e sobretudo preferivelmente 2-3). Rª, R♭ e Rҫ são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, arila e substituintes poliméricos como descrito abaixo. Ainda, quaisquer dois de Rª, R♭ e Rҫ ligados ao mesmo heteroátomo podem combinar para formar um anel de cinco ou mais membros compreendendo opcionalmente um ou mais heteroátomos adicionais selecionados do grupo consistindo em —O—, —NRd— e —S—, onde Rd é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, arila e substituintes poliméricos como descrito abaixo.

[0018] Grupos naftila adequados incluem aqueles de Fórmula (X) abaixo:

(X)

[0019] Na estrutura de Fórmula (X), um de R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} , R^{15} , R^{16} , R^{17} e R^{18} é uma ligação direta com o nitrogênio amina e o restante de R^{11} , R^{12} , R^{13} , R^{14} , R^{15} , R^{16} , R^{17} e R^{18} são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^w .

[0020] Grupos piridinila adequados incluem aqueles de Fórmula

(XX) abaixo:

(XX)

$$R^{25}$$
 R^{24}
 R^{24}
 R^{23}
 R^{22}

[0021] Na estrutura de Fórmula (XX), um de R^{21} , R^{22} , R^{23} , R^{24} e R^{25} é uma ligação direta com o nitrogênio amina e o restante de R^{21} , R^{22} , R^{23} , R^{24} e R^{25} são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^{w} .

[0022] Grupos pirimidinila adequados incluem aqueles de Fórmula (XXX) abaixo:

(XXX)

[0023] Na estrutura de Fórmula (XXX), um de R³¹, R³², R³³ e R³⁴ é uma ligação direta com o nitrogênio amina e o restante de R³¹, R³², R³³ e R³⁴ são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^w.

[0024] Grupos triazinila adequados incluem aqueles de Fórmula (XL) abaixo:

(XL)

[0025] Na estrutura de Fórmula (XL), um de R⁴¹, R⁴² e R⁴³ é uma ligação direta com o nitrogênio amina e o restante de R⁴¹, R⁴² e R⁴³ são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^w.

[0026] Grupos pirrolila adequados incluem aqueles de Fórmula (L) abaixo:

(L)

[0027] Na estrutura de Fórmula (L), um de R^{51} , R^{52} , R^{53} e R^{54} é uma ligação direta com o nitrogênio amina e o restante de R^{51} , R^{52} , R^{53} e R^{54} são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^{w} .

[0028] Grupos furanila adequados incluem aqueles de Fórmula (LX) abaixo:

(LX)

[0029] Na estrutura de Fórmula (LX), um de R⁶¹, R⁶², R⁶³ e R⁶⁴ é uma ligação direta com o nitrogênio amina e o restante de R⁶¹, R⁶², R⁶³ e R⁶⁴ são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^w.

[0030] Grupos tiofenila adequados incluem aqueles de Fórmula (LXX) abaixo:

(LXX)

[0031] Na estrutura de Fórmula (LXX), um de R⁷¹, R⁷², R⁷³ e R⁷⁴ é uma ligação direta com o nitrogênio amina e o restante de R⁷¹, R⁷², R⁷³ e R⁷⁴ são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R^w.

Em uma modalidade preferida, o grupo aromático ligado [0032] diretamente ao átomo de nitrogênio amina pode ser substituído com pelo menos um substituinte polimérico compreendendo três ou mais unidades de monômero conectadas em série. O substituinte polimérico pode compreender qualquer unidade de monômero adequada ou combinação de unidades de monômero diferentes. Em uma modalidade preferida, o substituinte polimérico compreende unidades de monômero independentemente selecionadas do grupo consistindo em grupos alquileno-óxi, grupos oxoalquileno-óxi, grupos oxoalquilenoamina, grupos alquilenoamina, grupos alquileno substituído, grupos sacarídeos, grupos halometilalquileno-óxi e grupos metilalquileno-óxi de amônio quaternário. Em uma outra modalidade preferida, o substituinte polimérico compreende unidades de monômero independentemente selecionadas do grupo consistindo em grupos alquileno-óxi e grupos oxoalquileno-óxi. Preferivelmente, 0 substituinte polimérico compreende unidades de monômero independentemente selecionadas do grupo consistindo em etileno-óxi, propileno-óxi e butileno-óxi. O substituinte polimérico pode ser terminado com qualquer grupo terminal adequado. Por exemplo, o substituinte polimérico pode ser terminado com uma outra porção aril amina secundária. Sendo assim, em tal modalidade, o composto de amina seria um dímero em que as duas porções aril amina secundárias são ligadas por um substituinte polimérico interveniente. Em tal modalidade, essas porções aril amina secundárias podem ser iguais ou elas podem ser diferentes. Em uma modalidade preferida, as porções aril amina secundárias são iguais. Preferivelmente, o substituinte polimérico é terminado com um grupo terminal compreendendo um átomo de hidrogênio ativo. Como aqui usado, o termo "hidrogênio ativo" se refere a um átomo de hidrogênio que é ligado a um átomo que é mais eletronegativo do que carbono. Grupos contendo hidrogênio ativos adequados incluem, mas não estão limitados a, um grupo hidróxi, grupos amina, grupos amida e grupos sulfidrila (por exemplo, tióis). Preferivelmente, o substituinte polimérico termina em um grupo hidróxi.

[0033] Grupos alquileno-óxi adequados incluem aqueles de Fórmula (C) abaixo:

(C)

$$\begin{cases} R^{102} \\ R^{101} \end{cases}$$

[0034] Na estrutura de Fórmula (C) e aquelas que seguem, as ligações truncadas por linhas onduladas representam ligações a porções adjacentes do composto de amina secundário, tais como os

grupos aromáticos descritos acima e o grupo terminal do substituinte polimérico. Na estrutura de Fórmula (C), cada grupo R¹⁰¹ e R¹⁰² é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, arila, alcoxialquila e ariloxialquila. Preferivelmente, cada grupo R¹⁰¹ e R¹⁰² é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₄ alquila). A variável a é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, de 1 a cerca de 100). Para cada unidade de monômero no grupo alquileno-óxi, os grupos R¹⁰¹ e R¹⁰² são independentemente selecionados do grupo mencionado. Portanto, quando a variável a é maior do que 1, o grupo alquileno-óxi pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero ligadas covalentemente para formar o grupo alquileno-óxi. Quando o grupo alquileno-óxi compreende duas ou mais unidades de monômero, essas unidades de monômero podem ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco geralmente é mais preferida. Como mencionado acima, em uma modalidade preferida, o grupo alquileno-óxi compreende unidades de monômero independentemente selecionadas do grupo consistindo em etileno-óxi, propileno-óxi e butileno-óxi. Um exemplo adequado de tal grupo alquileno-óxi é a Fórmula (CI) abaixo: (CI)

$$\int_{x} \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ y \end{array} \right\}_{z}$$

[0035] Na estrutura de Fórmula (CI), as variáveis x, y e z são independentemente selecionadas do grupo consistindo em zero e inteiros positivos (por exemplo, inteiros positivos de 1 a cerca de 100). Preferivelmente, a soma de x, y e z é 2 ou mais ou 3 ou mais (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca

de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). Em certas modalidades possivelmente preferidas, o grupo alquileno-óxi compreende unidades de monômero de etileno-óxi e propileno-óxi dispostas em uma configuração em bloco. Exemplos adequados de tais grupos alquileno-óxi incluem aqueles de Fórmulas (CII) e (CIII) abaixo

$$S$$
 O U O U

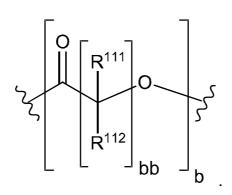
(CIII)
$$\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}$$

[0036] Nas estruturas de Fórmulas (CII) e (CIII), as variáveis t, u, v, q, r e s são independentemente selecionadas do grupo consistindo em zero e inteiros positivos (por exemplo, inteiros positivos de 1 a cerca de 100). Preferivelmente, a soma de t, u e v e q, r e s é 2 ou mais ou 3 ou mais (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10).

[0037] Grupos oxoalquileno-óxi adequados incluem aqueles de Fórmula (CX) abaixo:

(CII)

(CX)



Na estrutura de Fórmula (CX), cada grupo R¹¹¹ e R¹¹² é [0038] independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, Preferivelmente, cada grupo R¹¹¹ e R¹¹² é hidróxi e alquila. independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila). A variável b é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, de 1 a cerca de 100), mais preferivelmente 2 a cerca de 100 ou 3 a cerca de 100 (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). A variável bb é um inteiro de 1 a 12, mais preferivelmente 1-5. Para cada unidade de monômero no grupo oxoalquileno-óxi, os grupos R111 e R112 são independentemente selecionados do grupo mencionado. Portanto, quando a variável b é maior do que 1, o grupo oxoalquileno-óxi pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero ligadas covalentemente para formar o grupo oxoalquileno-óxi. Quando o grupo oxoalquileno-óxi compreende duas ou mais unidades de monômero, essas unidades de monômero podem ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco geralmente é mais preferida.

[0039] Grupos oxoalquilenoamina adequados incluem aqueles de Fórmula (CX) abaixo:

(CXX)

$$\begin{bmatrix}
O & R^{121} \\
R^{122}
\end{bmatrix}$$

$$CC & C$$

Na estrutura de Fórmula (CXX), cada grupo R¹²¹ e R¹²² é [0040] independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, Preferivelmente, cada grupo R¹²¹ e R¹²² é hidróxi e alquila. independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila). A variável c é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, de 1 a cerca de 100), mais preferivelmente 2 a cerca de 100 ou 3 a cerca de 100 (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). A variável cc é um inteiro de 1 a 12, mais preferivelmente 1-5. Para cada unidade de monômero no grupo oxoalquilenoamina, os grupos R121 e R122 são independentemente selecionados do grupo mencionado. Então, quando a variável c é maior do que 1, o grupo oxoalquilenoamina pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero ligadas covalentemente para formar o grupo oxoalquilenoamina grupo oxoalquilenoamina. Quando o compreende duas ou mais unidades de monômero, essas unidades de monômero podem ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco geralmente é mais preferida.

[0041] Grupos alquilenoamina adequados incluem aqueles de Fórmula (CXX) abaixo:

(CXX)

Na estrutura de Fórmula (CXX), cada grupo R¹³¹ e R¹³² é [0042] independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e cada R¹³³ é selecionado do grupo consistindo em grupos hidrogênio e alquilamina. A variável d é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, 1 a cerca de 100), mais preferivelmente 2 a cerca de 100 ou 3 a cerca de 100 (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). Para cada unidade de monômero no grupo alquilenoamina, os grupos R¹³¹, R¹³², R¹³³ são independentemente selecionados do grupo mencionado. quando a variável d é maior do que 1, o grupo alquilenoamina pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero covalentemente ligadas para formar um grupo alquilenoamina. Ainda, quando a variável d é maior do que 2, as unidades de monômero podem ser dispostas em uma configuração linear ou uma ramificada. Quando o grupo alquilenoamina compreende duas ou mais unidades de monômero,

essas unidades de monômero pode ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco geralmente é mais preferida.

[0043] Grupos alquileno substituídos adequados incluem aqueles de Fórmula (CXXX) abaixo:

(CXXX)

Na estrutura de Fórmula (CXXX), cada grupo R¹⁴¹ e R¹⁴² é [0044] independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, hidróxi, alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila), —OR¹⁴³ onde R¹⁴³ é acila (por exemplo, C₂-C₂₀ acila, C₂-C₁₀ acila ou C₂-C₄ acila) e -C(O)OR¹⁴⁴ onde R¹⁴⁴ é hidrogênio ou alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila), contanto que um de R¹⁴¹ e R¹⁴² seja hidróxi, -OR¹⁴³ ou -C(O)OR¹⁴⁴. Em uma modalidade preferida, cada grupo R¹⁴¹ e R¹⁴² é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e hidróxi. Em uma outra modalidade preferida, um de R¹⁴¹ e R¹⁴² é hidrogênio e o outro é -OR143, com R143 sendo preferivelmente C2-C4 acila (por exemplo, acetila). A variável e é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, 1 a cerca de 100), mais preferivelmente 2 a cerca de 100 ou 3 a cerca de 100 (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). Para cada unidade de monômero no grupo alquileno substituído, os grupos R¹⁴¹ e R¹⁴² são independentemente selecionados do grupo mencionado. Portanto, quando a variável e é maior do que 1, o grupo alquileno substituído pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero ligadas covalentemente para formar o grupo alquileno substituído. Quando o grupo alquileno substituído compreende duas ou mais unidades de monômero, essas unidades de monômero podem ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco geralmente é mais preferida. [0045] Grupos sacarídeos adequados incluem aqueles de Fórmula (CL) abaixo:

(CL)

[0046] Na estrutura de Fórmula (CL), cada grupo R¹⁵¹, R¹⁵² e R¹⁵³ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e —CH₂CO₂H. A variável f é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, de 1 a cerca de 100), mais preferivelmente 2 a cerca de 100 ou 3 a cerca de 100 (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). Para cada unidade de monômero no grupo sacarídeo, os grupos R¹⁵¹, R¹⁵² e R¹⁵³ são independentemente selecionados do grupo mencionado. Portanto,

quando a variável f é maior do que 1, o grupo sacarídeo pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero covalentemente ligadas para formar o grupo sacarídeo. Quando o grupo sacarídeo compreende duas ou mais unidades de monômero, essas unidades de monômero podem ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco é geralmente mais preferida.

