



УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **129100** (13) **C2**
(51) МПК

C07C 291/04 (2006.01)

C11D 1/75 (2006.01)

A61Q 5/12 (2006.01)

A61K 8/44 (2006.01)

A61K 8/73 (2006.01)

A61K 8/42 (2006.01)

A61K 8/46 (2006.01)

НАЦІОНАЛЬНИЙ ОРГАН
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ВЛАСНОСТІ
ДЕРЖАВНА ОРГАНІЗАЦІЯ
"УКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
ОФІС ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ ТА ІННОВАЦІЙ"

(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА ВІНАХІД

| | |
|---|---|
| <p>(21) Номер заявки: a 2022 03056</p> <p>(22) Дата подання заявки: 21.01.2021</p> <p>(24) Дата, з якої є чинними права інтелектуальної власності: 09.01.2025</p> <p>(31) Номер попередньої заявки відповідно до Паризької конвенції: 62/967,175</p> <p>(32) Дата подання попередньої заявки відповідно до Паризької конвенції: 29.01.2020</p> <p>(33) Код держави-учасниці Паризької конвенції, до якої подано попередню заявку: US</p> <p>(41) Публікація відомостей про заявку: 28.09.2022, Бюл.№ 39</p> <p>(46) Публікація відомостей про державну реєстрацію: 08.01.2025, Бюл.№ 2</p> <p>(86) Номер та дата подання міжнародної заявки, поданої відповідно до Договору РСТ: PCT/US2021/014445, 21.01.2021</p> | <p>(72) Винахідник(и): Асирватам Едвард (US), Гонціюк Андрей (US), Міхалі Воїчіта (US)</p> <p>(73) Володілець (володільці): АДВАНСІКС РЕЗІНС ЕНД ЧЕМІКАЛС ЛЛС, 300 Kimball Drive, Suite 101, Parsippany, New Jersey 07054, United States of America (US)</p> <p>(74) Представник: Кістерський Кирило Арсенійович, реєстр. №207</p> <p>(56) Перелік документів, взятих до уваги експертизою: Synthesis, characterization, antimicrobial and biofilm inhibitory activities of new N-oxide esters / SATHYAM REDDY YASA ET AL. // MEDICINAL CHEMISTRY RESEARCH. 2017. Vol. 26. No. 8. Pages 1689-1696 EP 0826661 A2, 04.03.1998</p> |
|---|---|

UA 129100 C2

(54) АМІНОКИСЛОТНІ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНІ РЕЧОВИНИ

(57) Реферат:

Даний винахід забезпечує похідні амінокислот, які мають поверхнево-активні властивості. Амінокислота може бути природною або синтетичною або її можна отримати за допомогою реакції розкриття кільця лактаму, такого як капролактаму. Амінокислота може бути функціоналізована з утворенням сполуки, яка є поверхнево-активною та має переваги поверхнево-активних характеристик. Сполуки цього винаходу мають низькі критичні концентрації міцели (ККМ), а також чудову здатність знижувати поверхневий натяг рідини.

ПЕРЕХРЕСНЕ ПОСИЛАННЯ НА ПОВ'ЯЗАНУ ЗАЯВКУ

Ця заявка претендує на пріоритет перед попередньою заявкою США № 62/967,175, поданою 29 січня 2020 року, розкриття якої повністю включено в цю заявку шляхом посилання.

ОБЛАСТЬ ТЕХНІКИ

5 Це розкриття стосується похідних амінокислот і способів їх синтезу, де похідні амінокислот мають поверхнево-активні властивості.

ПЕРЕДУМОВИ СТВОРЕННЯ ВІНАХОДУ

10 Поверхнево-активні речовини (молекули з поверхнево-активними властивостями) є важливим класом молекул із дуже цінними характеристиками. Поверхнево-активні речовини можуть бути незарядженими, цвіттеріонними, катіонними або аніонними. Часто ці сполуки є амфіфільними молекулами з нерозчинною у воді гідрофобною "хвостовою" групою та водорозчинною гідрофільною "головною" групою. Ці сполуки можуть адсорбуватися на межі розділу, наприклад між двома рідинами, рідиною та газом або рідиною та твердою речовиною. У разі межі розділу між водою та маслом гідрофільна головна група простягається у воду, тоді як гідрофобний хвіст простягається в масло. При додаванні у воду гідрофільна головна група поширюється у воду, тоді як гідрофобний хвіст поширюється в повітря. Присутність поверхнево-активної речовини порушує міжмолекулярну взаємодію між молекулами води, замінюючи її більш слабкими взаємодіями між молекулами води і поверхнево-активною речовиною. Це призводить до зниження поверхневого натягу, а також може служити для стабілізації поверхні розділу.

20 У достатньо високих концентраціях поверхнево-активні речовини можуть утворювати агрегати, щоб обмежити вплив полярного розчинника на гідрофобний хвіст. Одним із таких агрегатів є міцела, в якій молекули розташовані у формі сфери з гідрофобними хвостами всередині сфери та гідрофільними головками зовні для взаємодії з полярним розчинником. Вплив певної сполуки на поверхневий натяг і концентрацію, при якій вона утворює міцели, можуть служити визначальними характеристиками поверхнево-активної речовини.

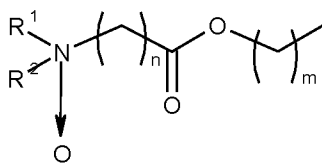
25 Поверхнево-активні речовини широко використовуються в комерційних цілях у складі різноманітних засобів: від миючих засобів до засобів для догляду за волоссям і косметики. Сполуки з поверхнево-активними властивостями використовуються як мила, мийні засоби, мастила, зволожуючі агенти, піноутворювачі та агенти для розподілу тощо. Таким чином, існує постійна потреба в ідентифікації та синтезі таких сполук.

30 Однак, виходячи лише з її структури, може бути важко передбачити, чи буде дана сполука мати поверхнево-активні властивості, не кажучи вже про інші важливі характеристики, такі як динаміка міжфазної адсорбції, мінімальний досяжний поверхневий натяг та/або здатність змочувати гідрофобну та/або олеофобні поверхні, які також є невід'ємною частиною того, чи стане сполука корисною поверхнево-активною речовиною. Деякі амінокислоти та їх похідні, наприклад, є бажаними як будівельні блоки для поверхнево-активних речовин, але вибір амінокислот для використання далеко не інтуїтивно зрозумілий. Синтез таких сполук додає ще один рівень труднощів через різницю в розчинності, що приписується різним елементам і частинам, присутнім в тих самих молекулах. Залишається потреба у вискоєфективних поверхнево-активних речовинах, які можна було б легко синтезувати в промислових масштабах простими шляхами.

