

(19)



Евразийское
патентное
ведомство

(21) 202492054 (13) A1

(12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ЕВРАЗИЙСКОЙ ЗАЯВКЕ

(43) Дата публикации заявки
2024.10.24(51) Int. Cl. C07F 7/08 (2006.01)
C07F 9/40 (2006.01)(22) Дата подачи заявки
2023.02.22(54) СИЛОКСАНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АМИНОКИСЛОТ, ИМЕЮЩИЕ
ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ СВОЙСТВА

(31) 63/313,115

(32) 2022.02.23

(33) US

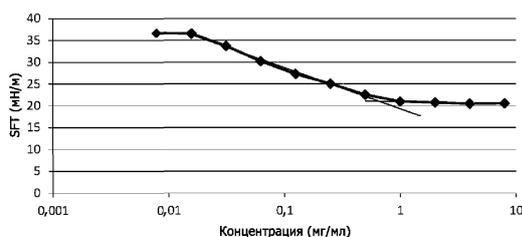
(86) PCT/US2023/013612

(87) WO 2023/163986 2023.08.31

(71) Заявитель:
АДВАНСИХ РЕСИНС ЕНД
ЧЕМИКАЛС ЛЛС (US)(72) Изобретатель:
Асирватам Эдвард,
Анантападманабхан Кавсери, Кумари
Харшита, Миттапалли Рамана,
Мирзамани Марзиех (US)(74) Представитель:
Рыбина Н.А. (RU)

(57) В настоящем изобретении представлены силоксановые производные аминокислот, которые имеют поверхностно-активные свойства. Аминокислоты могут представлять собой встречающиеся в природе или синтетические, или они могут быть получены посредством реакции раскрытия кольца лактама, такого как капролактама. Аминокислота может быть функционализирована силоксановой группой с образованием соединения, которое является поверхностно-активным и имеет характеристики поверхностно-активного вещества. Соединения имеют низкие критические концентрации мицелл (СМС), а также способность уменьшать поверхностное натяжение жидкости.

Поверхностно-активное вещество 1



A1

202492054

202492054

A1

СИЛОКСАНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АМИНОКИСЛОТ, ИМЕЮЩИЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ СВОЙСТВА

ПЕРЕКРЕСТНАЯ ССЫЛКА НА РОДСТВЕННЫЕ ЗАЯВКИ

[0001] Настоящая заявка испрашивает приоритет по предварительной заявке на патент США 63/313115, поданной 23 февраля 2022 года, которая включена в данный документ посредством ссылки во всей своей полноте.

ОБЛАСТЬ ТЕХНИКИ

[0002] Настоящее изобретение относится к силоксановым производным аминокислот и способам их синтеза, где силоксановые производные имеют поверхностно-активные свойства.

УРОВЕНЬ ТЕХНИКИ

[0003] Поверхностно-активные вещества (молекулы с поверхностно-активными свойствами) являются важным классом молекул с востребованными характеристиками. Поверхностно-активные вещества могут быть незаряженными, цвиттер-ионными, катионными или анионными. Часто эти соединения представляют собой амфифильные молекулы с нерастворимой в воде гидрофобной «хвостовой» группой и водорастворимой гидрофильной «головной» группой. Эти соединения могут адсорбироваться на границе раздела, такой как граница раздела между двумя жидкостями, жидкостью и газом или жидкостью и твердым телом. В случае границы раздела между водой и маслом гидрофильная головная группа проходит в воду, в то время как гидрофобный хвост проходит в масло. При добавлении в воду гидрофильная головная группа проходит в воду, в то время как гидрофобный хвост проходит в воздух. Присутствие поверхностно-активного вещества нарушает межмолекулярное взаимодействие между молекулами воды, заменяя его более слабыми взаимодействиями между молекулами воды и поверхностно-активным веществом. Это приводит к снижению поверхностного натяжения, а также может служить для стабилизации поверхности раздела.

[0004] При достаточно высоких концентрациях поверхностно-активные вещества могут образовывать агрегаты для ограничения воздействия полярного растворителя на гидрофобный хвост. Одним из таких агрегатов является мицелла, в которой молекулы расположены в сфере с гидрофобными хвостами внутри сферы и гидрофильными головками снаружи для взаимодействия с полярным растворителем. Влияние, которое

данное соединение оказывает на поверхностное натяжение, и концентрация, при которой оно образует мицеллы, могут служить определяющими характеристиками для поверхностно-активного вещества.

[0005] Поверхностно-активные вещества широко применяются в коммерческих целях в составах, начиная от моющих средств и заканчивая средствами по уходу за волосами и косметикой. Соединения с поверхностно-активными свойствами применяют, среди прочего, в качестве мыла, моющих средств, смазывающих веществ, смачивающих средств, вспенивающих средств и усиливающих растекание средств. Таким образом, существует постоянная потребность в идентификации и синтезе таких соединений.

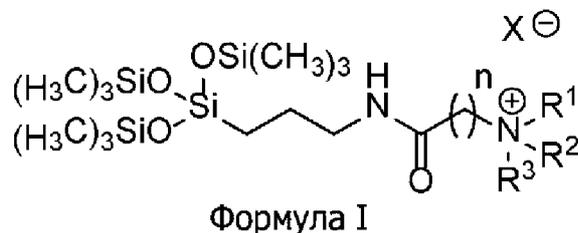
[0006] Однако исключительно по его структуре может быть трудно предсказать, будет ли данное соединение иметь поверхностно-активные свойства или требуемые поверхностно-активные свойства, необходимые для конечного применения, не говоря уже о других важных характеристиках, таких как динамика адсорбции на поверхности раздела, достижимое минимальное поверхностное натяжение и/или способность смачивать гидрофобные и/или олеофобные поверхности, которые также являются неотъемлемой частью того, станет ли соединение пригодным поверхностно-активным веществом. Некоторые аминокислоты и их производные, например, желательны в качестве строительных блоков для поверхностно-активных веществ, но выбор того, какие аминокислоты применять, далек от интуитивного понимания. Аналогичным образом, известно, что некоторые силосаны имеют поверхностно-активные свойства, но также предсказать, какой силосан будет эффективным, очень сложно. Синтез таких соединений добавляет еще один аспект сложности вследствие различий растворимостей, связанных с различными элементами и фрагментами, присутствующими в одних и тех же молекулах. Сохраняется потребность в высокоэффективных поверхностно-активных веществах, которые могут быть легко синтезированы в коммерческих масштабах с помощью простых путей.

КРАТКОЕ ИЗЛОЖЕНИЕ СУЩНОСТИ ИЗОБРЕТЕНИЯ

[0007] В настоящем изобретении представлены силосановые производные аминокислот, которые имеют поверхностно-активные свойства. Аминокислоты могут представлять собой встречающиеся в природе или синтетические аминокислоты, или они могут быть получены посредством реакций раскрытия кольца молекул, таких как лактамы, например, капролактамы. Аминокислоты могут быть функционализированы различными типами силосановых групп с образованием соединений с поверхностно-активными

свойствами. Характерно, что эти соединения могут иметь низкие критические концентрации мицелл (СМС) и/или способность уменьшать поверхностное натяжение жидкости.

[0008] В настоящем изобретении представлены соединения формулы I, ниже:



где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержать по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, необязательно C_1 - C_6 алкил может содержать один или более атомов кислорода, азота или серы или групп, которые содержат по меньшей мере один из этих атомов, и алкильная цепь может быть необязательно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

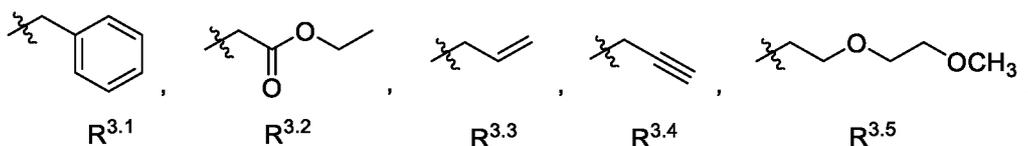
R^3 может быть выбран из группы, состоящей из алкенила, алкинила, сложного эфира, спирта, арилалкила, алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_{10} алкилбензойной кислоты или C_1 - C_6 линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же или другой;

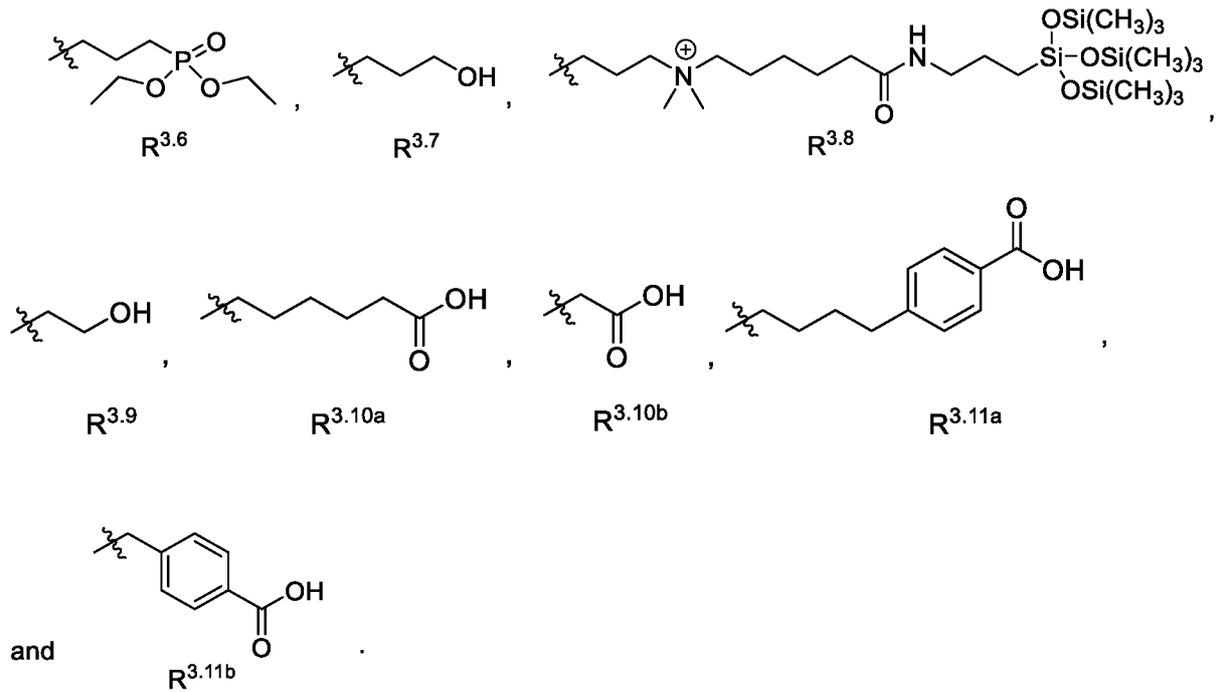
n может представлять собой целое число от 1 до 12; и

X может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромиды и йодида.

[0009] В частности, R^3 может быть выбран из группы, состоящей из C_2 - C_{10} алкенила, C_2 - C_{10} алкинила, C_2 - C_{12} сложного эфира, C_1 - C_{10} гидроксила, бензила, C_2 - C_{12} алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_5 алкилбензойной кислоты или трехуглеродного линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же, как и первая.

[0010] Более конкретно, R^3 может быть выбран из группы, состоящей из следующих формул:

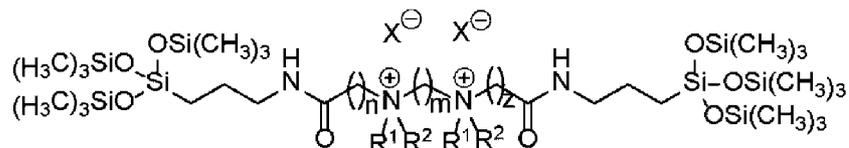




[0011] Дополнительные соединения, представленные в настоящем изобретении, представляют собой соединения формулы I, где R^1 и R^2 представляют собой метил.

[0012] Другие соединения, представленные в настоящем изобретении, представляют собой соединения формулы I, где n равно 5.

[0013] В настоящем изобретении дополнительно представлены соединения формулы II, ниже:



Формула II

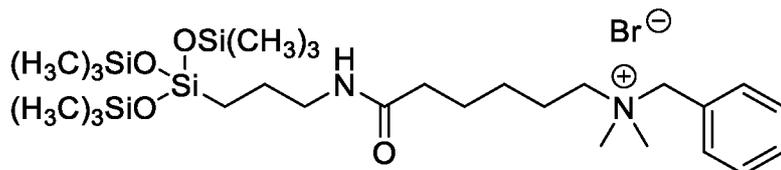
где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержать по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, необязательно C_1 - C_6 алкил может содержать один или более атомов кислорода, азота или серы или групп, которые содержат по меньшей мере один из этих атомов, и алкильная цепь может быть необязательно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

n и z могут быть выбраны независимо из любого целого числа от 1 до 12;

m может представлять собой любое целое число от 1 до 12; и

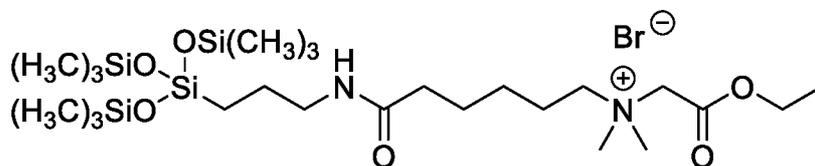
X может быть независимо выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и йодида.