[0047] Quando grupos halometilalquileno-óxi incluem aqueles de Fórmula (CLX) abaixo:

(CLX)

$$\begin{bmatrix} R^{162} \\ R^{161} \end{bmatrix}$$

 R^{161} Fórmula [0048] Na estrutura de (CLX). cada independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e cada R¹⁶² é um halogênio independentemente selecionado (por exemplo, cloro). A variável g é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, de 1 a cerca de 100), mais preferivelmente 2 a cerca de 100 ou 3 a cerca de 100 (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). Para cada unidade de monômero no grupo halometilalquileno-óxi, os grupos R¹⁶¹ e R¹⁶² são

independentemente selecionados dos grupos mencionados. Portanto, quando a variável g é maior do que 1, o grupo halometilalquileno-óxi pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero ligadas covalentemente para formar o grupo halometilalquileno-óxi. Quando o grupo halometilalquileno-óxi compreende duas ou mais unidades de monômero, essas unidades de monômero podem ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco é geralmente mais preferida. [0049] Grupos metilalquileno-óxi de amônio quaternário incluem aqueles de Fórmula (CLXX) abaixo: (CLXX)

[0050] Na estrutura de Fórmula (CLXX), R^{171} cada independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e cada R¹⁷², R¹⁷³, R¹⁷⁴ é independentemente selecionado do grupo consistindo em alquila hidroxialquila (por exemplo, C₁-C₁₀ hidroxialquila ou C₁-C₄ hidroxialquila). A variável h é um inteiro igual a ou maior do que 1 (por exemplo, de 1 a cerca de 100), mais preferivelmente 2 a cerca de 100 ou 3 a cerca de 100 (por exemplo, 2 a cerca de 300, 3 a cerca de 300, 2 a cerca de 200, 3 a cerca de 200, 2 a cerca de 100, 3 a cerca de 100, 2 a cerca de 50, 3 a cerca de 50, 2 a cerca de 30, 3 a cerca de 30, 2 a cerca de 25, 3 a cerca de 25, 2 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 2 a cerca de 15, 3 a cerca de 15, 2 a cerca de 10 ou 3 a cerca de 10). Para cada unidade de monômero no grupo metilalquileno-óxi de amônio quaternário, os R¹⁷¹, R¹⁷², R¹⁷³ e R¹⁷⁴ são independentemente selecionados do grupo mencionados. Portanto, quando a variável h é maior do que 1, o grupo metilalquileno-óxi de amônio quaternário pode ser compreendido de duas ou mais unidades de monômero ligadas covalentemente para formar o grupo metilalquileno-óxi de amônio quaternário. Quando o grupo metilalquileno-óxi de amônio quaternário compreende duas ou mais unidades de monômero, essas unidades de monômero podem ser dispostas ou em uma configuração em bloco ou em uma configuração aleatória, mas uma configuração em bloco é geralmente mais preferida.

[0051] O substituinte polimérico pode compreender dois ou mais de tais grupos (i.e., grupos alquileno-óxi, grupos oxoalquileno-óxi, grupos oxoalquilenoamina, grupos alquilenoamina, grupos alquileno substituído, grupos sacarídeos, grupos halometilalquileno-óxi e grupos metilalquileno-óxi de amônio quaternário) covalentemente ligados juntos. Por exemplo, o substituinte polimérico pode compreender um grupo alquileno-óxi de Fórmula (C) ligado covalentemente a um grupo oxoalquileno-óxi de Fórmula (CX).

[0052] O substituinte polimérico pode ser ligado diretamente ao grupo aromático do composto de amina secundário ou o substituinte polimérico pode ser ligado a um grupo funcional interveniente ou um átomo que liga o substituinte polimérico e o grupo aromático. Esses grupos funcionais intervenientes ou átomos ("grupos de ligação") podem ser qualquer grupo adequado. Quando o substituinte polimérico é ligado ao grupo aromático através de um grupo de ligação, o grupo de ligação é preferivelmente ligado diretamente a um átomo de carbono do grupo aromático. Preferivelmente, o grupo de ligação é selecionado do grupo consistindo em um átomo de oxigênio, um átomo de enxofre, um grupo

amina secundário, um grupo amina terciária, um grupo alcóxi, um grupo éster, um grupo alquilamina (carregando ou um grupo amina secundário ou terciário) e um grupo carbamato. Um grupo de ligação amina secundário é um em que a nitrogênio amina do grupo de ligação é ligada a um átomo de hidrogênio, ao grupo aromático e ao substituinte polimérico. Um grupo de ligação amina terciária é um em que a nitrogênio amina do grupo de ligação é ligada ao grupo aromático, ao substituinte polimérico e a um grupo não hidrogênio. Para tais grupos de ligação amina terciária, o grupo não hidrogênio pode ser qualquer grupo orgânico adequado, tal como um grupo alquila ou um outro substituinte polimérico como aqui descrito. Em uma modalidade preferida, o grupo de ligação é um átomo de oxigênio ligado diretamente ao substituinte polimérico e ao grupo aromático.

[0053] O substituinte polimérico pode ser ligado (ou diretamente ou através de um grupo de ligação adequado) a qualquer posição adequada no grupo aromático. Por exemplo, quando o grupo aromático é um grupo fenila, o grupo polimérico pode ser disposto na posição *meta* ou *para* em relação à ligação entre o grupo aromático e o átomo de nitrogênio amina. Preferivelmente, a ligação ao átomo de nitrogênio amina e a ligação ao substituinte polimérico (ou o grupo de ligação que é ligado ao substituinte polimérico) são dispostas na posição *para* em relação uma à outra no grupo aromático.

[0054] Em uma modalidade preferida, a invenção provê um composto de amina secundária de Fórmula (CC) (CC)

[0055] Na estrutura de Fórmula (CC), R²⁰¹ e R²⁰² são grupos aromáticos independentemente selecionados do grupo consistindo em

grupos fenila de Fórmula (I), grupos naftila de Fórmula (X), grupos piridinila de Fórmula (XX), grupos pirimidinila de Fórmula (XXX), grupos triazinila de Fórmula (XL), grupos pirrolila de Fórmula (L), grupos furanila de Fórmula (LX) e grupos tiofenila de Fórmula (LXX). Em uma modalidade preferida, um de R²⁰¹ e R²⁰² é um grupo fenila de Fórmula (I). Em uma outra modalidade preferida, R²⁰¹ e R²⁰² são ambos grupos fenila de Fórmula (I). Em uma outra modalidade preferida, R²⁰¹ é um grupo fenila de Fórmula (I) e R²⁰² é um grupo piridinila de Fórmula (XX). Na estrutura de Fórmula (CC), pelo menos um dos grupos pendentes em um dos grupos aromáticos é selecionado do grupo consistindo em $-(CH_2)_n-C(O)O-R^a$, $-(CH_2)_n-O-R^a$, -(CH₂)_n-NR^aR^b, $-(CH_2)_n-C(O)-NR^aR^b$, $-C(O)R^a$, $-C(O)OR^a$, $-C(O)NR^aR^b$, $-OC(O)R^a$, $-OC(O)OR^{a}$, $-OC(O)NR^{a}R^{b}$, $-S(O)_{2}R^{a}$, $-S(O)_{2}OR^{a}$, $-S(O)_{2}NR^{a}R^{b}$, $-NR^aC(O)R^b$, $-NR^aC(O)OR^b$, $-NR^aC(O)SR^b$, $-NR^aC(O)NR^bR^c$, $-P(O)_2R^a$ $-P(O)(OR^a)_2$, $-P(O)(OR^a)O^-$, onde a variável n é um inteiro de 0 a 10 (preferivelmente de 0 a 4, mais preferivelmente 0 a 2 e sobretudo preferivelmente 0) e pelo menos um de Ra e Rb no grupo pendente é um substituinte polimérico como acima descrito. Mais preferivelmente, pelo menos um de Ra e Rb no grupo é -RyRx ou -R^zR^yR^x, onde R^x é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila, Rz é selecionado do grupo consistindo em grupos alcóxi (por exemplo, grupos C₁-C₄ alcóxi) e grupos alcóxi substituídos (por exemplo, grupos C₁-C₄ alcóxi substituídos) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) ou um substituinte polimérico compreendendo dois ou mais grupos de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) covalentemente ligados juntos. Mais preferivelmente, pelo menos um dos grupos pendentes em um dos grupos aromáticos é em $-(CH_2)_n-O-R^a$ selecionado do grupo consistindo -(CH₂)_n-NR^aR^b. Em tal modalidade, pelo menos um de R^a e R^b no grupo pendente é —R^yR^x, onde R^x é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C). Preferivelmente, em tal modalidade, a variável n é zero e R^x é hidrogênio.

[0056] Em uma modalidade preferida, a invenção provê um composto de amina secundária de Fórmula (CCI) abaixo: (CCI)

$$R^{5}$$
 R^{6}
 R^{202}
 R^{4}
 R^{2}

Na estrutura de Fórmula (CCI), R^2 , R^3 , R^4 , R^5 e R^6 são [0057] independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e Rw, e R²⁰² é um grupo aromático selecionado do grupo consistindo em grupos fenila de Fórmula (I), grupos naftila de Fórmula (X), grupos piridinila de Fórmula (XX), grupos pirimidinila de Fórmula (XXX), grupos triazinila de Fórmula (XL), grupos pirrolila de Fórmula (L), grupos furanila de Fórmula (LX) e grupos tiofenila de Fórmula (LXX). Preferivelmente, um de R2, R4 e R6 consistindo em $-(CH_2)_n$ $-O-R^a$, selecionado do grupo $-(CH_2)_n-C(O)-NR^aR^b$, $-(CH_2)_n-C(O)O-R^a$, $-(CH_2)_n-NR^aR^b$, $-C(O)R^a$, $-C(O)OR^a$, $-C(O)NR^aR^b$, $-OC(O)R^a$, $-OC(O)OR^a$, $-OC(O)NR^aR^b$, $-S(O)_2R^a$, $-S(O)_2OR^a$, $-S(O)_2NR^aR^b$, $-NR^aC(O)R^b$, $-NR^aC(O)OR^b$, $-NR^aC(O)SR^b$, $-NR^aC(O)NR^bR^c$, $-P(O)_2R^a$. -P(O)(OR^a)₂, -P(O)(OR^a)O⁻, onde a variável n é um inteiro de 0 a 10 (preferivelmente de 0 a 4, mais preferivelmente 0 a 2 e sobretudo preferivelmente 0) e pelo menos um de Ra e Rb no grupo pendente é um

substituinte polimérico como acima descrito. Em tal modalidade, o restante de R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila e arila substituída. Mais preferivelmente, pelo menos um de Ra e Rb no grupo pendente é um substituinte de Fórmula —R^yR^x, onde R^x é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila e Ry é um substituinte polimérico de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) ou um substituinte polimérico compreendendo dois ou mais grupos de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) covalentemente ligados juntos. Preferivelmente, um de R2, R4 e R⁶ é selecionado do grupo consistindo em -(CH₂)_n-O-R^a e -(CH₂)_n-NR^aR^b, a variável n é zero e pelo menos um de R^a e R^b no grupo pendente é um substituinte de Fórmula -RyRx, onde Rx é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alguila ou C₁-C₄ alguila) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C). Em tal modalidade, R^x preferivelmente é hidrogênio.

[0058] Em uma modalidade preferida, a invenção provê um composto de amina secundária de Fórmula (CCII) abaixo: (CCII)

$$R^5$$
 R^6
 R^7
 R^7
 R^8
 R^8
 R^8
 R^8
 R^8

[0059] Na estrutura de Fórmula (CCII), cada R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e Rʷ. Preferivelmente, um de R², R⁴ e R⁶ em um dos anéis fenila é selecionado do grupo

consistindo em $-(CH_2)_n-O-R^a$, $-(CH_2)_n-C(O)O-R^a$, $-(CH_2)_n-NR^aR^b$, $-(CH_2)_n-C(O)-NR^aR^b$, $-(CH_2)_n-C(O)-N(H)-(CH_2)_m-NR^aR^b$, $-C(O)R^a$, $-C(O)OR^a$, $-C(O)NR^aR^b$, $-OC(O)R^a$, $-OC(O)OR^a$, $-OC(O)NR^aR^b$, $-S(O)_2R^a$, $-S(O)_2OR^a$, $-S(O)_2NR^aR^b$, $-NR^aC(O)R^b$, $-NR^aC(O)OR^b$, $-NR^aC(O)SR^b$, $-NR^aC(O)NR^bR^c$, $-P(O)_2R^a$, -P(O)(OR^a)₂, -P(O)(OR^a)O⁻, onde a variável n é um inteiro de 0 a 10 (preferivelmente de 0 a 4, mais preferivelmente 0 a 2 e sobretudo preferivelmente 2), a variável m é um inteiro de 1 a 10 (preferivelmente 1 a 4 e sobretudo preferivelmente 2-3) e pelo menos um de Ra e Rb no grupo pendente é um substituinte polimérico como acima descrito. Mais preferivelmente, um de R², R⁴ e R⁶ em cada um dos anéis fenila é independentemente selecionado do grupo mencionado. modalidades, o restante de R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ nos anéis fenila são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila e arila substituída. preferivelmente, pelo menos um de Ra e Rb no grupo pendente é um substituinte de Fórmula -RyRx, onde Rx é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) ou um substituinte polimérico compreendendo dois ou mais grupos de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) covalentemente ligados juntos. Preferivelmente, um de R², R⁴ e R⁶ em pelo menos um dos anéis fenila é selecionado do grupo consistindo em -(CH₂)_n-O-R^a e -(CH₂)_n-NR^aR^b, a variável n é zero e pelo menos um de R^a e R^b no grupo pendente é um substituinte de Fórmula -RyRx, onde Rx é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C). Em tal modalidade, R^x preferivelmente é hidrogênio. Em uma modalidade preferida, a invenção provê um [0060]

composto de amina secundária de Fórmula (CCIII) abaixo: (CCIII)

$$R^{5}$$

$$R^{205}$$

$$R^{2}$$

$$R^{6}$$

$$R^{2}$$

$$R^{6}$$

$$R^{2}$$

$$R^{6}$$

$$R^{4}$$

Na estrutura de Fórmula (CCIII), cada R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ é [0061] independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio. alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e Rw. e R²⁰⁵ é um substituinte polimérico como descrito acima. Mais preferivelmente, cada R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila e arila substituída. Ainda mais preferivelmente, cada R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alqula. Preferivelmente, R²⁰⁵ é um substituinte de Fórmula —R^yR^x, onde R^x é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alguila ou C₁-C₄ alguila) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) ou um substituinte polimérico compreendendo dois ou mais grupos de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) covalentemente ligados juntos. Mais preferivelmente, R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C) e R^x é hidrogênio. modalidade, Ry preferivelmente é uma estrutura de (CI) em que uma soma de x, y e z é de a partir de 3 a cerca de 50, 3 a cerca de 30, 3 a cerca de 25, 3 a cerca de 20, 3 a cerca de 15, ou 3 a cerca de 10. Em uma outra modalidade do tipo, R^y preferivelmente é uma estrutura de (CII) em que a soma de t, u e v é de a partir de 3 a cerca de 50, 3 a cerca de 30, 3 a cerca de 25, 3 a cerca de 20, 3 a cerca de 15, ou 3 a cerca de 10.

