

(19)



**Евразийское
патентное
ведомство**

(21) **202290649** (13) **A1**

(12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ЕВРАЗИЙСКОЙ ЗАЯВКЕ

(43) Дата публикации заявки
2022.05.13

(51) Int. Cl. **C07F 7/08** (2006.01)

(22) Дата подачи заявки
2020.08.11

**(54) СИЛОКСАНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АМИНОКИСЛОТ, ОБЛАДАЮЩИЕ
ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМИ СВОЙСТВАМИ**

(31) **62/890,341**

(32) **2019.08.22**

(33) **US**

(86) **PCT/US2020/045797**

(87) **WO 2021/034550 2021.02.25**

(71) Заявитель:
**ЭДВАНСИКС РЕСИНС ЭНД
КЕМИКАЛС ЛЛК (US)**

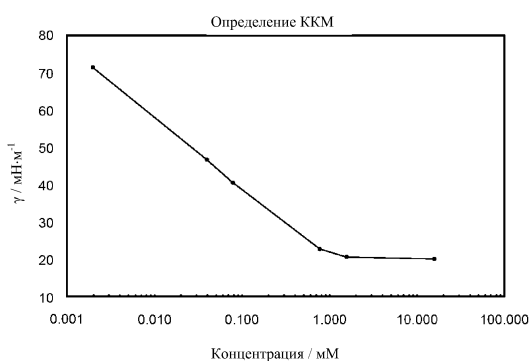
(72) Изобретатель:

**Асирватхам Эдвард, Хонсиук Андрей,
Михали Воичита (US)**

(74) Представитель:

**Костюшенкова М.Ю., Угрюмов В.М.,
Строкова О.В., Джермакян Р.В.,
Гизатуллин Ш.Ф., Гизатуллина Е.М.,
Парамонова К.В., Христофоров А.А.
(RU)**

(57) В настоящем изобретении предложены силоксановые производные аминокислот, обладающие поверхностно-активными свойствами. Данные аминокислоты могут встречаться в природе, или могут представлять собой синтетические аминокислоты, или могут быть получены в результате реакции раскрытия кольца с использованием лактама, такого как капролактама. Данные аминокислоты могут быть функционализированы силоксановой группой с получением соединений, которые обладают поверхностно-активными свойствами и имеют характеристики поверхностно-активных веществ. Данные соединения имеют низкие критические концентрации мицеллообразования (ККМ), а также обладают способностью уменьшать поверхностное натяжение жидкости.



A1

202290649

202290649

A1

СИЛОКСАНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АМИНОКИСЛОТ, ОБЛАДАЮЩИЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМИ СВОЙСТВАМИ

ПЕРЕКРЕСТНАЯ ССЫЛКА НА РОДСТВЕННЫЕ ЗАЯВКИ

5 **[0001]** Настоящая заявка испрашивает приоритет на основании Title 35, U.S.C. §119(e) согласно предварительной заявке на патент США № 62/890341 СИЛОКСАНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АМИНОКИСЛОТ, ОБЛАДАЮЩИЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМИ СВОЙСТВАМИ, поданной 22 августа 2019 г.,
10 содержание которой включено во всей полноте в настоящую заявку посредством ссылки.

ОБЛАСТЬ ТЕХНИКИ ИЗОБРЕТЕНИЯ

15 **[0002]** Настоящее изобретение относится к силоксановым производным аминокислот, обладающим поверхностно-активными свойствами, и к способам их синтеза.

УРОВЕНЬ ТЕХНИКИ ИЗОБРЕТЕНИЯ

20 **[0003]** Поверхностно-активные вещества (молекулы, обладающие поверхностно-активными свойствами) представляют собой важный класс молекул с высоковостребованными характеристиками. Поверхностно-активные вещества могут представлять собой незаряженные, цвиттер-ионные, катионные или анионные соединения. Часто данные соединения являются амфифильными молекулами с водонерастворимой гидрофобной "хвостовой" группой и водорастворимой гидрофильной "головной" группой. Данные соединения могут
25 адсорбироваться на границе раздела двух сред, например на границе раздела двух жидких сред, жидкой и газообразной среды или жидкой и твердой среды. В случае границы раздела вода-масло гидрофильная головная группа ориентирована в воду, тогда как гидрофобная хвостовая группа ориентирована в масло. При добавлении воды гидрофильная головная группа ориентирована в воду, тогда как
30 гидрофобная хвостовая группа ориентирована в воздушную среду. Присутствие поверхностно-активного вещества нарушает межмолекулярное взаимодействие между молекулами воды, заменяя его более слабыми взаимодействиями между молекулами воды и поверхностно-активного вещества. Это приводит к снижению поверхностного натяжения и также может способствовать стабилизации границы
35 раздела.

[0004] При достаточно высоких концентрациях поверхностно-активные вещества могут образовывать агрегаты, ограничивая тем самым воздействие полярного растворителя на гидрофобный хвост. Одним из таких агрегатов является мицелла, где молекулы упорядочены в виде сферы таким образом, что их гидрофобные хвосты ориентированы внутрь сферы и гидрофильные головы направлены наружу и взаимодействуют с полярным растворителем. Действие, которое данное соединение оказывает на поверхностное натяжение, и концентрация, при которой оно образует мицеллы, могут служить в качестве определяющих характеристик поверхностно-активного вещества.

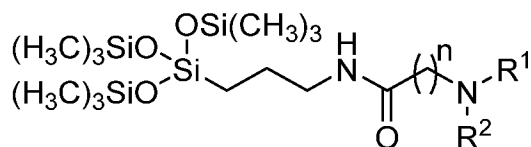
10 **[0005]** Поверхностно-активные вещества используются в промышленном производстве широко ряда препаратов - от детергентов до средств ухода за волосами и косметических средств. Соединения, обладающие поверхностно-активными свойствами, используют, например, в качестве мыла, детергентов, смазывающих веществ, увлажняющих агентов, вспенивающих агентов и
15 растекателей. Соответственно, существует необходимость в идентификации и синтезе таких соединений.

[0006] Однако исключительно на основе структуры может быть трудно прогнозировать, будет ли данное соединение обладать поверхностно-активными свойствами, уже не говоря о прогнозировании других важных характеристик, таких как динамика адсорбции на поверхности раздела, достижимое минимальное
20 поверхностное натяжение и/или способность смачивать гидрофобные и/или олеофобные поверхности, также являющихся важной составляющей того, станет ли соединение эффективным поверхностно-активным веществом. Некоторые аминокислоты и их производные, например, являются желательными в качестве
25 строительных блоков поверхностно-активных веществ, но выбор аминокислот, которые следует использовать, не является интуитивно-понятным. Также известно, что некоторые силоксаны обладают поверхностно-активными свойствами, но, опять-таки, прогнозирование того, какой силоксан будет эффективным, является весьма проблематичным. Синтез таких соединений
30 создает еще ряд трудностей, обусловленных различиями в растворимостях, свойственных разным элементам и группировкам, присутствующим в одной и той же молекуле. Существует необходимость в высокоэффективных поверхностно-активных веществах, которые могут быть легко синтезированы в промышленном масштабе с использованием эффективных методик.

СУЩНОСТЬ ИЗОБРЕТЕНИЯ

[0007] В настоящем изобретении предложены силоксановые производные аминокислот, обладающие поверхностно-активными свойствами. Данные аминокислоты могут встречаться в природе, или могут представлять собой синтетические аминокислоты, или могут быть получены в результате реакций раскрытия кольца с использованием таких молекул, как лактамы, например капролактама. Данные аминокислоты могут быть функционализированы разными типами силоксановых групп с получением соединений, обладающих поверхностно-активными свойствами. Что характерно, данные соединения могут иметь низкие критические концентрации мицеллообразования (ККМ) и/или обладать способностью уменьшать поверхностное натяжение жидкости.

[0008] В настоящем изобретении предложены соединения Формулы I, представленной ниже:



Формула I

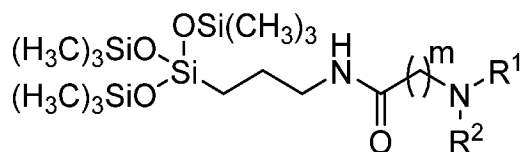
где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, данный C_1 - C_6 алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, amino, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

n представляет собой целое число от 1 до 12;

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , при этом R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода, гидроксила и C_1 - C_6 алкила; и

с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

[0009] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ia:



Формула Ia

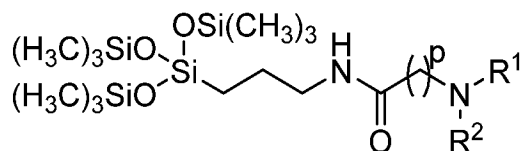
где R¹ и R² могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C₁-C₆ алкила, данный C₁-C₆ алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

m представляет собой целое число от 1 до 6;

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R³, при этом R³ выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C₁-C₆ алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

[0010] Дополнительные соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib:



Формула Ib

где R¹ и R² могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C₁-C₆ алкила, данный C₁-C₆ алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может

необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

р имеет значение 5;

- 5 концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , при этом R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C_1 - C_6 алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

- 10 с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

- [0011] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы I, где R^1 и R^2 представляют собой метил.

[0012] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы I, где n имеет значение 5.

- [0013] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где R^1 и R^2 представляют собой метил.

[0014] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где R^3 представляет собой атом водорода.

- [0015] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где противоион выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

[0016] Дополнительные соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где противоион представляет собой хлорид.

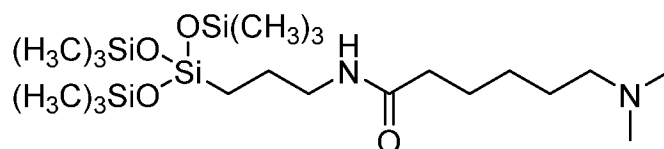
- 30 [0017] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где R^3 представляет собой метил.

[0018] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где противоион представляет собой иодид.

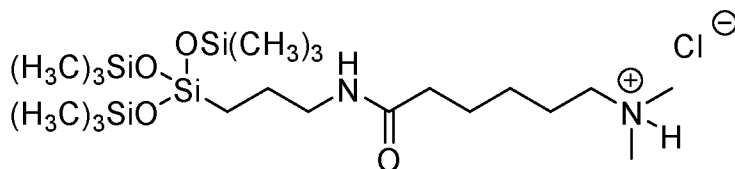
[0019] Другие соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где R³ представляет собой атом кислорода.

[0020] Дополнительные соединения, предложенные в настоящем изобретении, представляют собой соединения Формулы Ib, где R³ представляет собой C₁-C₆ алкил, содержащий в качестве заместителя сульфонат.