КОРОТКИЙ ОПИС ВІНАХОДУ

45 Це розкриття забезпечує похідні амінокислот, які мають поверхнево-активні властивості. Амінокислоти можуть бути природними або синтетичними амінокислотами, або вони можуть бути отримані за допомогою реакцій розкриття кільця молекул, таких як лактами, наприклад капролактама. Амінокислоти можуть бути функціональні для утворення сполук із поверхнево-активними властивостями. Характерно, що ці сполуки можуть мати низькі критичні концентрації міцели (ККМ) та/або здатність зменшувати поверхневий натяг рідини.

50 У цьому описі представлені сполуки Формули I, наведені нижче, які також згадуються тут як поверхнево-активна речовина:



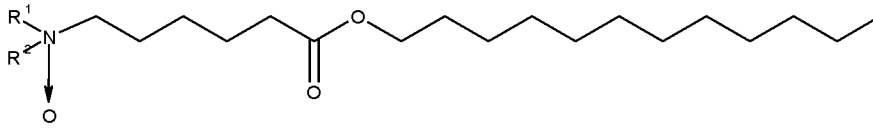
Формула I

55 де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і вибрані з групи, що складається з C₁-C₆

алкілу, а саме C₁, C₂, C₃, C₄, C₅ або C₆; n є цілим числом від 2 до 5, а саме 2, 3, 4 або 5; i m є цілим числом від 9 до 20, а саме 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19 або 20.

Альтернативно, у цьому описі представлені сполуки Формули II, наведені нижче, які також згадуються тут як поверхнево-активна речовина:

5

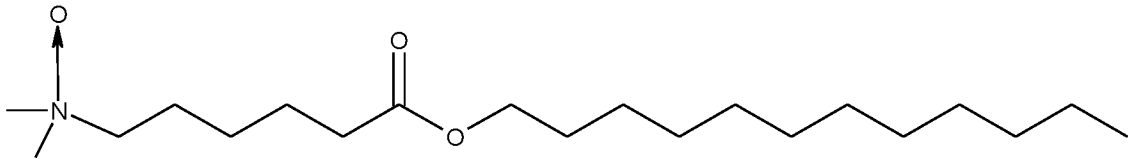


Формула II

де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆ алкілу, а саме C₁, C₂, C₃, C₄, C₅ або C₆.

10

Однією конкретною сполукою, наданою в цьому описі, є додецил 6-(диметиламіно)гексаноат N-оксид, що має таку формулу:



15

У наведених вище структурах позначення "N→O" призначене для передачі неіонної зв'язувальної взаємодії між азотом і киснем.

Вищезазначені та інші ознаки розкриття, а також спосіб їх досягнення стануть більш очевидними і будуть краще зрозумілі з посиланням на наступний опис варіантів здійснення разом із супровідними кресленнями.

20

КОРОТКИЙ ОПИС КРЕСЛЕНЬ

На Фіг. 1 показаний графік залежності поверхневого натягу від концентрації, виміряної при pH = 7, як описано в Прикладі 2, де на осі Y зображено поверхневий натяг (γ) у міліньютон на метр (мН/м), а на осі X зображено концентрацію (c) у мілімоль (мМ).

25

На Фіг. 1 показаний графік динамічного поверхневого натягу як зміни поверхневого натягу від часу, як описано в Прикладі 3, де вісь Y відображає поверхневий натяг у міліньютон на метр (мН/м), а вісь X відображає вік поверхні в мілісекундах (мс).

ДЕТАЛЬНИЙ ОПИС

30

У цьому документі фраза "в будь-якому діапазоні, визначеному між будь-якими двома з наведених вище значень" буквально означає, що будь-який діапазон може бути обраний з будь-яких двох значень, перелічених перед такою фразою, незалежно від того, чи знаходяться значення в нижчій частині списку або у верхній частині списку. Наприклад, пара значень може бути обрана з двох нижчих значень, двох вищих значень або нижчого значення та вищого значення.

35

Як використовується тут, слово "алкіл" означає будь-який насичений вуглецевий ланцюг, який може бути прямим або розгалуженим.

40

Як використовується тут, фраза "поверхнево-активний" означає, що пов'язана сполука здатна знижувати поверхневий натяг середовища, в якому вона розчинена, та/або міжфазний натяг з іншими фазами, і, відповідно, може бути адсорбованим на межі розділу рідина/пар та/або на інших поверхнях. До такої сполуки можна застосовувати термін "поверхнево-активна речовина".

45

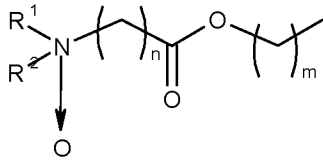
Щодо термінології неточності, терміни "близько" та "приблизно" можуть використовуватися як взаємозамінні для позначення вимірювання, яке включає заявлене вимірювання, а також включає будь-які вимірювання, які достатньо близькі до заявленого вимірювання. Вимірювання, які достатньо близькі до заявленого вимірювання, відрізняються від заявленого вимірювання на відносно невелику величину, як це розуміється та легко підтверджується особами, які мають звичайні навички у відповідній галузі техніки. Такі відхилення можуть бути пов'язані з помилкою вимірювання або незначними коригуваннями, внесеними, наприклад, для оптимізації продуктивності. У випадку, якщо буде встановлено, що люди, які мають звичайні навички у відповідних галузях мистецтва, не зможуть легко визначити значення таких відносно невеликих відмінностей, терміни "близько" та "приблизно" можна розуміти як плюс-мінус 10 % від зазначеного значення.

50

Це розкриття забезпечує похідні амінокислот. Амінокислоти можуть бути природними або

синтетичними, або вони можуть бути отримані в результаті реакції розкриття циклу лактамів, таких як капролактан. Було показано, що сполуки цього винаходу мають поверхнево-активні властивості та можуть використовуватися, наприклад, як поверхнево-активні речовини та зволожуючі агенти. У цьому описі представлені сполуки Формули I, наведені нижче:

5

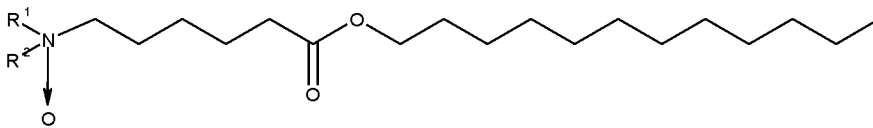


Формула I

де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і вибрані з групи, що складається з C₁-C₆ алкілу, а саме C₁, C₂, C₃, C₄, C₅ або C₆; n є цілим числом від 2 до 5, а саме 2, 3, 4 або 5; і m є цілим числом від 9 до 20, а саме 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19 або 20.