[0062] Em uma modalidade preferida, a invenção provê um composto de amina secundária de Fórmula (CCIV) abaixo: (CCIV)

$$R^{5}$$
 R^{205}
 R^{2}
 R^{2}
 R^{2}
 R^{2}
 R^{2}
 R^{3}
 R^{2}
 R^{2}
 R^{3}

Na estrutura de Fórmula (CIV), cada R², R³, R⁵ e R⁶ é [0063] independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e Rw, e R²⁰⁵ e R²⁰⁶ são substituintes poliméricos independentemente selecionados como Mais preferivelmente, cada R², R³, R⁵ e R⁶ é descrito acima. independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila e arila substituída. Ainda mais preferivelmente, cada R², R³, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila). Preferivelmente, R²⁰⁵ e R²⁰⁶ são substituintes cada um independentemente selecionados de Fórmula -RyRx, onde cada R^x é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e cada Ry é um substituinte polimérico independentemente selecionado de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) ou um substituinte polimérico compreendendo dois ou mais grupos de Fórmula (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) (C), (CX), covalentemente ligados juntos. Mais preferivelmente, cada R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C) e cada R^x é hidrogênio. Em tal modalidade, cada R^y preferivelmente é uma estrutura de (CI) em que uma soma de x, y e z é de a partir de 3 a cerca de 50, 3 a cerca de 30, 3 a cerca de 25, 3 a cerca de 20, 3 a cerca de 15, ou 3 a cerca de 10. Em uma outra modalidade do tipo, cada R^y preferivelmente é uma estrutura de (CII) em que a soma de t, u e v é de a partir de 3 a cerca de 50, 3 a cerca de 30, 3 a cerca de 25, 3 a cerca de 20, 3 a cerca de 15, ou 3 a cerca de 10.

[0064] Em uma modalidade preferida, a invenção provê um composto de amina secundária de Fórmula (CCX) abaixo: (CCX)

[0065] Na estrutura de Fórmula (CCX), cada R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e R™, e R²¹¹ e R²¹² são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila (por exemplo, C¹-C¹₀ alquila ou C¹-C⁴ alquila) e substituintes poliméricos como descrito acima, contanto que pelo menos um de R²¹¹ e R²¹² seja um substituinte polimérico. Mais preferivelmente, cada R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila e arila substituída. Ainda mais preferivelmente, cada R², R³, R⁴, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C¹-C¹₀ alquila ou C¹-C⁴ alquila). Preferivelmente, um de R²¹¹ e R²¹² is

um substituinte de Fórmula —R^yR^x, onde R^x é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) ou um substituinte polimérico compreendendo dois ou mais grupos de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) covalentemente ligados juntos. Mais preferivelmente, R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C) e R^x é hidrogênio. Em tal modalidade, R^y preferivelmente é uma estrutura de (CI) em que uma soma de x, y e z é de a partir de 3 a cerca de 50, 3 a cerca de 30, 3 a cerca de 25, 3 a cerca de 20, 3 a cerca de 15, ou 3 a cerca de 10. Em uma outra modalidade do tipo, R^y preferivelmente é uma estrutura de (CII) em que a soma de t, u e v é de a partir de 3 a cerca de 50, 3 a cerca de 30, 3 a cerca de 25, 3 a cerca de 20, 3 a cerca de 20, 3 a cerca de 15, ou 3 a cerca de 10.

[0066] Em uma modalidade preferida, a invenção provê um composto de amina secundária de Fórmula (CCXI) abaixo: (CCXI)

$$R^{5}$$
 R^{211}
 R^{212}
 R^{3}
 R^{2}
 R^{2}

[0067] Na estrutura de Fórmula (CCXI), cada R², R³, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila, arila substituída e Rw, e R²¹¹, R²¹², R²¹³ e R²¹⁴ são independentemente selecionados do grupo consistindo em hidrogênio, alquila (por exemplo, C₁-C¹₀ alquila ou C₁-C₄ alquila) e substituintes poliméricos como descrito acima, contanto que pelo menos

um de R²¹¹, R²¹², R²¹³ e R²¹⁴ seja um substituinte polimérico. Mais preferivelmente, cada R², R³, R⁵ e R⁶ é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio, alquila, alquila substituída, arila e arila substituída. Ainda mais preferivelmente, cada R2, R3, R5 e R6 é independentemente selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C₁-C₁₀ alquila ou C₁-C₄ alquila). Preferivelmente, um de R²¹¹, R²¹², R²¹³ e R²¹⁴ é um substituinte de Fórmula –R^yR^x, onde R^x é selecionado do grupo consistindo em hidrogênio e alquila (por exemplo, C_1 - C_{10} alquila ou C_1 - C_4 alquila) e R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) ou um substituinte polimérico compreendendo dois ou mais grupos de Fórmula (C), (CX), (CXX), (CXXX), (CXL), (CL), (CLX) ou (CLXX) covalentemente ligados juntos. Mais preferivelmente, R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C) e R^x é hidrogênio. Em uma outra modalidade preferida, R²¹¹ e R²¹³ são substituintes cada um independentemente selecionados de Fórmula –R^yR^x, cada R^y é um substituinte polimérico de Fórmula (C) e cada Rx é hidrogênio. Em ainda uma outra modalidade preferida, cada um de R²¹¹, R²¹², R²¹³ e R²¹⁴ é um substituinte independentemente selecionado de Fórmula --RyRx, cada Ry é um substituinte polimérico de Fórmula (C) e cada Rx é hidrogênio.

[0068] Nas estruturas acima, qualquer carga presente em qualquer uma das estruturas é equilibrada com um contraíon interno ou externo independentemente selecionado adequado. Contraíons externos independentemente selecionados adequados podem ser catiônicos ou aniônicos. Exemplos de cátions adequados incluem, mas não estão limitados a, um ou mais metais preferivelmente selecionados do Grupo I e do Grupo II, os mais preferidos sendo Na, K, Mg e Ca, ou um cátion orgânico tal como imínio, amônio e fosfônio. Exemplos de ânions adequados incluem, mas não estão limitados a, flúor, cloro, bromo, iodo,

perclorato, hidrogenossulfato, sulfato, aminossulfato, nitrato, dihidrogeno fosfato, hidrogeno fosfato, fosfato, bicarbonato, carbonato, metossulfato, etossulfato, cianato, tiocianato, tetraclorozincato, borato, tetrafluorborato, acetato, cloroacetato, cianoacetato, hidroxiacetato, aminoacetato, metilaminoacetato, di- e tri-cloroacetato, 2-cloropropionato, 2-hidroxipropionato, glicolato, tioglicolato, tioacetato, fenoxiacetato, trimetilacetato, valerato, palmitato, acrilato, oxalato, malonato, crotonato, succinato, citrato, metileno-bis-tioglicolato, etilenonitrilotriacetato, fumarato, maleato, bis-iminoacetato, benzoato, metilbenzoato. clorobenzoato. diclorobenzoato, hidroxibenzoato, aminobenzoato, ftalato. tereftalato, indolilacetato, clorobenzenossulfonato, benzenossulfonato, toluenossulfonato, bifenilsulfonato e clorotoluenossulfonato. Aqueles de habilidade comum na técnica têm bastante conhecimento de contraíons diferentes que podem ser usados no lugar daqueles listados acima.

Os compostos acima descritos acima são acreditados ser [0069] bastante adequados para uso como antioxidantes ou estabilizadores para materiais orgânicos que são submetidos à degradação oxidativa ou outra. Especificamente, os compostos de amina secundários são acreditados ser sequestrantes de radical livre eficazes, que funcionam através de doação de um átomo de hidrogênio (isto é, o átomo de hidrogênio ligado ao átomo de nitrogênio amina) para as espécies de radical livre. Portanto, em uma aplicação, os compostos de amina descritos acima podem ser usados como antioxidantes estabilizadores para polímeros orgânicos, tais como polímeros de poliolefina e poliuretano, e para composições contendo compostos orgânicos que são suscetíveis à degradação, tais como composições de cuidado para lavagem de roupa. Em tais aplicações, os compostos de amina podem ser projetados para ter características que otimizam seu desempenho no polímero ou composição à qual eles são adicionados. Por exemplo, o comprimento do substituinte polimérico pode ser projetado para melhorar a compatibilidade do composto de amina com os componentes da composição ou, no caso de estabilização de um polímero, o polímero em si ou as matérias-primas usadas na fabricação do polímero. Por exemplo, o comprimento do substituinte polimérico pode ser projetado para prover um composto de amina que é líquido em temperatura ambiente, tornando mais fácil manusear e misturar homogeneamente o composto de amina com as matérias-primas líquidas (por exemplo, polióis) usadas na fabricação de certos polímeros (por exemplo, polímeros de poliuretano). Também, o substituinte polimérico pode conter um ou mais grupos funcionais que reagem no polímero, dessa maneira enxertando o composto antioxidante de amina na estrutura principal do polímero. Em tal modalidade, o substituinte polimérico do composto de amina pode ter um grupo reativo funcional, o que fará com que o composto de amina funcione como um agente de término de cadeia, ou o substituinte polimérico pode ter dois ou mais grupos funcionais reativos, que permitirão que o composto funcione como um trocador de cadeia ou um agente de reticulação. Através da incorporação do composto de amina ao polímero, o composto de amina não pode migrar para fora do polímero, o que se dirige a um dos inconvenientes para o uso de antioxidantes de amina aromáticos conhecidos em polímeros.

[0070] Em uma segunda modalidade, a invenção provê um método para produção de um polímero de poliuretano usando o composto de amina descrito acima como um antioxidante ou estabilizador. O método compreende as etapas de: (a) prover um poliol; (b) prover um composto poli-isocianato; (c) prover um composto de amina como descrito acima; (d) combinar o poliol, o composto poli-isocianato e o composto de amina para produzir uma mistura de reação; e (e) permitir que o poliol e o composto poli-isocianato reajam para produzir um polímero de

poliuretano.

O método descrito acima pode utilizar qualquer poliol [0071] adequado ou combinação de polióis. Polióis adequados incluem, mas não estão limitados a, glicóis de peso molecular baixo, tais como etileno glicol, 1,2-propileno glicol, 1,3-propileno glicol, 1,4-butileno glicol e 1,6hexametileno glicol; poliéster dióis obtidos a partir de ácidos dibásicos, tais como ácido adípico, ácido maleico e ácido tereftálico; poliéster dióis, tais como polilactonas obtidas submetendo as lactonas à polimerização de abertura de anel com glicóis; policarbonato dióis; e poliéter dióis, tais como politetrametileno glicol, polietileno glicol e polipropileno glicol. Poliéter polióis adequados incluem aqueles feitos através da reação de epóxidos, tais como óxido de etileno, óxido de propileno, óxido de butileno e glicidol, com um composto iniciador multifuncional, tal como um álcool ou amina multifuncional. Exemplos de compostos iniciadores multifuncionais adequados incluem, mas não estão limitados a, água, glicerina, pentaeritritol, etileno glicol, propileno glicol (por exemplo, 1,2propileno glicol), trimetilolpropano, açúcares e etileno diamina. O(s) poliol(óis) usado(s) no método pode(m) ter qualquer massa molar adequada. Em uma modalidade preferida, o(s) poliol(óis) tem/têm uma massa molar de cerca de 400 g/mol ou mais. Mais preferivelmente, o(s) poliol(óis) tem/têm uma massa molar de cerca de 500 g/mol ou mais, cerca de 750 g/mol ou mais ou cerca de 1.000 g/mol ou mais. Preferivelmente, o(s) poliol(óis) tem/têm uma massa molar de cerca de 10.000 g/mol ou menos. Portanto, o(s) poliol(óis) tem/têm uma massa molar de cerca de 400 g/mol a cerca de 10.000 g/mol, cerca de 500 g/mol a cerca de 10.000 g/mol, cerca de 750 g/mol a cerca de 10.000 g/mol ou cerca de 1.000 g/mol a cerca de 10.000 g/mol.

[0072] O método descrito acima pode utilizar qualquer composto poli-isocianato adequado ou combinação de compostos poli-isocianato. Compostos poli-isocianato adequados incluem, mas não estão limitados

a, diisocianatos aromáticos, tais como tolueno-2,4-diisocianato (TDI), diisocianato de 4-metoxi-1,3-fenileno, diisocianato de 4-isopropil-1,3fenileno, diisocianato de 4-cloro-1,3-fenileno, diisocianato de 4-butoxi-2,4-diisocianatodifenil éter, 4,4'-metilenobis(fenil-1,3-fenileno, isocianato) (MDI), MDI polimérico, diisocianato de durileno, diisocianato de tolidina, diisocianato de xilileno (XDI), diisocianato de 1,5-naftaleno, diisocianato de benzidina, diisocianato de o-nitrobenzidina e 4,4diisocianatodibenzila; diisocianatos alifáticos, tais como diisocianato de metileno, diisocianato de 1,4-tetrametileno, diisocianato de 1,6hexametileno e diisocianato de 1,10-decametileno; diisocianatos alicíclicos, tais como diisocianato de 1,4-cicloexileno, 4,4-metilenobis(cicloexilisocianato), diisocianato 1,5-tetraidronaftaleno, diisocianato de isoforona, MDI hidrogenado e XDI hidrogenado; e prepolímeros de poliuretano obtidos através de reação de qualquer um dos diisocianatos mencionados acima com polióis ou poliaminas de pesos moleculares baixos de modo que os pré-polímeros resultantes têm grupos isocianato nas suas extremidades.

[0073] Em adição ao(s) poliol(óis) e ao(s) composto(s) poliisocianato, a mistura de reação pode conter um ou mais extensores de cadeia adequados. Esses incluem, mas não estão limitados a, água; dióis de peso molecular baixo, tais como etileno glicol e propileno glicol; diaminas alifáticas, tal como etilenodiamina; diaminas aromáticas, tal como 4,4'-diaminodifenilmetano; diaminas alicíclicas, tais como 4,4'diaminodicicloexilmetanol e isoforonodiamina; alcanolaminas, tal como etanolamina; hidrazinas; e di-hidrazidas, tal como di-hidrazida succínica. Dentre os extensores de cadeia mencionados acima, os compostos diamina são preferíveis, com 4,4'-diaminodifenilmetano sendo particularmente preferido devido à sua resistência ao calor e 4,4'diaminodicicloexilmetano sendo preferido por resistência à luz. Os extensores de cadeia mencionados acima podem, certamente, ser usados sozinhos ou em qualquer combinação adequada.

[0074] Quando o método é usado para produzir uma espuma de poliuretano, a mistura de reação compreende preferivelmente um ou mais agente(s) de sopro adequado(s). Agentes de sopro adequados incluem, mas não estão limitados a, pentano, 1,1,1,2-tetrafluoretano, 1,1,1,3,3-pentafluorpropano, água (que produz dióxido de carbono através de uma reação com o composto poli-isocianato).

Tipicamente, o(s) poliol(óis) e o(s) composto(s) poli-[0075] isocianato são reagidos na presença de um catalisador, tal como um catalisador de amina, um catalisador organometálico (por exemplo, compostos organoestanho, tal como dilaurato de dibutilestanho) ou uma mistura dos dois. Catalisadores de amina, que são tipicamente composto de amina terciária (por exemplo, trietilenodiamina ou 1,4diazabiciclo[2.2.2]octano, dimetilcicloexilamina, diemetiletanolamina e bis-(2-dimetilaminoetil)éter), são os catalisadores mais comumente usados na produção de espumas de poliuretano flexíveis, tais como aquelas usadas em assento e outras de aplicações de acolchoamento. [0076] No método descrito acima, o(s) composto(s) amina descrito(s) acima pode(m) ser adicionado(s) ao sistema de reação em qualquer nível adequado. Como será compreendido por aqueles versados na técnica, o carregamento necessário do composto(s) amina dependerá de vários fatores, tais como a massa molar do composto(s) amina, o poliol particular que está sendo usado e o nível de proteção antioxidante desejada para o polímero de poliuretano resultante. Tipicamente, o(s) composto(s) amina é/são adicionados ao sistema de reação em uma quantidade de cerca de 10 partes em peso por cem partes em peso do poliol (php) ou menos. Portanto, em uma modalidade preferida, o(s) composto(s) amina é/são preferivelmente adicionados ao sistema de reação em uma quantidade de cerca de 0,04 a cerca de 5 php ou mais preferivelmente de a partir de cerca de 0,04 a 3 php.