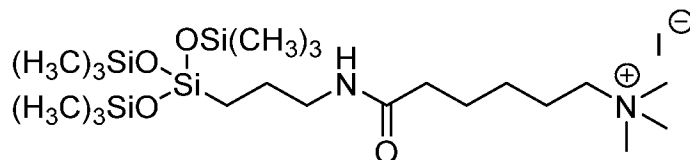
[0021] Одно конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-(диметиламино)-N-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексанамида, имеющий следующую Формулу:



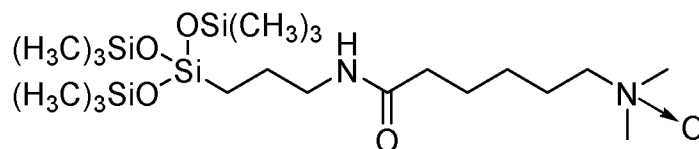
[0022] Второе конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-(диметиламино)-N-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексаминия хлорид, имеющий следующую Формулу:



[0023] Третье конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N,N-триметил-6-оксогексан-1-аминия иодид, имеющий следующую Формулу:

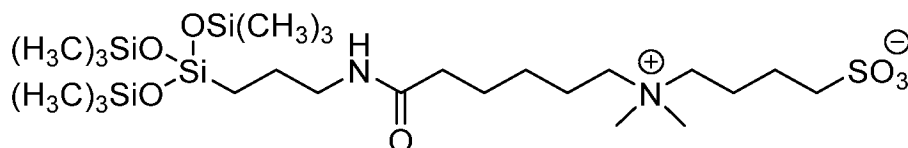


[0024] Четвертое конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-амин оксид, имеющий следующую Формулу:



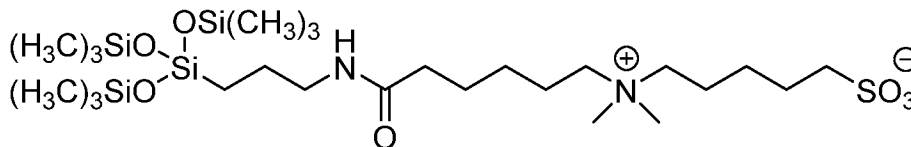
[0025] Пятое конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 4-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-

5 оксогексил)диметиламмонии)бутан-1-сульфонат, имеющий следующую Формулу:



[0026] Шестое конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 5-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-

10 оксогексил)диметиламмонии)пентан-1-сульфонат, имеющий следующую Формулу:



[0027] Вышеприведенные и другие признаки изобретения и способы их осуществления станут более очевидными и будет достигнуто их лучшее понимание исходя из следующего далее описания вариантов осуществления настоящего изобретения в сочетании с прилагаемыми чертежами.

КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ ЧЕРТЕЖЕЙ

20 **[0028]** На Фиг. 1 представлен график зависимости поверхностного натяжения от концентрации Поверхностно-активного вещества 2, содержащего в качестве противоиона хлорид, при pH = 7, построенный на основе данных, описанных в Примере 1b.

[0029] На Фиг. 2 представлен график зависимости поверхностного натяжения от концентрации Поверхностно-активного вещества 3, построенный на основе данных, описанных в Примере 2b.

[0030] На Фиг. 3 представлен график динамического поверхностного натяжения в виде изменения поверхностного натяжения во времени для Поверхностно-активного вещества 3, построенный на основе данных, описанных в Примере 2b.

5 **[0031]** На Фиг. 4 представлен график зависимости поверхностного натяжения от концентрации Поверхностно-активного вещества 4, построенный на основе данных, описанных в Примере 3b.

[0032] На Фиг. 5 представлен график динамического поверхностного натяжения в виде изменения поверхностного натяжения во времени для
10 Поверхностно-активного вещества 4, построенный на основе данных, описанных в Примере 3b.

[0033] На Фиг. 6 представлен график зависимости поверхностного натяжения от концентрации Поверхностно-активного вещества 5, построенный на основе данных, описанных в Примере 4b.

15 **[0034]** На Фиг. 7 представлен график динамического поверхностного натяжения в виде изменения поверхностного натяжения во времени для Поверхностно-активного вещества 5, построенный на основе данных, описанных в Примере 4b.

20 ПОДРОБНОЕ ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ

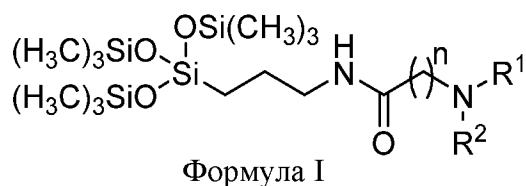
[0035] В контексте данного описания фраза "в пределах любого диапазона, заключенного между любыми двумя вышеуказанными значениями" в буквальном смысле означает, что может быть выбран любой диапазон с использованием
25 любых двух значений из списка, предшествующего такой фразе, независимо от того, расположены данные значения в нижней части данного списка или в верхней части данного списка. Например, пара значений может быть представлена двумя нижними значениями, двумя верхними значениями или одним нижним значением и одним верхним значением.

[0036] В контексте данного описания слово "алкил" означает любую
30 насыщенную углеродную цепь, которая может представлять собой нормальную или разветвленную цепь.

[0037] В контексте данного описания фраза "поверхностно-активный" означает, что ассоциированное соединение может понижать поверхностное натяжение среды, в которой оно растворено, и/или натяжение на поверхности

раздела с другими фазами, и, соответственно, может быть адсорбировано на поверхности раздела жидкость/пар и/или на других поверхностях раздела. Термин "поверхностно-активное вещество" может быть использован в отношении такого соединения.

- 5 **[0038]** Что касается терминологии для описания неточности измерений, термины "приблизительно" и "примерно" могут быть использованы взаимозаменяемо и относятся к результату измерения, который включает данный результат измерения и который также включает любые результаты измерений, которые находятся достаточно близко к данному результату измерения.
- 10 Результаты измерений, которые находятся достаточно близко к данному результату измерения, отклоняются от данного результата измерения на достаточно небольшую величину, как это понимают и определяют средние специалисты в данной области техники. Такие отклонения могут быть, например, приписаны ошибке измерения или незначительным корректировкам, сделанным
- 15 для оптимизации результативности работ. В данном случае это означает, что средние специалисты в данной области техники не могли достоверно определить значения таких достаточно маленьких отклонений, значения терминов "приблизительно" и "примерно" можно понимать как плюс или минус 10% от данного значения.
- 20 **[0039]** В настоящем изобретении предложены силоксановые производные аминокислот. Данные аминокислоты могут встречаться в природе, или могут представлять собой синтетические аминокислоты, или могут быть получены в результате реакций раскрытия кольца с использованием лактамов, таких как капролактam. Показано, что соединения согласно настоящему изобретению
- 25 обладают поверхностно-активными свойствами и могут быть использованы, например в качестве поверхностно-активных веществ и увлажняющих агентов. В частности, в настоящем изобретении предложены соединения Формулы I, приведенной ниже:



- 30 где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными, и представляют собой по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила,

с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромид и иодида.

$$\begin{array}{c} \text{(H}_3\text{C)}_3\text{SiO} \quad \text{OSi(CH}_3\text{)}_3 \\ | \quad \quad | \\ \text{(H}_3\text{C)}_3\text{SiO} - \text{Si} - \text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH} - \text{C}(=\text{O}) - (\text{CH}_2)_m - \text{N} \begin{array}{l} \text{R}^1 \\ \text{R}^2 \end{array} \end{array}$$

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , где R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C_1 - C_6 алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

[0041] В настоящем изобретении дополнительно предложены соединения

5 **Формулы Ib:**



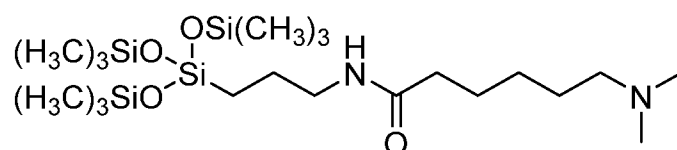
где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, данный C_1 - C_6 алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

15 p имеет значение 5;

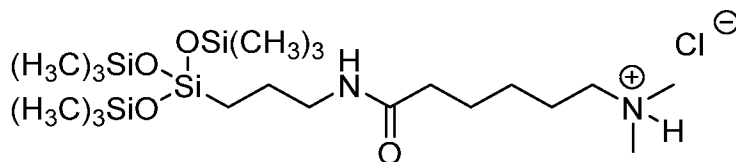
концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , где R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C_1 - C_6 алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

[0042] Одно конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-(диметиламино)-*N*-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексанамида (Поверхностно-активное вещество 1), имеющий следующую Формулу:



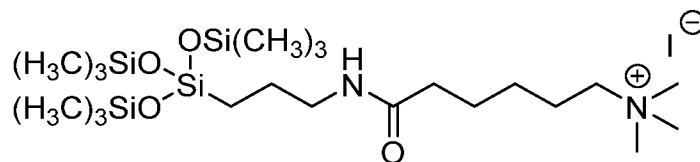
[0043] Второе конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-(диметиламино)-*N*-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексаминия хлорид (Поверхностно-активное вещество 2), имеющий следующую Формулу:



5

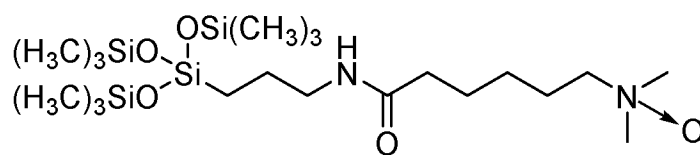
[0044] Третье конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N,N*-триметил-6-оксогексан-1-аминия иодид (Поверхностно-активное вещество 3), имеющий следующую Формулу:

10



[0045] Четвертое конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N*-диметил-6-оксогексан-1-амин оксид (Поверхностно-активное вещество 4), имеющий следующую Формулу:

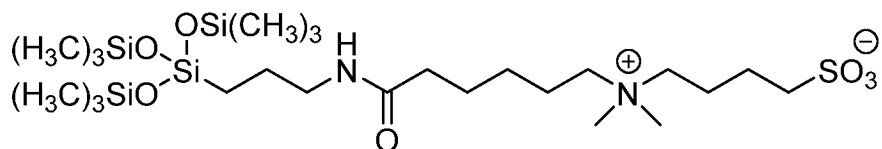
15



[0046] В структуре, приведенной выше, обозначение "*N*→*O*" означает неионную связь, обусловленную взаимодействием атома азота и кислорода.

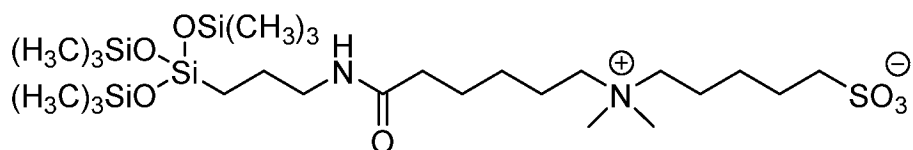
20

[0047] Пятое конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 4-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)диметиламмоний)бутан-1-сульфонат (Поверхностно-активное вещество 5), имеющий следующую Формулу:



[0048] Шестое конкретное соединение, предложенное в настоящем изобретении, представляет собой 5-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-

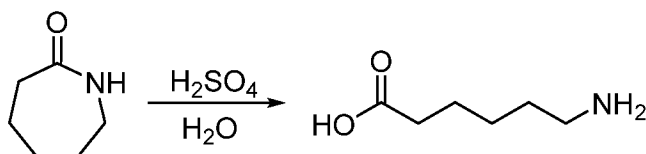
5 оксогексил)диметиламмонии)пентан-1-сульфонат, имеющий следующую Формулу:



[0049] Данные соединения могут быть синтезированы с использованием различных методик. Одна из таких методик включает взаимодействие аминокислоты, такой как *N*-алкилированная или *N*-ацилированная аминокислота, и силоксана с превращением С-конца аминокислоты в желаемое силоксановое производное. Дополнительно *N*-конец аминокислоты может быть протонирован, алкилирован или окислен с получением, например, четвертичного амина или *N*-оксида.

[0050] Данная аминокислота может встречаться в природе, или может представлять собой синтетическую аминокислоту, или может быть получена в результате реакции раскрытия кольца с использованием лактама, такого как капролактam. Реакция раскрытия кольца может представлять собой реакцию, катализируемую кислотой или щелочью, Пример реакции, катализируемой кислотой, показан ниже на Схеме 1.