10

Зокрема, у цьому описі представлені сполуки Формули II, наведені нижче:

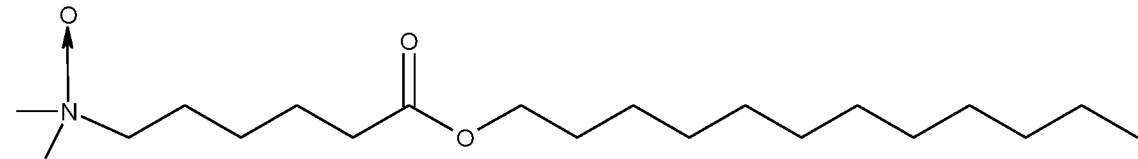


Формула II

де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆ алкілу, а саме C₁, C₂, C₃, C₄, C₅, або C₆.

15

Однією конкретною сполукою, представленою в цьому описі, є додецил 6-(диметиламіно)гексаноат N-оксид, що має таку формулу:



20

У наведених вище структурах позначення "N→O" призначене для передачі неіонної зв'язувальної взаємодії між азотом і киснем.

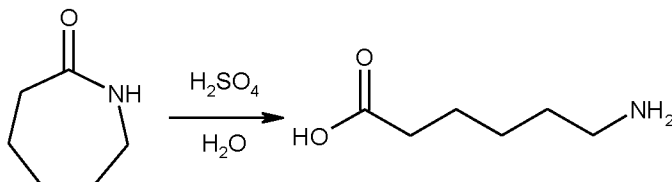
Ці сполуки можна синтезувати різними методами. Один із таких методів включає відкриття лактаму з утворенням амінокислоти з N-кінцем і реакцію N-кінця амінокислоти з алкілюючим агентом з утворенням третинного аміну. Отриманий третинний амін може потім реагувати зі спиртом у кислотних умовах з утворенням ефіру амінокислоти з N-кінцем. N-кінець складного ефіру амінокислоти може потім реагувати з окислювачем з утворенням аміноксиду.

25

Амінокислота може бути природною або синтетичною, або може бути отримана в результаті реакції розкриття циклу лактаму, такого як, наприклад, пропіолактан, бутиролактан, валеролактан і капролактан. Реакція розкриття кільця може бути реакцією, що каталізується кислотою або лугом, і приклад реакції, що каталізується кислотою, показаний нижче на Схемі 1.

30

СХЕМА 1



35

Амінокислота може мати лише 2 або навіть 5, а саме 2, 3, 4 або 5 атомів вуглецю між N- і C-кінцями. Алкільний ланцюг може бути розгалуженим або прямим. Алкільний ланцюг може бути перерваний азотом, киснем або сіркою. Алкільний ланцюг може бути додатково заміщений одним або декількома замісниками, вибраними з групи, що складається з гідроксилу, аміно, амідю, сульфонілу, сульфонату, карбоксилу і карбоксилату. N-кінцевий атом азоту може бути

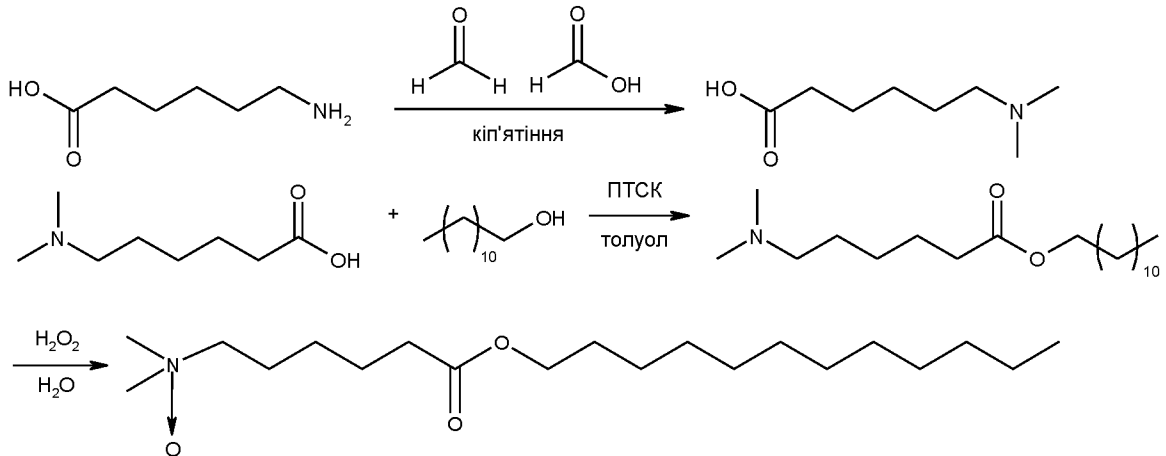
40

ацильований або алкілований однією або кількома алкільними групами. Наприклад, амінокислота може бути 6-(диметиламіно)гексановою кислотою.

5 Похідну амінокислоти можна синтезувати, як показано нижче на Схемі 2. Як показано, 6-аміногексанову кислоту обробляють формальдегідом у мурашиній кислоті при кип'ятінні, щоб отримати 6-(диметиламіно)гексанову кислоту. Потім вільну карбонову кислоту обробляють спиртом, таким як додеканол, у присутності п-толуолсульфоїкислоти (ПТСК) у толуолі, щоб отримати відповідний складний ефір, додецил 6-(диметиламіно)гексаноат. Потім N-кінець окислюється перекисом водню з утворенням аміноксиду.

СХЕМА 2

10



15

Сполуки цього опису демонструють поверхнево-активні властивості. Ці властивості можна виміряти та описати різними методами. Одним із методів, за допомогою якого можна описати поверхнево-активні речовини, є критична концентрація міцел (ККМ) молекули. ККМ можна визначити як концентрацію поверхнево-активної речовини, при якій утворюються міцели, і вище якої вся додаткова поверхнево-активна речовина включається в міцели.