[0014] Одно конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 1, представляет собой N-бензил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



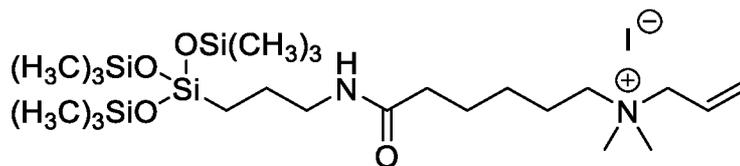
Поверхностно-активное вещество 1

[0015] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 2, представляет собой N-(2-этокси-2-оксоэтил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



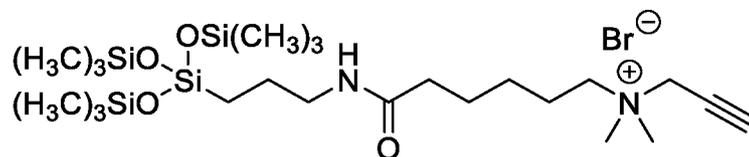
Поверхностно-активное вещество 2

[0016] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 3, представляет собой N-аллил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



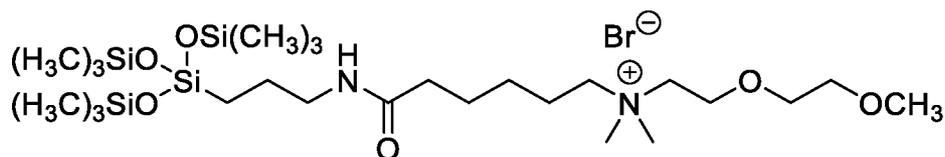
Поверхностно-активное вещество 3

[0017] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 4, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксо-N-(проп-2-ин-1-ил)гексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



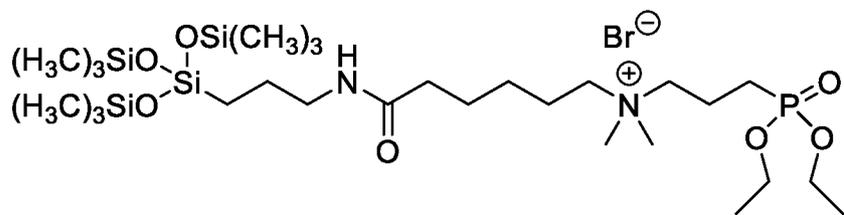
Поверхностно-активное вещество 4

[0018] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 5, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-(2-метоксиэтокси)этил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



Поверхностно-активное вещество 5

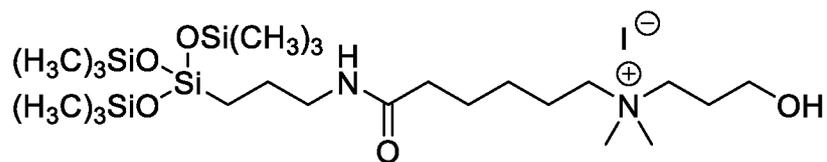
[0019] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 6, представляет собой N-(3-(диэтоксифосфорил)пропил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



Поверхностно-активное вещество 6

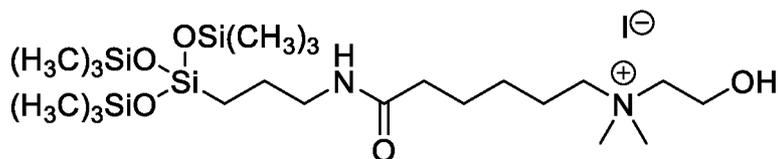
[0020] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 7,

представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(3-гидроксипропил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



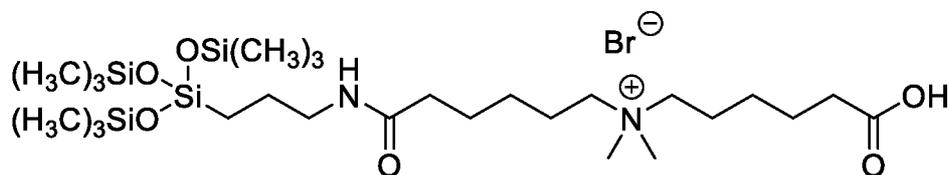
Поверхностно-активное вещество 7

[0021] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 8, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-гидроксиэтил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



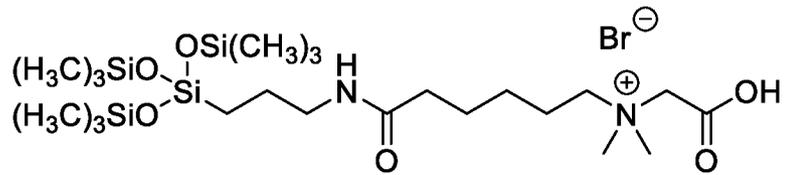
Поверхностно-активное вещество 8

[0022] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 9а, представляет собой N-(5-карбоксипентил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



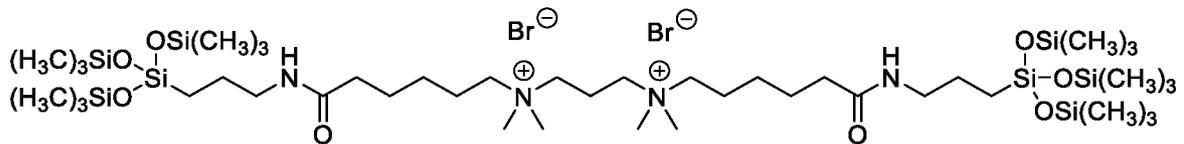
Поверхностно-активное вещество 9а

[0023] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 9б, представляет собой N-(карбоксиметил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



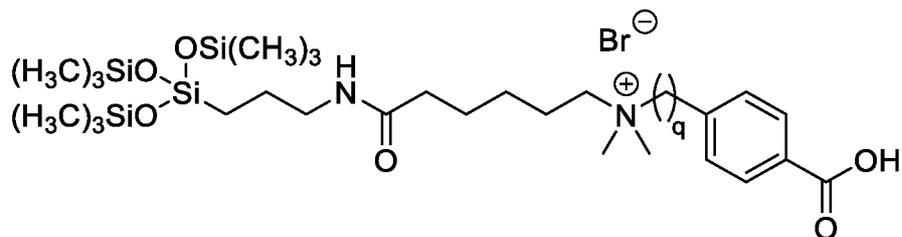
Поверхностно-активное вещество 9b

[0024] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 10, представляет собой N^1, N^3 -бис(6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)- N^1, N^1, N^3, N^3 -тетраметилпропан-1,3-диаминийдидбромид, имеющий формулу:



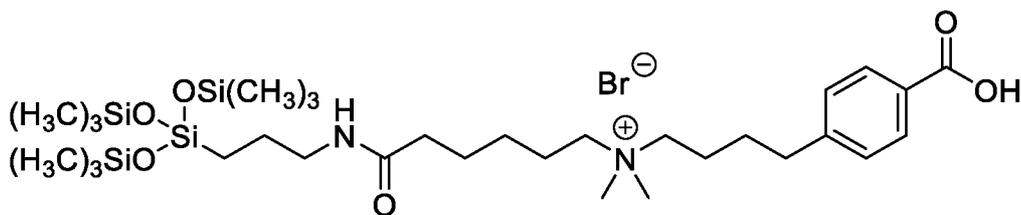
Поверхностно-активное вещество 10

[0025] Дополнительная группа конкретных соединений, представленных в настоящем изобретении и называемых в данном документе поверхностно-активным веществом 11, имеет общую формулу:



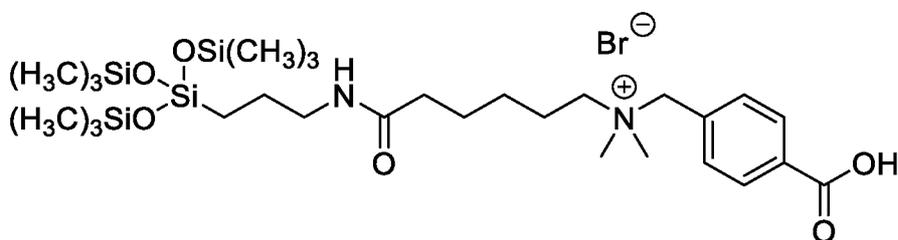
где q может представлять собой целое число от 1 до 10.

[0026] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 11a, представляет собой N -(4-(4-карбоксифенил)бутил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)- N, N -диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий формулу:



Поверхностно-активное вещество 11a

[0027] Дополнительное конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 11b, представляет собой N-(4-(4-карбоксифенил)бутил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий формулу:



Поверхностно-активное вещество 11b

[0028] Вышеупомянутые и другие характеристики изобретения и способ их достижения станут более очевидными и будут лучше понятны со ссылкой на следующее описание вариантов осуществления, взятых вместе с прилагаемыми графическими материалами.

КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

[0029] На фиг. 1 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 2, как описано в примере 2b.

[0030] На фиг. 2 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 2, как описано в примере 3b.

[0031] На фиг. 3 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 3, как описано в примере 4b.

[0032] На фиг. 4 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 4, как описано в примере 5b.

[0033] На фиг. 5 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 5, как описано в примере 6b.

[0034] На фиг. 6 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 6, как описано в примере 7b.

[0035] На фиг. 7 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 7, как описано в примере 8b.

[0036] На фиг. 8 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 8, как описано в примере 9b.

[0037] На фиг. 9a показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 9a, как описано в примере 11b.

[0038] На фиг. 9b показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 9b, как описано в сравнительном примере A2.

[0039] На фиг. 10 показан график зависимости поверхностного натяжения от концентрации поверхностно-активного вещества 10, как описано в примере 10b.

[0040] Используемая в данном документе фраза «в пределах любого диапазона, определенного между любыми двумя из вышеуказанных значений» буквально означает, что любой диапазон может быть выбран из любых двух значений, перечисленных до такой фразы, независимо от того, находятся ли значения в нижней части перечня или в верхней части перечня. Например, пара значений может быть выбрана из двух меньших значений, двух больших значений или меньшего значения и большего значения.

[0041] Используемый в данном документе термин «алкил» означает любую насыщенную углеродную цепь, которая может представлять собой прямую или разветвленную цепь и может быть замещена в любой точке вдоль углеродной цепи.

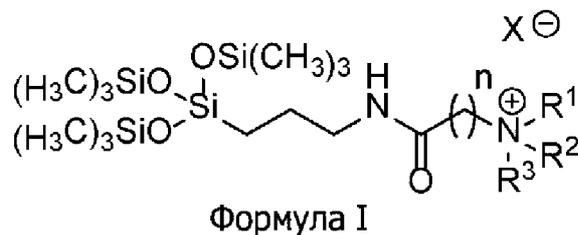
[0042] Используемая в данном документе фраза «поверхностно-активное» означает, что ассоциированное соединение способно снижать поверхностное натяжение среды, в которой оно растворено, и/или натяжение на поверхности раздела с другими фазами, и, соответственно, может адсорбироваться на поверхности раздела жидкость/пар и/или других границах раздела. Термин «поверхностно-активное вещество» может быть применен к такому соединению.

[0043] Касательно терминологии неточности, термины «приблизительно» и «примерно» могут использоваться взаимозаменяемо для обозначения измерения, которое включает в себя указанное измерение, и которое также включает в себя любые измерения, которые разумно близки к указанному измерению. Измерения, которые достаточно близки

к указанному измерению, отклоняются от указанного измерения на достаточно небольшую величину, как понятно и легко установлено специалистами в соответствующей области техники. Такие отклонения могут быть связаны, например, с погрешностью измерения или незначительными корректировками, внесенными для оптимизации производительности. В случае, если определено, что индивидуумы, имеющие обычную квалификацию в соответствующих областях техники, не смогут легко установить значения для таких разумно небольших различий, термины «приблизительно» и «примерно» можно понимать как означающие плюс или минус 10% от указанного значения.

[0044] Настоящее изобретение относится к силоксановым производным аминокислот. Аминокислоты могут представлять собой встречающиеся в природе или синтетические, или они могут быть получены в результате реакций раскрытия кольца лактамов, таких как капролактамы. Было показано, что соединения по настоящему изобретению имеют поверхностно-активные свойства и могут быть применены, например, в качестве поверхностно-активных веществ и смачивающих средств. В частности, в настоящем изобретении представлены соединения формулы I, показанные ниже:

[0045] В настоящем изобретении представлены соединения формулы I, ниже:



где R^1 и R^2 могут быть одинаковыми или разными и содержать по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, необязательно C_1 - C_6 алкил может содержать один или более атомов кислорода, азота или серы или групп, которые содержат по меньшей мере один из этих атомов, и алкильная цепь может быть необязательно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, amino, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

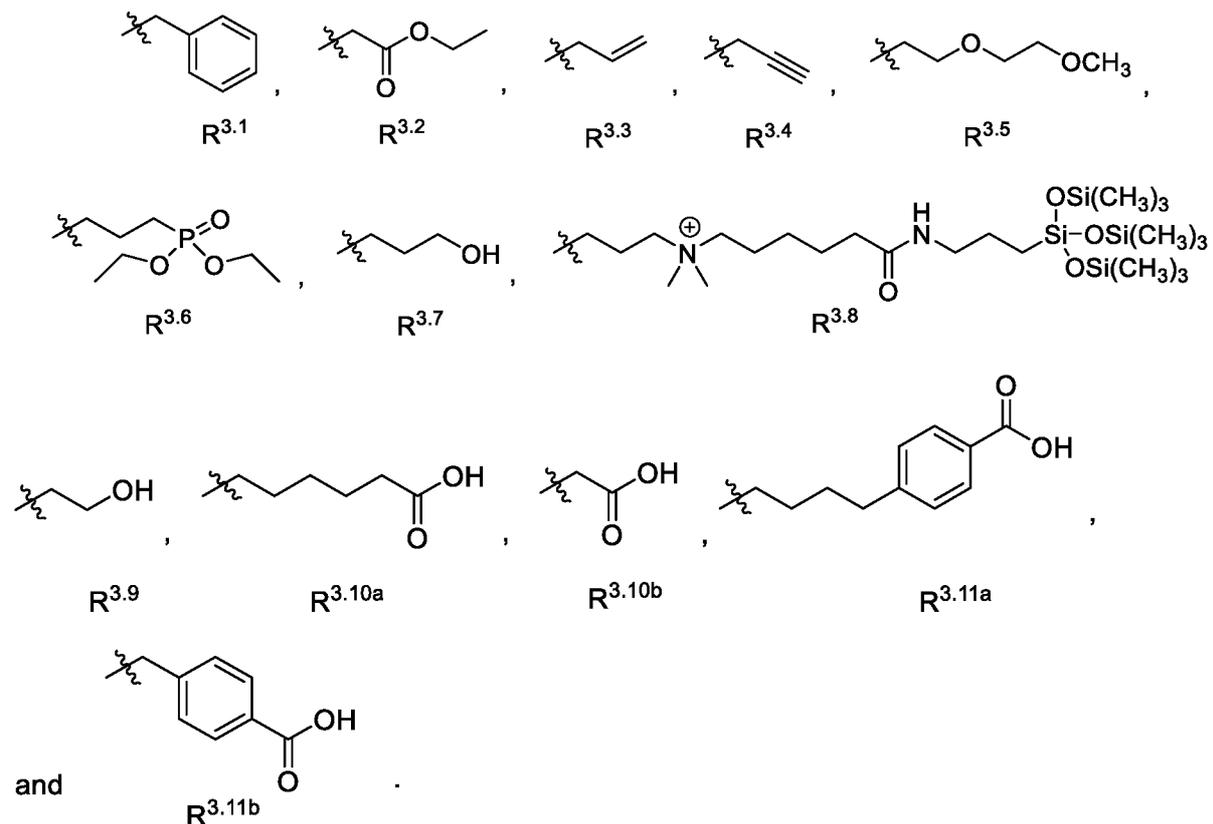
R^3 может быть выбран из группы, состоящей из алкенила, алкинила, сложного эфира, спирта, арилалкила, алкоксиалкилового эфира, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, алкилфосфата или C_1 - C_6 линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же или другой;

n может представлять собой целое число от 1 до 12; и

X может быть выбран из группы, состоящей из хлорида, бромиды и йодида.

[0046] В частности, R^3 может представлять собой C_2 - C_{10} алкенил, C_2 - C_{10} алкинил, C_2 - C_{12} сложный эфир, C_1 - C_{10} гидроксил, бензил, C_2 - C_{12} алкоксиалкиловый эфир, алкилфосфат, C_3 - C_8 карбоновую кислоту, C_1 - C_{10} алкилбензойную кислоту или трехуглеродный линкер, присоединенный ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же.