Quando mais de um dos compostos de amina descritos acima é usado, cada composto de amina pode ser adicionado à mistura de reação em uma quantidade se encaixando em uma das faixas mencionadas acima, ou a quantidade total dos compostos de amina descritos acima adicionada à mistura de reação pode se encaixar em uma das faixas citadas acima. Preferivelmente, a quantidade total dos compostos de amina descritos acima adicionada à mistura de reação se encaixa em uma das faixas citadas acima.

[0077] Em uma terceira modalidade, a invenção provê uma composição de cuidado para lavagem de roupa compreendendo um ou mais dos compostos de amina descritos acima. Mais especificamente, nessa modalidade, a invenção provê uma composição de cuidado para lavagem de roupa compreendendo um ou mais ingredientes de cuidado para lavagem de roupa e um ou mais dos compostos de amina descritos acima.

[0078] O(s) composto(s) amina descrito(s) acima pode(m) estar presente(s) na composição de cuidado para lavagem de roupa em qualquer quantidade adequada. Por exemplo, o(s) composto(s) amina pode(m) estar presente(s) na composição de cuidado para lavagem de roupa em uma quantidade de cerca de 0,001 a cerca de 2% em peso. Preferivelmente, o(s) composto(s) amina está/estão presente(s) na composição de cuidado para lavagem de roupa em uma concentração na faixa de 0,01 a 0,08% em peso. Quando a composição de cuidado para lavagem de roupa contém mais de um dos compostos de amina descritos acima, cada composto de amina pode estar individualmente presente na composição de cuidado para lavagem de roupa em uma quantidade se encaixando em uma das faixas citadas acima, ou a quantidade combinada de todos os compostos de amina presentes na composição pode se encaixar em uma das faixas citadas acima. Preferivelmente, a quantidade combinada de todos os compostos de amina presentes na composição (isto é, todos os compostos de amina descritos acima) se encaixa em uma das faixas citadas acima.

INGREDIENTES DE CUIDADO PARA LAVAGEM DE ROUPA Sistema tensoativo

[0079] As composições de cuidado para lavagem de roupa da presente invenção podem compreender de a partir de cerca de 0,00% em peso, mais tipicamente de a partir de cerca de 0,10 a 80% em peso de um tensoativo. Em um aspecto, tais composições podem compreender de a partir de cerca de 5% a 50% em peso de tensoativo. Tensoativos utilizados podem ser do tipo aniônico, não iônico, anfotérico, anfolítico, zwitteriônico ou catiônico ou podem compreender misturas compatíveis desses tipos. Tensoativos aniônicos ou não iônicos são tipicamente empregados se o produto de cuidado de tecido for um detergente para lavagem. Por outro lado, tensoativos catiônicos são tipicamente empregados se o produto de cuidado de tecido for um amaciante de tecido.

Tensoativo aniônico

[0080] Tensoativos aniônicos úteis podem ser de vários tipos diferentes. Por exemplo, sais solúveis em água dos ácidos graxos superiores, isto é, "sabões", são tensoativos aniônicos úteis nas presentes composições. Isso inclui sabões de metal alcalino tais como os sais de sódio, potássio, amônio e alquilolamônio de ácidos graxos superiores contendo de a partir de cerca de 8 a cerca de 24 átomos de carbono, ou até mesmo de a partir de cerca de 12 a cerca de 18 átomos de carbono. Sabões podem ser feitos através de saponificação direta de gorduras e óleos ou através da neutralização de ácidos graxos livres. Particularmente úteis são os sais de sódio e potássio das misturas de ácidos graxos derivados de óleo de coco e sebo, isto é, sabão de sebo e coco de sódio ou potássio.

[0081] Sulfatos de alquila preferidos são sulfatos alcoxilados de C8-

18 alquila, preferivelmente sulfatos alcoxilados de C12-15 alquila ou hidroxialquila. Preferivelmente, o grupo de alcoxilação é um grupo de etoxilação. Tipicamente, o sulfato alcoxilado de alquila tem um grau de alcoxilação médio de a partir de 0,5 a 30 ou 20 ou de a partir de 0,5 a 10. O grupo alquila pode ser ramificado ou linear. O tensoativo de sulfato de alquila alcoxilado pode ser uma mistura de sulfatos de alquila alcoxilados, a misturando tendo um comprimento de cadeia de carbono médio (média aritmética) dentro da faixa de cerca de 12 a cerca de 30 átomos de carbono ou um comprimento de cadeia de carbono médio de cerca de 12 a cerca de 15 átomos de carbono e um grau médio (média aritmética) de alcoxilação de a partir de cerca de 1 mol a cerca de 4 mols de óxido de etileno, óxido de propileno ou misturas dos mesmos, ou um grau médio (média aritmética) de alcoxilação de cerca de 1,8 mol de óxido de etileno, óxido de propileno ou misturas dos mesmos. O tensoativo de sulfato de alquila alcoxilado pode ter um comprimento de cadeia de carbono de a partir de cerca de 10 átomos de carbono a cerca de 18 átomos de carbono, e um grau de alcoxilação de a partir de cerca de 0,1 a cerca de 6 mol de óxido de etileno, óxido de propileno ou misturas dos mesmos. O sulfato de alquila alcoxilado pode ser alcoxilado com óxido de etileno, óxido de propileno ou misturas dos mesmos. Tensoativos de sulfato de éter de alquila podem conter distribuição de etoxilato no pico. Exemplos específicos incluem C12-C15 EO 2.5 Sulfate, C14-C15 EO 2.5 Sulfate e C12-C15 EO 1.5 Sulfate derivados de álcoois NEODOL® da Shell e C12-C14 EO3 Sulfate, C12-C16 EO3 Sulfate, C12-C14 EO2 Sulfate e C12-C14 EO1 Sulfate derivados de álcoois naturais da Huntsman. O AES pode ser linear, ramificado ou combinações dos mesmos. O grupo alquila pode ser derivado de álcoois sintéticos ou naturais tais como aqueles fornecidos pelo nome comercial Neodol® pela Shell, Safol®, Lial® e Isalchem® pela Sasol ou álcoois de corte médio derivados de óleos vegetais tais como coco e semente de palma. Um outro tensoativo detersivo aniônico adequado é carboxilato de éter de alquila, compreendendo um álcool de alquila C10-C26 linear ou ramificado, preferivelmente C10-C20 linear, sobretudo preferivelmente C16-C18 linear e de a partir de 2 a 20, preferivelmente 7 a 13, mais preferivelmente 8 a 12, sobretudo preferivelmente 9,5 a 10,5 etoxilatos. A forma ácida ou forma de sal, tal como sal de sódio ou amônio, pode ser usada, e a cadeia de alquila pode conter uma ligação dupla cis ou trans. Ácidos carboxílicos de éter de alquila estão disponíveis da Kao (Akypo®), Huntsman (Empicol®) e Clariant (Emulsogen®).

[0082] Outros tensoativos aniônicos úteis podem incluir os sais de metal alcalino de alquil benzeno sulfonatos, em que o grupo alquila contém de a partir de cerca de 9 a cerca de 15 átomos de carbono, em configuração de cadeia reta (linear) ou ramificada. Em alguns exemplos, o grupo alquila é linear. Tais alquilbenzeno sulfonatos lineares são conhecidos como "LAS". Em outros exemplos, o alquilbenzeno sulfonato linear pode ter um número médio de átomos de carbono no grupo alquila de a partir de cerca de 11 a 14. Em um exemplo específico, os alquilbenzeno sulfonatos de cadeia reta lineares podem ter um número médio de átomos de carbono no grupo alquila de cerca de 11,8 átomos de carbono, que pode ser abreviado como C11.8 LAS. Sulfonatos preferidos são C10-13 alquil benzeno sulfonato. Alquil benzeno sulfonato adequado (LAS) pode ser obtido através de sulfonação de alquil benzeno linear comercialmente disponível (LAB); LAB adequado inclui LAB com baiso teor de 2-fenila, tais como aqueles fornecidos pela Sasol sob a marca registrada Isochem® ou aqueles fornecidos pela Petresa sob a marca registrada Petrelab®, outros LAB adequados incluem LAB com alto teor de 2-fenila, tais como aqueles fornecidos pela Sasol sob a marca registrada Hyblene[®]. Um tensoativo detersivo aniônico adequado é um alquil benzeno sulfonato que é obtido pelo processo catalisado DETAL, embora outras vias de síntese, tal como HF, possam ser também adequadas. Em um aspecto, um sal de magnésio de LAS é usado. Tensoativos de sulfato aniônicos adequados para uso aqui incluem sais solúveis em água de C8-C18 alquil ou hidroxialquil sulfonatos; C11-C18 alquil benzeno sulfonatos (LAS), alquilbenzeno sulfonato modificado (MLAS) como discutido nos WO 99/05243, WO 99/05242, WO 99/05244, WO 99/05082, WO 99/05084, WO 99/05241, WO 99/07656, WO 00/23549 e WO 00/23548; sulfonato de éster de metila (MES); e sulfonato de alfa-olefina (AOS). Esses também incluem os sulfonatos de parafina que podem ser monossulfonatos e/ou dissulfonatos, obtidos através da sulfonação de parafinas de 10 a 20 átomos de carbono. O tensoativo de sulfonato pode também incluir os tensoativos de sulfonato de alquil glicerila.

Os tensoativos aniônicos da presente invenção podem existir em uma forma ácida, e a dita forma ácida pode ser neutralizada para formar um sal de tensoativo que é desejável para uso nas presentes composições detergentes. Agentes típicos para neutralização incluem a base de contraíon de metal tais como hidróxidos, por exemplo, NaOH ou KOH. Agentes preferidos adicionais para neutralização de tensoativos aniônicos da presente invenção e tensoativos aniônicos adjuntos ou cotensoativos em suas formas ácidas incluem amônia, aminas ou alcanolaminas. Alcanolaminas são preferidas. Exemplos não limitantes adequados incluem monoetanolamina, dietanolamina, trietanolamina e outras alcanolaminas lineares ou ramificadas conhecidas na técnica. por exemplo, alcanolaminas altamente preferidas incluem 2-amino-1-propanol, 1-aminopropanol, monoisopropanolamina ou 1-amino-3-propanol.

Tensoativo não iônico

[0084] Preferivelmente, a composição de cuidado para lavagem de roupa compreende um tensoativo detersivo não iônico. Tensoativos não

iônicos adequados incluem álcoois graxos alcoxilados. O tensoativo não iônico pode ser selecionado de álcoois etoxilados e alquil fenóis etoxilados da fórmula R(OC2H4),OH, em que R é selecionado do grupo consistindo em radicais de hidrocarboneto alifáticos contendo de a partir de cerca de 8 a cerca de 15 átomos de carbono e radicais de alquil fenila em que os grupos alquila contêm de a partir de cerca de 8 a cerca de 12 átomos de carbono, e o valor médio de n é de a partir de cerca de 5 a cerca de 15. Outros exemplos não limitantes de tensoativos não iônicos úteis aqui incluem: etoxilatos de C8-C18 alquila, tais como tensoativos não iônicos NEODOL® da Shell; alcoxilatos de C6-C12 alquil fenol onde as unidades de alcoxilato podem ser unidades de etileno-óxi, unidades de propileno-óxi ou uma misturas das mesmas; condensados de álcool C12-C18 e C6-C12 alquil fenol com polímeros em bloco de óxido de etileno/óxido de propileno tal como Pluronic® da BASF; álcoois ramificados de cadeia média C14-C22, BA; alcoxilatos de alquila ramificados de cadeia média C14-C22, BAE_x, em que x é de a partir de 1 a 30; alquilpolissacarídeos; especificamente alquilpoliglicosídeos; amidas do ácido poli-hidroxi graxo; e tensoativos de álcool poli(oxialquilado) capeado com éter. Exemplos específicos incluem tensoativos não iônicos da C12-C15 EO7 e C14-C15 EO7 NEODOL® da Shell, tensoativos não iônicos C12-C14 EO7 e C12-C14 EO9 Surfonic® da Huntsman.

[0085] Tensoativos não iônicos altamente preferidos são os produtos de condensação de álcoois Guerbet com de a partir de 2 a 18 moles, preferivelmente 2 a 15, mais preferivelmente 5-9, de óxido de etileno por mol de álcool. Tensoativos não iônicos adequados incluem aqueles com o nome comercial Lutensol® da BASF. Lutensol XP-50 é um etoxilato de Guebert que contém uma média de 5 grupos etóxi. Lutensol XP-80 e contendo uma média de 8 grupos etóxi. Outros tensoativos não iônicos adequados para uso aqui incluem poliglicol

éteres de álcool graxo, alquilpoliglicosídeos e glucamidas de ácido graxo, alquilpoliglicosídeos com base em álcoois Guebert.

Tensoativo anfotérico

[0086] O sistema tensoativo pode incluir tensoativo anfotérico, tal como óxido de amina. Óxidos de amina preferidos são óxido de alquil dimetil amina ou óxido de alquil amido propil dimetil amina, mais preferivelmente óxido de alquil dimetil amina e especialmente óxido de coco dimetil amino. Óxido de amina pode ter uma porção alquila linear ou ramificada pela metade.

Tensoativos anfolíticos

[0087] O sistema tensoativo pode compreender um tensoativo anfolítico. Exemplos não limitantes, específicos, de tensoativos anfolíticos incluem: derivados alifáticos de aminas secundárias ou terciárias ou derivados alifáticos de aminas heterocíclicas secundárias e terciárias em que o radical alifático pode ser de cadeia reta ou ramificada. Um dos substituintes alifáticos pode conter pelo menos cerca de 8 átomos de carbono, por exemplo, de a partir de cerca de 8 a cerca de 18 átomos de carbono e pelo menos um contém um grupo aniônico de solubilização em água, por exemplo, carbóxi, sulfonato, sulfato. Vide Pat. U.S. No. 3.929.678 na coluna 19, linhas 18-35, para exemplos adequados de tensoativos anfolíticos.