20

Зі збільшенням концентрації поверхнево-активної речовини поверхневий натяг зменшується. Коли поверхня повністю покривається молекулами поверхнево-активної речовини, починають утворюватися міцели. Ця точка являє собою ККМ, а також мінімальний поверхневий натяг. Подальше додавання поверхнево-активної речовини не вплине на поверхневий натяг. Тому ККМ можна виміряти шляхом спостереження за зміною поверхневого натягу як функції концентрації поверхнево-активної речовини. Одним із таких методів вимірювання цього значення є метод пластинки Вільгемі. Пластина Вільгельмі зазвичай являє собою тонку іридієво-платинову пластину, прикріплену до терезів за допомогою дроту та розміщену перпендикулярно до межі повітря та рідини. Терези використовуються для вимірювання сили, що діє на пластину при змочуванні. Потім це значення використовується для розрахунку поверхневого натягу (γ) згідно з Рівнянням 1:

30

$$\text{Рівняння 1: } \gamma = F/l \cos \theta$$

де l дорівнює зволеному периметру ($2w+2d$, де w і d - товщина та ширина пластини відповідно), а $\cos \theta$ - контактний кут між рідиною та пластиною - вважається рівним 0 за відсутності наявного літературного значення.

35

Іншим параметром, який використовується для оцінки ефективності поверхнево-активних речовин, є динамічний поверхневий натяг. Динамічний поверхневий натяг - це значення поверхневого натягу для конкретної поверхні або віку розділу. У випадку рідин з додаванням поверхнево-активних речовин це може відрізнитися від рівноважного значення. Відразу після створення поверхні поверхневий натяг дорівнює натягу чистої рідини. Як описано вище, поверхнево-активні речовини знижують поверхневий натяг; тому поверхневий натяг падає до досягнення рівноважного значення. Час, необхідний для досягнення рівноваги, залежить від швидкості дифузії та швидкості адсорбції поверхнево-активної речовини.

40

Один із методів вимірювання динамічного поверхневого натягу покладається на тензіометр тиску бульбашок. Цей прилад вимірює максимальний внутрішній тиск бульбашки газу, яка утворюється в рідині за допомогою капіляра. Виміряне значення відповідає поверхневому натягу за певного віку поверхні, часу від початку утворення бульбашки до появи максимуму тиску. Залежність поверхневого натягу від віку поверхні можна виміряти, змінюючи швидкість, з якою утворюються бульбашки.

45

Поверхнево-активні сполуки можна також оцінити за їхньою змочуючою здатністю на твердих підкладках, яка вимірюється кутом контакту. Коли крапля рідини стикається з твердою поверхнею в третьому середовищі, такому як повітря, між рідиною, газом і твердим тілом утворюється трифазна лінія. Кут між одиничним вектором поверхневого натягу, що діє на трифазній лінії і дотичний до краплі рідини, і поверхнею описується як контактний кут. Контактний кут (також відомий як кут змочування) є мірою змочуваності твердого тіла рідиною. У разі повного змочування рідина повністю розтікається по твердому тілу, а контактний кут становить 0°. Властивості змочування зазвичай вимірюють для даної сполуки при концентрації 1-100х ККМ, однак ця властивість не залежить від концентрації, тому вимірювання властивостей змочування можна вимірювати при концентраціях, які є вищими або нижчими.

В одному методі для вимірювання контактного кута можна використовувати гоніометр оптичного контактного кута. Цей пристрій використовує цифрову камеру та програмне забезпечення для визначення контактного кута шляхом аналізу форми контуру сидячої краплі рідини на поверхні.

Потенційне застосування поверхнево-активних сполук у цьому описі включає композиції для використання як шампунів, кондиціонерів для волосся, миючих засобів, розчинів для полоскання без плям, засобів для чищення підлоги та килимів, засобів для чищення для видалення графіті, зволожуючих речовин для захисту рослин, допоміжних речовин для захисту рослин та зволожуючих речовин для аерозольних розпилюваних покриттів.

Фахівцю в даній галузі буде зрозуміло, що невеликі відмінності між сполуками можуть призвести до суттєво відмінних властивостей поверхнево-активних речовин, так що різні сполуки можуть використовуватися з різними субстратами в різних застосуваннях.

Для демонстрації різних властивостей різних поверхнево-активних речовин наведені наступні необмежуючі варіанти здійснення.

Сполуки є ефективними як поверхнево-активні агенти, корисні для змочування або спінування агентів, диспергаторів, емульгаторів і мийних засобів, серед іншого.

Сполуки цього винаходу можуть бути корисними як у застосуваннях, описаних вище, так і в деяких інших спеціальних застосуваннях, таких як обробка поверхонь, наприклад, у продуктах особистого догляду за волоссям, а також можуть використовуватися для створення водовідштовхувальних поверхонь.

Кількість описаних тут сполук, що використовуються в композиції, може становити приблизно 0,001 мас. %, приблизно 0,05 мас. %, приблизно 0,1 мас. %, приблизно 0,5 мас. %, приблизно 1 мас. %, приблизно 2 мас. %, або приблизно 5 мас. %, або до приблизно 8 мас. %, приблизно 10 мас. %, приблизно 15 мас. %, приблизно 20 мас. %, або приблизно 25 мас. %, або в межах будь-якого діапазону, визначений між будь-якими двома з наведених вище значень.

ПРИКЛАДИ

Спектроскопію ядерного магнітного резонансу (ЯМР) проводили на спектрометрі Bruker 500 МГц. Критичну концентрацію міцели (ККМ) визначали методом пластинки Вільгельмі при 23 °C за допомогою тензіометра (DCAT 11, DataPhysics Instruments GmbH), обладнаного пластиною Pt-Ir. Динамічний поверхневий натяг визначали за допомогою тензіометра тиску бульбашок (Krüss BP100, Krüss GmbH) при 23 °C. Контактний кут визначали за допомогою оптичного гоніометра контактного кута (OCA 15 Pro, DataPhysics GmbH), оснащеного цифровою камерою.