[0047] Более конкретно, R^3 может быть выбран из группы, состоящей из следующих формул:



[0048] Дополнительные соединения, представленные в настоящем изобретении, представляют собой соединения формулы I, где R^1 и R^2 представляют собой метил.

[0049] Другие соединения, представленные в настоящем изобретении, представляют собой соединения формулы I, где n равно 5.

[0050] Используемая в данном документе фраза « n может представлять собой целое число от 1 до 12» означает, что n может быть равно 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 и/или 12 или находиться в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0051] Используемая в данном документе фраза « C_1 - C_6 алкил» означает неразветвленную или разветвленную алкильную группу, содержащую 1, 2, 3, 4, 5 и/или 6

атомов углерода, или число в пределах любого диапазона, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0052] Используемая в данном документе фраза «C₁-C₆ линкер» означает неразветвленную или разветвленную алкильную цепь, содержащую 1, 2, 3, 4, 5 и/или 6 атомов углерода, или число в пределах любого диапазона, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0053] Используемая в данном документе фраза «C₂-C₁₀ алкенил» означает неразветвленную или разветвленную алкенильную группу, содержащую 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 и/или 10 атомов углерода, или число в пределах любого диапазона, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0054] Используемая в данном документе фраза «C₂-C₁₀ алкинил» означает неразветвленную или разветвленную алкинильную группу, содержащую 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 и/или 10 атомов углерода, или число в пределах любого диапазона, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0055] Используемая в данном документе фраза «C₂-C₁₂ сложный эфир» означает неразветвленную или разветвленную сложноэфирную группу, имеющую в общей сложности 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 и/или 12 атомов углерода или число в пределах любого диапазона, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0056] Используемая в данном документе фраза «C₂-C₁₂ алкоксиалкиловый эфир» означает неразветвленную или разветвленную алкоксиалкиловую эфирную группу, имеющую в общей сложности 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 и/или 12 атомов углерода или число в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0057] Используемая в данном документе фраза «C₁-C₁₀ гидроксил» означает гидроксил, присоединенный к неразветвленной или разветвленной алкильной группе, содержащей 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 и/или 10 атомов углерода, или число в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0058] Используемая в данном документе фраза «C₃-C₈ карбоновая кислота» означает группу карбоновой кислоты, присоединенную к неразветвленной или разветвленной алкильной группе, содержащей 3, 4, 5, 6, 7 и/или 8 атомов углерода или число в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0059] Используемая в данном документе фраза «C₁-C₁₀ алкилбензойная кислота» означает группу бензойной кислоты, присоединенную к неразветвленной или разветвленной алкильной группе, содержащей 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 и/или 10 атомов

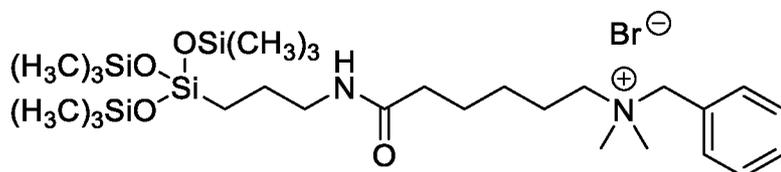
углерода, или число в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0060] Используемая в данном документе фраза «n и z могут быть выбраны независимо из любого целого числа от 1 до 12» означает, что n и z могут независимо быть равными 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 и/или 12 или число в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

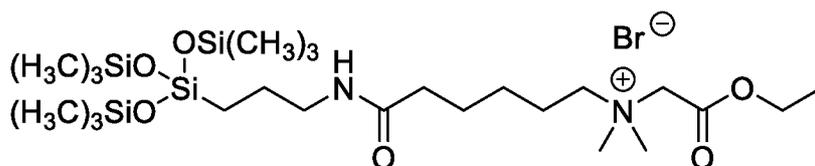
[0061] Используемая в данном документе фраза «m может представлять собой любое целое число от 1 до 12» означает, что m может быть равно 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 и/или 12 или число в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0062] Используемая в данном документе фраза «q может представлять собой любое целое число от 1 до 10» означает, что q может быть равно 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 и/или 10 или число в любом диапазоне, включая любые две из вышеперечисленных в качестве конечных точек.

[0063] Одно конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 1, представляет собой N-бензил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

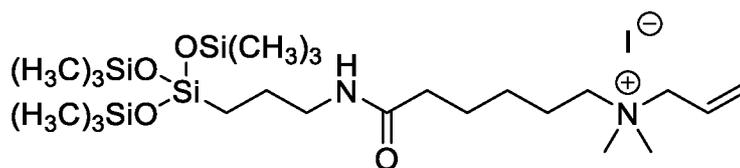


[0064] Второе конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 2, представляет собой N-(2-этокси-2-оксоэтил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

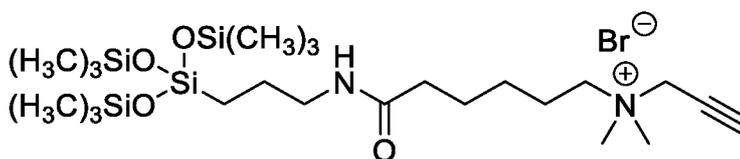


[0065] Третье конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 3, представляет собой N-аллил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-

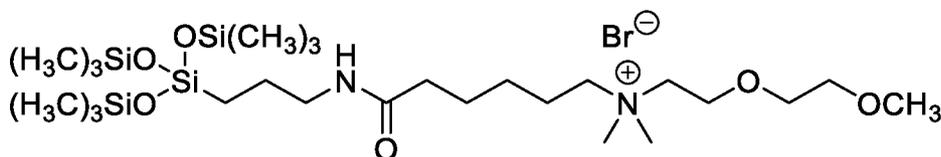
ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



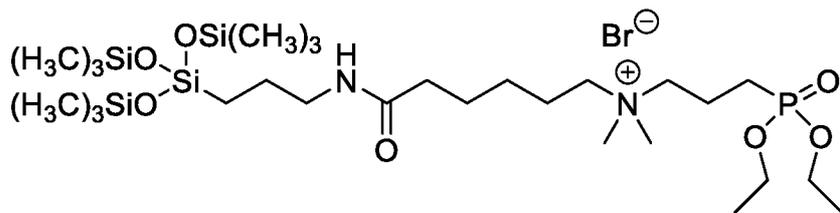
[0066] Четвертое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 4, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксо-N-(проп-2-ин-1-ил)гексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



[0067] Пятое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 5, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-(2-метоксиэтокси)этил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:

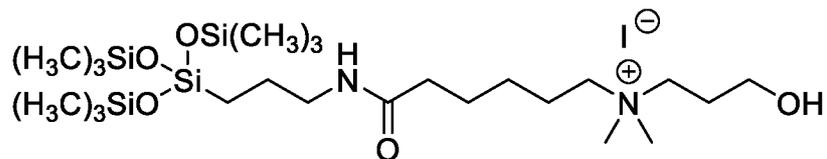


[0068] Шестое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 6, представляет собой N-(3-(диэтоксифосфорил)пропил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:

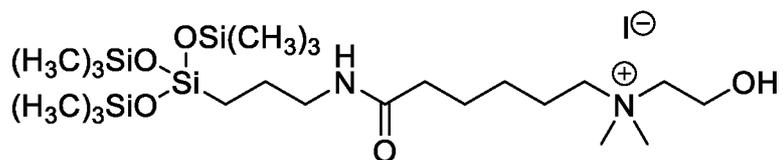


[0069] Седьмое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 7, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-

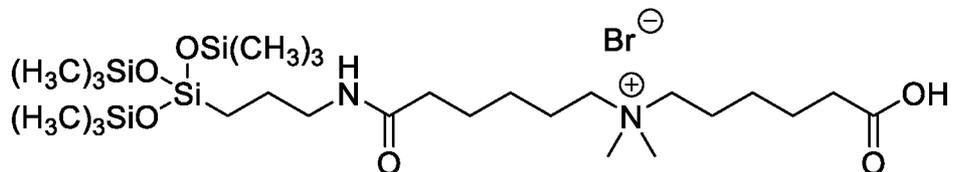
(3-гидроксипропил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийодид, имеющий следующую формулу:



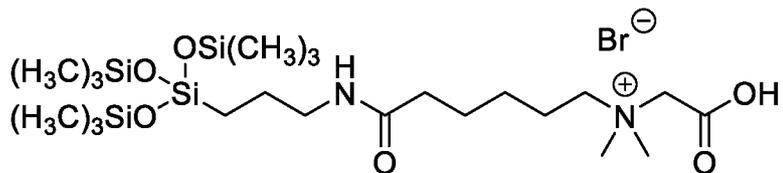
[0070] Восьмое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 8, представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-гидроксиэтил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийодид, имеющий следующую формулу:



[0071] Девятое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 9a, представляет собой N-(5-карбокспентил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

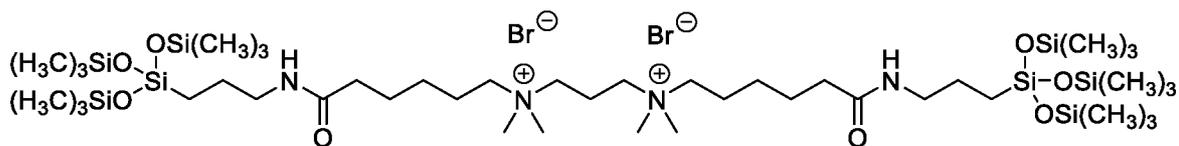


[0072] Десятое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 9b, представляет собой N-(карбоксиметил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

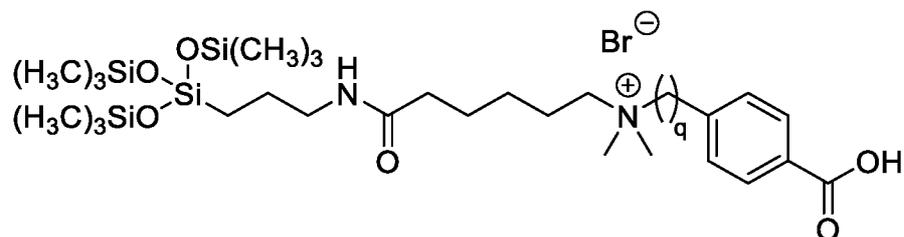


[0073] Одиннадцатое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 10, представляет собой N¹,N³-бис(6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-

((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)-N¹,N¹,N³,N³-тетраметилпропан-1,3-диаминийдидбромид, имеющий формулу:

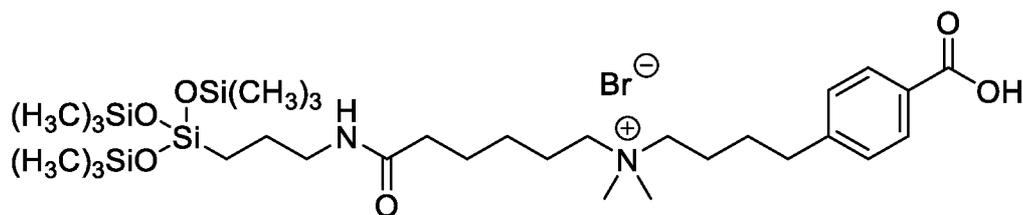


[0074] Дополнительная группа конкретных соединений, представленных в настоящем изобретении и называемых в данном документе поверхностно-активным веществом 11, имеет общую формулу:

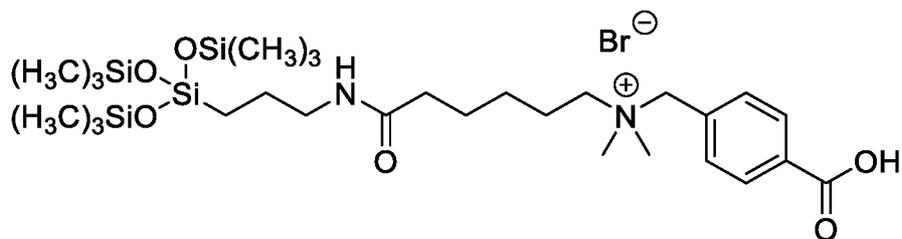


где q может представлять собой целое число от 1 до 10.

[0075] Двенадцатое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 11a, представляет собой N-(4-(4-карбоксифенил)бутил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий формулу:



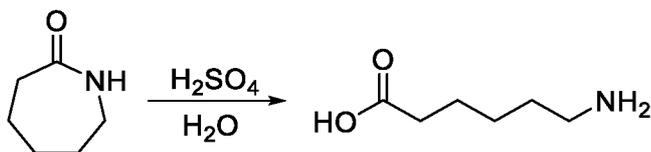
[0076] Тринадцатое конкретное соединение, представленное в настоящем изобретении и называемое в данном документе поверхностно-активным веществом 11b, представляет собой N-(4-(4-карбоксифенил)бутил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий формулу:



[0077] Эти соединения могут быть синтезированы различными способами. Один такой способ включает вступление в реакцию аминокислоты, такой как *N*-алкилированная или *N*-ацилированная аминокислота, с силоксаном для преобразования С-конца аминокислоты в требуемое силоксановое производное. N-конец аминокислоты может быть дополнительно алкилирован с получением, например, четвертичного амина.

[0078] Аминокислота может представлять собой встречающуюся в природе или синтетическую или может быть получена в результате реакции раскрытия кольца лактама, такого как капролактam. Реакция раскрытия кольца может представлять собой реакцию, катализируемую кислотой или щелочью, и пример реакции, катализируемой кислотой, показан ниже на схеме 1.

СХЕМА 1



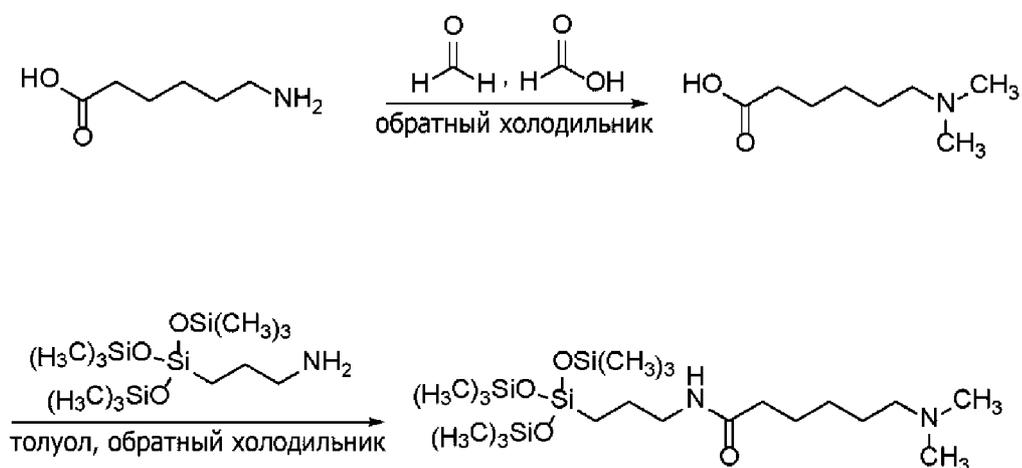
[0079] Аминокислота может содержать от 1 до 12 атомов углерода между N- и С-концами, например, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 или 12 атомов углерода. Алкильная цепь может быть разветвленной или прямой. Алкильная цепь может быть прервана азотом, кислородом или серой. Алкильная цепь может быть дополнительно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонил, сульфоната, карбоксила и карбоксилата. N-концевой азот может быть ацилирован или алкилирован одной или более алкильными группами. Например, аминокислота может представлять собой 6-(диметиламино)гексановую кислоту.