Tensoativo zwitteriônico

[0088] Tensoativos zwitteriônicos são conhecidos na técnica, e incluem em geral tensoativos que estão carregados neutramente no geral, mas carregam pelo menos um átomo/grupo carregado positivo e pelo menos um átomo/grupo carregado negativamente. Exemplos de tensoativos zwitteriônicos incluem: derivados de aminas secundárias e terciárias, derivados de aminas heterocíclicas secundárias e terciárias, ou derivados de compostos amônio quaternário, fosfônio quaternário ou sulfônio terciário. Vide Patente U.S. No. 3.929.678 na coluna 19, linha

38, até coluna 22, linha 48, para exemplos de tensoativos zwitteriônicos; betaínas, incluindo alquil dimetil betaína e cocodimetil amidopropil betaína, óxidos de C₈ a C₁₈ (por exemplo, de C₁₂ a C₁₈) amina e sulfo e hidroxi betaína, tal como N-alquil-N,N-dimetilamino-1-propano sulfonato onde o grupo alquila pode ser C₈ a C₁₈ e em certas modalidades de C₁₀ a C₁₄. Um tensoativo zwitteriônico preferido para uso na presente invenção é cocoamidopropil betaína.

Tensoativos catiônicos

[0089] Exemplos de tensoativos catiônicos incluem tensoativos de amônio quaternário, que têm até 26 átomos de carbono específicos. Exemplos adicionais incluem a) tensoativos de amônio quaternário alcoxilato (AQA) como discutido na Pat. U.S. No. 6.136.769; b) dimetil hidroxietil amônio quaternário como discutido na Pat. U.S. No. 6.004.922; c) tensoativos de poliamina catiônicos como discutido nos WO 98/35002, WO 98/35003, WO 98/35004, WO 98/35005 e WO 98/35006, que são aqui incorporados a título de referência; d) tensoativos de éster catiônicos como discutido nas Pat. U.S. Nos. 4.228.042, 4.239.660 4.260.529 e U.S. Pat. No. 6.022.844, que são aqui incorporadas a título de referência; e e) tensoativos amino como discutido na Patente U.S. No. 6.221.825 e no WO 00/47708, que são aqui incorporados a título de referência, e especificamente amido propildimetil amina (APA). Tensoativos catiônicos úteis também incluem aqueles descritos na Pat. U.S. No. 4.222.905, Cockrell, expedida em 16 de setembro de 1980 e na Pat. U.S. No. 4.239.659, Murphy, expedida em 16 de dezembro de 1980, ambas aqui também incorporadas a título de referência. Compostos de amônio quaternário podem estar presentes em composições melhoradoras de tecido, tais como amaciantes de tecido, e compreendem cátions de amônio quaternário que são íons poliatômicos positivamente carregados da estrutura NR₄⁺, onde R é um grupo alquila ou um grupo arila.

Aditivos de Limpeza Adjuntos

[0090] As composições de cuidado para lavagem de roupa da invenção também podem conter aditivos de limpeza adjuntos. A natureza precisa dos aditivos de limpeza adjuntos e níveis de incorporação dos mesmos dependerão da forma física da composição de cuidado para lavagem de roupa, e a natureza precisa da operação de limpeza para a qual ela deve ser usada.

[0091] Os aditivos de limpeza adjuntos podem ser selecionados do grupo consistindo em *builders*, estruturantes ou espessantes, agentes de remoção/antirredeposição de sujeira de argila, agentes de liberação de sujeira poliméricos, agentes de dispersão poliméricos, agentes de limpeza de gordura poliméricos, enzimas, sistemas de estabilização de enzima, compostos alvejantes, agentes alvejantes, ativadores de alvejamento, catalisadores de alvejamento, abrilhantadores, corantes, agentes matizantes, agentes de inibição de transferência de corante, agentes de quelação, supressores de espuma, amaciantes e perfumes. Essa lista de aditivos de limpeza adjuntos é apenas exemplar, e não uma maneira de limitação dos tipos de aditivos de limpeza adjuntos que podem ser usados. A princípio, qualquer aditivo de limpeza adjunto conhecido na técnica pode ser usado na presente invenção.

Polímeros

[0092] A composição pode compreender um ou mais polímeros. Exemplos não limitantes, todos os quais podem ser opcionalmente modificados, incluem polietilenoiminas, carboximetilcelulose, poli(vinil-pirrolidona), poli(etileno glicol), poli(vinil álcool), poli(vinilpiridino-N-óxido), poli(vinilimidazol), policarboxilatos ou fenóis alcoxilados substituídos (ASP) como descrito no WO 2016/041676. Um exemplo de dispersantes ASP incluem, mas não estão limitados a, HOSTAPAL BV CONC S1000 disponível da Clariant.

[0093] Poliaminas podem ser usadas para remoção de gordura,

remoção de partícula ou sujeira. Uma ampla variedade de aminas e polialquilenoiminas pode ser alcoxilada para vários graus para obter limpeza hidrofóbica ou hidrofílica. Tais compostos podem incluir, mas não estão limitados a, polietilenoimina etoxilada, hexametileno diamina etoxilada e suas versões sulfatadas. Exemplos úteis de tais polímeros são HP20 disponível da BASF ou um polímero tendo a estrutura geral que segue:

 $bis((C_2H_5O) (C_2H_4O)_n)(CH_3)-N+-C_xH_{2x}-N+-(CH_3)-bis((C_2H_5O)(C_2H_4O)_n)$

[0094] em que n = de a partir de 20 a 30 e x = de a partir de 3 a 8 ou suas variantes sulfadas ou sulfonadas. Derivados de polietilenoimina anfifílicos polipropoxilados-polietoxilados podem também ser incluídos para obter remoção de gordura e emulsificação maiores. Esses podem compreender polialquilenoiminas alcoxiladas, preferivelmente tendo um bloco de óxido de polietileno interno e um bloco de óxido de polipropileno externo. Composições detergentes também podem conter polietilenoiminas não modificadas úteis para remoção de sujeira de bebida melhorada. PEI's de vários pesos moleculares estão comercialmente disponíveis da BASF Corporation sob a marca registrada Lupasol®. Exemplos de PEI's adequados incluem, mas não estão limitados a, Lupasol®, Lupasol G-35®.

[0095] A composição pode compreender um ou mais polímeros de carboxilato, tal como copolímero aleatório de maleato/acrilato ou homopolímero de poliacrilato útil como agentes de dispersão poliméricos. Policarboxilatos alcoxilados tais como aqueles preparados a partir de poliacrilatos são também úteis para prover dispersão de argila. Tais materiais são descritos no WO 91/08281. Quimicamente, esses materiais compreendem poliacrilatos tendo uma cadeia lateral etóxi por cada 7-8 unidades de acrilato. As cadeias laterais são da fórmula -(CH₂CH₂O)_m (CH₂)_nCH₃ em que m é 2-3 e n é 6-12. As cadeias

laterais são ligadas por éster ou éter à "estrutura principal" de acrilato para prover uma estrutura do tipo polímero "colmeia".

[0096] Copolímero(s) de enxerto anfifílicos preferidos compreende(m) (i) estrutura principal de polietileno glicol; e (ii) pelo menos uma porção pendente selecionada de acetato de polivinila, álcool de polivinila e misturas dos mesmos. Um exemplo de um copolímero de enxerto anfifílico é Sokalan HP22, fornecido pela BASF.

[0097] Fenóis alcoxilados substituídos como descrito no WO 2016/041676 são também exemplos de polímeros adequados que proveem dispersão de argila. Hostapal BV Conc. S1000, disponível da Clariant, é um exemplo não limitante de um dispersante de ASP.

[0098] Preferivelmente a composição compreende um ou mais polímeros de liberação de sujeira tais como polímeros Repel-o-tex, incluindo Repel-o-tex SF, SF-2 e SRP6 fornecidos pela Rhodia. Outros polímeros de liberação de sujeira adequados incluem polímeros Texcare, incluindo Texcare SRA100, SRA300, SRN100, SRN170, SRN240, SRN260 SRN300 e SRN325 fornecidos pela Clariant. Outros polímeros de liberação de sujeira adequados são polímeros Marloquest, tais como Marloquest SL, HSCB, L235M, B, G82 fornecido pela Sasol. Outros polímeros de liberação de sujeira adequados incluem polímeros de liberação de sujeira adequados com metila como descrito na US 9.365.806.

[0099] Preferivelmente as composições compreendem um ou mais polissacarídeos que podem ser em particular escolhidos de carboximetil celulose, metilcarboximetilcelulose, sulfoetilcelulose, metilidroxietilcelulose, carboximetil xiloglucano, carboximetil xilano, sulfoetilgalactomanana, carboximetil galactomanana, hidroxietil galactomanana, sulfoetil amido, carboximetil amido e misturas dos mesmos. Outros polissacarídeos adequados para uso na presente invenção são os glucanos. Glucanos preferidos são Poli alfa-1,3-

glucano que é um polímero compreendendo unidades monoméricas de glicose ligadas por ligações glicosídicas (isto é, ligações glicosídicas), em que pelo menos cerca de 50% das ligações glicosídicas são ligações alfa-1,3-glicosidicas. Poli alfa-1,3-glucano é um tipo de polissacarídeo. Poli alfa-1,3-glucano pode ser produzido enzimaticamente a partir de sacarose usando uma ou mais enzimas glicosiltransferase, tal como descrito na Pat. U.S. No. 7.000.000 e Publ. de Ped. de Patente U.S. Nos. 2013/0244288 e 2013/0244287 (todas aqui incorporadas a título de referência), por exemplo.

[00100] Outros polissacarídeos adequados para uso na composição são polissacarídeos catiônicos. Exemplos de polissacarídeos catiônicos incluem derivados de goma guar catiônicos, éteres de celulose contendo nitrogênio quaternário e polímeros sintéticos que são copolímeros de celulose eterificada, guar e amido. Quando usados, os presentes polímeros catiônicos ou são solúveis na composição ou são solúveis em uma fase de coacervato complexa na composição formada pelo polímero catiônico e o componente tensoativo aniônico, anfotérico e/ou zwitteriônico descrito aqui anteriormente. Polímeros catiônicos adequados são descritos nas Pat. U.S. Nos. 3.962.418; 3.958.581; e Publicação U.S. No. 2007/0207109A1.

[00101] Polímeros podem também funcionar como auxiliares de deposição para outras matérias-primas de detergente. Auxiliares de deposição preferidos são selecionados do grupo consistindo em polímeros catiônicos e não iônicos. Polímeros adequados incluem amidos catiônicos, hidroxietilcelulose catiônica, polivinilformaldeído, goma de alfarroba, mananas, xiloglucanos, goma de tamarindo, polietilenotereftalato e polímeros contendo metacrilato de dimetilaminoetila, opcionalmente com um ou mais monômeros selecionados do grupo compreendendo ácido acrílico e acrilamida.

Aminas adicionais

[00102] Poliaminas são conhecidas melhorar a remoção de gordura. Aminas cíclicas e lineares preferidas para desempenho são 1,3-bis (metilamino)-cicloexano, 4-metilcicloexano-1,3-diamina (Baxxodur ECX 210 fornecida pela BASF) 1,3 propano diamina, 1,6 hexano diamina, 1,3 pentano diamina (Dytek EP fornecida pela Invista), 2-metil 1,5 pentano diamina (Dytek A fornecida pela Invista). A US6710023 descreve composições de lavagem de louça à mão contendo as ditas diaminas e poliaminas contendo pelo menos 3 aminas protonáveis. As poliaminas de acordo com a invenção têm pelo menos um pka acima do pH de lavagem e pelo menos dois pka's maiores do que cerca de 6 e abaixo do pH de lavagem. Poliaminas preferidas são selecionadas do grupo consistindo tetraetilenopentamina, em hexaetilexamina, heptaetileptaminas, octaetiloctaminas, nonetilnonaminas e misturas das mesmas comercialmente disponíveis da Dow, BASF e Huntman. Polieteraminas especialmente preferidas são lipofílicas modificadas como descrito nas US9752101. US9487739 e US 9631163.

Inibidor de Transferência de Corante (DTI)

A composição pode compreender um ou mais agentes de inibição de transferência de corante. Em uma modalidade da invenção, os inventores constataram surpreendentemente que composições compreendendo agentes de inibição de transferência de corante poliméricos em adição ao corante especificado proveem desempenho melhorado. Isso é surpreendente porque esses polímeros evitam deposição de corante. Inibidores de transferência de corante adequados incluem, mas não estão limitados a, polímeros de polivinilpirrolidona, polímeros de N-óxido de poliamina, copolímeros de N-vinilpirrolidona e N-vinilimidazol, poliviniloxazolidonas e polivinilimidazóis ou misturas dos mesmos. Exemplos adequados incluem PVP-K15, ChromaBond S-400, ChromaBond S-403E e Chromabond S-100 da Ashland Aqualon e Sokalan HP165, Sokalan HP50, Sokalan HP53, Sokalan HP59, Sokalan® HP 56K, Sokalan® HP 66 da BASF. Outros DTIs adequados são como descrito no WO2012/004134. Quando presentes em uma composição-objeto, os agentes de inibição de transferência de corante podem estar presentes em níveis de a partir de cerca de 0,0001% a cerca de 10%, de a partir de cerca de 0,01% a cerca de 5% ou até mesmo de a partir de cerca de 0,1% a cerca de 3% em peso da composição.

Enzimas

[00104] Enzimas podem ser incluídas nas composições de cuidado para lavagem de roupa para uma variedade de propósitos, incluindo remoção de manchas à base de proteína, à base de carboidrato ou à base de triglicerídeos de substratos, para a prevenção de transferência de corante refugiado em lavagem de tecido e para restauração de tecido. Enzimas adequadas incluem proteases, amilases, lipases, carboidrases, celulases, oxidases, peroxidases, mananases e misturas das mesmas de qualquer origem adequada, tal como origem vegetal, animal, bacteriana, fúngica e levedura. Outras enzimas que podem ser usadas nas composições de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui incluem hemicelulases, peroxidases, proteases, celulases, endoglucanases, xilanases. lipases, fosfolipases, amilases, glucoamilases, esterases. cutinases. pectinases, xilanases, queratanases, redutases, oxidases, fenoloxidases, lipoxigenases, ligninases, pululanases, tanases, pentosanases, malanases, βglucanases, arabinosidases, hialuronidases, condroitinases, lacases ou misturas das mesmas, esterases, mananases, pectato liases ou misturas das mesmas. Outras enzimas adequadas incluem enzima Nuclease. A composição pode compreender uma enzima nuclease. A enzima nuclease é uma enzima capaz de clivar as ligações fosfodiéster entre as subunidades de nucleotídeo de ácidos nucleicos. A presente enzima nuclease é preferivelmente uma enzima desoxirribonuclease ou ribonuclease ou um fragmento funcional da mesma. Seleção de enzima é influenciada por fatores tais como atividade do pH e/ou estabilidade ótima, termoestabilidade e estabilidade para detergentes ativos, builders e similar.