Приклад 1:

Синтез додецил 6-(диметиламіно)гексаноат N-оксиду

6-(Диметиламіно)гексанову кислоту (11,99 г, 75,36 ммоль) розчиняють у толуолі (50 мл) у круглодонній колбі, обладнаній пасткою Діна-Старка. Потім додавали додеканол (12,68 г, 75,36 ммоль) і моногідрат п-толуолсульфоїкислоти (PTSA) (14,33 г, 75,36 ммоль). Реакційну суміш кип'ятили зі зворотним холодильником протягом 24 годин, поки в пастці Діна-Старка більше не було помічено води. Розчинник видаляли під вакуумом і отриману тверду речовину промивали гексаном. Тверду речовину розчиняли в дихлорметані (200 мл) і промивали насиченим карбонатом натрію, отримуючи додецил 6-(диметиламіно)гексаноат з виходом 51 %. ¹H NMR (DMSO) δ 4,00 (t, J=6,5 Гц, 2H), 2,27 (t, J=7,3 Гц, 2H), 2,13-2,16 (m, 2H), 2,01 (c, 6H), 1,54-1,53 (m, 6H), 1,27-1,18 (m, 20H), 0,86 (t, 3H).

Додецил-6-(диметиламіно)гексаноат (1,0 г, 3,05 ммоль) розчиняють у дистильованій воді (80 мл). Додають перекис водню (50 % розчин, 1,04 г, 30,5 ммоль). Реакційну суміш нагрівали зі зворотним холодильником протягом 12 годин, потім розчинник видаляли під вакуумом. Отриману тверду речовину промивали ацетоном, отримуючи бажаний N-оксид з виходом 90 %. ¹H NMR (500 МГц, DMSO) δ 4,00 (t, J=6,6 Гц, 2H), 3,30-3,26 (m, 2H), 3,18 (c, 6H), 2,31 (t, J=7,4 Гц, 2H), 1,76-1,73 (m, 2H), 1,54-1,57 (m, 4H), 1,30-1,24 (m, 22H), 0,86 (t, J=6,9 Гц, 3H).

Приклад 2:

Визначення критичної концентрації міцел (ККМ)

Випробувано критичну концентрацію міцел (ККМ). За зміною поверхневого натягу з концентрацією у воді було визначено, що ККМ становить приблизно 0,08 ммоль. Значення плато мінімального поверхневого натягу, яке може бути досягнуте цією поверхнево-активною речовиною, становить приблизно 28 мН/м,

а саме 28 мН/м + 2,8 мН/м. На Фіг. 1 наведено графік цих результатів, що показує залежність поверхневого натягу від концентрації. З графіка результатів поверхневий натяг на ККМ дорівнює або менше ніж приблизно 30 мН/м. Крім того, графік показує поверхневий натяг, що дорівнює або менше 30 мН/м при концентрації 0,08 ммоль або більше.

Приклад 3:

Визначення динамічного поверхневого натягу

Динамічний поверхневий натяг визначали за допомогою тензіометра тиску бульбашок, який вимірює зміну поверхневого натягу щойно створеної поверхні розділу повітря-вода з часом. На Фіг. 2 представлено графік залежності поверхневого натягу від часу, який показує, що суміш повністю насичує поверхню приблизно за 7,6 секунди. З графіка видно, що динамічний поверхневий натяг дорівнює або менше 40 мН/м при віці поверхні 4900 мс або більше.

Приклад 4:

Визначення змочувальних властивостей

На додаток до поверхневого натягу та поверхневої динаміки, звожуючі властивості сполуки були перевірені на різних поверхнях. Наприклад, гідрофобні підкладки, такі як поліетилен-HD, демонструють змочування поверхні з контактним кутом 39,3°, набагато нижчим, ніж у воді. На олеофобних і гідрофобних підкладках, таких як тефлон, виміряний контактний кут був набагато меншим, ніж у воді, 57,4° (Таблиця 1).

Таблиця 1

| Субстрат | CA поверхнево-активної речовини (°) | Концентрація | CA води (°) |
|----------------------|-------------------------------------|--------------|-------------|
| Тефлон | 57.4 | 10x ККМ | 119 |
| Поліетилен-HD | 39.3 | 10x ККМ | 93.6 |
| Нейлон | 21.7 | 10x ККМ | 50 |
| Поліетилентерефталат | 24.5 | 10x ККМ | 65.3 |

Приклад 5:

Композиція шампуню

У цьому прикладі надається композиція для використання в якості шампуню. Ця композиція корисна для надання волоссю гладкості та шовковистості. Компоненти композиції наведені нижче в Таблиці 2. Крім того, композиція може включати інші натуральні олії та інгредієнти, а також вітаміни для споживчої привабливості в кількості менше 1 мас. %.

Таблиця 2

| Компоненти | Функція | Вага% |
|--|--------------------------------|----------|
| Поверхнево-активна речовина | Поверхнево-активна речовина | 0.1-10 |
| Лаурилсульфат амонію | Піноутворювач | 10-25 |
| Кокамідпропілбетаїн | Доповерхнево-активна речовина | 0.1-5 |
| Кокамід діетаноламін | Підсилювач піни | 1-4 |
| Ксантанова камедь або сополімер акрилату | Загущувач/модифікатор реології | 0-5 |
| Лимонна кислота | стабілізатор рН | 0.1-0.3 |
| Ароматизатор | | 0.02-0.1 |
| Вода | | 49.5-89 |

Приклад 6:

Композиція кондиціонера для волосся

У цьому прикладі надається композиція для використання кондиціонера для волосся. Цю композицію можна використовувати для заміни або зменшення масел полікватерніуму-10, полікватерніуму-7 та диметикону, зберігаючи легкість розчісування та шовковистість на дотик, які забезпечують кондиціонери для волосся. Композиція наведена нижче в Таблиці 3.

Таблиця 3

| Компоненти | Функція | Вага% |
|------------------------------|-----------------------------|-----------|
| Поверхнево-активна речовина | Поверхнево-активна речовина | 0.1-10 |
| Кумолсульфонат натрію | Гідротроп | 1-3 |
| Лаурилсульфат амонію | Поверхнево-активна речовина | 0.1-6 |
| Лаурет-3 сульфат амонію | Поверхнево-активна речовина | 0.1-6 |
| Кокоамід діетаноламін | Піноутворювач | 0.5-2 |
| ПЕГ-55 пропіленгліколю олеат | Емульгатор | 0.01-1 |
| Ароматизатор | | 0.02-0.1 |
| Вода | | 61.9-97.2 |

- Приклад 7:
Композиція мийних засобів для видалення складних плям з поверхні
У цьому прикладі надається композиція для використання м'яких засобів для миття
5 автомобіля для видалення складних плям з поверхні.
Композиція наведена нижче в Таблиці 4.