СХЕМА 1



[0051] Аминокислота может содержать от 1 до 12 атомов углерода между *N*- и С-концами. Алкильная цепь аминокислоты может быть разветвленной или нормальной. Алкильная цепь может прерываться атомом азота, кислорода или серы. Алкильная цепь может дополнительно содержать один, или более,

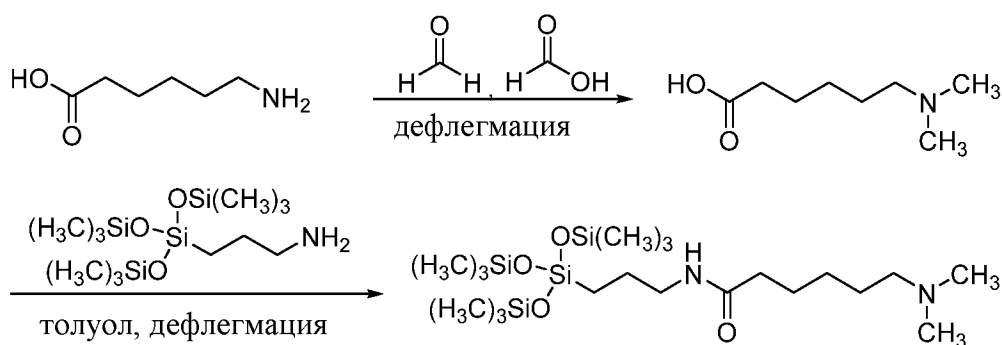
заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбоксила и карбоксилата. *N*-концевой азот может быть ацилирован или алкилирован одной, или более, алкильной группой. Например, аминокислота может представлять собой 6-(диметиламино)гексановую кислоту.

- 5 [0052] Силоксан может содержать в качестве заместителей одну, или более, алкокси-группу, такую как метокси, этокси, изопропокси, третичный буюкси и другие. Силоксан может дополнительно содержать в качестве заместителей одну, или более, алкильную группу, такую как пропил, при этом данная алкильная группа может дополнительно содержать в качестве заместителя подходящую
- 10 функциональную группу, такую как атом азота, которая делает возможным взаимодействие силоксана с аминокислотой. Например, силоксан может представлять собой 3-аминопропилтрис(триметилсилокси)силан.

- [0053] Силоксановое производное аминокислоты может быть синтезировано в соответствии с приведенной ниже Схемой 2. Как показано на схеме, 6-аминогексановую кислоту обрабатывают формальдегидом в муравьиной кислоте
- 15 при температуре дефлегмации с получением 6-(диметиламино)гексановой кислоты. Затем данную свободную карбоновую кислоту подвергают взаимодействию с 3-аминопропил(триметилсилокси)силаном в толуоле при температуре дефлегмации с получением желаемого силоксанового производного.

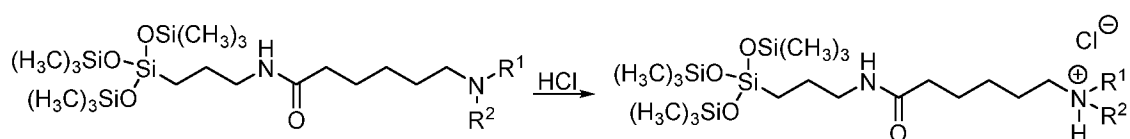
20

СХЕМА 2



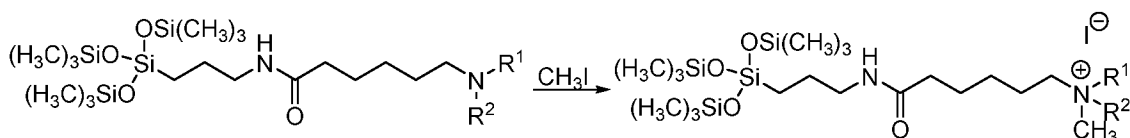
- [0054] Дополнительно *N*-концевой азот может быть использован для
- 25 получения других производных, чтобы модифицировать или улучшить растворимость в воде и поверхностно-активные свойства. Пример такого синтеза показан ниже на Схеме 3, где *N*-концевой азот обрабатывают соляной кислотой с получением соответствующей гидрохлоридной соли.

СХЕМА 3



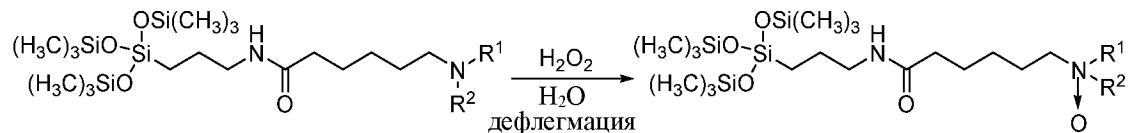
[0055] *N*-концевой азот может быть алкилирован. Ниже показан пример схемы синтеза, где *N*-концевой азот обрабатывают иодистым метилом с получением соответствующей соли четвертичного амина.

СХЕМА 4



[0056] *N*-концевой азот может быть обработан пероксидом водорода в воде при температуре дефлегмации с получением соответствующего *N*-оксида, пример такого синтеза показан ниже на Схеме 5.

СХЕМА 5



[0057] Соединения согласно настоящему изобретению обладают поверхностно-активными свойствами. Соответствующие параметры могут быть измерены и описаны с использованием различных методик. Одна из методик, с помощью которой могут быть характеризованы поверхностно-активные вещества, представляет собой методику определения для данной молекулы критической концентрации мицеллообразования (ККМ). ККМ может быть определена как концентрация поверхностно-активного вещества, при которой образуются мицеллы и выше которой все дополнительное количество поверхностно-активного вещества включается в мицеллы.

[0058] По мере увеличения концентрации поверхностно-активного вещества поверхностное натяжение уменьшается. Когда поверхность полностью покрывается молекулами поверхностно-активного вещества, начинается образование мицелл. Данная концентрация соответствует ККМ и минимальному поверхностному натяжению. Дальнейшее добавление поверхностно-активного

вещества не оказывает влияния на поверхностное натяжение. Следовательно, ККМ может быть измерена путем наблюдения за изменением поверхностного натяжения в зависимости от концентрации поверхностно-активного вещества. Одной из методик измерения данного значения является метод пластины Вильгельми. Обычно пластина Вильгельми представляет собой тонкую иридиево-платиновую пластину, которую с помощью проволоки прикрепляют к весам и размещают перпендикулярно поверхности раздела воздух-жидкость. Силу, приложенную к пластине в результате смачивания, измеряют с помощью весов. Затем полученное значение используют для вычисления поверхностного натяжения (γ) в соответствии с Уравнением 1.

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

где l представляет собой периметр смачивания ($2w + 2d$, где w и d представляют собой толщину и ширину пластины, соответственно) и $\cos \theta$, краевой угол между поверхностью жидкости и пластиной, принимают равным 0 при отсутствии имеющихся в настоящее время справочных данных.

[0059] Другим параметром, используемым для оценки эффективности поверхностно-активных веществ, является динамическое поверхностное натяжение. Динамическое поверхностное натяжение представляет собой значение поверхностного натяжения, зависящее от конкретного возраста поверхности или границы раздела. В случае жидкостей, в которые добавили поверхностно-активные вещества, значение динамического поверхностного натяжения может отличаться от его равновесного значения. Сразу после образования поверхности значение поверхностного натяжения равно значению поверхностного натяжения чистой жидкости. Как указано выше, поверхностно-активные вещества уменьшают поверхностное натяжение, поэтому поверхностное натяжение уменьшается до тех пор, пока не достигает равновесного значения. Время, требуемое для достижения равновесия, зависит от скорости диффузии и скорости адсорбции поверхностно-активного вещества.

[0060] Одна из методик измерения динамического поверхностного натяжения основана на использовании тензометра максимального давления пузырька. Данное устройство измеряет максимальное давления в пузырьке газа, который формируется в жидкости с помощью капилляра. Измеренное значение соответствует поверхностному натяжению при определенном возрасте поверхности, который определяется временем от начала образования пузырька до

момента достижения максимального давления. Зависимость поверхностного натяжения от возраста поверхности может быть определена путем варьирования скорости образования пузырьков.

[0061] Поверхностно-активные соединения также можно оценивать по их смачивающей способности на твердых субстратах путем измерения краевого угла. Когда капля жидкости контактирует с твердой поверхностью в третьей среде, такой как воздух, образуется линия раздела трех фаз - жидкой, твердой и газообразной. Угол между единичным вектором поверхностного натяжения, приложенным к трехфазной линии и касательной к капле жидкости, и поверхностью определяют как краевой угол. Краевой угол (также известный как угол смачивания) является мерой смачиваемости твердого тела жидкостью. В случае полного смачивания жидкость полностью распределена по твердому телу, и краевой угол равен 0° . Смачивающую способность данного соединения обычно измеряют при концентрации 1-10х ККМ, однако она не является свойством, которое зависит от концентрации, поэтому измерения смачивающей способности могут быть выполнены при более высоких или более низких концентрациях.

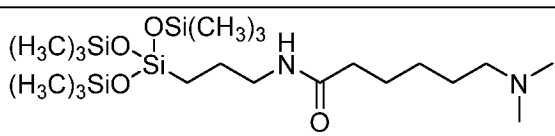
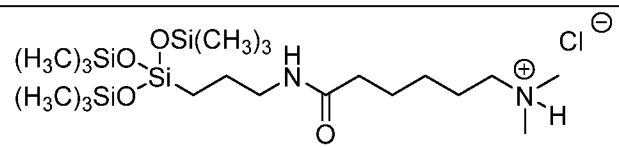
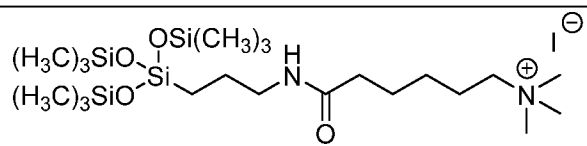
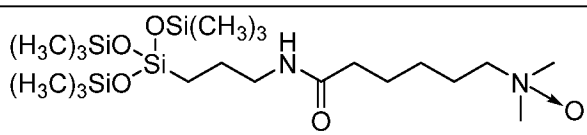
[0062] В одной из методик для измерения краевого угла может быть использован оптический гониометр, предназначенный для измерения краевых углов. В данном устройстве использованы цифровая камера и программное обеспечение для получения значений краевого угла путем анализа формы контура неподвижной капли жидкости на поверхности.

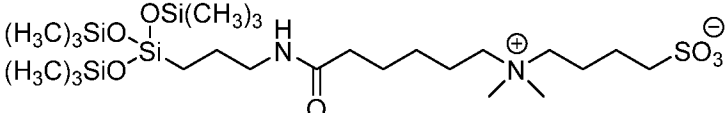
[0063] Возможное применение поверхностно-активных соединений согласно настоящему изобретению включает препараты для использования в качестве шампуней, кондиционеров для волос, детергентов, не оставляющих пятен растворов для мойки, средств для чистки полов и ковровых покрытий, очищающих агентов для удаления надписей и рисунков на стенах, увлажняющих агентов для защиты растений, адъювантов для защиты растений и увлажняющих агентов для аэрозольных покрытий.

[0064] Специалисту в данной области техники должно быть понятно, что небольшие различия соединений могут приводить к существенному различию свойств поверхностно-активных веществ, так что разные соединения могут быть использованы с разными субстратами и в разных сферах использования.

[0065] Ниже приведены неограничивающие варианты осуществления настоящего изобретения, которые демонстрируют различные свойства разных поверхностно-активных веществ. В Таблице 1, представленной ниже, короткие названия поверхностно-активных веществ соотнесены с соответствующими им химическими структурами.