[0080] Силоксан может быть замещен одной или более алкоксигруппами, такими как метокси, этокси, изопропокси, третичный бутокси и другие. Силоксан может быть дополнительно замещен одной или более алкильными группами, такими как пропил, где алкильная группа может быть дополнительно замещена соответствующей функциональной группой для обеспечения связывания силоксана с аминокислотой, такой как азот.

Например, силоксан может представлять собой 3-аминопропилтрис(триметилсилокси)силан.

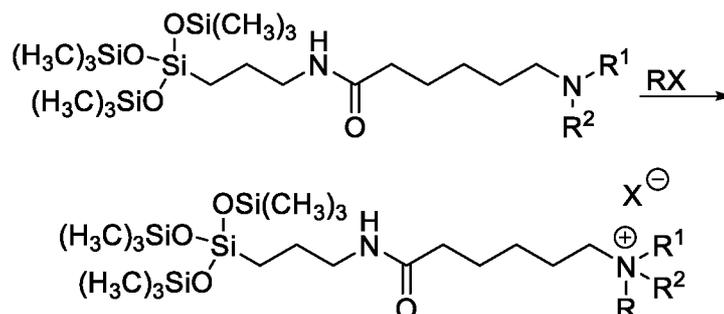
[0081] Силоксановое производное аминокислоты может быть синтезировано, как показано ниже на схеме 2. Как показано, 6-аминогексановая кислота может быть алкилирована на N-конце путем обработки формальдегидом в муравьиной кислоте с обратным холодильником с получением 6-(диметиламино)гексановой кислоты. Затем свободную карбоновую кислоту соединяют с 3-аминопропил(триметилсилокси)силаном в кипящем толуоле с получением требуемого силоксанового производного.

СХЕМА 2



[0082] N-концевой азот может быть дополнительно дериватизирован для модификации или улучшения растворимости в воде и поверхностно-активных свойств. Схема синтеза образца показана ниже на схеме 3, в которой N-концевой азот алкилируют с получением четвертичного амина.

СХЕМА 3



[0083] Подходящие алкилирующие средства могут включать, например, бензилбромид, этилбромацетат, аллилйодид, пропаргилбромид, 1-бром-2-(2-метоксиэтокси)этан, бромфосфонат, 3-йодпропанол, 3-бромпропанол, 2-йодэтанол, 2-бромэтанол, 6-бромгексановую кислоту, 4-(4-бромбутил)бензойную кислоту и 4-(бромметил)бензойную кислоту. Две молекулы формулы I могут быть связаны путем обработки N-концевого азота дифункциональным алкилирующим средством, таким как, например, 1,3-дибромпропан.

[0084] Соединения по настоящему изобретению демонстрируют поверхностно-активные свойства. Эти свойства могут быть измерены и описаны различными способами. Одним способом, с помощью которого могут быть описаны поверхностно-активные вещества, является критическая концентрация мицеллы (СМС) молекулы. СМС может быть определена как концентрация поверхностно-активного вещества, при которой образуются мицеллы, и выше которой все дополнительное поверхностно-активное вещество включается в мицеллы.

[0085] Например, соединения формулы (I) могут иметь критическую концентрацию мицелл (СМС) от приблизительно 0,0010 ммоль до приблизительно 10,0000 ммоль, или от 0,0500 ммоль до приблизительно 5,0000 ммоль, или от приблизительно 0,0500 ммоль до приблизительно 2,0000 ммоль, или от приблизительно 0,0600 ммоль до приблизительно 1,3600 ммоль, или число в любом диапазоне, определенном между любыми двумя из вышеуказанных значений в качестве конечных точек.

[0086] По мере увеличения концентрации поверхностно-активного вещества поверхностное натяжение уменьшается. Как только поверхность полностью покрывается молекулами поверхностно-активного вещества, начинают образовываться мицеллы. Эта точка представляет СМС, а также минимальное поверхностное натяжение. Дальнейшее добавление поверхностно-активного вещества не будет дополнительно влиять на поверхностное натяжение. Следовательно, СМС может быть измерена путем наблюдения изменения поверхностного натяжения в зависимости от концентрации поверхностно-активного вещества. Одним таким способом измерения этого значения является метод смачивания пластин Вильгельми. Пластина Вильгельми обычно представляет собой тонкую иридиево-платиновую пластину, прикрепленную к весам проволокой и расположенную перпендикулярно поверхности раздела воздух-жидкость. Весы используются для измерения силы, оказываемой на пластину путем смачивания. Это

значение затем используют для расчета поверхностного натяжения (γ) в соответствии с уравнением 1:

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

где l равно увлажненному периметру ($2w + 2d$, где w и d представляют собой толщину и ширину пластины соответственно), а $\cos \theta$, угол контакта между жидкостью и пластиной, принимается равным 0 в отсутствие существующего значения из литературных данных.

[0087] Другим параметром, используемым для оценки эффективности поверхностно-активных веществ, является динамическое поверхностное натяжение. Динамическое поверхностное натяжение представляет собой значение поверхностного натяжения для конкретной поверхности или возраста границы раздела. В случае жидкостей с добавлением поверхностно-активных веществ оно может отличаться от равновесного значения. Непосредственно после получения поверхности поверхностное натяжение равно поверхностному натяжению чистой жидкости. Как описано выше, поверхностно-активные вещества уменьшают поверхностное натяжение; следовательно, поверхностное натяжение снижается до достижения равновесного значения. Время, необходимое для достижения равновесия, зависит от скорости диффузии и скорости адсорбции поверхностно-активного вещества.

[0088] Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто для соединений формулы (I), может составлять от приблизительно 10,00 мН/м до приблизительно 28,00 мН/м, или от приблизительно 20,00 мН/м до приблизительно 25 мН/м, или от приблизительно 20,00 мН/м до приблизительно 23,00 мН/мм, или число в пределах любого диапазона, определенного между любыми двумя из вышеуказанных значений в качестве конечных точек.

[0089] Один способ, с помощью которого измеряют динамическое поверхностное натяжение, основан на тензиометре давления пузырьков. Это устройство измеряет максимальное внутреннее давление пузырька газа, который образуется в жидкости с помощью капилляра. Измеренное значение соответствует поверхностному натяжению при определенном поверхностном возрасте, времени от начала образования пузырьков до возникновения максимума давления. Зависимость поверхностного натяжения от возраста поверхности может быть измерена путем изменения скорости образования пузырьков.

[0090] Поверхностно-активные соединения также могут быть оценены по их смачивающей способности на твердых подложках, измеренной по углу контакта. Когда

капля жидкости вступает в контакт с твердой поверхностью в третьей среде, такой как воздух, между жидкостью, газом и твердым телом образуется трехфазная линия. Угол между вектором блока поверхностного натяжения, действующим на трехфазную линию и касательной на каплю жидкости, и поверхностью описывается как угол контакта. Угол контакта (также известный как угол смачивания) является мерой смачиваемости твердого вещества жидкостью. В случае полного смачивания жидкость полностью распределяется по твердому веществу, а угол контакта составляет 0° . Свойства смачивания обычно измеряют для данного соединения в концентрации $1-10 \times \text{СМС}$; однако это свойство не является зависимым от концентрации. Следовательно, измерения смачивающих свойств могут быть определены в концентрациях, которые выше или ниже.

[0091] В одном способе для измерения угла контакта может быть использован гониометр угла оптического контакта. Это устройство использует цифровую камеру и программное обеспечение для извлечения угла контакта путем анализа формы контура сидячей капли жидкости на поверхности.

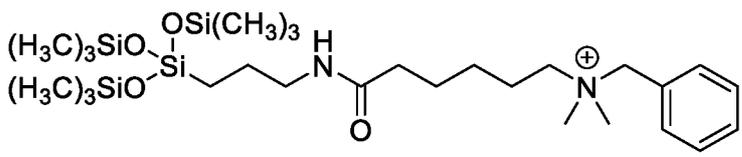
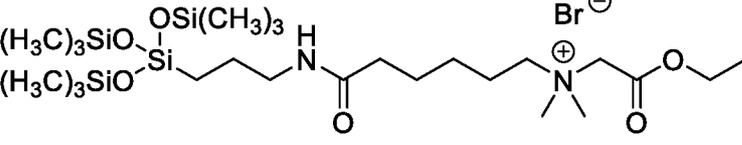
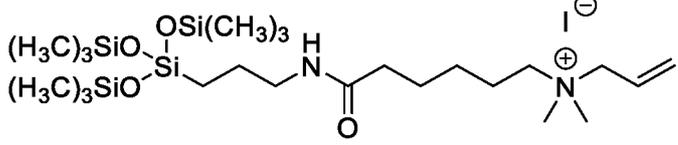
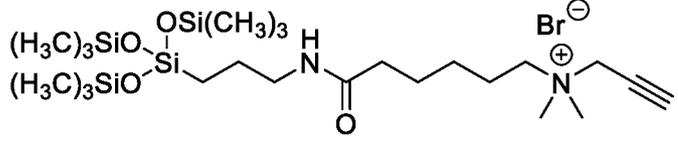
[0092] Потенциальные варианты применения поверхностно-активных соединений по настоящему изобретению включают составы для применения в качестве шампуней, кондиционеров для волос, моющих средств, сухих растворов для ополаскивания, средств для чистки пола и ковров, чистящих средств для удаления граффити, смачивающих средств для защиты растений, вспомогательных веществ для защиты растений и смачивающих средств для аэрозольных покрытий.

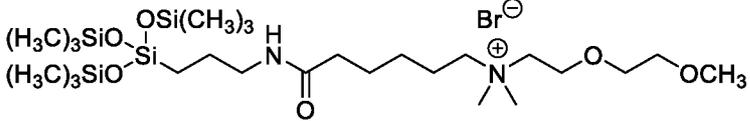
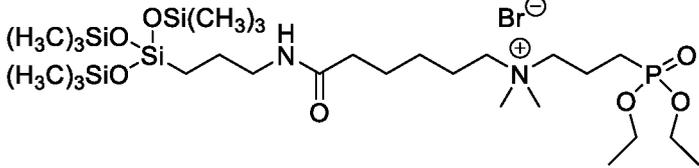
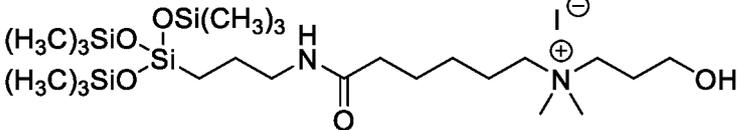
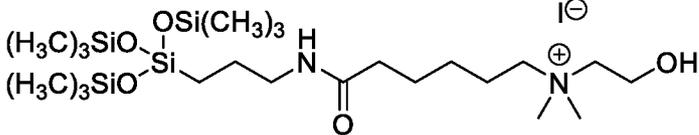
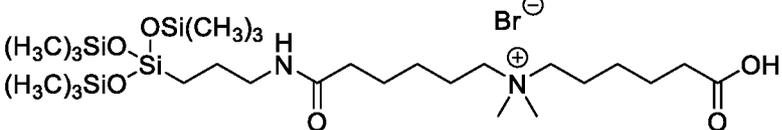
[0093] Специалисту в данной области техники будет понятно, что небольшие различия между соединениями могут приводить к существенно различным поверхностно-активным свойствам, так что различные соединения могут быть использованы с различными субстратами в различных вариантах применения. Специалисту в данной области техники будет дополнительно понятно, что свойства поверхностно-активного вещества могут быть непредсказуемыми на основе химической структуры, как дополнительно продемонстрировано ниже. Например, поверхностно-активные вещества 9a и 9b, которые отличаются только количеством метиленовых групп в R^3 , демонстрируют различные поверхностно-активные свойства. Неожиданно, поверхностно-активное вещество 9b демонстрирует превосходную активность, как описано ниже, в то время как поверхностно-активное вещество 9a демонстрирует более низкие поверхностно-активные свойства.

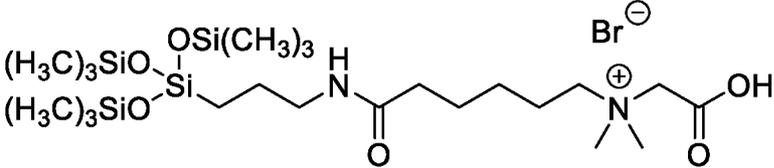
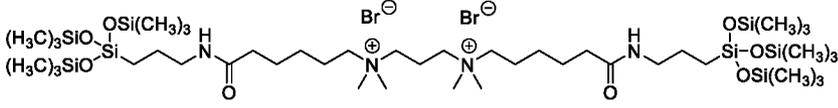
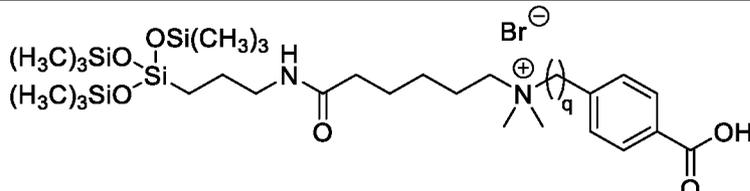
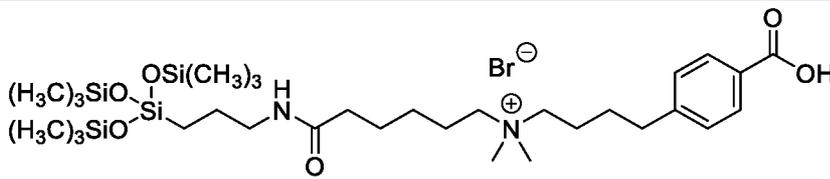
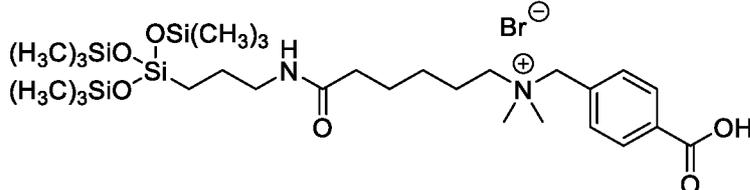
[0094] Следующие неограничивающие варианты осуществления представлены для демонстрации различных свойств различных поверхностно-активных веществ. В таблице 1

ниже короткие названия поверхностно-активных веществ коррелируют с их соответствующими химическими структурами.