[00105] As enzimas podem ser incorporadas à composição de cuidado para lavagem de roupa em níveis de a partir de 0,0001% a 5% de enzima ativa em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa. As enzimas podem ser adicionadas como um ingrediente único separado ou como misturas de duas ou mais enzimas.

Em algumas modalidades, lipase pode ser usada. Lipase pode ser comprada sob o nome comercial Lipex da Novozymes (Dinamarca). Amilases (Natalase[®], Stainzyme[®], Stainzyme Plus[®]) podem ser fornecidas pela Novozymes, Bagsvaerd, Dinamarca. Proteases podem ser fornecidas pela Genencor International, Palo Alto, Calif., USA (por exemplo, Purafect Prime®) ou pela Novozymes, Bagsvaerd, Dinamarca (por exemplo, Liquanase[®], Coronase[®], Savinase®). Outras enzimas preferidas incluem pectato liases, preferivelmente aquelas vendidas sob os nomes Pectawash®, Xpect®, Pectaway® e as mananases vendidas sob os nomes comerciais Mannaway® (todas Novozymes A/S, Bagsvaerd, Dinamarca) e Purabrite® (Genencor International Inc., Palo Alto, California). Uma gama de materiais de enzima e meios para sua incorporação às composições de cuidado para lavagem de roupa sintéticas é descrita nos WO 9307263 A; WO 9307260 A; WO 8908694 A; Pat. U.S. Nos. 3.553.139; 4.101.457; e Pat. U.S. No. 4.507.219. Materiais de enzima úteis para composições de cuidado para lavagem de roupa líquidas e sua incorporação a tais composições são descritos na U.S. Pat. No. 4.261.868.

Sistema de Estabilização de Enzima

[00107] As composições contendo enzima descritas aqui podem

compreender opcionalmente de a partir de cerca de 0,001% a cerca de 10%, em alguns exemplos de a partir de cerca de 0,005% a cerca de 8%, e em outros exemplos de a partir de cerca de 0,01% a cerca de 6%, em peso da composição, de um sistema de estabilização de enzima. O sistema de estabilização de enzima pode ser qualquer sistema de estabilização que seja compatível com a enzima detersiva. Tal sistema pode ser inerentemente provido por outros ativos da formulação, ou ser adicionado separadamente, por exemplo, pelo formulador ou por um fabricante de enzimas prontas para detergente. Tais sistemas de estabilização podem, por exemplo, compreender íon de cálcio, ácido bórico, propileno glicol, ácidos carboxílicos de cadeia curta, ácidos borônicos, sequestrantes de alvejante de cloro e misturas dos mesmos, e são projetados para se endereçar a problemas de estabilização diferentes dependendo do tipo e forma física da composição de cuidado para lavagem de roupa. Vide Pat. U.S. No. 4.537.706 para uma revisão de estabilizadores de borato.

Agentes de Quelação

[00108] Preferivelmente, a composição de cuidado para lavagem de roupa compreende agentes de quelação e/ou inibidor de crescimento de cristal. Moléculas adequadas incluem agentes de quelação de cobre, ferro e/ou manganês e misturas dos mesmos. Moléculas adequadas incluem aminocarboxilatos, aminofosfonatos, succinados, sais dos mesmos e misturas dos mesmos. Exemplos não limitantes de quelantes adequados para uso aqui incluem tetraacetatos de etilenodiamina, N-(hidroxietil)-etileno-diamino-triacetatos, nitrilotriacetatos. tetraproprionatos de etilenodiamina, trietileno-tetraamina-hexaacetatos, dietilenotriamina-pentaacetatos, etanoldiglicinas, etilenodiaminotetracis(metilenofosfonatos), ácido dietilenotriamina penta(metileno fosfônico) (DTPMP), dissuccinato de etilenodiamina (EDDS), ácido hidroxietanodimetilenofosfônico (HEDP), ácido metilglicinodiacético (MGDA), ácido dietilenotriaminopentaacético (DTPA) e ácido 1,2-di-hidroxibenzeno-3,5-dissulfônico (Tiron), sais dos mesmos e misturas dos mesmos. Tiron bem como outros catecóis sulfonados podem ser também usados como quelantes de metal pesado eficazes. Outros exemplos não limitantes de quelantes de uso na presente invenção são encontrados nas Patentes U.S. Nos. 7445644, 7585376 e 2009/0176684A1. Outros agentes de quelação adequados para uso aqui são a série comercial DEQUEST, e quelantes da Monsanto, DuPont e Nalco Inc.

Abrilhantadores

[00109] Abrilhantadores ópticos ou outros agentes de brilho ou branqueamento podem ser incorporados em níveis de a partir de cerca de 0,01% a cerca de 1,2%, em peso da composição, às composições de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui. Abrilhantadores ópticos comerciais que podem ser usados aqui podem ser classificados em subgrupos que incluem, mas não estão necessariamente limitados a, derivados de estilbeno, pirazolina, coumarina, ácido carboxílico, metinocianinas, dibenzotiofeno-5,5-dióxido, azóis, heterociclos de anel de 5 e 6 membros e outros agentes miscelâneos. Exemplos de tais abrilhantadores são descritos em "The Production and Application of Fluorescent Brightening Agents," M. Zahradnik, John Wiley & Sons, New York (1982). Exemplos específicos, não limitantes, de abrilhantadores ópticos que podem ser úteis nas presentes composições são aqueles identificados na Patente U.S. No. 4.790.856 e Pat. U.S. No. 3.646.015. Abrilhantadores altamente preferidos incluem 4,4'-bis{[4-anilino-6-[bis(2-hidroxietil)amino-s-triazin-2-il]-amino}-2,2'-estilbenodissulfonato dissódico. 4,4'-bis{[4-anilino-6-morfolino-s-triazin-2-il]-amino}-2,2'estilbenodissulfonato, 4,4"-bis[(4,6-di-anilino-s-triazin-2-il)-amino]-2,2'estilbenodissulfonato dissódico е 4,4'-bis-(2-sulfoestiril)bifenila dissódica.

Agentes Alvejantes

[00110] Pode ser preferido que a composição compreenda um ou mais agentes alvejantes. Agentes alvejantes adequados incluem fotoalvejantes, peróxido de hidrogênio, fontes de peroxido de hidrogênio, perácidos preformados e misturas dos mesmos.

[00111] (1) fotoalvejantes, por exemplo, ftalocianina de zinco sulfonada, ftalocianinas de alumínio sulfonatadas, corantes xanteno e misturas dos mesmos;

[00112] (2) preformados: preformados perácidos perácidos adequados incluem, mas não estão limitados a, compostos selecionados do grupo consistindo em peroxiácidos preformados ou sais dos mesmos, tipicamente ácidos e sais percarboxílicos, ácidos e sais percarbônicos, ácidos e sais perimídicos, ácidos e sais peroximonossulfúricos, por exemplo, Oxone[®] e misturas dos mesmos. Exemplos adequados incluem ácidos peroxicarboxílicos ou sais dos mesmos ou sais peroxissulfônicos ou sais dos mesmos. Peroxiácidos particularmente preferidos são ácidos ftalimido-peroxi-alcanoicos, em particular ácido ε-ftalimido peroxi hexanoico (PAP). Preferivelmente, o peroxiácido ou sal do mesmo tem um ponto de fusão na faixa de a partir de 30° C a 60° C.

[00113] (3) fontes de peróxido de hidrogênio, por exemplo, sais de per-hidrato inorgânicos, incluindo sais de metal alcalino tais como sais de sódio de perborato (geralmente mono- ou tetra-hidrato), percarbonato, persulfato, perfosfato, sais de persilicato e misturas dos mesmos.

Corantes de Sombreamento de Tecido

[00114] O corante de sombreamento de tecido (algumas vezes referido como agentes de matização, azulantes e branqueadores) tipicamente provê uma sombra azul ou violeta ao tecido. Tal(ais) corante(s) é/são bem conhecido(s) na técnica e pode(m) ser usado(s)

ou sozinho(s) ou em combinação para criar uma sombra específica de matização e/ou sombrear tipos de tecido diferentes. O corante de sombreamento de tecido pode ser selecionado de qualquer classe química de corante como conhecido na técnica, incluindo, mas não limitado a, acridina, antraquinona (incluindo quinonas policíclicas), azina, azo (por exemplo, monoazo, disazo, trisazo, tetracisazo, poliazo), benzodifurano, benzodifuranona, carotenoide, coumarina, cianina, diazaemicianina, difenilmetano, formazano, hemicianina, indigoides, metano, naftalimidas, naftoquinona, nitro, nitroso, oxazina, ftalocianina, pirazóis, estilbeno, estirila, triarilmetano, trifenilmetano, xantenos e misturas dos mesmos. A quantidade de corante de sombreamento de tecido adjunto presente em uma composição de cuidado para lavagem de roupa da invenção é tipicamente de a partir de 0,0001 a 0,05% em peso com base na composição de cuidado para lavagem de roupa total, preferivelmente de a partir de 0,0001 a 0,005% em peso. Com base no licor de lavagem, a concentração de corante de sombreamento de tecido tipicamente é de a partir de 1 ppb a 5 ppm, preferivelmente de a partir de 10 ppb a 500 ppb.

Corantes de sombreamento de tecido adequados incluem corantes de molécula pequena, corantes poliméricos e conjugados de corante-argila. Corantes de sombreamento de tecido preferidos são selecionados de corantes de molécula pequena e corantes poliméricos. Corantes de molécula pequena adequados podem ser selecionados do grupo consistindo em corantes se encaixando nas classificações de Índice de Cor (C.I., Society of Dyers and Colourists, Bradford, UK) de corantes Ácidos, Diretos, Básicos, Reativos, Solventes ou Dispersos. [00116] Corantes poliméricos adequados incluem selecionados do grupo consistindo em polímeros contendo cromógenos ligados covalentemente (algumas vezes referidos como conjugados), (também conhecidos como conjugados de corante-polímero), por exemplo, polímeros com monômeros de cromógeno copolimerizados na estrutura principal do polímero e misturas dos mesmos. Corantes poliméricos preferidos compreendem os corantes alcoxilados opcionalmente substituídos, tais como corantes poliméricos de trifenilmetano alcoxilados, corantes azo carbocíclicos alcoxilados e heterocíclicos alcoxilados incluindo corantes poliméricos de tiofeno alcoxilados, e misturas dos mesmos, tais como os corantes substantivos de tecido vendidos sob o nome de Liquitint[®] (Milliken, Spartanburg, South Carolina, USA).

[00117] Conjugados de corante argila adequados incluem conjugados de corante argila selecionados do grupo compreendendo pelo menos um corante catiônico/básico e uma argila esmectita; uma argila preferida pode ser selecionada do grupo consistindo em argila Montmorilonita, argila Hectorita, argila Saponina e misturas das mesmas.

[00118] Pigmentos são bem conhecidos na técnica e também podem ser usados nas presentes composições de cuidado para lavagem de roupa. Pigmentos adequados incluem C.I Pigment Blues 15 a 20, especialmente 15 e/ou 16, C.I. Pigment Blue 29, C.I. Pigment Violet 15, Monastral Blue e misturas dos mesmos.

Builders

[00119] As composições de cuidado para lavagem de roupa da presente invenção podem compreender opcionalmente um *builder*. *Builders* selecionados de aluminossilicato e silicatos auxiliam no controle da dureza mineral em água de lavagem ou auxiliam na remoção de sujeiras em partícula das superfícies. Builders adequados podem ser selecionados do grupo consistindo em fosfatos, polifosfatos, especialmente sais de sódio dos mesmos; carbonatos, bicarbonatos, sesquicarbonatos e minerais de carbonato que não carbonato de sódio e sesquicarbonato; mono-, di-, tri- e tetracarboxilatos orgânicos,

especialmente carboxilatos não tensoativos solúveis em água em forma de sal ácido, sódio, potássio ou alcanolamônio, bem como carboxilatos oligoméricos ou de polímero de peso molecular baixo solúvel em água incluindo tipos alifáticos e aromáticos; e ácido fítico. Esses podem ser complementados por boratos, por exemplo, para propósitos de tamponamento do pH, ou por sulfatos, especialmente sulfato de sódio e quaisquer outras cargas ou carreadores que possam ser importantes para a engenharia de composições de cuidado para lavagem de roupa contendo tensoativo e/ou *builder* estáveis.

Sistema de Tamponamento de pH

[00120] As composições de cuidado para lavagem de roupa podem também incluir um sistema de tamponamento de pH. As presentes composições de cuidado para lavagem de roupa podem ser formuladas de modo que, durante uso em operações de limpeza aquosas, a água de lavagem terá um pH entre cerca de 6,0 e cerca de 12, e em alguns exemplos, entre cerca de 7,0 e 11. Técnicas para controle do pH em níveis de uso recomendados incluem o uso de tampões, álcalis ou ácidos, e são bem conhecidas daqueles versados na técnica. Essas incluem, mas não estão limitadas a, uso de carbonato de sódio, ácido cítrico ou citrato de sódio, monoetanol amina ou outras aminas, ácido bórico ou boratos e outros compostos de ajuste do pH bem conhecidos na técnica. As presentes composições de cuidado para lavagem de roupa podem compreender perfis de pH em lavagem dinâmicos através do retardo da liberação de ácido cítrico.

Estruturante/Espessantes

[00121] Líquidos estruturados podem ser ou internamente estruturados, de modo que a estrutura é formada por ingredientes primários (por exemplo, material tensoativo) e/ou externamente estruturados ao prover uma estrutura de matriz tridimensional usando ingredientes secundários (por exemplo, polímeros, argila e/ou material

de silicato). A composição pode compreender de a partir de cerca de 0,01% a cerca de 5%, em peso da composição, de um estruturante e, em alguns exemplos, de a partir de cerca de 0,1% a cerca de 2,0%, em peso da composição, de um estruturante. O estruturante pode ser selecionado do grupo consistindo em diglicerídeos e triglicerídeos, diestearato de etileno glicol, celulose microcristalina, materiais à base de celulose, celulose de microfibra, biopolímeros, goma xantana, goma gelana e misturas dos mesmos. Em alguns exemplos, um estruturante adequado inclui óleo de rícino hidrogenado e derivados não etoxilados do mesmo. Outros estruturantes adequados são descritos na Patente U.S. No. 6.855.680. Tais estruturantes têm um sistema de estrutura do tipo cordão tendo uma faixa de razões de aspecto. Estruturantes adequados adicionais e processos para fabricação dos mesmos são descritos no WO 2010/034736.