ТАБЛИЦА 1

Поверхностно-активное вещество	Формула & Название
Поверхностно-активное вещество 1	 6-(диметиламино)-N-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексанамида
Поверхностно-активное вещество 2	 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминия хлорид
Поверхностно-активное вещество 3	 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N,N-триметил-6-оксогексан-1-аминия иодид
Поверхностно-активное вещество 4	 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-амин оксид

Поверхностно-активное вещество 5	 4-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3- ((триметилсилил)окси)трисилоксан-3- ил)пропил)амино)-6- оксогексил)диметиламмоний)бутан-1-сульфонат
---	---

[0066] Каждое из данных пяти соединений является эффективным при использовании в качестве поверхностно-активных агентов и может быть использовано, например, в увлажняющих или вспенивающих агентах, диспергирующих агентах, эмульгаторах и детергентах.

[0067] Поверхностно-активные вещества 1 и 2 являются кандидатами для использования в качестве вспенивающих или увлажняющих агентов в ряде препаратов для средств очистки поверхностей и средств личной гигиены.

[0068] Поверхностно-активное вещество 3 является катионным. Данные поверхностно-активные вещества могут иметь сферы применения, описанные выше, а также некоторые другие специальные сферы применения, такие как обработка поверхностей, такие как средства личного ухода за волосами, и могут быть использованы для получения гидрофобных поверхностей.

[0069] Поверхностно-активное вещество 4 является неионогенным, и может быть использовано в шампунях, детергентах, средствах для чистки твердых поверхностей и в ряде других препаратах для очистки поверхностей.

[0070] Поверхностно-активное вещество 5 является цвиттер-ионным. Данные поверхностно-активные вещества могут быть использованы в качестве дополнительных поверхностно-активных веществ во всех сферах применения, описанных выше.

[0071] Препараты соединений, описанных в данной заявке, могут содержать данные соединения в небольшом количестве: приблизительно 0,001% по массе, приблизительно 0,05% по массе, приблизительно 0,1% по массе, приблизительно 0,5% по массе, приблизительно 1% по массе, приблизительно 2% по массе, или приблизительно 5% по массе, или в количестве, достигающем приблизительно 8% по массе, приблизительно 10% по массе, приблизительно 15% по массе, приблизительно 20% по массе или приблизительно 25% по массе, или в

количестве, находящемся в пределах любого диапазона, заключенного между любыми двумя вышеуказанными значениями.

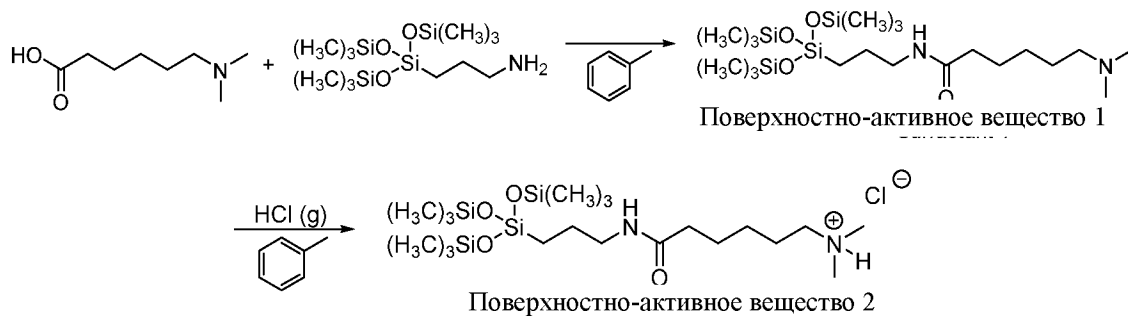
ПРИМЕРЫ

- 5 [0072] Спектроскопию ядерного магнитного резонанса (ЯМР) выполняли на спектрометре Bruker 500 МГц. Критическую концентрацию мицеллообразования (ККМ) определяли с помощью метода пластины Вильгельми, при 23°C, с использованием тензиометра (DCAT 11, DataPhysics Instruments GmbH), оснащенного Pt-Ir планшетом. Динамическое поверхностное натяжение
- 10 определяли с использованием тензиометра максимального давления пузырьков (Krüss BP100, Krüss GmbH), при 23° C. Краевой угол определяли с использованием оптического гониометра для измерения краевого угла (OCA 15 Pro, DataPhysics GmbH), оснащенного цифровой камерой.

15

Пример 1a:

- Синтез 6-(диметиламино)-N-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексанамида (Поверхностно-активного вещества 1) и 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминия соли (Поверхностно-активного вещества 2)
- 20



- [0073] 6-(Диметиламино)гексановую кислоту (2,00 г, 12,56 ммоль, 1 экв.) растворяли в толуоле (50 мл) в круглодонной перегонной колбе объемом 100 мл,
- 25 оснащенной ловушкой Дина-Старка, затем добавляли 3-аминопропилтрис(триметилсилокси)силан (5,48 мл, 13,81 ммоль, 1,1 экв.). Реакционный сосуд нагревали, и реакцию подвергали дефлегмации в течение 24 часов, пока не заканчивалось выделение воды в трубку Дина-Старка. Растворитель удаляли под вакуумом с получением Поверхностно-активного
- 30 вещества 1 в виде желтого масла с выходом 94%. ¹H ЯМР (500 МГц, ДМСО) δ:

0.09 (s, 27H), 0.28-0.31 (m, 2H), 1.12-1.26 (m, 2H), 1.27-1.30 (m, 4H), 1.38-1.41 (m, 2H), 1.94 (t, $J = 7.3$ Гц, 2H), 2.00 (s, 6H), 2.06 - 2.03 (m, 2H), 2.89 (dd, $J = 12.9$, 6.8 Гц, 2H).

[0074] В своей нейтральной форме Поверхностно-активное вещество 1 является слегка растворимым в чистой воде без добавления гидротропов или других поверхностно-активных веществ, но после протонирования в слегка кислых условиях оно становится активным на поверхности раздела фаз (Поверхностно-активное вещество 2). Указанные кислые условия могут быть созданы путем добавления кислоты или кислого буфера, имеющего рН в диапазоне 4-7. Поверхностно-активное вещество 2 также может быть получено в неводных растворах, например путем барботирования газообразного HCl в толуоле в присутствии Поверхностно-активного вещества 1.

Пример 1b:

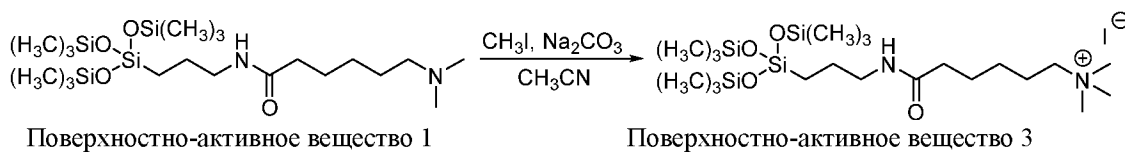
Определение критической концентрации мицеллообразования (ККМ)

Поверхностно-активного вещества 2

[0075] Измеренная критическая концентрация мицеллообразования (ККМ) Поверхностно-активного вещества 2, содержащего хлорид-противоион, составляла приблизительно 2 ммоль. Минимальное поверхностное натяжение, соответствующее горизонтальному участку кривой, которое может быть достигнуто при использовании данного поверхностно-активного вещества, составляло приблизительно 23 мН/м. На Фиг. 1 данные результаты представлены в виде графика, показывающего зависимость поверхностного натяжения от концентрации.

Пример 2a:

Синтез 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N,N*-триметил-6-оксогексан-1-аминия иодида (Поверхностно-активного вещества 3)



[0076] Поверхностно-активное вещество 1 (1,00 г, 2,02 ммоль, 1 экв.) растворяли в ацетонитриле (10 мл) в круглодонной колбе объемом 100 мл. Затем

добавляли Na_2CO_3 (0,26 г, 2,42 ммоль, 1,2 экв.), и данную смесь перемешивали в течение 10 минут. Добавляли иодистый метил (0,377 мл, 6,06 ммоль, 3 экв.), и данную реакционную смесь нагревали в течение 24 часов при 40°C. Охлажденную реакционную смесь фильтровали, и удаляли под вакуумом растворитель с получением Поверхностно-активного вещества 3 в виде желтоватого твердого вещества с количественным выходом. Н ЯМР (500 МГц, ДМСО) δ 0.09 (s, 2H), 0.38-0.42 (m, 2H), 1.23-1.26 (m, 2H), 1.37-1.40 (m, 2H), 1.52-1.55 (m, 2H), 1.65-1.69 (m, 2H), 2.08 (t, $J = 7.4$ Гц, 2H), 2.99 (dd, $J = 13$, 6.9 Гц, 2H), 3.04 (s, 9H), 3.24 - 3.33 (m, 2H).

10 [0077] Полученный чистый продукт был растворим в воде и обладал свойствами поверхностно-активного вещества. Галогеновые анионы могут быть получены непосредственно в ходе реакции *N*-алкилирования, и другие желаемые анионы могут быть получены путем анионного обмена.

15 Пример 2b:

Определение физических свойств Поверхностно-активного вещества 3

[0078] Измеряли критическую концентрацию мицеллообразования (ККМ) Поверхностно-активного вещества 3. На основе данных об изменении поверхностного натяжения с изменением концентрации в воде определили, что

20 ККМ составляет приблизительно 1,6 ммоль. Минимальное поверхностное натяжение, соответствующее горизонтальному участку кривой, которое может быть достигнуто при использовании данного поверхностно-активного вещества, составляло приблизительно 20 мН/м, данное значение указывает на то, что

25 на поверхности раздела фаз. На Фиг. 2 данные результаты представлены в виде графика, показывающего зависимость поверхностного натяжения от концентрации.

[0079] Динамическое поверхностное натяжение Поверхностно-активного вещества 3 определяли с использованием тензиометра максимального давления

30 пузырьков, который регистрирует изменение поверхностного натяжения свежесозданной поверхности раздела воздух-вода во времени. На Фиг. 3 представлен график зависимости поверхностного натяжения от времени, построенный на основе полученных данных, который демонстрирует, что Поверхностно-активное вещество 3 полностью насыщает поверхность раздела в

течение менее 500 мс, то есть, иными словами, имеет место исключительно быстрая адсорбция на поверхности раздела.

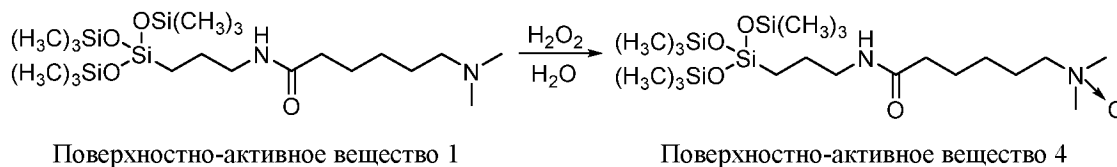
[0080] Кроме того, что Поверхностно-активное вещество 3 обладает способностью снижать как межфазное, так и поверхностное натяжение, препараты, содержащие только данное Поверхностно-активное вещество, обладают исключительными смачивающими свойствами. Например, гидрофобные субстраты, такие как полиэтилен и полипропилен, показывают полное смачивание поверхности с краевым углом 0° . Измерение краевого угла у олеофобных и гидрофобных субстратов, таких как Тefлон, дает крайне низкое значение $10,5^\circ$ (Таблица 2).