ТАБЛИЦА 1

Поверхности о-активное вещество	Формула и название
Поверхностно -активное вещество 1	 <p>N-бензил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид</p>
Поверхностно -активное вещество 2	 <p>N-(2-этоксид-2-оксоэтил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид</p>
Поверхностно -активное вещество 3	 <p>N-аллил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид</p>
Поверхностно -активное вещество 4	 <p>6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксо-N-(проп-2-ин-1-ил)гексан-1-аминийбромид</p>

Поверхности о-активное вещество	Формула и название
Поверхностно -активное вещество 5	 <p>6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-(2-метоксиэтокси)этил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид</p>
Поверхностно -активное вещество 6	 <p>N-(3-(диэтоксифосфорил)пропил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид</p>
Поверхностно -активное вещество 7	 <p>6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(3-гидроксипропил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид</p>
Поверхностно -активное вещество 8	 <p>6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-гидроксиэтил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид</p>
Поверхностно -активное вещество 9а	 <p>6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид</p>

Поверхностно-активное вещество	Формула и название
	N-(5-карбоксивентил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид
Поверхностно-активное вещество 9b	 <p>N-(карбоксиметил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид</p>
Поверхностно-активное вещество 10	 <p>N¹,N³-бис(6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)-N¹,N¹,N³,N³-тетраметилпропан-1,3-диаминийдибромид</p>
Поверхностно-активное вещество 11	
Поверхностно-активное вещество 11a	 <p>N-(4-(4-карбоксифенил)бутил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид</p>
Поверхностно-активное вещество 11b	

Поверхности о-активное вещество	Формула и название
	N-(4-карбоксибензил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид

[0095] Эти соединения могут быть эффективными в качестве поверхностно-активных средств, применимых, среди прочих вариантов применения, для смачивающих или вспенивающих средств, диспергаторов, эмульгаторов и моющих средств.

[0096] Количество соединений, раскрытых в данном документе, применяемых в составе, может составлять только приблизительно 0,001 масс.%, приблизительно 0,05 масс.%, приблизительно 0,1 масс.%, приблизительно 0,5 масс.%, приблизительно 1 масс.%, приблизительно 2 масс.% или приблизительно 5 масс.%, или до приблизительно 8 масс.%, приблизительно 10 масс.%, приблизительно 15 масс.%, приблизительно 20 масс.% или приблизительно 25 масс.%, или число в пределах любого диапазона, определенного между любыми двумя из вышеуказанных значений.

ПРИМЕРЫ

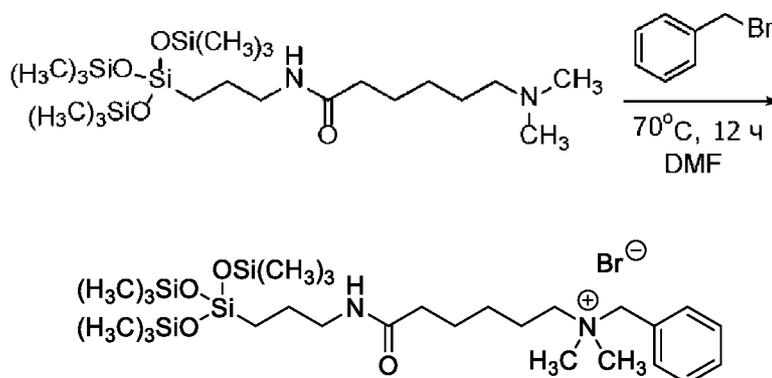
[0097] Спектроскопию ядерного магнитного резонанса (ЯМР) проводили на спектрометре Bruker с частотой 500 МГц. Критическую концентрацию мицелл (СМС) определяли методом смачивания пластин Вильгельми при 23°C с помощью тензиометра (DCAT 11, DataPhysics Instruments GmbH), оснащенного Pt-Ir пластиной. Динамическое поверхностное натяжение определяли с помощью тензиометра давления пузырьков (Krüss BP100, Krüss GmbH), при 23°C. Угол контакта определяли с помощью гониометра угла оптического контакта (OCA 15 Pro, DataPhysics GmbH), оснащенного цифровой камерой.

Пример 1. Синтез 6-(диметиламино)-N-(3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)гексанамида

[0098] 6-(Диметиламино)гексановую кислоту (2,00 г, 12,56 ммоль, 1 экв.) растворяли в толуоле (50 мл) в круглодонной кипящей колбе объемом 100 мл, оснащенной ловушкой Дина-Старка, затем добавляли 3-аминопропилтрис(триметилсилокси)силан (5,48 мл, 13,81 ммоль, 1,1 экв.). Реакционный сосуд нагревали, и реакционную смесь кипятили с

обратным холодильником в течение 24 часов до тех пор, пока в пробирке Дина-Старка не отделялась вода. Растворитель удаляли под вакуумом с получением требуемого силоксанового производного в виде масла желтого цвета с выходом 94%. ^1H ЯМР (500 МГц, DMSO) 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).

Пример 2а. Синтез N-бензил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида (поверхностно-активное вещество 1)



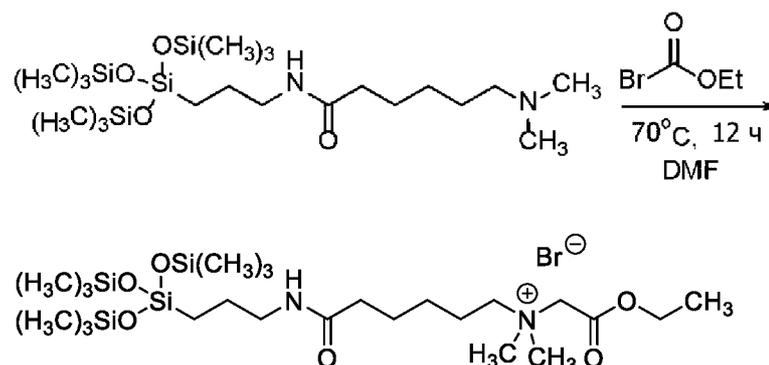
[0099] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1 г, 2,02 ммоль), растворяли в диметилформамиде (DMF) (15 мл). Добавляли бензилбромид (518 мг, 3,03 ммоль) и смесь нагревали до 70°C в течение 12 часов. Растворитель удаляли под вакуумом и неочищенный продукт дважды промывали ацетоном для удаления избытка бензилбромида и получения поверхностно-активного вещества 1 в виде твердого вещества желтого цвета (1,1 г).

Пример 2б. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 1

[0100] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 1. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 9,883 ммоль при значении рН 8. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло около 20,67 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на

поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 1.

Пример 3а. Синтез N-(2-этокси-2-оксоэтил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида (поверхностно-активное вещество 2)

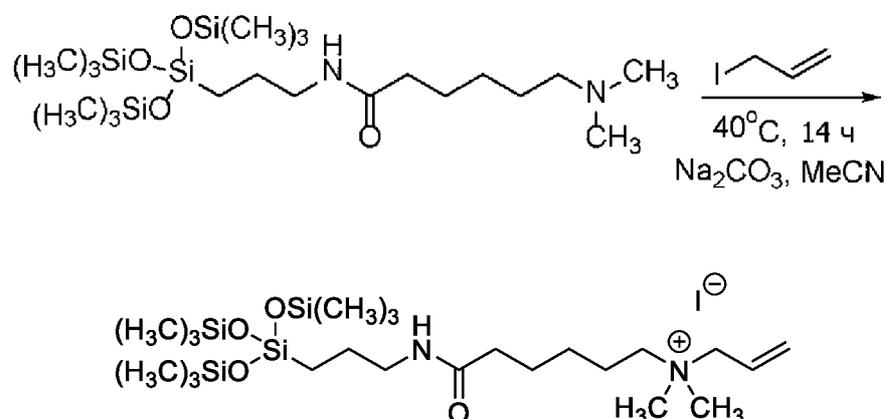


[0101] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1 г, 2,02 ммоль), растворяли в DMF (15 мл) и добавляли этилбромацетат (0,25 мл, 2,4 ммоль). Смесь перемешивали в течение 12 часов при 70°C. Растворитель удаляли под вакуумом, и неочищенный продукт дважды промывали гексаном с получением поверхностно-активного вещества 2 в виде жидкости коричневого цвета (900 мг).

Пример 3б. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 2

[0102] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 2. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,2171 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло около 20,36 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 2.

Пример 4а. Синтез N-аллил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодида (поверхностно-активное вещество 3)

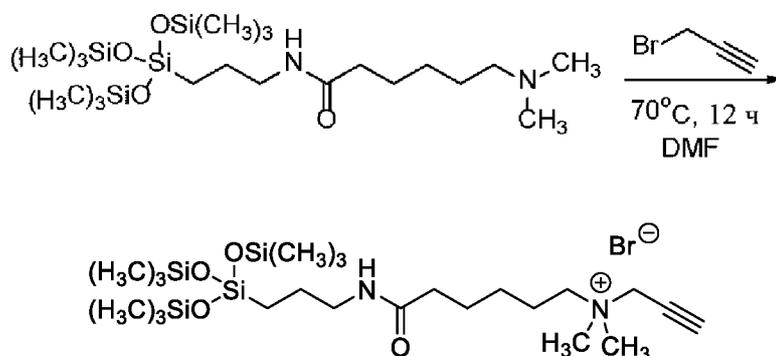


[0103] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), добавляли к ацетонитрилу (10 мл), затем к карбонату натрия (0,26 г), а затем к аллилйодиду (674 мг). Реакционную смесь кипятили с обратным холодильником в течение 14 часов при 40°C . Остаточный карбонат натрия удаляли фильтрованием и фильтрат концентрировали. Неочищенный продукт дважды промывали гексаном для удаления избытка аллилйодида с получением поверхностно-активного вещества 3 в виде жидкости коричневого цвета (850 мг).

Пример 4б. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 3

[0104] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 3. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 1,3599 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 20,67 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 3.

Пример 5а. Синтез 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксо-N-(проп-2-ин-1-ил)гексан-1-аминийбромида
(поверхностно-активное вещество 4)

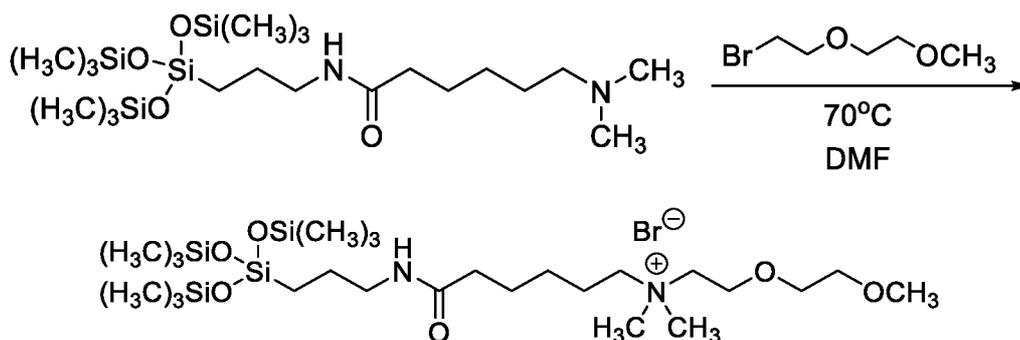


[0105] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), растворяли в диметилформамиде (DMF) (15 мл). Добавляли пропаргилбромид (674 мг, 2,4 ммоль) и смесь перемешивали в течение 12 часов при 70°C. Растворитель удаляли под вакуумом, и неочищенный продукт дважды промывали гексанами с получением поверхностно-активного вещества 4 в виде жидкости коричневого цвета (850 мг).

Пример 5b. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 4

[0106] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 4. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,2419 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 20,54 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 4.

Пример 6а. Синтез 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-(2-метоксиэтокси)этил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида (поверхностно-активное вещество 5)

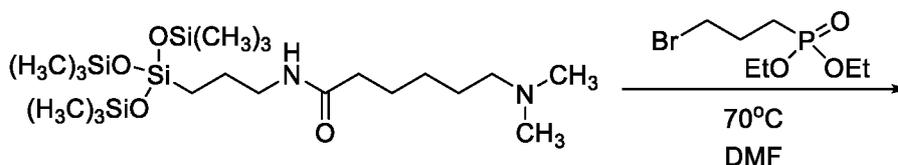


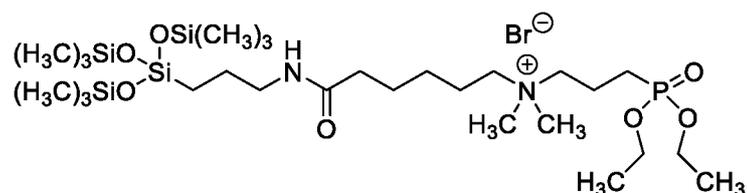
[0107] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), растворяли в диметилформамиде (DMF) (15 мл). Добавляли 1-бром-2-(2-метоксиэтокси)этан (2,4 ммоль) и смесь перемешивали в течение 12 часов при 70°C. Растворитель удаляли под вакуумом, и неочищенный продукт дважды промывали гексанами с получением поверхностно-активного вещества 5 в виде жидкости коричневого цвета (800 мг).

Пример 6b. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 5

[0108] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 5. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,4622 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 20,40 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 5.

Пример 7а. Синтез N-(3-(диэтоксифосфорил)пропил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида (поверхностно-активное вещество 6)



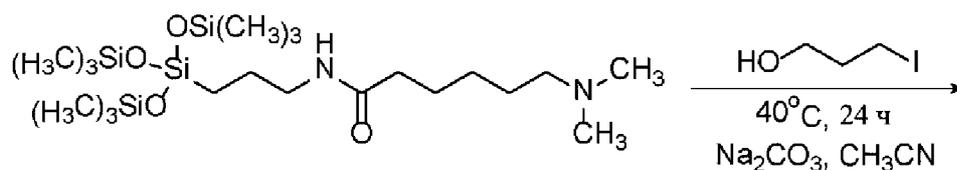


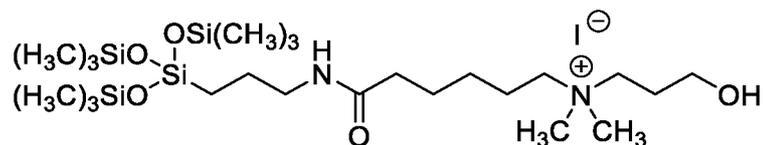
[0109] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), растворяли в диметилформамиде (DMF) (20 мл). Добавляли бромфосфонат (4,04 ммоль) и смесь перемешивали в течение 12 часов при 70°C. Растворитель удаляли под вакуумом, и неочищенный продукт дважды промывали гексанами с получением поверхностно-активного вещества 6 в виде жидкости коричневого цвета (900 мг).

Пример 7b. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 6

[0110] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 6. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,3989 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 20,48 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 6.