Supressores de Espuma

[00122] Compostos para redução ou supressão da formação de espumas podem ser incorporados às composições de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui. Supressão de espumas pode ser de importância particular no chamado "processo de limpeza de concentração alta" como descrito nas Pat. U.S. Nos. 4.489.455, 4.489.574 e em máquinas de lavagem de estilo carregamento frontal. [00123] Uma ampla variedade de materiais pode ser usada como supressores de espuma, e supressores de espuma são bem conhecidos daqueles de habilidade na técnica. Vide, por exemplo, Kirk Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, Terceira Edição, Volume 7, páginas 430-447 (John Wiley & Sons, Inc., 1979). Exemplos de supressores de espuma incluem ácido graxo monocarboxílico, e sais solúveis nos mesmos, hidrocarbonetos de peso molecular alto tal como parafina, ésteres de ácido graxo (por exemplo, triglicerídeos de ácido graxo), ésteres de ácido graxo de álcoois monovalentes, cetonas C18-

C40 alifáticas (por exemplo, estearona), amino triazinas N-alquiladas, hidrocarbonetos cerosos tendo preferivelmente um ponto de fusão abaixo de cerca de 100° C, supressores de espuma de silicone e álcoois secundários. Supressores de espuma são descritos nas Pat. U.S. Nos. 2.954.347; 4.075.118; 4.265.779; 4.265.779; 3.455.839; 3.933.672; 4.652.392; 4.978.471; 4.983.316; 5.288.431; 4.639.489; 4.749.740; e 4.798.679.

As presentes composições de cuidado para lavagem de [00124] roupa podem compreender de a partir de cerca de 0% a cerca de 100%, em peso da composição, de supressor de espumas. Quando utilizados como supressores de espumas, ácidos monocarboxílicos, e sais dos mesmos, podem estar presentes em quantidades de até cerca de 5% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa, e em alguns exemplos, podem estar de a partir de cerca 0,5% a cerca de 3% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa. Supressores de espumas de silicone podem ser utilizados em quantidades de até cerca de 2,0% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa, embora quantidades maiores possam ser usadas. Supressores de espumas de fosfato de monoestearila podem ser utilizados em quantidades vaiando de a partir de cerca de 0,1% a cerca de 2% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa. Supressores de espumas de hidrocarboneto podem ser utilizados em quantidades variando de a partir de cerca de 0,01% a cerca de 5,0% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa, embora níveis maiores possam ser usados. Supressores de espumas de álcool podem ser usados em cerca de 0,2% a cerca de 3% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa.

Reforçadores de Espuma

[00125] Se espumação alta for desejada, reforçadores de espuma tais como C10-C16 alcanolamidas podem ser incorporados às

composições de cuidado para lavagem de roupa de a partir de cerca de 1% a cerca de 10% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa. Alguns exemplos incluem as C10-C14 monoetanol e dietanol amidas. Se desejado, sais de magnésio e/ou cálcio solúveis em água tais como MgCl₂, MgSO₄, CaCl₂, CaSO₄, e similar, podem ser adicionados em níveis de cerca de 0,1% a cerca de 2% em peso da composição de cuidado para lavagem de roupa para prover espumas adicionais e melhorar o desempenho de remoção de gordura.

Cargas e Carreadores

Cargas e carreadores podem ser usados nas composições [00126] de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui. Como aqui usado, os termos "carga" e "carreador" têm o mesmo significado e podem ser usados intercomutavelmente. Composições de cuidado para lavagem de roupa líquidas e outras formas de composições de cuidado para lavagem de roupa que incluem um componente líquido (tais como composições de cuidado para lavagem de roupa de dose unitária contendo líquido) podem conter água e outros solventes como cargas ou carreadores. Álcoois primários ou secundários de peso molecular baixo exemplificados por metanol, etanol, propanol, isopropanol e fenoxietanol são adequados. Álcoois monoídricos podem ser usados em alguns exemplos para solubilização de tensoativos, e polióis tais como aqueles contendo de a partir de cerca de 2 a cerca de 6 átomos de carbono e de a partir de 2 a cerca de 6 grupos hidróxi (por exemplo, 1,2-propanodiol, 1,3-propanodiol, 2,3-butanodiol, etileno glicol e glicerina) podem ser usados. Solventes contendo amina podem ser também usados.

Métodos de Uso

[00127] A presente invenção inclui métodos para tratamento de tecido com as composições de cuidado para lavagem de roupa descritas acima. Composições detergentes fluidas compactas que são

adequadas para venda a consumidores são adequadas para uso em aplicações de pretratamento de lavagem, aplicações de limpeza de lavagem e aplicações de cuidado doméstico. Tais métodos incluem, mas não estão limitados a, as etapas de contato das composições detergentes em forma pura ou diluída em líquido de lavagem, com pelo menos uma porção de um tecido que pode ou não estar sujo e então opcionalmente enxaguando o tecido. O material de tecido pode ser submetido a uma etapa de lavagem antes da etapa de enxágua opcional. Métodos de lavagem de roupa em máquina podem compreender tratamento da roupa suja com uma solução de lavagem aquosa em uma máquina de lavagem tendo dissolvida ou dispersa na mesma uma quantidade eficaz de uma composição detergente de lavagem em máquina de acordo com a invenção. Uma "quantidade eficaz" da composição detergente significa de a partir de cerca de 20 g a cerca de 300 g de produto dissolvido ou disperso em uma solução de lavagem de volume de a partir de cerca de 5 L a cerca de 65 L. As temperaturas da água podem variar de a partir de cerca de 5º C a cerca de 100° C. A razão de água para material sujo (por exemplo, tecido) pode ser de a partir de cerca de 1:1 a cerca de 30:1. As composições podem ser empregadas em concentrações de a partir de cerca de 500 ppm a cerca de 15.000 ppm em solução. No contexto de uma composição para lavagem de tecido, os níveis de uso podem também variar dependendo não apenas do tipo e severidade das sujeiras e manchas, mas também da temperatura da água de lavagem, do volume da água de lavagem e do tipo de máquina de lavar (por exemplo, de carregamento por cima, carregamento frontal, máquina de lavar automático do tipo Japonesa de eixo vertical).

[00128] As presentes composições detergentes podem ser usadas para lavagem de tecidos em temperaturas de lavagem reduzidas. Esses métodos de lavagem de tecido compreendem as etapas de administrar

uma composição detergente de lavagem à água para formar um líquido de lavagem e adicionar um tecido de lavagem ao dito líquido de lavagem, em que o líquido de lavagem tem uma temperatura de a partir de cerca de 0o C a cerca de 20° C ou de a partir de cerca de 0o C a cerca de 15° C ou de a partir de cerca de 0o C a cerca de 9° C. O tecido pode ser contatado com a água antes do ou após ou simultâneo com contato da composição detergente para roupa com água. Um outro método inclui contato de um substrato não tecido, que é impregnado com a composição detergente, com um material sujo. Como aqui usado, "substrato não tecido" pode compreender qualquer folha ou trama não tecida convencionalmente feita tendo características de peso base, calibre (espessura), absorbância e resistência adequadas. Exemplos não limitantes de substratos não tecidos comercialmente disponíveis adequados incluem aqueles comercializados sob os nomes comerciais SONTARA® da DuPont e POLY WEB® da James River Corp.

[00129] Métodos de lavagem à mão/molho e lavagem à mão combinada com máquinas de lavar semiautomáticas são também incluídos.

Embalagem para as Composições

[00130] As composições de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui podem ser embaladas em qualquer recipiente adequado incluindo aqueles feitos de papel, papelão, materiais plásticos e quaisquer laminados adequados. Um tipo de embalagem opcional é descrito no Pedido Europeu No. 94921505.7.

Bolsa de Multicompartimentos

[00131] As composições de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui também podem ser embaladas como uma composição de cuidado para lavagem de roupa de multicompartimentos.

Outros Ingredientes Adjuntos

[00132] Uma ampla variedade de outros ingredientes pode ser usada

nas composições de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui incluindo, por exemplo, outros ingredientes ativos, carreadores, hidrótopos, auxiliares de processamento, corantes ou pigmentos, solventes para formulações líquidas, cargas sólidas ou outras líquidas, eritrosina, sílica coloidal, ceras, probióticos, surfactina, polímeros amilocelulósicos, Ricinoleato de Zinco, microcápsulas de perfume, ramnolipídeos, soforolipídeos, glicopeptídeos, etoxilatos de éster de metila, estolídeos sulfonados, tensoativos cliváveis, biopolímeros, silicones modificados, aminossilicones, auxiliares deposição, hidrótopos (especialmente sais de cumeno-sulfonato, sais de tolueno-sulfonato, sais de xileno-sulfonato e sais de naftaleno), corantes ou perfumes encapsulados em partícula de PVA, agentes pearlescentes, agentes efervescentes, sistemas de mudança de cor, poliuretanos de silicone, opacificantes, desintegrantes de comprimido, cargas de biomassa, silicones de secagem rápida, glicol diestearato, encapsulatos de perfume de amido, óleos emulsificados incluindo óleos de hidrocarboneto, poliolefinas e ésteres graxos, antioxidantes de bisfenol, estruturantes de celulose microfibrosos, properfumes, polímeros de estireno/acrilato, triazinas, sabões, superóxido dismutase, inibidores de protease de benzofenona, TiO2 funcionalizado, fosfato de dibutila, cápsulas de perfume de sílica e outros ingredientes adjuntos, colina oxidase, corantes básicos azul de triarilmetano e violeta, corantes básicos azul metina e violeta, corantes básicos azul antraquinona e violeta, corantes azo azul básico 16, azul básico 65, azul básico 66, azul básico 67, azul básico 71, azul básico 159, violeta básico 19, violeta básico 35, violeta básico 38, violeta básico 48, corantes oxazina, azul básico 3, azul básico 75, azul básico 95, azul básico 122, azul básico 124, azul básico 141, azul Nilo A e corante xanteno violeta básico 10, um corante polimérico de trifenilmetano alcoxilado; um corante polimérico de tiofeno alcoxilado; corante tiazólio, mica revestida com dióxido de titânio, oxicloreto de bismuto e outros ativos.

Antioxidante

[00133] A composição de cuidado para lavagem de roupa pode conter opcionalmente um antioxidante presente na composição de a partir de cerca de 0,001 a cerca de 2% em peso. Preferivelmente, o antioxidante está presente em uma concentração na faixa de 0,01 a 0,08% em peso. Misturas de antioxidantes podem ser usadas.

[00134] Uma classe de antioxidantes usada na presente invenção são fenóis alquilados. Compostos fenólicos impedidos são um tipo preferido de fenóis alquilados tendo essa fórmula. Um composto fenólico impedido preferido desse tipo é 3,5-di-terc-butil-4-hidroxitolueno (BHT).

[00135] Ainda, o antioxidante usado na composição pode ser selecionado do grupo consistindo em α -, β -, γ -, δ --tocoferol, etoxiquina, 2,2,4-trimetil-1,2-di-hidroquinolina, 2,6-di-terc-butil hidroquinona, terc-butil hidroxianisol, ácido lignossulfônico e sais dos mesmos e misturas dos mesmos.

[00136] As composições de cuidado para lavagem de roupa descritas aqui podem também conter vitaminas e aminoácidos tais como: vitaminas solúveis em água e seus derivados, aminoácidos solúveis em água e seus sais e/ou derivados, aminoácidos insolúveis em água, modificadores de viscosidade, corantes, solventes ou diluentes não voláteis (solúveis e insolúveis em água), auxiliares pearlescentes, pediculicidas, agentes de ajuste do pH, conservantes, agentes ativos para a pele, protetores solares, absorvedores de UV, niacinamida, cafeína e minoxidil.

[00137] As composições de cuidado para lavagem de roupa da presente invenção também podem conter materiais de pigmento tais como nitroso, monoazo, disazo, carotenoide, trifenila metano, triaril metano, xanteno, quinolina, oxazina, azina, antraquinona, indigoide,

tionindigoide, quinacridona, ftalocianina, botânicos e cores naturais, incluindo componentes solúveis em água tais como aqueles tendo Nomes C.I.

[00138] As composições de cuidado para lavagem de roupa da presente invenção também podem conter agentes antimicrobianos. Ingredientes ativos catiônicos podem incluir, mas não estão limitados a, cloreto de n-alquil dimetil benzil amônio, cloreto de alquil dimetil etil benzil amônio, compostos de dialquil dimetil amônio quaternário tais como cloreto de didecil dimetil amônio, propionato de N,N-didecil-Nmetil-poli(oxietil)amônio, cloreto de dioctil didecil amônio, incluindo também espécies quaternárias tal como cloreto de benzetônio e compostos amônio quaternário com contraíons inorgânicos ou orgânicos tais como bromo, carbonato ou outras porções incluindo carbonatos de dialquil dimetil amônio, bem antimicrobianas tal como Gluconato Clorexidina, **PHMB** de (Poliexametileno biguanida), sal de uma biguanida, um derivado de biguanina substituído, um sal orgânico de um composto contendo amônio quaternário ou um sal inorgânico de um composto contendo amônio quaternário ou misturas dos mesmos.

[00139] Em um aspecto, tal método compreende as etapas de opcionalmente lavar e/ou enxaguar a dita superfície ou tecido, contatando a dita superfície ou tecido com qualquer composição descrita no presente relatório, então opcionalmente lavar e/ou enxaguar a dita superfície ou tecido descrito com uma etapa de secagem opcional. [00140] Secagem de tais superfícies ou tecidos pode ser realizada através de um dos meios comuns empregados ou em cenários domésticos ou industriais. O tecido pode compreender qualquer tecido capaz de ser lavado em condições de uso de consumidor ou institucional normais, e a invenção é adequada para substratos celulósicos e em alguns aspectos também adequada para têxteis

sintéticos tais como poliéster e náilon e para tratamento de tecidos e/ou fibras mistos compreendendo tecidos e/ou fibras sintéticos e celulósicos. Como exemplos de tecidos sintéticos são poliéster, náilon, esses podem estar presentes em misturas com fibras celulósicas, por exemplo, tecidos de polialgodão. A solução tem tipicamente um pH de a partir de 7 a 11, mais comumente 8 a 10,5. As composições são tipicamente empregadas em concentrações de a partir de 500 ppm a 5.000 ppm em solução. As temperaturas da água variam tipicamente de a partir de cerca de 5° C a cerca de 90° C. A razão de água para tecido é tipicamente de a partir de 1:1 a cerca de 30:1.

[00141] Os exemplos que seguem ilustram mais a matéria-objeto descrita acima, mas, certamente, não devem ser considerados de modo algum limitantes do seu escopo.

EXEMPLO 1

[00142] Esse exemplo demonstra a síntese de um composto de amina de acordo com a invenção.