Таблиця 4

| Компоненти | Функція | Вага% |
|--|-----------------------------|-----------|
| Поверхнево-активна речовина | Поверхнево-активна речовина | 0.1-10 |
| Додецилбензолсульфофокислота або Лаурилсульфат амонію | Піноутворювач/м'який засіб | 5-14 |
| Моноетаноламін, діетаноламін або триетаноламін | Стабілізатор рН | <0.5 |
| Кокоамід діетаноламін | Стабілізатор піни | 0.1-2 |
| Пропіленгліколь | Солюбілізатор | 0.05-1.6 |
| Ароматизатор | | 0.02-0.1 |
| Фарбувальний засіб | | 0-0.1 |
| Вода | | 71.6-95.0 |

- Приклад 8:
10 Композиція розчину для полоскання або сушіння без плям
У цьому прикладі надано композицію розчину для полоскання або сушіння без плям. Розчин можна наносити на вікна або кузов автомобіля після завершення основного миття. Композиція наведена нижче в Таблиці 5.

Таблиця 5

| Компоненти | Функція | Вага% |
|-----------------------------|-----------------------------|-----------|
| Поверхнево-активна речовина | Поверхнево-активна речовина | 0.001-2 |
| Вода | | 98-99.999 |

- 15 Приклад 9:
Композиція потужного засобу для чищення килимів
У цьому прикладі подано композицію для потужного засобу для чищення килимів. Очисник глибоко піноутворюючий засіб. Композиція наведена нижче в Таблиці 6.

20

Таблиця 6

| Компоненти | Функція | Вага% |
|--|-----------------------------|----------|
| Поверхнево-активна речовина | Поверхнево-активна речовина | 1-15 |
| Додецилбензолсульфофокислота або Лаурилсульфат амонію | Піноутворювач/м'який засіб | 0.001-10 |
| Кумолсульфонат натрію | Гідротроп | 0.001-3 |
| Моноетаноламін, діетаноламін або триетаноламін | Стабілізатор рН | 0.01-1 |
| Вода | | 74.95-99 |

Приклад 10:

Композиція потужного засобу для чищення поверхонь

- 5 У цьому прикладі подано композицію для потужного очищувача поверхонь. Цей очисник можна використовувати для ручних або автоматичних машин для очищення поверхонь. Композиція наведена нижче в Таблиці 7.

Таблиця 7

| Компоненти | Функція | Вага% |
|--|-----------------------------------|------------|
| Поверхнево-активна речовина | Поверхнево-активна речовина | 0.001-25 |
| Додецилбензолсульфофокислота Лаурилсульфат амонію | або Піноутворювач/миючий засіб | 0.001-10 |
| Кумолсульфонат натрію | Гідротроп | <0.5 |
| Пропіленгліколь | Солюбілізатор | 0.01-5 |
| Вода | | 59.5-99.99 |

Приклад 11:

- 10 Композиція концентрованого засобу для видалення графіті

У цьому прикладі подано композицію для концентрованого мийного засобу для видалення графіті. Мийний засіб можна використовувати в шлангу високого тиску. Композиція наведена нижче в Таблиці 8.

Таблиця 8

| Компоненти | Функція | Вага% |
|-------------------------------|-----------------------------|----------|
| Поверхнево-активна речовина 4 | Поверхнево-активна речовина | 0.001-15 |
| Кумолсульфонат натрію | Гідротроп | 0.001-3 |
| Пропіленгліколь | Солюбілізатор | 0.01-5 |
| Вода | | 67-99.99 |

15

Приклад 12:

Композиція для зволожувача в аерозольних розпилювачах

- 20 У цьому прикладі надається композиція для ад'юванту зволожувача в аерозольних розпилювачах. Аерозольні розпилювачі можна використовувати для внесення пестицидів або інших засобів захисту рослин. Надана композиція має на меті зменшити кількість поверхнево-активних хімічних речовин у пестицидах і засобах захисту рослин (зазвичай на 2-5 %) шляхом забезпечення кращої продуктивності завдяки чудовому зволоженню та низькому ККМ, таким чином забезпечуючи більш екологічний варіант. Композиція наведена нижче в Таблиці 9.

Таблиця 9

| Компоненти | Функція | Вага% |
|---|--------------------|-----------|
| Поверхнево-активна речовина | Спільне зволоження | 0.001-2 |
| Пестициди та/або інші засоби захисту рослин | | 0.1-10 |
| Вода | | 88-99.899 |

25

Приклад 13:

Композиція добавок для аерозольних фарб

- 30 У цьому прикладі подано композицію добавки для аерозольного розпилення фарби або покриття на водній основі. Композиція спрямована на забезпечення хорошого динамічного зволоження крапель аерозолію на поверхнях під час нанесення, таким чином запобігаючи утворенню кратерів фарби та інших подібних проблем. Композиція наведена нижче в Таблиці 10.

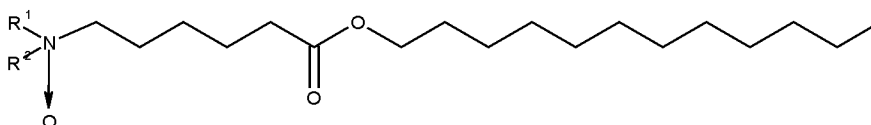
Таблиця 10

| Компоненти | Функція | Вага% |
|-------------------------------|--|---------|
| Поверхнево-активна речовина | Змочувач/агент для вирівнювання потоку/агент для контролю ковзання | 0.001-5 |
| Газовий пропелент | Пропелент | 5-30 |
| Емульсія масло-у-воді | Пігментація | 0.1-25 |
| Тамол 731А | Диспергатор | 1-4 |
| Ізопропанол (97-99 % чистоти) | Розчинник/носій | 7-15 |
| Efka SI2022 або SI 2723 | Антипінний засіб | 0.001-2 |
| Вода | | 19-86.9 |

АСПЕКТИ

Аспект 1 є сполукою такої формули:

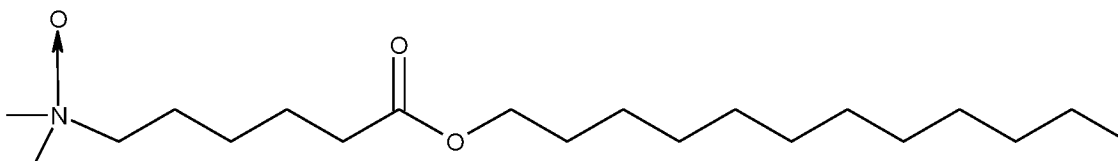
5



де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆ алкілу.

10

Аспект 2 є сполукою Аспекту 1, де сполука являє собою додецил 6-(диметиламіно)гексаноат N-оксид, що має таку формулу:



15

Аспект 3 є сполукою Аспекту 1 або Аспекту 2, яка має критичну концентрацію міцел (ККМ) у воді приблизно 0,08 ммоль.

Аспект 4 є сполукою будь-якого з Аспектів 1-3, яка має значення плато мінімального поверхневого натягу у воді приблизно 28 мН/м.

20

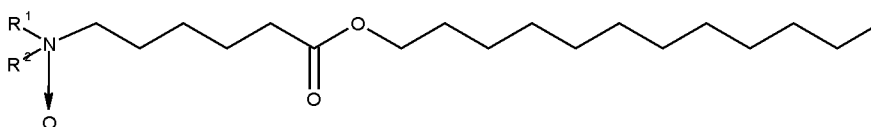
Аспект 5 є сполукою будь-якого з Аспектів 1-4, яка має поверхневий натяг у воді, що дорівнює або менше 30 мН/м при концентрації 0,08 ммоль або більше.

Аспект 6 є сполукою будь-якого з Аспектів 1-4, яка має поверхневий натяг у воді, що дорівнює або менше ніж 40 мН/м при віці поверхні 4900 мс або більше.

25

Аспект 7 є способом синтезу амінокислотної поверхнево-активної речовини, який включає наступні етапи: (1) розкриття лактаму з утворенням амінокислоти з N-кінцем; (2) реакцію N-кінця амінокислоти з алкілюючим агентом з утворенням третинного аміну; (3) реакцію третинного аміну зі спиртом у кислих умовах з утворенням складного ефіру амінокислоти, що має N-кінець; і (4) реакцію N-кінця складного ефіру амінокислоти з окислювачем з утворенням поверхнево-активної речовини амінокислоти такої формули:

30



де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆ алкілу.

35

Аспект 8 є способом Аспекту 7, де на етапі 1 лактам є капролактамом.

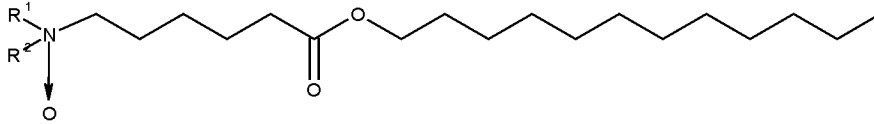
Аспект 9 є способом Аспекту 7 або Аспекту 8, де на етапі 2 алкілюючим агентом є формальдегід або параформальдегід.

Аспект 10 є способом будь-якого з Аспектів 7-9, де на етапі 3 спиртом є додеканол.

Аспект 11 є способом будь-якого з Аспектів 7-10, де на етапі 3 кислотою є п-толуолсульфонова кислота.

Аспект 12 є способом будь-якого з Аспектів 7-11, де на етапі 4 окислювачем є перекис водню.

5 Аспект 13 є рідкою композицією, що містить: середовище; і поверхнево-активну речовину такої формули:



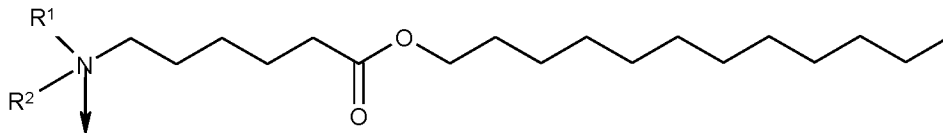
10 де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆ алкілу.

Аспект 14 є композицією Аспекту 13, де середовищем є вода.

15

ФОРМУЛА ВИНАХОДУ

1. Сполука формули:

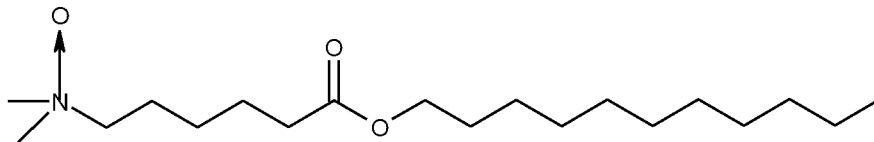


20

де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆ алкілу.

2. Сполука за п. 1, яка являє собою додецил-6-(диметиламіно)гексаноат-N-оксид, що має таку формулу:

25



3. Сполука за п. 1 або 2, яка має:

30

а) критичну концентрацію міцел (ККМ) у воді приблизно 0,08 ммоль; та/або

б) значення плато мінімального поверхневого натягу у воді приблизно 28 мН/м.

4. Сполука за будь-яким одним із пп. 1-3, яка має:

а) поверхневий натяг у воді, що дорівнює або менше 30 мН/м при концентраціях 0,08 мМ або більше; або

35

б) поверхневий натяг води, що дорівнює або менше ніж 40 мН/м при віці поверхні 4900 мс або більше.

5. Спосіб синтезу амінокислотної поверхнево-активної речовини, що включає наступні етапи:

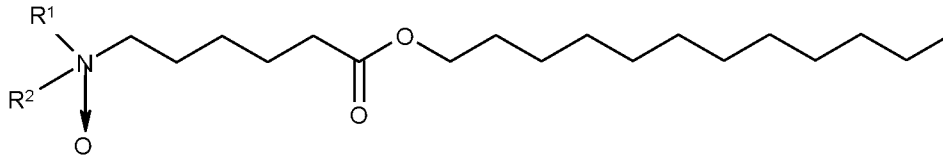
(1) розкриття лактаму з утворенням амінокислоти, що має N-кінець;

(2) реакцію N-кінця амінокислоти з алкілюючим агентом з утворенням третинного аміну;

40

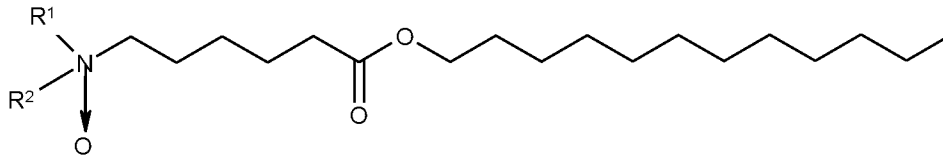
(3) реакцію третинного аміну зі спиртом у кислих умовах з утворенням складного ефіру амінокислоти, що має N-кінець; і

(4) реакцію N-кінця ефіру амінокислоти з окислювачем з утворенням поверхнево-активної речовини амінокислоти такої формули:



де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆алкілу.

- 5 6. Спосіб за п. 5, який **відрізняється** тим, що на стадії (1) лактам є капролактамом.
7. Спосіб за п. 5 або 6, який **відрізняється** тим, що на стадії (2) алкілюючим агентом є формальдегід або параформальдегід.
8. Спосіб за будь-яким одним із пп. 5-7, який **відрізняється** тим, що на стадії (3) спирт є додеканолом.
- 10 9. Спосіб за будь-яким одним із пп. 5-8, який **відрізняється** тим, що на стадії (3) кислотою є п-толуолсульфонова кислота.
10. Спосіб за будь-яким одним із пп. 5-9, який **відрізняється** тим, що на стадії (4) окислювач являє собою перекис водню.
11. Рідка композиція, що містить:
- 15 середовище; і
поверхнево-активну речовину наступної формули:



- 20 де R¹ і R² можуть бути однаковими або різними і містити щонайменше одну групу, вибрану з групи, що складається з C₁-C₆алкілу.
12. Композиція за п. 11, яка **відрізняється** тим, що середовищем є вода.
13. Сполука за будь-яким з пп. 1-4 для застосування як поверхнево-активної речовини.
- 25 14. Композиція, що містить сполуку за будь-яким з пп. 1-4, для застосування як шампуню, кондиціонера для волосся, мийного засобу, розчину для ополіскування без плям, засобу для чищення підлоги та килимів, засобів для чищення для видалення графіті, зволожуючих речовин для захисту рослин, допоміжних речовин для захисту рослин або зволожуючих речовин для аерозольних розпилюваних покриттів, в якій зазначена сполука являє собою поверхнево-активну речовину.
- 30

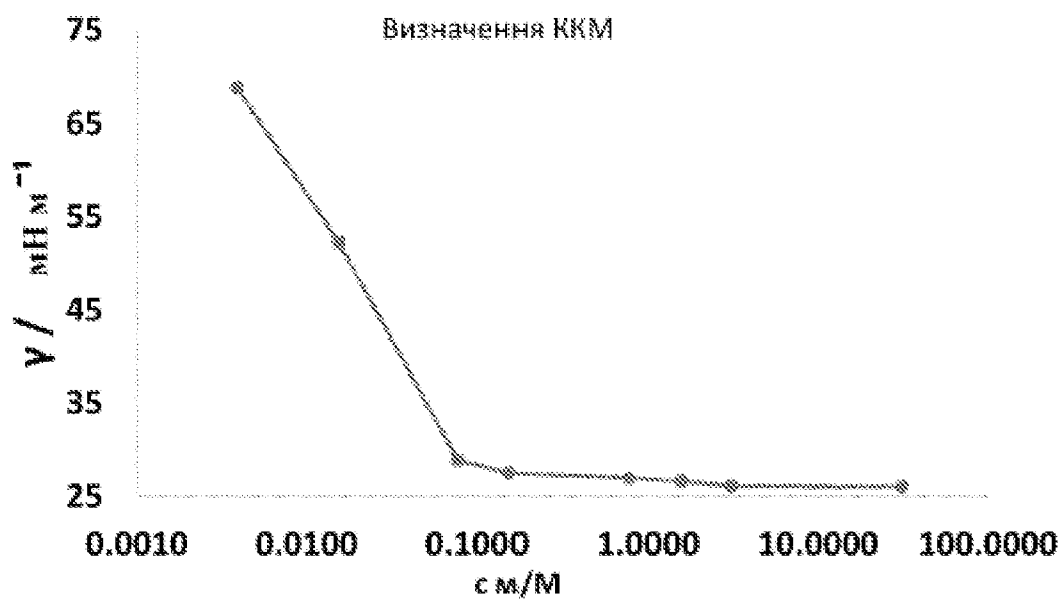


Fig. 1

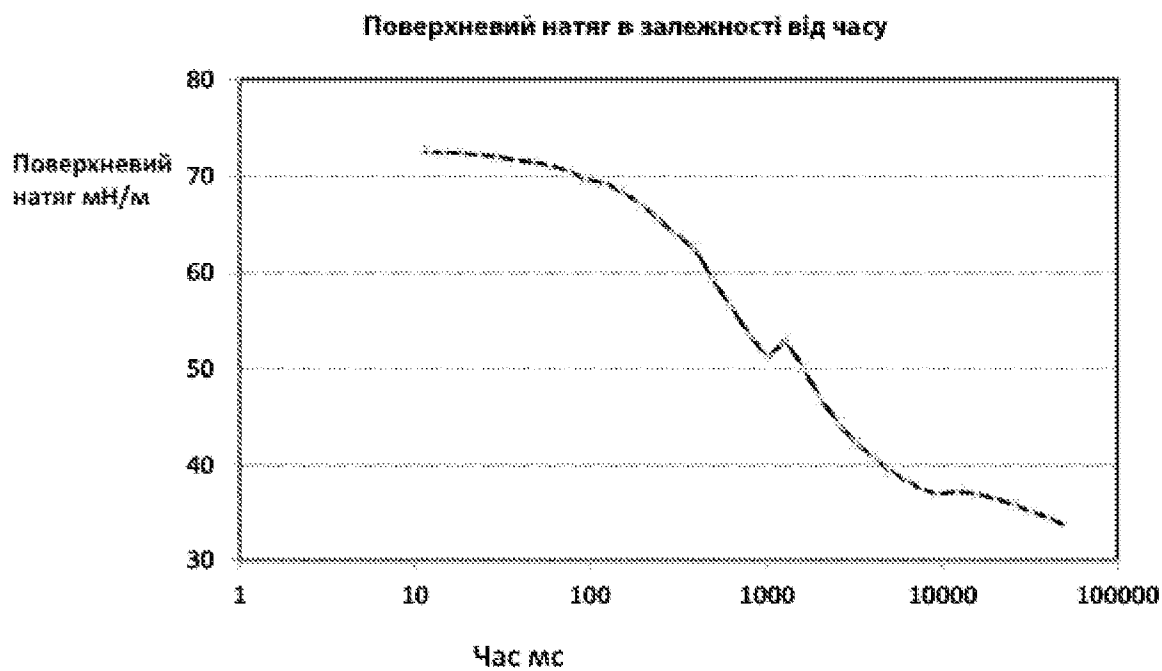


Fig. 2