Пример 8a. Синтез 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(3-гидроксипропил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийодида (поверхностно-активное вещество 7)



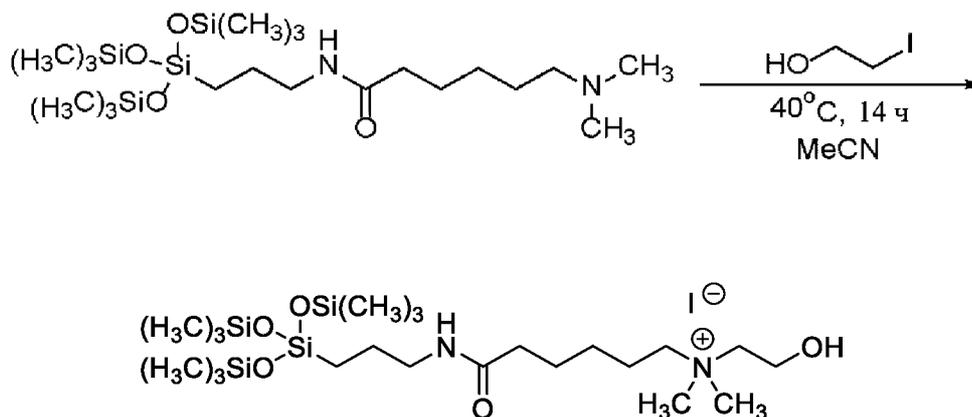


[0111] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), растворяли в ацетонитриле (10 мл). Добавляли карбонат натрия (0,26 г), а затем 3-йодпропанол (674 мг). Смесь перемешивали в течение 24 часов при 40°C. Остаточное основание удаляли фильтрованием и фильтрат концентрировали. Неочищенный продукт дважды промывали гексанами для удаления избытка йодпропанола с получением поверхностно-активного вещества 7 в виде жидкости коричневого цвета (780 мг).

Пример 8b. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 7

[0112] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 7. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,4568 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 20,61 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 7.

Пример 9а. Синтез 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-гидроксиэтил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийиодида (поверхностно-активное вещество 8)

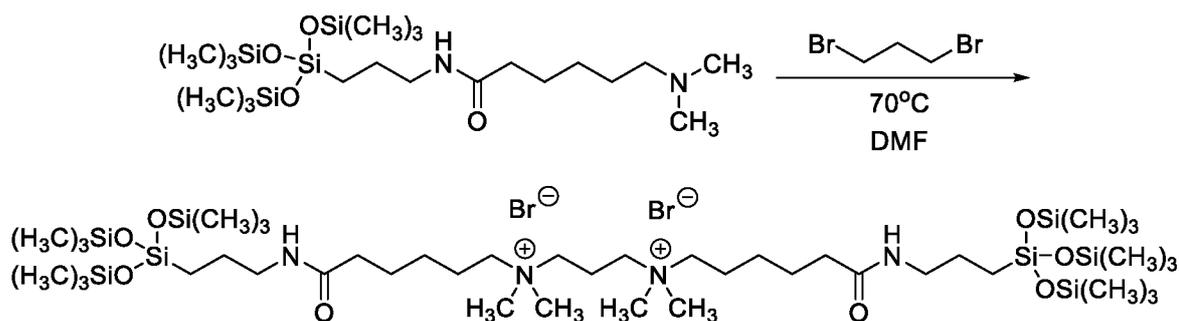


[0113] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), растворяли в ацетонитриле (10 мл). Добавляли 2-йодэтанол (4,04 ммоль) и смесь перемешивали в течение 14 часов при 40°C. Растворитель удаляли, и неочищенный продукт дважды промывали гексанами с получением поверхностно-активного вещества 8 (910 мг).

Пример 9b. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 8

[0114] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 8. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,9986 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 20,41 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет исключительную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 8.

Пример 10а. Синтез N¹,N³-бис(6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)-N¹,N¹,N³,N³-тетраметилпропан-1,3-диаминийдидбромида (поверхностно-активное вещество 10)

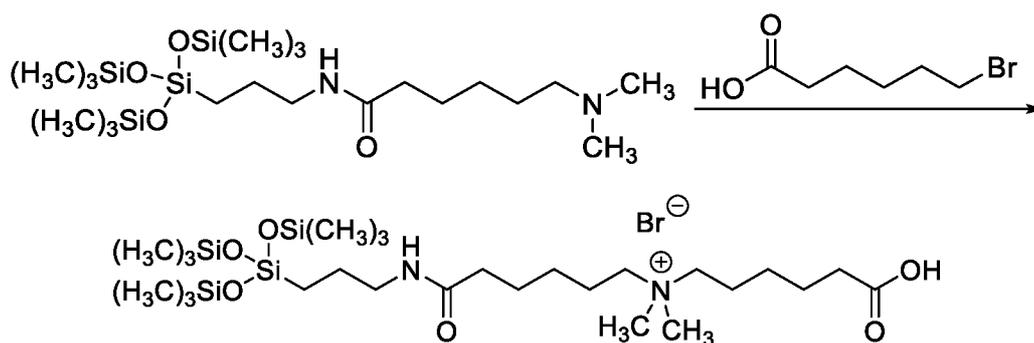


[0115] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), растворяли в диметилформамиде (DMF) (20 мл). Добавляли 1,2-дибромпропан (1 ммоль) и смесь перемешивали в течение 12 часов при 70°C. Растворитель удаляли, и неочищенный продукт дважды промывали гексанами с получением поверхностно-активного вещества 10 в виде жидкости коричневого цвета (900 мг).

Пример 10b. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 10

[0116] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 10. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,0631 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 22,12 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 10.

Пример 11а. Синтез N-(5-карбоксипентил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида (поверхностно-активное вещество 9а)

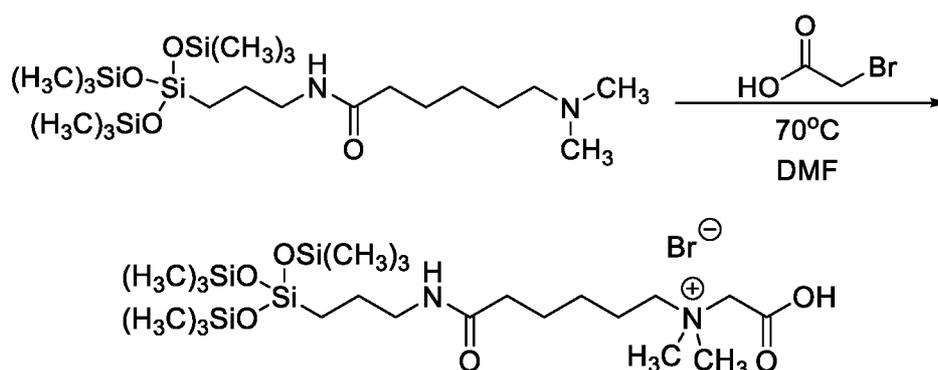


[0117] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1 г, 2,02 ммоль), растворяли в диметилформамиде (DMF) (15 мл) и добавляли 6-бромгексановую кислоту (2,02 ммоль). Смесь перемешивали в течение 12 часов при 70°C, после чего растворитель удаляли под вакуумом. Неочищенный продукт дважды промывали гексаном с получением N-(5-карбоксипентил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида в виде липкой жидкости коричневого цвета (650 мг).

Пример 11b. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 9а

[0118] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 9a. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 0,2237 ммоль. Значение плато минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 20,52 мН/м, что указывает на то, что поверхностно-активное вещество имеет отличную активность на поверхности раздела. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 9a.

Сравнительный пример А1. Синтез N-(карбоксиметил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид (поверхностно-активное вещество 9b)



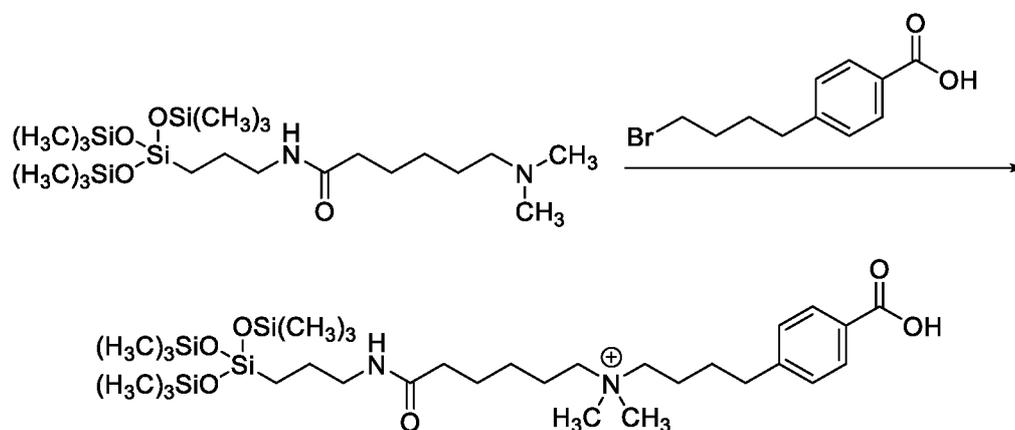
[0119] Силоксановое производное, описанное в примере 1 (1,00 г, 2,02 ммоль), растворяли в диметилформамиде (DMF) (15 мл). Добавляли бромуксусную кислоту (2,02 ммоль) и перемешивали смесь в течение 12 часов при 70°C. Растворитель удаляли, и неочищенный продукт дважды промывали гексанами с получением поверхностно-активного вещества 9b в виде жидкости коричневого цвета (700 мг).

Сравнительный пример А2. Определение физических свойств поверхностно-активного вещества 9b

[0120] Измеряли критическую концентрацию мицелл (СМС) для поверхностно-активного вещества 9b. На основе изменения поверхностного натяжения с концентрацией в воде определяли, что СМС составляет приблизительно 17,28 ммоль. Значение плато

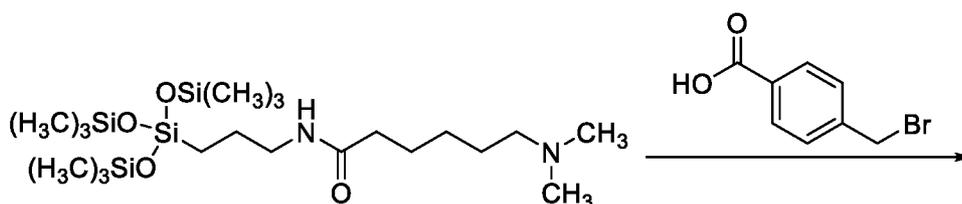
минимального поверхностного натяжения, которое может быть достигнуто этим поверхностно-активным веществом, составляло приблизительно 29,16 мН/м. Эти результаты представлены в виде зависимости поверхностного натяжения от концентрации на фиг. 9. Результаты показывают сложность прогнозирования активности поверхностно-активного вещества на основе химической структуры; поверхностно-активное вещество 9а, которое отличается только количеством метиленовых групп в карбоновой кислоте, проявляет отличную активность.

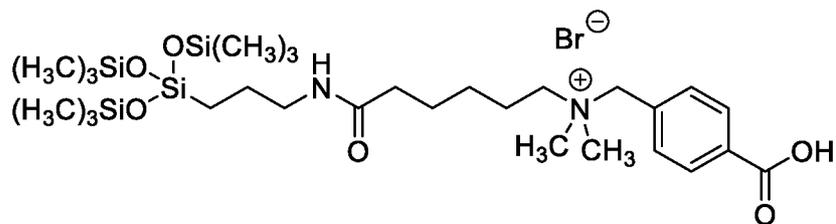
Пример 12. Синтез N-(4-(4-карбоксифенил)бутил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида (поверхностно-активное вещество 11А)



[0121] К силиконовому производному, описанному в примере 1, добавляют 4-(4-бромбутил)бензойную кислоту с получением N-(4-(4-карбоксифенил)бутил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида.

Пример 13. Синтез N-(4-карбоксибензил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида (поверхностно-активное вещество 11b)





[0122] К силоксановому производному, описанному в примере 1, добавляют 4-(бромметил)бензойную кислоту с получением N-(4-карбоксибензил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромида.

АСПЕКТЫ

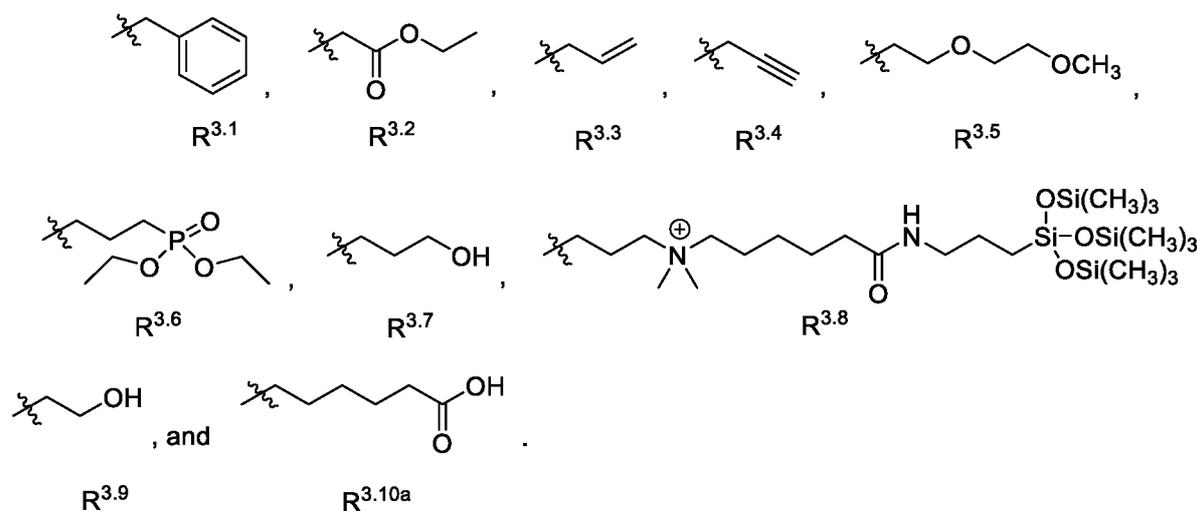
[0123] В аспекте 1 представлено соединение формулы I:



где R^1 и R^2 являются одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, необязательно C_1 - C_6 алкил может содержать один или более атомов кислорода, азота или серы или групп, которые содержат по меньшей мере один из этих атомов, и алкильная цепь может быть необязательно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата; R^3 выбран из группы, состоящей из алкенила, алкинила, сложного эфира, спирта, арилалкила, алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_{10} алкилбензойной кислоты и C_1 - C_6 линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же или другой; n представляет собой целое число от 1 до 12; и X выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и йодида.

[0124] В аспекте 2 представлено соединение по аспекту 1, где R^3 выбран из группы, состоящей из C_2 - C_{10} алкенила, C_2 - C_{10} алкинила, C_2 - C_{12} сложного эфира, C_1 - C_{10} гидроксила, бензила, C_2 - C_{12} алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_{10} алкилбензойной кислоты и трехуглеродного линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же, как и первая молекула.