ТАБЛИЦА 2

Субстрат	Краевой угол Поверхностно-активного вещества 3 ($^\circ$)	Концентрация	Краевой угол воды ($^\circ$)
Тefлон	10,5	10х ККМ	119
Полиэтилен	0	10х ККМ	91,5
Полипропилен	0	10х ККМ	93,3
Нейлон	0	10х ККМ	50
Полиэтилентерефталат	0	10х ККМ	65,3

Пример 3а:

Синтез 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N*-диметил-6-оксогексан-1-амин оксида (Поверхностно-активного вещества 4)



[0081] Поверхностно-активное вещество 1 (1,00 г, 2,02 ммоль, 1 экв.) добавляли к дистиллированной воде (80 мл) в круглодонной колбе объемом 100 мл, и затем добавляли 50%-ю перекись водорода (1,15 мл, 20,2 ммоль, 10 экв.). Данную реакционную смесь подвергали дефлегмации в течение 12 часов, затем концентрировали под вакуумом. Остаток промывали три раза ацетоном с получением Поверхностно-активного вещества 4 с выходом 99%. ^1H ЯМР (500 МГц, ДМСО) δ 0.09 (s, 27H), 0.38-0.44 (m, 2H), 1.21-1.25 (m, 2H), 1.35-1.42(m, 2H),

1.50-1.55 (m, 2H), 1.71-1.75 (m, 2H), 2.05-2.08 (m, 2H), 2.97-3.00 (m, 2H), 3.01 (s, 9H), 3.11 - 3.14 (m, 2H).

Пример 3b:

5 Определение физических свойств Поверхностно-активного вещества 4

[0082] Измеряли критическую концентрацию мицеллообразования (ККМ) Поверхностно-активного вещества 4. На основе данных об изменении поверхностного натяжения с изменением концентрации в воде определили, что ККМ составляет приблизительно 0,49 ммоль. Минимальное поверхностное
10 натяжение, соответствующее горизонтальному участку кривой, которое может быть достигнуто при использовании данного поверхностно-активного вещества, составляло приблизительно 20 мН/м, данное значение указывает на то, что поверхностно-активное вещество обладает исключительно высокой активностью на поверхности раздела фаз. На Фиг. 4 данные результаты представлены в виде
15 графика, показывающего зависимость поверхностного натяжения от концентрации.

[0083] Динамическое поверхностное натяжение Поверхностно-активного вещества 4 определяли с использованием тензиометра максимального давления пузырьков. На Фиг. 5 представлен график зависимости поверхностного натяжения
20 от времени, построенный на основе полученных данных, который демонстрирует, что Поверхностно-активное вещество 4 полностью насыщает свежесозданную поверхность раздела воздух-вода в течение одной секунды или менее, то есть, иными словами, имеет место быстрая адсорбция на поверхности раздела.

[0084] Кроме того, что Поверхностно-активное вещество 4 обладает
25 способностью снижать как межфазное, так и поверхностное натяжение, препараты, содержащие только Поверхностно-активное вещество 4 в концентрации 1-100х ККМ, обладают исключительными смачивающими свойствами. Например, раствор Поверхностно-активного вещества 4 в воде в концентрации 10х ККМ имеет значение краевого угла 0° на гидрофобных
30 субстратах, таких как полиэтилен и полипропилен, и $10,6^\circ$ на олеофобных и гидрофобных субстратах, таких как Тefлон. Данные краевые углы имеют крайне низкие значения в сравнении с краевым углом воды на том же самом субстрате (Таблица 3).

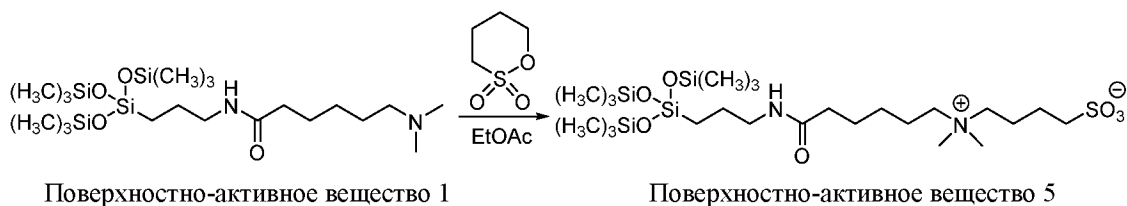
ТАБЛИЦА 3

Субстрат	Краевой угол Поверхностно-активного вещества 4 (°)	Концентрация	Краевой угол воды (°)
Тефлон	10,6	10х ККМ	119
Полиэтилен	0	10х ККМ	91,5
Полипропилен	0	10х ККМ	93,3
Нейлон	0	10х ККМ	50
Полиэтилентерефталат	0	10х ККМ	65,3

Пример 4а:

Синтез 4-(((6-(((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)диметиламмоний)бутан-1-сульфоната

(Поверхностно-активного вещества 5)



[0085] Поверхностно-активное вещество 1 (1,00 г, 2,02 ммоль, 1 экв.) добавляли к этилацетату (EtOAc) (30 мл) в круглодонной колбе объемом 100 мл, и затем добавляли 1,2-бутан сульфон (0,27 мл, 2,2 ммоль, 1,1 экв.). Данную реакционную смесь подвергали дефлегмации в течение 12 часов, затем удаляли растворитель, и полученное белое воскообразное твердое вещество промывали ацетоном с получением Поверхностно-активного вещества 5 с выходом 50%. ¹H ЯМР (500 МГц, ДМСО) δ 0.10 (s, 27H), 0.38-0.46 (m, 2H), 1.23-1.27 (m, 2H), 1.37-1.68 (m, 10H), 1.73-1.78 (m, 2H), 2.45-2.48 (m, 2H), 2.97-3.01 (m, 8H), 3.18-3.21 (m, 2H), 3.23-3.27 (m, 2H).

Пример 4b:Определение физических свойств Поверхностно-активного вещества 5

[0086] Измеряли критическую концентрацию мицеллообразования (ККМ) Поверхностно-активного вещества 5. На основе данных об изменении поверхностного натяжения с изменением концентрации в воде определили, что ККМ составляет приблизительно 0,39 ммоль. Минимальное поверхностное

натяжение, соответствующее горизонтальному участку кривой, которое может быть достигнуто при использовании данного поверхностно-активного вещества, составляло приблизительно 21 мН/м, данное значение указывает на то, что поверхностно-активное вещество обладает исключительно высокой активностью на поверхности раздела фаз. На Фиг. 6 данные результаты представлены в виде графика, показывающего зависимость поверхностного натяжения от концентрации.

[0087] Динамическое поверхностное натяжение Поверхностно-активного вещества 5 определяли с использованием тензиометра максимального давления пузырьков. На Фиг. 7 представлен график зависимости поверхностного натяжения от времени, построенный на основе полученных данных, который демонстрирует, что Поверхностно-активное вещество 5 полностью насыщает свежесозданную поверхность раздела воздух-вода в течение одной секунды или менее, то есть, иными словами, имеет место быстрая адсорбция на поверхности раздела.

[0088] В качестве завершения необходимо отметить, что раствор Поверхностно-активного вещества 5 в воде в концентрации 10х ККМ имеет значение краевого угла 0° на гидрофобных субстратах, таких как полиэтилен и полипропилен, и $10,2^\circ$ на олеофобных и гидрофобных субстратах, таких как Тефлон. Данные краевые углы имеют крайне низкие значения в сравнении с краевым углом воды на том же самом субстрате (Таблица 4).

ТАБЛИЦА 4

Субстрат	Краевой угол Поверхностно-активного вещества 5 ($^\circ$)	Концентрация	Краевой угол воды ($^\circ$)
Тефлон	10,2	10х ККМ	119
Полиэтилен	0	10х ККМ	91,5
Полипропилен	0	10х ККМ	93,3
Полиэтилентерефталат	0	10х ККМ	65,3
Нейлон	0	10х ККМ	50
Полиэтилен-НД	0	10х ККМ	93,6

Пример 5:Препарат шампуня

[0089] В данном Примере предложен препарат для применения в качестве шампуня. Данный препарат может быть использован для создания ощущения гладкости и шелковистости волос. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 4. Дополнительно данный препарат может включать другие натуральные масла и ингредиенты, а также витамины для создания потребительской привлекательности в количестве менее 1% по массе.

Таблица 4

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 5	Поверхностно-активное вещество	0,1-10
Лаурилсульфат аммония	Вспенивающее вещество	10-25
Кокамидопропилбетаин	Вспомогательное поверхностно-активное вещество	0,1-5
Кокамид диэтаноламина	Усилитель пенообразования	1-4
Ксантановая камедь или акрилатный сополимер	Загуститель/реологический модификатор	0-5
Лимонная кислота	pH-стабилизатор	0,1-0,3
Ароматизирующее вещество		0,02-0,1
Вода		49,5-89

Пример 6:Препарат кондиционера для волос

[0090] В данном Примере предложен препарат для применения в качестве кондиционера для волос. Данный препарат можно применять для замены или уменьшения количества поликватерния-10, поликватерния-7 и диметиконовых масел с сохранением легкой расчесываемости волос и ощущения шелковистости и мягкости, которые обеспечивают кондиционеры для волос. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 5.

ТАБЛИЦА 5

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 3	Поверхностно-активное вещество	1-10
Поверхностно-активное вещество 5	Поверхностно-активное вещество	0,1-10

Куменсульфонат натрия	Гидротроп	1-3
Лаурилсульфат аммония	Поверхностно-активное вещество	0,1-6
Лаурет-3 сульфат аммония	Поверхностно-активное вещество	0,1-6
Кокамид диэтаноламина	Вспенивающее вещество	0,5-2
ПЭГ-55 пропиленгликоля олеат	Эмульгатор	0,01-1
Ароматизирующее вещество		0,02-0,1
Вода		61,9-97,2

Пример 7:

Препарат детергентов для мытья машин, предназначенный для удаления с поверхности трудноудаляемых пятен

- 5 [0091] В данном Примере предложен препарат для применения в качестве детергентов для мытья машин, предназначенных для удаления с поверхности трудноудаляемых пятен. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 6.

ТАБЛИЦА 6

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 5	Поверхностно-активное вещество	0,1-10
Додецилбензолсульфоновая кислота или Лаурилсульфат аммония	Вспенивающее/моющее вещество	5-14
Моноэтаноламин, диэтаноламин или триэтаноламин	pH-стабилизатор	<0,5
Кокамид диэтаноламина	Стабилизатор пены	0,1-2
Пропиленгликоль	Солубилизирующий агент	0,05-1,6
Ароматизирующее вещество		0,02-0,1
Окрашивающий агент		0-0,1
Вода		71,6-95,0

Пример 8:Препарат не оставляющего пятен раствора для мойки или сушки

[0092] В данном Примере предложен препарат не оставляющего пятен раствора для мойки или сушки. Данный раствор можно применять для мойки стекол и корпуса машины после завершения основной мойки. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 7.

ТАБЛИЦА 7

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 5	Поверхностно-активное вещество	0,001-2
Вода		98-99,999

Пример 9:Препарат высокоэффективного средства для чистки ковровых покрытий

[0093] В данном Примере предложен препарат высокоэффективного средства для чистки ковровых покрытий. Данное средство для чистки представляет собой средство для глубокой очистки с обильным пенообразованием. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 8.

ТАБЛИЦА 8

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 4	Поверхностно-активное вещество	1-15
Додецилбензолсульфоновая кислота или Лаурилсульфат аммония	Вспенивающее/моющее вещество	0,001-10
Куменсульфонат натрия	Гидротроп	0,001-3
Моноэтаноламин, диэтаноламин или триэтаноламин	pH-стабилизатор	0,01-1
Вода		74,95-99

Пример 10:Препарат высокоэффективного средства для очистки поверхностей

[0094] В данном Примере предложен препарат высокоэффективного средства для очистки поверхностей. Данное средство для чистки можно применять в

ручных или автоматических устройствах для очистки поверхностей. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 9.