[00143] Um mol de 4-hidroxidifenilamina foi adicionado a um recipiente de pressão junto com 0,1 mol de potássio. O recipiente de pressão foi então carregado com 5 moles de óxido de etileno. A mistura de reação foi agitada e aquecida a 60° C até que a pressão do óxido de etileno caiu. O produto obtido era um líquido em temperaturas ambientes. O produto foi analisado através de GC-MS e configurado ser um composto da estrutura que segue.

$$\begin{array}{c|c} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ & & \\ &$$

[00144] O composto de amina é acreditado ser adequado para uso

como um antioxidante para vários materiais. Ainda, a natureza líquida do composto em temperatura ambiente é esperada facilitar manuseamento e dosagem do composto, especialmente quando ele é misturado com outros componentes líquidos, tais como as matériasprimas usadas em fabricação de polímeros de poliuretano. Por fim, o substituinte polimérico no composto termina com um átomo de hidrogênio ativo, que significa que o composto de amina é capaz de reagir em um sistema de poliuretano. É esperado que um composto de amina que é ligado ao polímero de poliuretano dessa maneira vá exibir migração e extração muito menores do que antioxidantes amina tradicionais.

EXEMPLO 2

[00145] Para demonstrar o desempenho antioxidante dos compostos de amina da invenção, uma série de espumas (Amostras 2A-2C) foi feita usando formulações de espuma de poliuretano de poliéter de baixa densidade padrão. As espumas foram feitas usando água de aproximadamente 6,5 php em uma densidade de aproximadamente 13,6 kg/m³ (0,85 lb/ft³). Durante a produção, cada espuma exibiu um exoterma de pico em excesso de 191° C.

[00146] Cada uma das espumas foi feita usando formulações que diferenciavam apenas no poliol éter particular usado e na combinação de antioxidantes usada para estabilizar o poliol. A Amostra 2A foi feita usando poliol Arcol[®] 5613 (da Covestro), que é um poliol integralmente estabilizado acreditado conter uma combinação de 1.550 ppm de uma difenil amina impedida e 4.500 ppm de um fenol impedido (antioxidante Irganox[®] 1135 da BASF). A Amostra 2B foi feita usando um poliol éter minimamente estabilizado, especificamente poliol Voranol[™] 9137CA (da Dow Chemical) que é acreditado ser estabilizado com aproximadamente 700 ppm de uma difenil amina impedida. Em adição a essa amina impedida, a Amostra 2B foi estabilizada mais com

antioxidante Vanox® 945 (da Vanderbilt Chemicals, LLC), que era acreditado ter contribuído para um adicional de aproximadamente 2.600 ppm de uma difenil amina impedida, aproximadamente 40 ppm de fenotiazina e aproximadamente 900 ppm de fenol impedido (antioxidante Irganox® 1010 da BASF). A Amostra 2C foi feita também com poliol Voranol® 9137CA que foi estabilizado mais com 500 ppm de um antioxidante benzofurano (antioxidante Milliguard® AOX-1 da Milliken & Company), 2.000 ppm de um fenol impedido (estabilizador Anox® 1315 da Addivant) e 1.000 ppm do composto do Exemplo 1.

[00147] As amostras de espuma produzidas foram testadas quanto a chamuscamento, resistência a NO_x (desvanecimento de gás), resistência a UV e resistência ao calor. Os resultados desses testes mostraram que a amostra de espuma feita com o composto da invenção (isto é, Amostra 2C) teve desempenho muito similar à amostra de espuma feita com o poliol integralmente estabilizado, comercial (Amostra 2A) e a espuma feita do poliol minimamente estabilizado que tinha sido estabilizado com Vanox[®] 945 (Amostra 2B). Esses resultados confirmam que os compostos da invenção (por exemplo, o composto do Exemplo 1) são adequados para uso como um antioxidante para espumas de poliuretano e exibem desempenho comparável a antioxidantes existentes.

[00148] Enquanto os compostos da invenção exibiram desempenho comparável a antioxidantes conhecidos em termos de chamuscamento, resistência a NO_x (desvanecimento de gás), resistência a UV e resistência ao calor, os compostos da invenção produziram espuma que teve desempenho notadamente melhor em termos de embaçamento e a emissão de compostos orgânicos voláteis (VOC). Em particular, as amostras de espuma foram testadas de acordo com o método da *German Automobile Association VDA 278* para determinar a quantidade de emissões voláteis exibidas por cada espuma. Os resultados dessas

análises são mostrados na Tabela 1 abaixo.

Tabela 1. Resultados do teste VDA 278 para Amostras 2A-2C

	Amostra 2A	Amostra 2B	Amostra 2C
VOC	91,2 ppm	146,1 ppm	87,3 ppm
Fog	229,6 ppm	609,0 ppm	11,2 ppm

Como pode ser visto a partir dos dados na Tabela 1, a [00149] espuma feita com o composto da invenção (Amostra 2C) exibiu emissões de VOC menores do que qualquer uma das Amostras 2A e 2B. Na verdade, as emissões de VOC da Amostra 2B foram 60% maiores do que as emissões para a Amostra 2C. A diferença mais drástica entre as amostras vem da comparação das emissões de névoa, que é uma medida das espécies de massa molecular maior (C₁₄-C₃₅) liberadas pela amostra durante o teste. A Amostra 2C liberou apenas 11,2 ppm de voláteis durante o teste de névoa. A título de contraste, a Amostra 2B liberou 609 ppm de voláteis, que é mais de cinquenta e quatro (54) vezes a quantidade liberada pela Amostra 2C. A Amostra 2A liberou 229,6 ppm de voláteis, que é apenas um terço da quantidade liberada pela Amostra 2B, mas é ainda vinte (20) vezes mais a quantidade liberada pela Amostra 2C. Essas diferenças em emissões de voláteis são drásticas e mostram que os compostos da invenção podem ser usados para reduzir drasticamente a quantidade total de voláteis liberada por uma espuma nos arredores (por exemplo, o interior de um automóvel).

[00150] Todas as referências, incluindo publicações, pedidos de patente, e patentes, citadas aqui são aqui incorporadas a título de referência até o mesmo ponto como se cada referência fosse individualmente e especificamente indicada ser incorporada a título de referência e fosse mostrada em sua totalidade aqui.

[00151] O uso dos termos "um" e "uma" e "o" e "a" e referentes

similares no contexto de descrição da matéria-objeto do presente pedido (especialmente no contexto das reivindicações que seguem) deve ser considerado compreender ambos o singular e o plural, a menos que de outro modo indicado aqui ou claramente contradito pelo contexto. Os termos "compreendendo", "tendo", "incluindo" e "contendo" devem ser considerados como termos abertos (isto é, significando "incluindo, mas não limitado a") a menos que de outro modo mencionado. Menção de faixas de valores aqui pretende apenas servir como um método de abreviação para se referir individualmente a cada valor separado se encaixando na faixa, a menos que de outro modo aqui indicado, e cada valor separado é incorporado ao relatório como se ele fosse individualmente mencionado aqui. Todos os métodos descritos aqui podem ser realizados em qualquer ordem adequada a menos que de outro modo aqui indicado ou de outro modo claramente contradito pelo contexto. O uso de qualquer um e todos os exemplos, ou linguagem exemplar (por exemplo, "tal como"), providos aqui pretende apenas iluminar melhor a matéria-objeto do pedido e não impor uma limitação ao escopo da matéria-objeto a menos que de outro modo reivindicado. Nenhuma linhagem no relatório deve ser considerada como indicando qualquer elemento não reivindicado como essencial para a prática da matéria-objeto descrita aqui.

[00152] Modalidades preferidas da matéria-objeto do presente pedido são descritas aqui, incluindo o melhor modo conhecido dos inventores para realizar a matéria-objeto reivindicada. Variações dessas modalidades preferidas podem ser tornar aparentes àqueles de habilidade na técnica quando da leitura da descrição acima. Os inventores esperam que os versados empreguem tais variações conforme apropriado, e os inventores pretendem que a matéria-objeto descrita aqui seja praticada de uma outra maneira diferente da especificamente descrita aqui. Portanto, a presente invenção inclui

todas as modificações e equivalentes da matéria-objeto mencionada nas reivindicações apensas conforme permitido pela lei aplicável. Além disso, qualquer combinação dos elementos descritos acima em todas as suas variações possíveis é compreendida pela presente invenção, a menos que de outro modo aqui indicado ou de outro modo claramente contradito pelo contexto.

REIVINDICAÇÕES

- 1. Composto de amina compreendendo um átomo de nitrogênio, um átomo de hidrogênio ligado diretamente ao átomo de nitrogênio e dois grupos aromáticos ligados diretamente ao átomo de nitrogênio, caracterizado pelo fato de que pelo menos um dos grupos aromáticos compreende pelo menos um substituinte polimérico ligado ao mesmo, o substituinte polimérico compreendendo três ou mais unidades de monômero.
- 2. Composto de amina, de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que os grupos aromáticos são independentemente selecionados do grupo consistindo em grupos fenila, grupos naftila, grupos piridinila, grupos pirimidinila, grupos triazinila, grupos pirrolila, grupos furanila e grupos tiofenila.
- Composto de amina, de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo fato de que pelo menos um dos grupos aromáticos é um grupo fenila.
- 4. Composto de amina, de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo fato de que o composto compreende um grupo aromático selecionado do grupo consistindo em piridin-3-ila, pirimidin-5-ila e 1,3,5-triazin-2-ila.
- 5. Composto, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 4, caracterizado pelo fato de que cada uma das unidades de monômero é independentemente selecionada do grupo consistindo em grupos alquileno-óxi, grupos oxoalquileno-óxi, grupos oxoalquilenoamina, grupos alquilenoamina, grupos alquileno alquileno substituídos, grupos sacarídeos, grupos halometilalquileno-óxi e grupos metilalquileno-óxi de amônio quaternário.
- 6. Composto de amina, de acordo com a reivindicação 5, caracterizado pelo fato de que as unidades de monômero são selecionadas do grupo consistindo em grupos alquileno-óxi e grupos

oxoalquileno-óxi.

- 7. Composto de amina, de acordo com a reivindicação 6, caracterizado pelo fato de que as unidades de monômero são selecionadas do grupo consistindo em etileno-óxi, propileno-óxi e butileno-óxi.
- 8. Composto de amina, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 7, caracterizado pelo fato de que o substituinte polimérico termina em um grupo hidróxi.
- 9. Composto de amina, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 8, caracterizado pelo fato de que o substituinte polimérico é ligado diretamente a um grupo de ligação selecionado do grupo consistindo em um átomo de oxigênio, um átomo de enxofre, um grupo amina secundário, um grupo amina terciária, um grupo alcóxi, um grupo éster, um grupo alquilamina e um grupo carbamato, e o grupo de ligação é ligado diretamente a um átomo de carbono do grupo aromático.
- 10. Composto de amina, de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que o grupo de ligação é um átomo de oxigênio.
- 11. Composto de amina, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 10, caracterizado pelo fato de que as ligações ao átomo de nitrogênio e o substituinte polimérico são dispostas na posição para em relação uma à outra no grupo aromático.
- 12. Método para produção de um polímero de poliuretano, caracterizado pelo fato de que compreende as etapas de:
 - (a) prover um poliol;
 - (b) prover um composto poli-isocianato;
- (c) prover um composto de amina compreendendo um átomo de nitrogênio, um átomo de hidrogênio ligado diretamente ao átomo de nitrogênio e dois grupos aromáticos ligados diretamente ao

átomo de nitrogênio, em que pelo menos um dos grupos aromáticos compreende pelo menos um substituinte polimérico ligado ao mesmo, o substituinte polimérico compreendendo três ou mais unidades de monômero;

- (d) combinar o poliol, o composto poli-isocianato e o composto de amina para produzir uma mistura de reação; e
- (e) permitir que o poliol e o composto poli-isocianato reajam para produzir um polímero de poliuretano.
- 13. Método, de acordo com a reivindicação 12, caracterizado pelo fato de que os grupos aromáticos são independentemente selecionados do grupo consistindo em grupos fenila, grupos naftila, grupos piridinila, grupos pirimidinila, grupos triazinila, grupos pirrolila, grupos furanila e grupos tiofenila.
- 14. Método, de acordo com a reivindicação 13, caracterizado pelo fato de que pelo menos um dos grupos aromáticos é um grupo fenila.
- 15. Método, de acordo com a reivindicação 13, caracterizado pelo fato de que o composto compreende um grupo aromático selecionado do grupo consistindo em piridin-3-ila, pirimidin-5-ila e 1,3,5-triazin-2-ila.
- 16. Método. de acordo qualquer com uma reivindicações 12 a 15, caracterizado pelo fato de que cada uma das unidades de monômero é independentemente selecionada do grupo consistindo em grupos alquileno-óxi, grupos oxoalquileno-óxi, grupos oxoalquilenoamina, grupos alquilenoamina, grupos substituídos, grupos sacarídeos, grupos halometilalquileno-óxi e grupos metilalquileno-óxi de amônio quaternário.
- 17. Método, de acordo com a reivindicação 16, caracterizado pelo fato de que as unidades de monômero são selecionadas do grupo consistindo em grupos alquileno-óxi e grupos

oxoalquileno-óxi.

- 18. Método, de acordo com a reivindicação 17, caracterizado pelo fato de que as unidades de monômero são selecionadas do grupo consistindo em etileno-óxi, propileno-óxi e butileno-óxi.
- 19. Método, de acordo com qualquer uma das reivindicações 12 a 18, caracterizado pelo fato de que o substituinte polimérico termina em um grupo hidróxi.
- 20. Método, de acordo com qualquer uma das reivindicações 12 a 19, caracterizado pelo fato de que o substituinte polimérico é ligado diretamente a um grupo de ligação selecionado do grupo consistindo em um átomo de oxigênio, um átomo de enxofre, um grupo amina secundário, um grupo amina terciária, um grupo alcóxi, um grupo éster, um grupo alquilamina e um grupo carbamato, e o grupo de ligação é ligado diretamente a um átomo de carbono do grupo aromático.
- 21. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que o grupo de ligação é um átomo de oxigênio.
- 22. Método, de acordo com qualquer uma das reivindicações 12 a 21, caracterizado pelo fato de que a ligação ao átomo de nitrogênio e a ligação ao grupo de ligação são dispostas na posição *para* em relação uma à outra no grupo aromático.

RESUMO

Patente de Invenção: "ANTIOXIDANTES POLIMÉRICOS DE AMINA".

A invenção refere-se a um composto de amina que compreende um átomo de nitrogênio, um átomo de hidrogênio ligado diretamente ao átomo de nitrogênio e dois grupos aromáticos ligados diretamente ao átomo de nitrogênio. Pelo menos um dos grupos aromáticos compreende pelo menos um substituinte polimérico ligado a ele, o substituinte polimérico compreendendo três ou mais unidades de monômero. Um método para produção de um polímero de poliuretano compreende as etapas de (a) prover um poliol; (b) prover um composto poli-isocianato; (c) prover o composto de amina descrito acima; (d) combinar o poliol, o composto poli-isocianato e o composto de amina para produzir uma mistura de reação; e (e) permitir que o poliol e o composto poli-isocianato reajam para produzir um polímero de poliuretano.