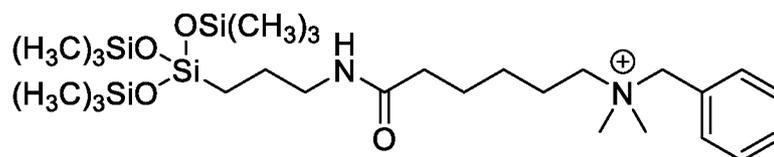
[0125] В аспекте 3 представлено соединение либо по аспекту 1, либо аспекту 2, где R^3 выбран из формул, состоящих из:



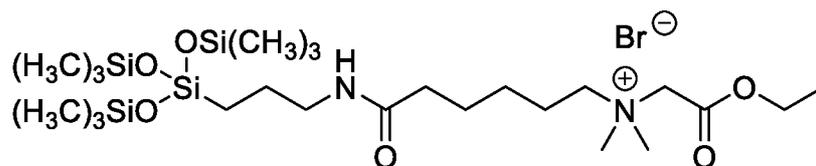
[0126] В аспекте 4 представлено соединение по любому из аспектов 1-3, где R^1 и R^2 представляют собой метил.

[0127] В аспекте 5 представлено соединение по любому из аспектов 1-4, где n равно 5.

[0128] В аспекте 6 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой N-бензил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

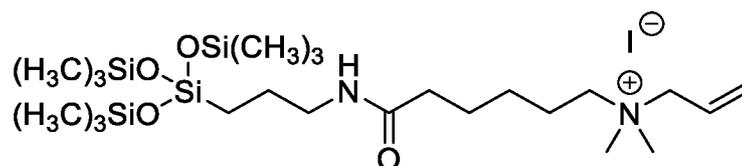


[0129] В аспекте 7 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой N-(2-этокси-2-оксоэтил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

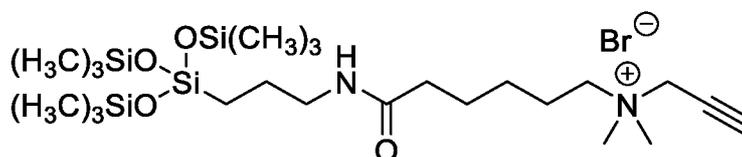


[0130] В аспекте 8 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой N-аллил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-

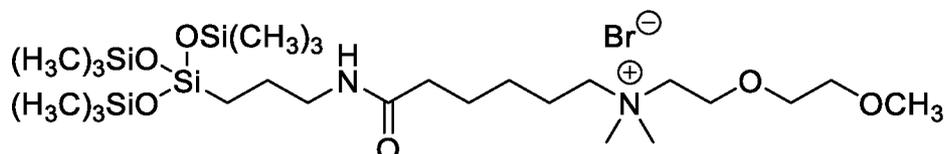
((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



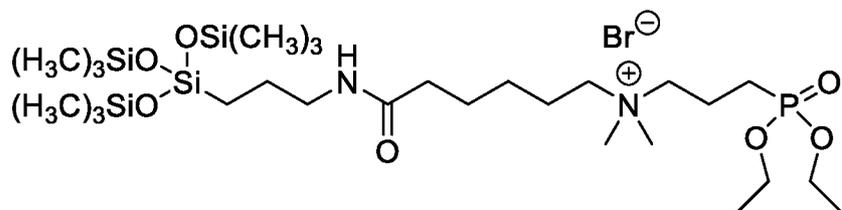
[0131] В аспекте 9 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксо-N-(проп-2-ин-1-ил)гексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



[0132] В аспекте 10 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-(2-метоксиэтокси)этил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

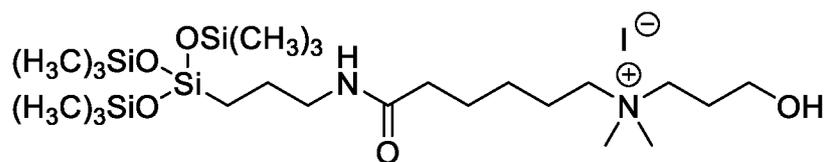


[0133] В аспекте 11 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой N-(3-(диэтоксифосфорил)пропил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:

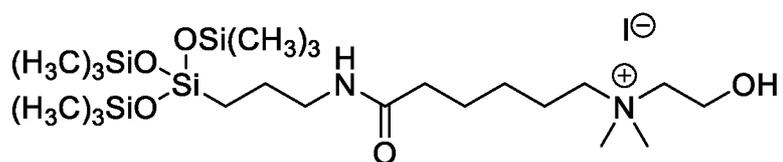


[0134] В аспекте 12 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-

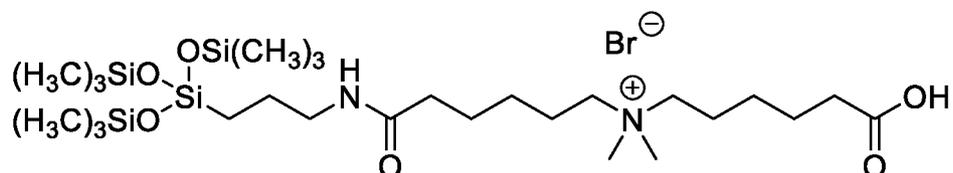
((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(3-гидроксипропил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



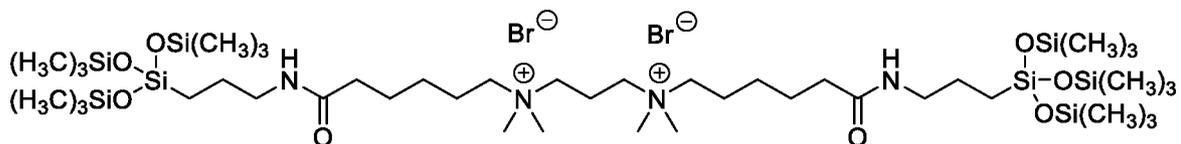
[0135] В аспекте 13 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-гидроксиэтил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



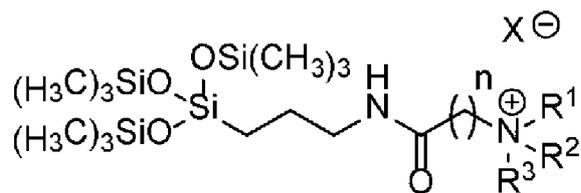
[0136] В аспекте 14 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой N-(5-карбокспентил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



[0137] В аспекте 15 представлено соединение по любому из аспектов 1-5, где соединение представляет собой N¹,N³-бис(6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)-N¹,N¹,N³,N³-тетраметилпропан-1,3-диаминийдибромид, имеющий формулу:



[0138] В аспекте 16 представлен способ синтеза соединения формулы I



Формула I

где R^1 и R^2 являются одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, необязательно C_1 - C_6 алкил может содержать один или более атомов кислорода, азота или серы или групп, которые содержат по меньшей мере один из этих атомов, и алкильная цепь может быть необязательно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата; R^3 выбран из группы, состоящей из алкенила, алкинила, сложного эфира, спирта, арилалкила, алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_{10} алкилбензойной кислоты и линкера C_1 - C_6 , присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же или другой; n представляет собой целое число от 1 до 12; и X выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и йодида, причем способ включает: стадию раскрытия кольца для раскрытия лактамного кольца с получением аминокислоты, имеющей N-конец и C-конец; первую стадию алкилирования для алкилирования N-конца с получением третичного амина; стадию связывания для вступления в реакцию C-конца с 3-аминопропилтрис(триметилсилокси)силаном с получением силоксанового производного; и вторую стадию алкилирования для алкилирования N-конца с получением четвертичного амина формулы I.

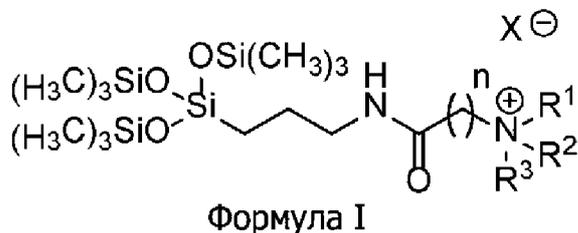
[0139] В аспекте 17 представлен способ по аспекту 16, где лактам представляет собой капролактam.

[0140] В аспекте 18 представлен способ по аспекту 16 или аспекту 17, где на первой стадии алкилирования третичный амин представляет собой 6-(диметиламино)гексановую кислоту.

[0141] В аспекте 19 представлен способ по любому из аспектов 16-18, где на второй стадии алкилирования N-конец алкилируют алкилирующим средством, выбранным из группы, состоящей из бензилбромида, этилбромацетата, аллилйодида, пропаргилбромида, 1-бром-2-(2-метоксиэтокси)этана, бромфосфоната, 3-йодпропанола, 3-бромпропанола, 2-йодэтанола, 2-бромэтанола, 6-бромгексановой кислоты и 1,3-дибромпропана.

ФОРМУЛА ИЗОБРЕТЕНИЯ

1. Соединение формулы I:



где R^1 и R^2 являются одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C_1 - C_6 алкила, необязательно C_1 - C_6 алкил может содержать один или более атомов кислорода, азота или серы или групп, которые содержат по меньшей мере один из этих атомов, и алкильная цепь может быть необязательно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонил, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

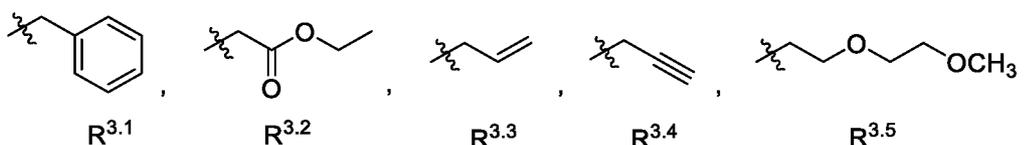
R^3 выбран из группы, состоящей из алкенила, алкинила, сложного эфира, спирта, арилалкила, алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_{10} алкилбензойной кислоты и C_1 - C_6 линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же или другой;

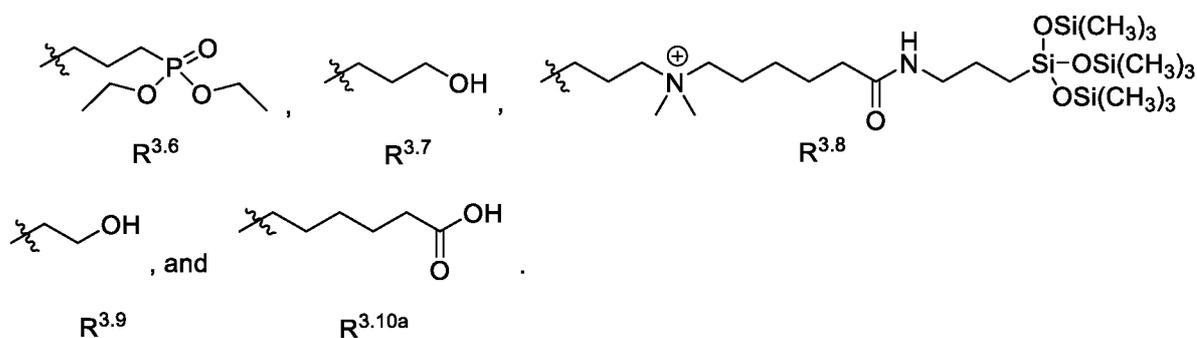
n представляет собой целое число от 1 до 12; и

X выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и йодида.

2. Соединение по п. 1, где R^3 выбран из группы, состоящей из C_2 - C_{10} алкенила, C_2 - C_{10} алкинила, C_2 - C_{12} сложного эфира, C_1 - C_{10} гидроксила, бензила, C_2 - C_{12} алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_{10} алкилбензойной кислоты и трехуглеродного линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же, как и первая молекула.

3. Соединение по п. 1 или п. 2, где R^3 выбран из формул, состоящих из:

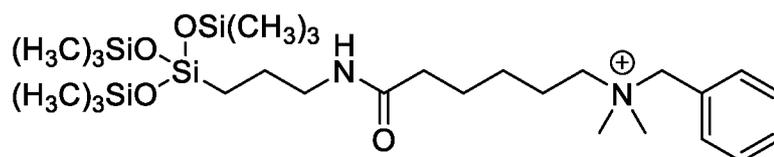




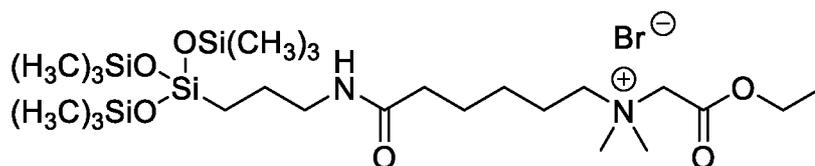
4. Соединение по любому из пп. 1-3, где R^1 и R^2 представляют собой метил.

5. Соединение по любому из пп. 1-4, где n равно 5.