ТАБЛИЦА 9

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 4	Поверхностно-активное вещество	0,001-25
Додецилбензолсульфоновая кислота или Лаурилсульфат аммония	Вспенивающее/моющее вещество	0,001-10
Куменсульфонат натрия	Гидротроп	<0,5
Пропиленгликоль	Солюбилизирующий агент	0,01-5
Вода		59,5-99,99

5

Пример 11:Препарат концентрированного детергента для удаления надписей и рисунков на стенах

[0095] В данном Примере предложен препарат концентрированного детергента для удаления надписей и рисунков на стенах. Данный детергент можно применять в шланге высокого давления. Компоненты данного препарата

10 приведены ниже в Таблице 10.

ТАБЛИЦА 10

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 4	Поверхностно-активное вещество	0,001-15
Поверхностно-активное вещество 5	Вспомогательный увлажняющий агент	0,001-10
Куменсульфонат натрия	Гидротроп	0,001-3
Пропиленгликоль	Солюбилизирующий агент	0,01-5
Вода		67-99,99

Пример 12:Препарат увлажняющего агента для аэрозольных распылителей

[0096] В данном Примере предложен препарат адъюванта увлажняющего агента для аэрозольных распылителей. Данные аэрозольные распылители могут
 5 быть использованы для распыления пестицидов и других средств защиты растений. Предложенный препарат предназначен для уменьшения количества химических реагентов на основе поверхностно-активных веществ в пестицидах и других средствах защиты растений (обычно в диапазоне 2-5%) путем улучшения эффективности данных химических реагентов за счет превосходного увлажнения
 10 и низкой ККМ, что делает их более экологичными. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 11.

ТАБЛИЦА 11

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 2, 4, или 5	Вспомогательный увлажняющий агент	0,001-2
Пестицид и/или другое(ие) средство(а) защиты растений		0,1-10
Вода		88-99,899

Пример 13:

15 Препарат добавок для аэрозольной краски

[0097] В данном Примере предложен препарат добавки для аэрозольной краски или покрытия на водной основе. Данный препарат предназначен для хорошего динамического увлажнения аэрозольных капель при использовании на
 20 поверхностях, что препятствует образованию рябизны и появлению других подобных проблем. Компоненты данного препарата приведены ниже в Таблице 12.

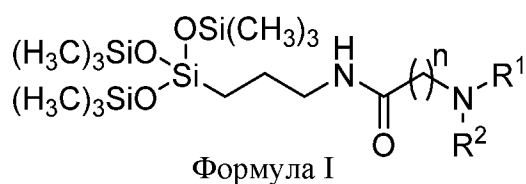
ТАБЛИЦА 12

Компонент	Функция	% по массе
Поверхностно-активное вещество 4 или 5	Увлажняющий агент/выравниватель потока/агент, регулирующий скольжение	0,001-5

Газовый пропеллент	Пропеллент	5-30
Эмульсия масло в воде	Пигментирование	0,1-25
Tamol 731A	Диспергирующий агент	1-4
Изопропанол (чистота 97-99%)	Растворитель/носитель	7-15
Efka SI2022 или SI 2723	Пеногаситель	0,001-2
Вода		19-86,9

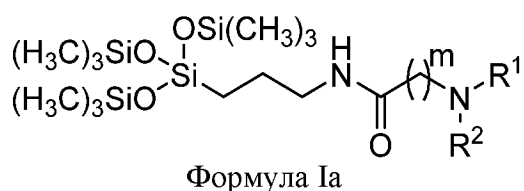
АСПЕКТЫ НАСТОЯЩЕГО ИЗОБРЕТЕНИЯ

[0098] Аспект 1 настоящего изобретения относится к соединению Формулы I:



- 5 где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, данный C_1 - C_6 алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может
- 10 необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;
- n представляет собой целое число от 1 до 12;
- концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , где
- 15 R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода, гидроксила и C_1 - C_6 алкила; и
- с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

- 20 **[0099]** Аспект 2 настоящего изобретения относится к соединению согласно Аспекту 1, которое представлено Формулой Ia:



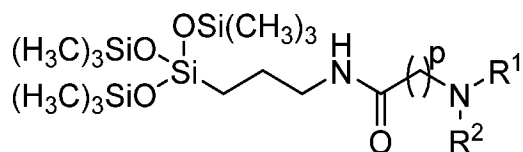
где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, данный C_1 - C_6 алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, amino, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

m представляет собой целое число от 1 до 6;

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , где R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C_1 - C_6 алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

[00100] Аспект 3 настоящего изобретения относится к соединению согласно Аспекту 1 или 2, которое представлено Формулой Ib:



Формула Ib

где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, данный C_1 - C_6 алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, amino, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

p имеет значение 5;

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , где R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C_1 - C_6

алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

с соединением необязательно может быть ассоциирован противоион, и данный
5 противоион, при его наличии, может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромиды и иодида.

[00101] Аспект 4 настоящего изобретения относится к соединению согласно любому из Аспектов 1-3, в котором R^1 и R^2 представляют собой метил.

[00102] Аспект 5 настоящего изобретения относится к соединению согласно
10 Аспекту 1, в котором n имеет значение 5.

[00103] Аспект 6 настоящего изобретения относится к соединению согласно любому из Аспектов 1-5, в котором R^3 представляет собой атом водорода.

[00104] Аспект 7 настоящего изобретения относится к соединению согласно
15 любому из Аспектов 1-6, в котором противоион выбран из группы, состоящей из хлорида, бромиды и иодида.

[00105] Аспект 8 настоящего изобретения относится к соединению согласно Аспекту 7, в котором противоион представляет собой хлорид.

[00106] Аспект 9 настоящего изобретения относится к соединению согласно любому из Аспектов 1-5, в котором R^3 представляет собой метил.

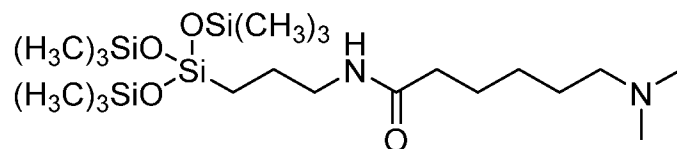
[00107] Аспект 10 настоящего изобретения относится к соединению согласно
20 Аспекту 9, в котором противоион выбран из группы, состоящей из хлорида, бромиды и иодида.

[00108] Аспект 11 настоящего изобретения относится к соединению согласно Аспекту 10, в котором противоион представляет собой иодид.

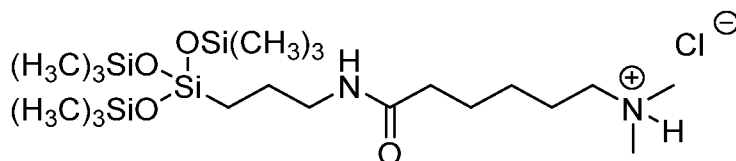
[00109] Аспект 12 настоящего изобретения относится к соединению согласно
25 любому из Аспектов 1-5, в котором R^3 представляет собой атом кислорода.

[00110] Аспект 13 настоящего изобретения относится к соединению согласно любому из Аспектов 1-5, в котором R^3 представляет собой C_1 - C_6 алкил, содержащий в качестве заместителя концевой сульфонат.

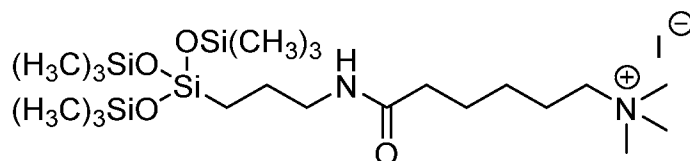
[00111] Аспект 14 настоящего изобретения относится к соединению согласно
30 любому из Аспектов 1-3, которое представляет собой 6-(диметиламино)-*N*-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексанамид, имеющий следующую Формулу:



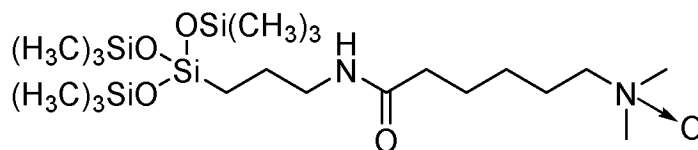
[00112] Аспект 15 настоящего изобретения относится к соединению согласно любому из Аспектов 6-8, которое представляет собой 6-((диметиламино)-*N*-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексаминия хлорид, имеющий следующую Формулу:



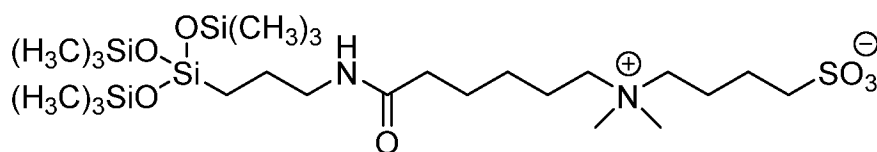
[00113] Аспект 15 настоящего изобретения относится к соединению согласно любому из Аспектов 9-11, которое представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N,N*-триметил-6-оксогексан-1-аминия иодид, имеющий следующую Формулу:



[00114] Аспект 17 настоящего изобретения относится к соединению согласно Аспекту 12, которое представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N*-диметил-6-оксогексан-1-амин оксид, имеющий следующую Формулу:

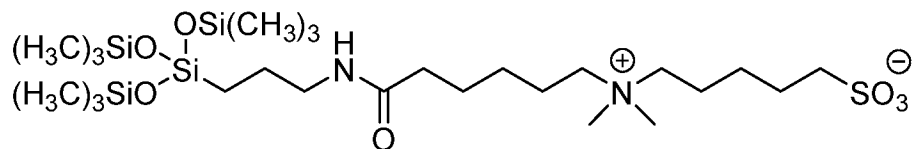


[00115] Аспект 18 настоящего изобретения относится к соединению согласно Аспекту 13, которое представляет собой 4-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)диметиламмоний)бутан-1-сульфонат, имеющий следующую Формулу:



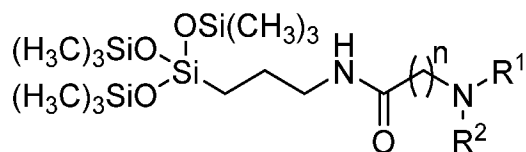
[00116] Аспект 19 настоящего изобретения относится к соединению согласно Аспекту 13, которое представляет собой 5-(((6-(((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)диметиламмоний)пентан-1-сульфонат, имеющий следующую

5 Формулу:



ФОРМУЛА ИЗОБРЕТЕНИЯ

1. Соединение Формулы I:



Формула I

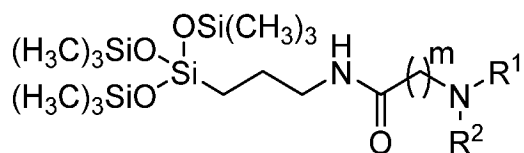
где R¹ и R² могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C₁-C₆ алкила, данный C₁-C₆ алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

n представляет собой целое число от 1 до 12;

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R³, где R³ выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода, гидроксила и C₁-C₆ алкила; и

с соединением необязательно ассоциирован противоион, который, при его наличии, выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

2. Соединение по п. 1, представленное Формулой Ia:



Формула Ia

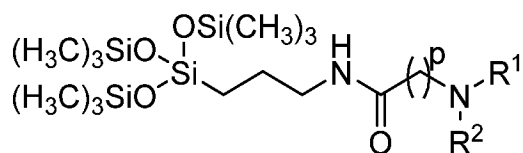
где R¹ и R² могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C₁-C₆ алкила, данный C₁-C₆ алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

m представляет собой целое число от 1 до 6;

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , где R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C_1 - C_6 алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

с соединением необязательно ассоциирован противоион, который, при его наличии, выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

3. Соединение по п. 1, представленное Формулой Ib:



Формула Ib

где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, данный C_1 - C_6 алкил необязательно может содержать один, или более, атом, выбранный из атомов кислорода, азота или серы, или одну, или более, группу, которая содержит по меньшей мере один из данных атомов, и указанная алкильная цепь может необязательно содержать один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонил, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

p имеет значение 5;

концевой атом азота необязательно содержит дополнительный заместитель R^3 , где R^3 выбран из группы, состоящей из атома водорода, атома кислорода и C_1 - C_6 алкила, и данная алкильная цепь необязательно содержит один, или более, заместитель, выбранный из группы, состоящей из карбоксила, карбоксилата и сульфоната; и

с соединением необязательно ассоциирован противоион, который, при его наличии, выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

4. Соединение по п. 1, в котором R^1 и R^2 представляют собой метил.

5. Соединение по п. 1, в котором p имеет значение 5.

6. Соединение по п. 5, в котором R^3 представляет собой атом водорода.

5 7. Соединение по п. 6, в котором противоион выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

8. Соединение по п. 7, в котором противоион представляет собой хлорид.

10 9. Соединение по п. 5, в котором R^3 представляет собой метил.

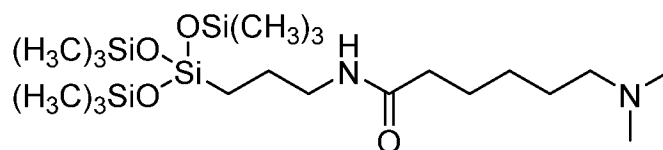
10. Соединение по п. 9, в котором противоион выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и иодида.

15 11. Соединение по п. 10, в котором противоион представляет собой иодид.

12. Соединение по п. 5, в котором R^3 представляет собой атом кислорода.

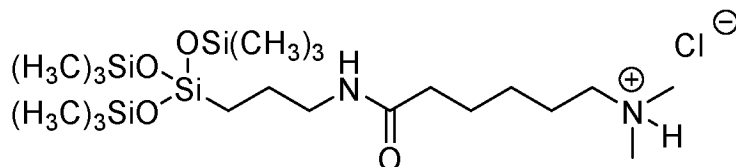
20 13. Соединение по п. 5, в котором R^3 представляет собой C_1 - C_6 алкил, содержащий в качестве заместителя сульфонат.

14. Соединение по п. 5, которое представляет собой 6-(диметиламино)-*N*-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексанамида, имеющий следующую Формулу:

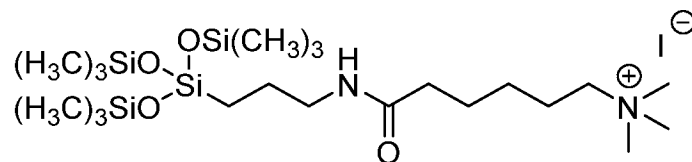


25

15. Соединение по п. 8, которое представляет собой 6-(диметиламино)-*N*-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексаминия хлорид, имеющий следующую Формулу:

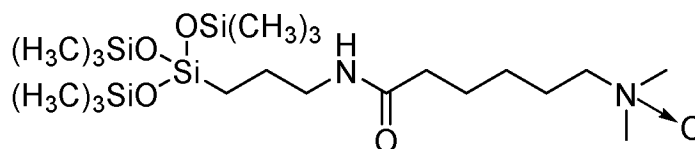


16. Соединение по п. 11, которое представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N,N*-триметил-6-оксогексан-1-аминия иодид, имеющий следующую Формулу:



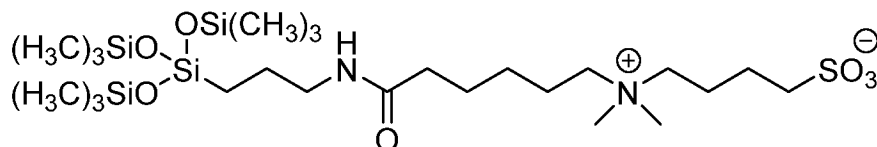
5

17. Соединение по п. 12, которое представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-*N,N*-диметил-6-оксогексан-1-амин оксид, имеющий следующую Формулу:



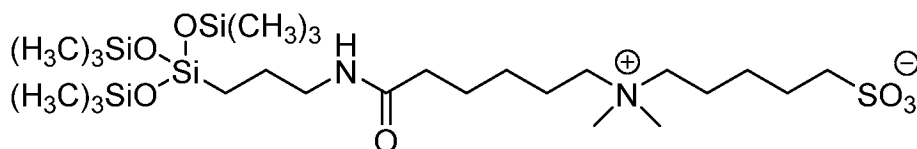
10

18. Соединение по п. 13, которое представляет собой 4-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)диметиламмоний)бутан-1-сульфонат, имеющий следующую Формулу:

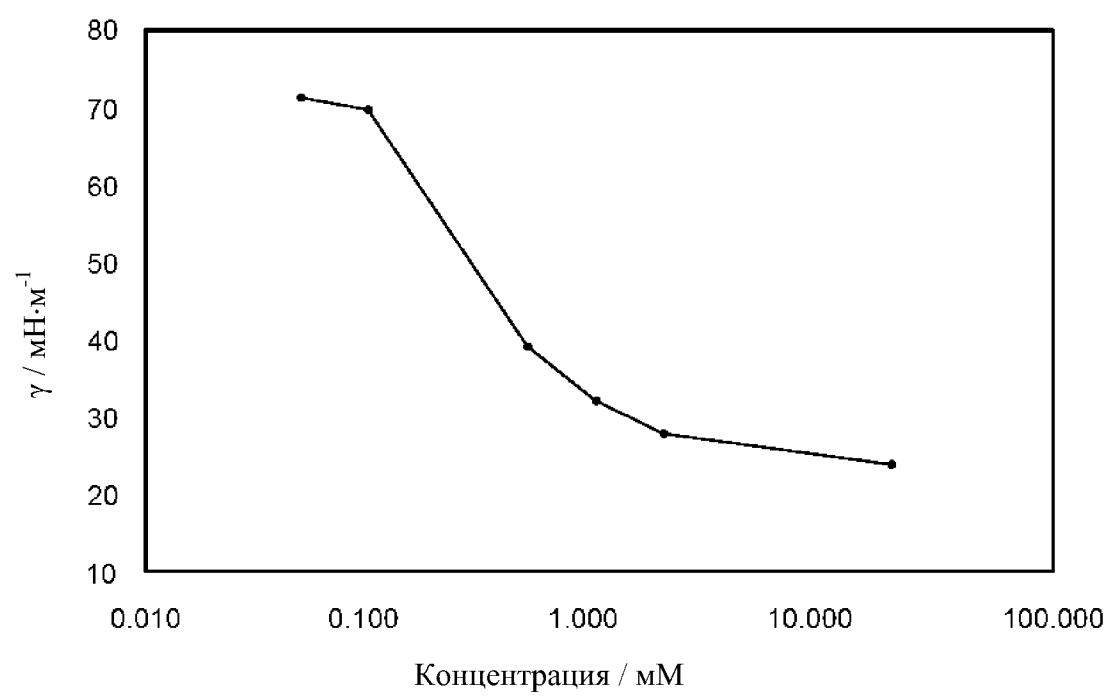


15

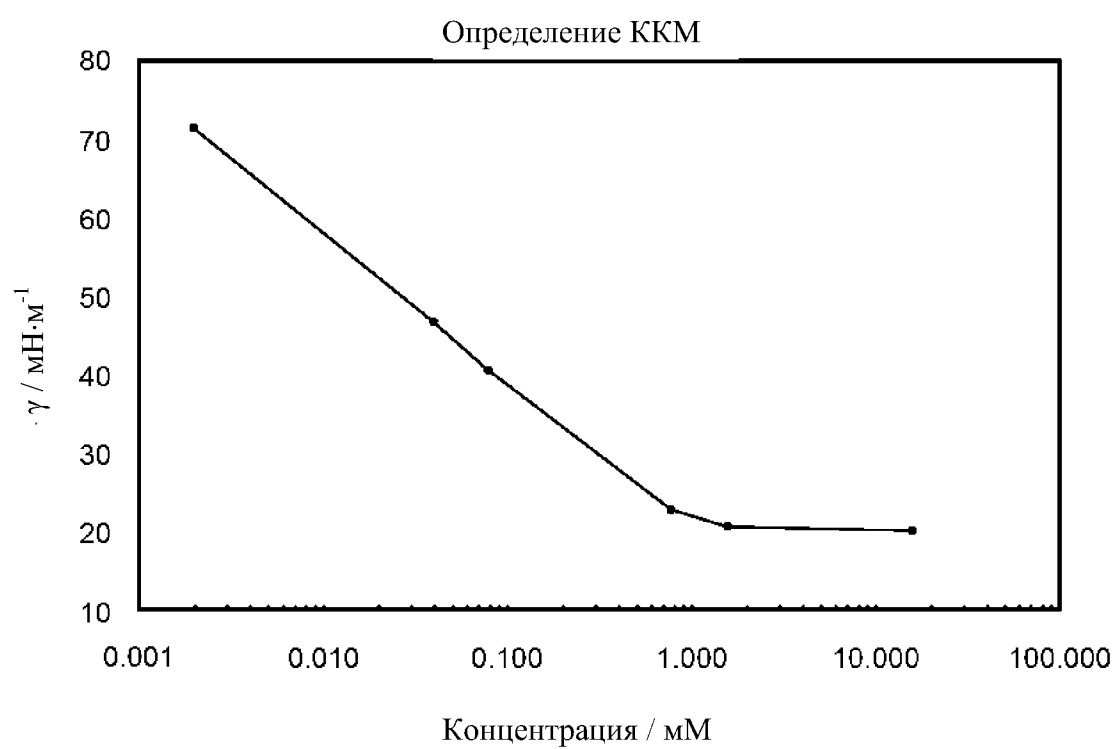
19. Соединение по п. 13, которое представляет собой 5-(((6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)диметиламмоний)пентан-1-сульфонат, имеющий следующую Формулу:



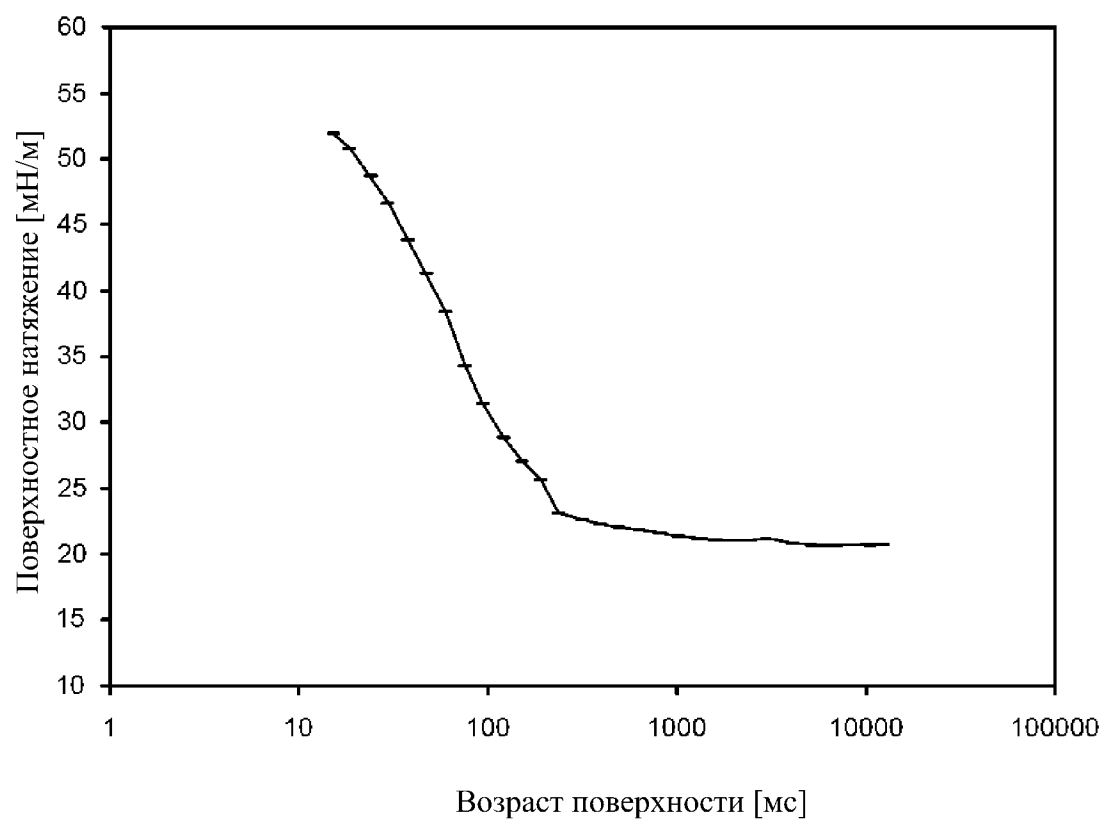
20



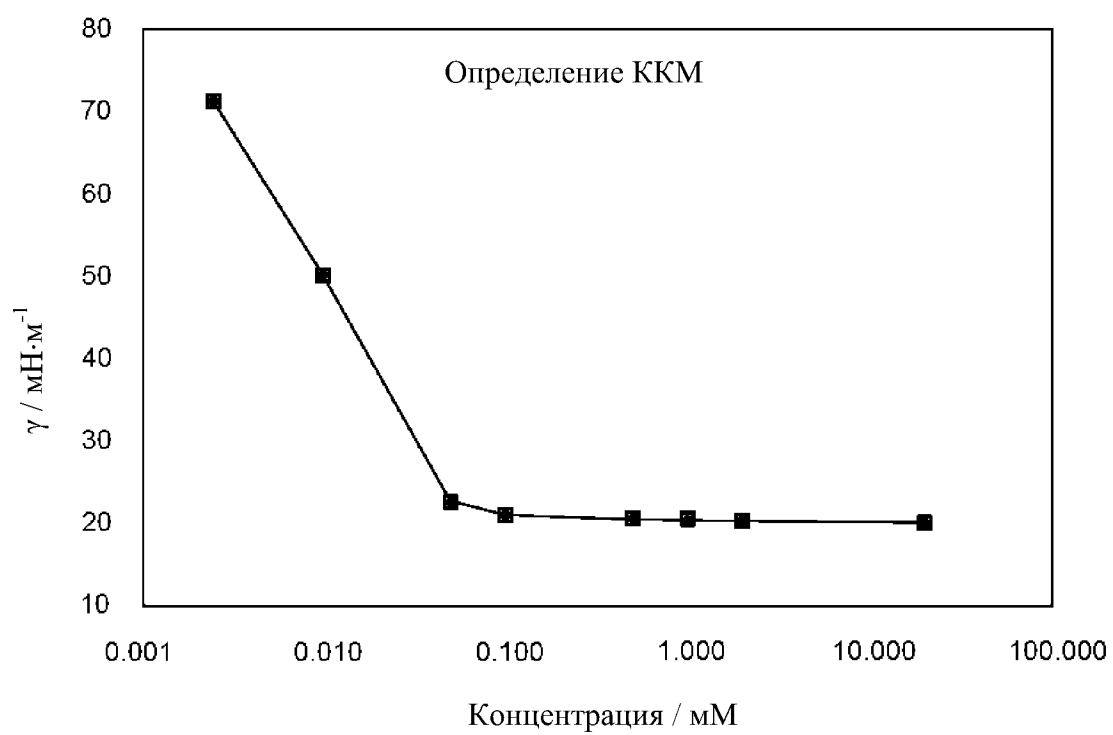
ФИГ. 1



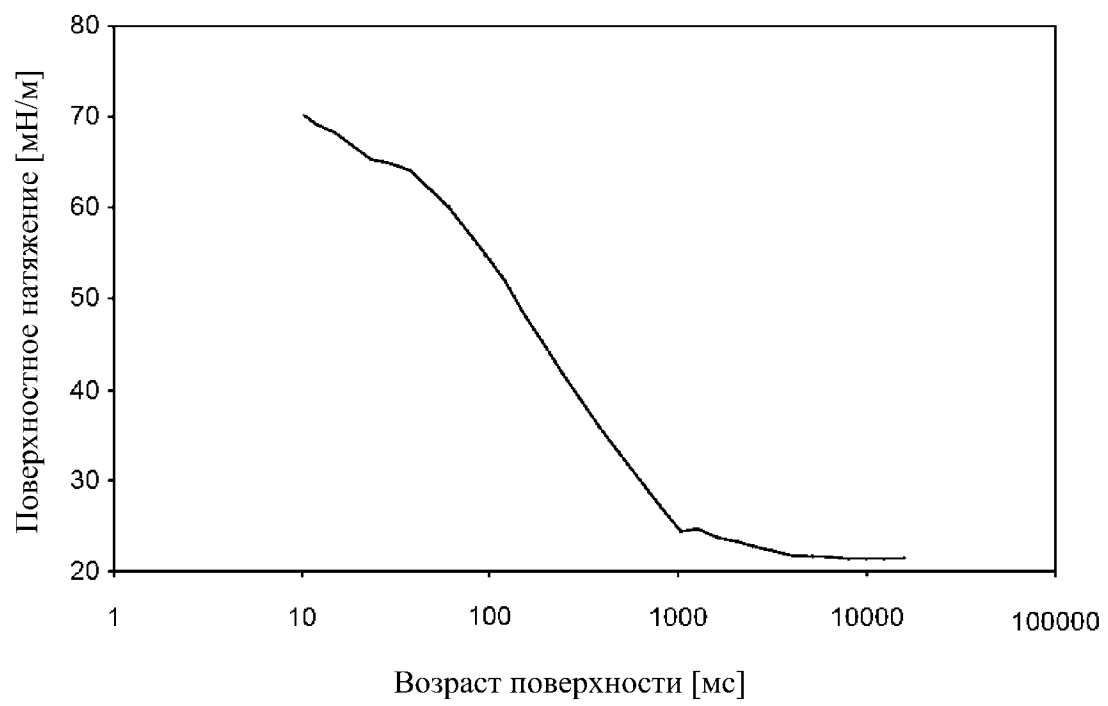
ФИГ. 2

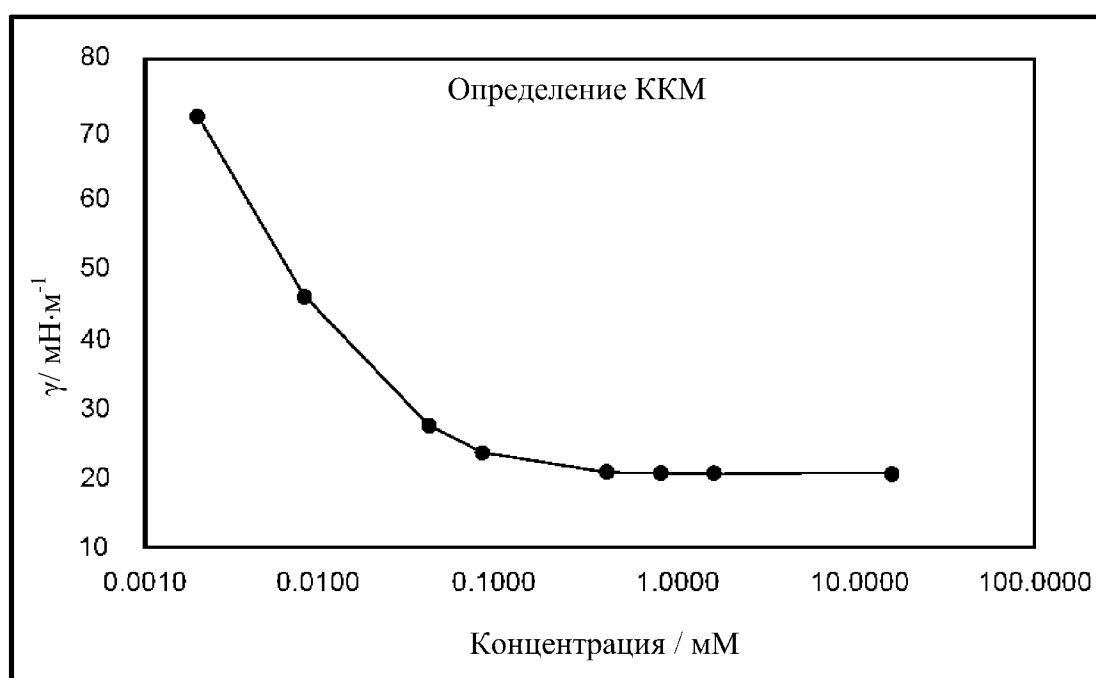


ФИГ. 3

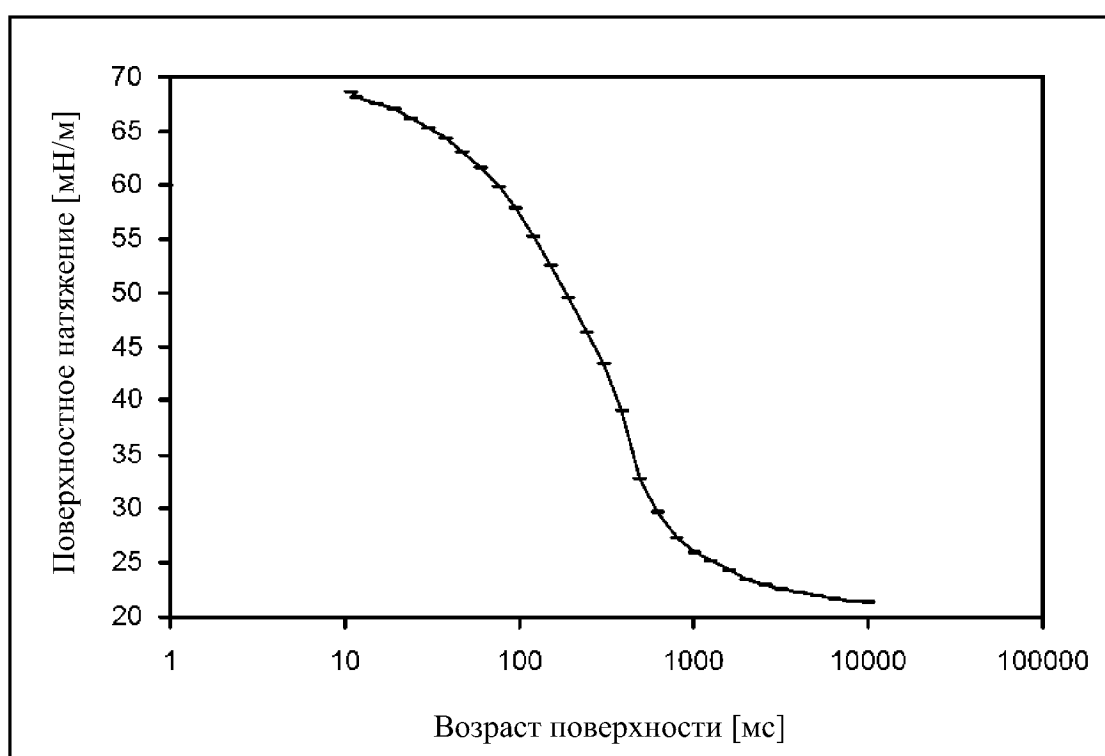


ФИГ. 4

**ФИГ. 5**



ФИГ. 6



ФИГ. 7