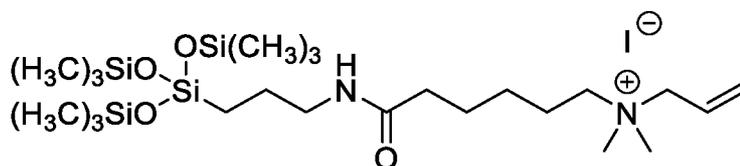
6. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой N-бензил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



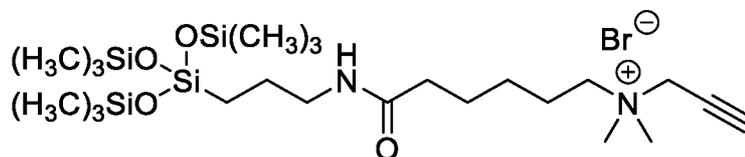
7. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой N-(2-этокси-2-оксоэтил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



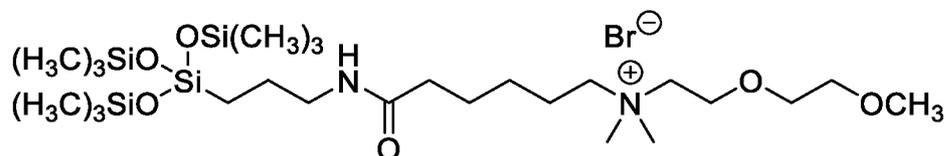
8. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой N-аллил-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



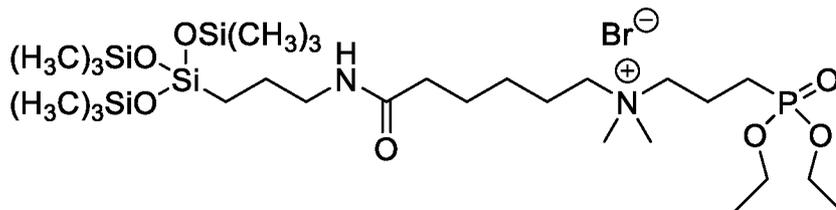
9. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксо-N-(проп-2-ин-1-ил)гексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



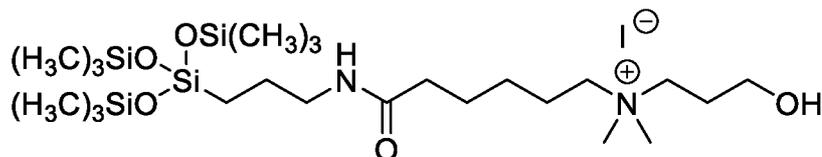
10. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-(2-метоксиэтокси)этил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



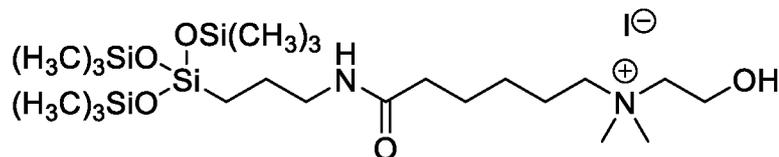
11. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой N-(3-(диэтоксифосфорил)пропил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



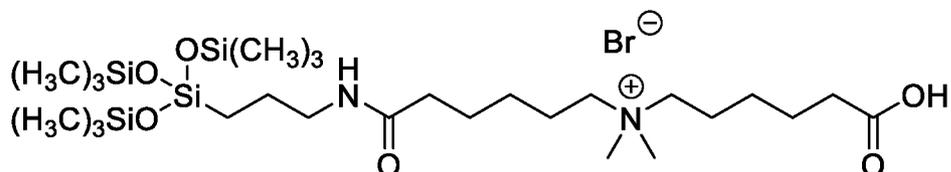
12. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(3-гидроксипропил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



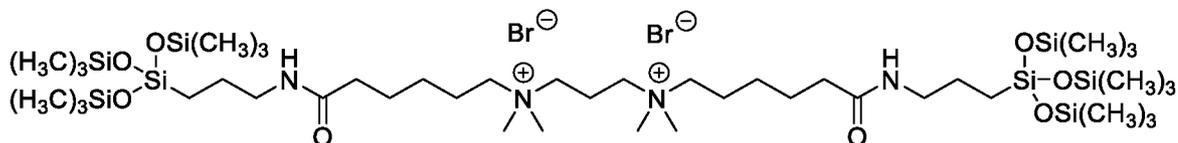
13. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой 6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N-(2-гидроксиэтил)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминиййодид, имеющий следующую формулу:



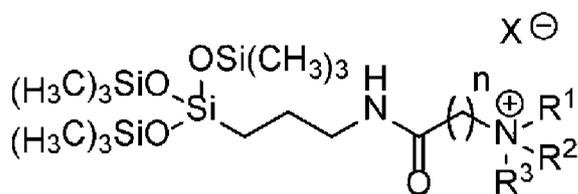
14. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой N-(5-карбоксипентил)-6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-N,N-диметил-6-оксогексан-1-аминийбромид, имеющий следующую формулу:



15. Соединение по любому из пп. 1-5, где соединение представляет собой N¹,N³-бис(6-((3-(1,1,1,5,5,5-гексаметил-3-((триметилсилил)окси)трисилоксан-3-ил)пропил)амино)-6-оксогексил)-N¹,N¹,N³,N³-тетраметилпропан-1,3-диаминийдидбромид, имеющий формулу:



16. Способ синтеза соединения формулы I



Формула I

где R¹ и R² являются одинаковыми или разными и содержат по меньшей мере одну группу, выбранную из группы, состоящей из C₁-C₆ алкила, необязательно C₁-C₆ алкил может содержать один или более атомов кислорода, азота или серы или групп, которые содержат по меньшей мере один из этих атомов, и алкильная цепь может быть

необязательно замещена одним или более заместителями, выбранными из группы, состоящей из гидроксила, амина, амидо, сульфонила, сульфоната, карбонила, карбоксила и карбоксилата;

R^3 выбран из группы, состоящей из алкенила, алкинила, сложного эфира, спирта, арилалкила, алкоксиалкилового эфира, алкилфосфата, C_3 - C_8 карбоновой кислоты, C_1 - C_{10} алкилбензойной кислоты и C_1 - C_6 линкера, присоединенного ко второй молекуле формулы I, где вторая молекула является такой же или другой;

n представляет собой целое число от 1 до 12; и

X выбран из группы, состоящей из хлорида, бромида и йодида, при этом способ включает: стадию раскрытия кольца для раскрытия лактамного кольца с получением аминокислоты, имеющей N-конец и C-конец;

первую стадию алкилирования для алкилирования N-конца с получением третичного амина;

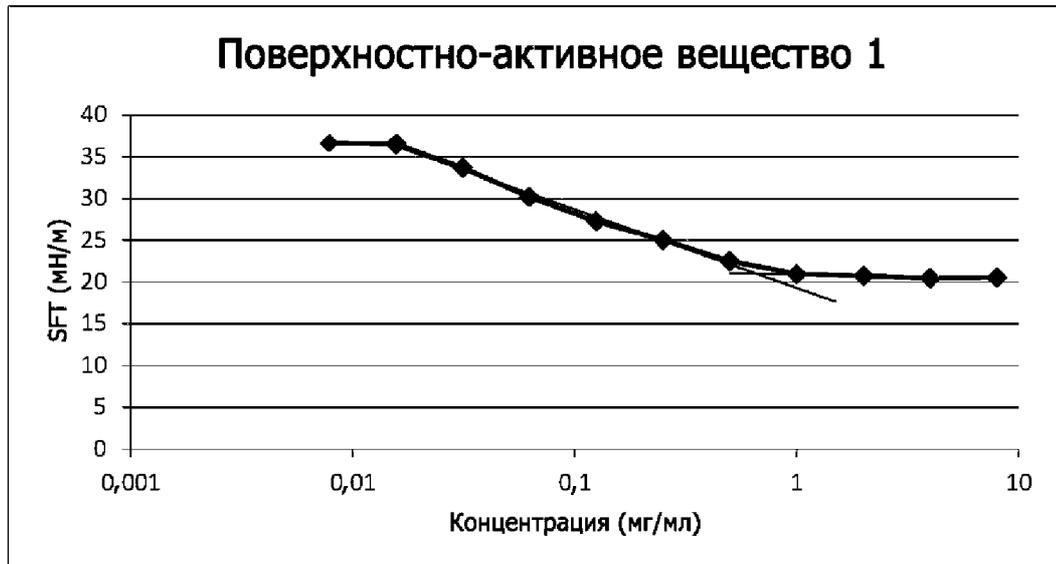
стадию связывания для вступления в реакцию C-конца с 3-аминопропилтрис(триметилсилокси)силаном с получением силоксанового производного; и

вторую стадию алкилирования для алкилирования N-конца с получением четвертичного амина формулы I.

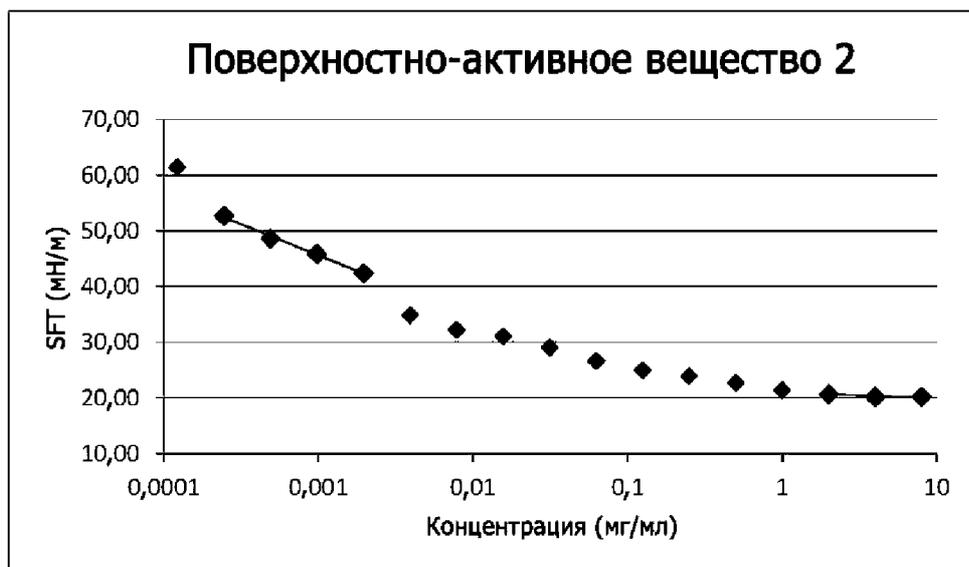
17. Способ по п. 16, где лактам представляет собой капролактam.

18. Способ по п. 16 или п. 17, где на первой стадии алкилирования третичный амин представляет собой 6-(диметиламино)гексановую кислоту.

19. Способ по любому из пп. 16-18, где на второй стадии алкилирования N-конец алкилируют алкилирующим средством, выбранным из группы, состоящей из бензилбромида, этилбромацетата, аллилийодида, пропаргилбромида, 1-бром-2-(2-метоксиэтокси)этана, бромфосфоната, 3-йодпропанола, 3-бромпропанола, 2-йодэтанола, 2-бромэтанола, 6-бромгексановой кислоты и 1,3-дибромпропана.



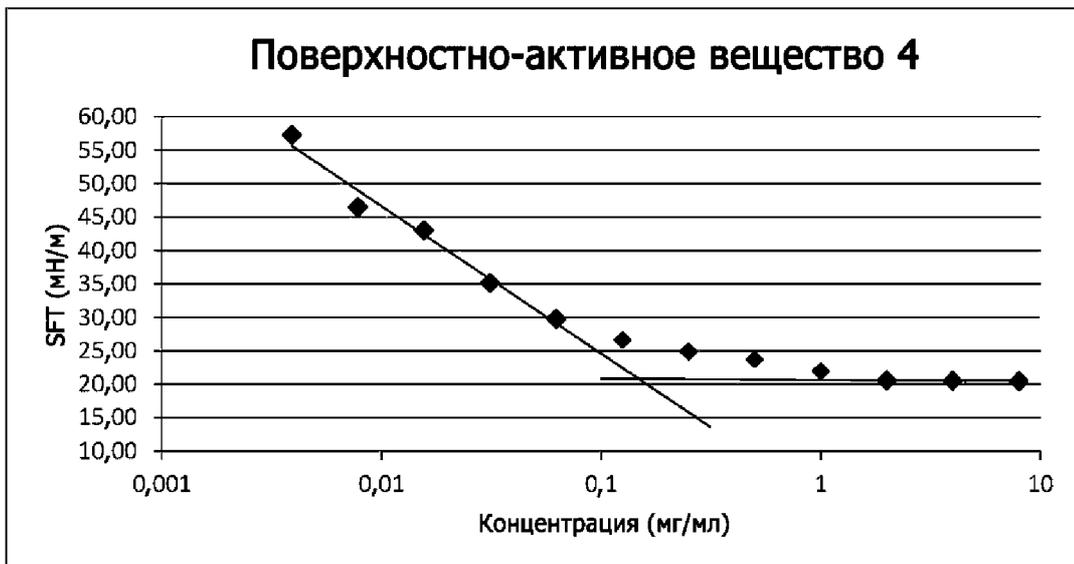
ФИГ. 1



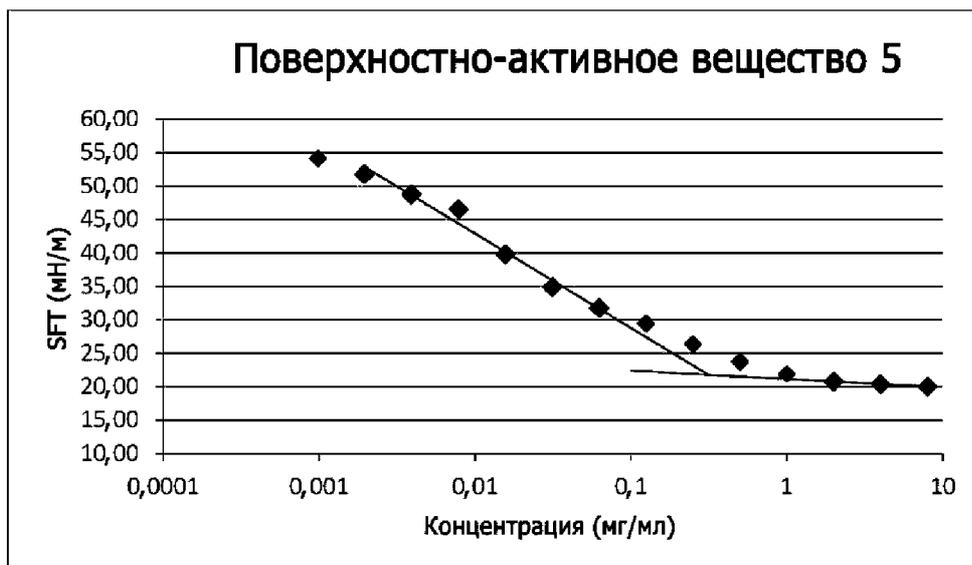
ФИГ. 2



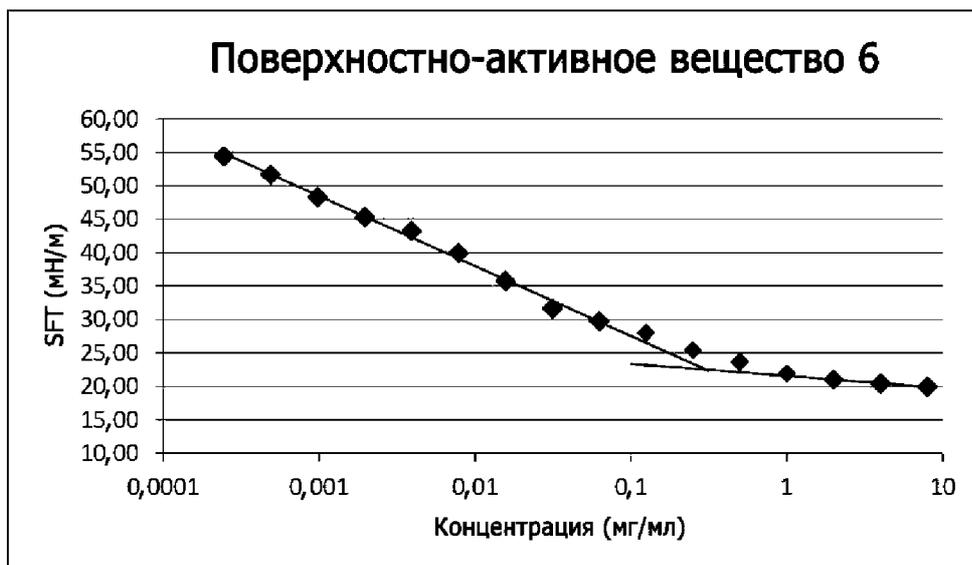
ФИГ. 3



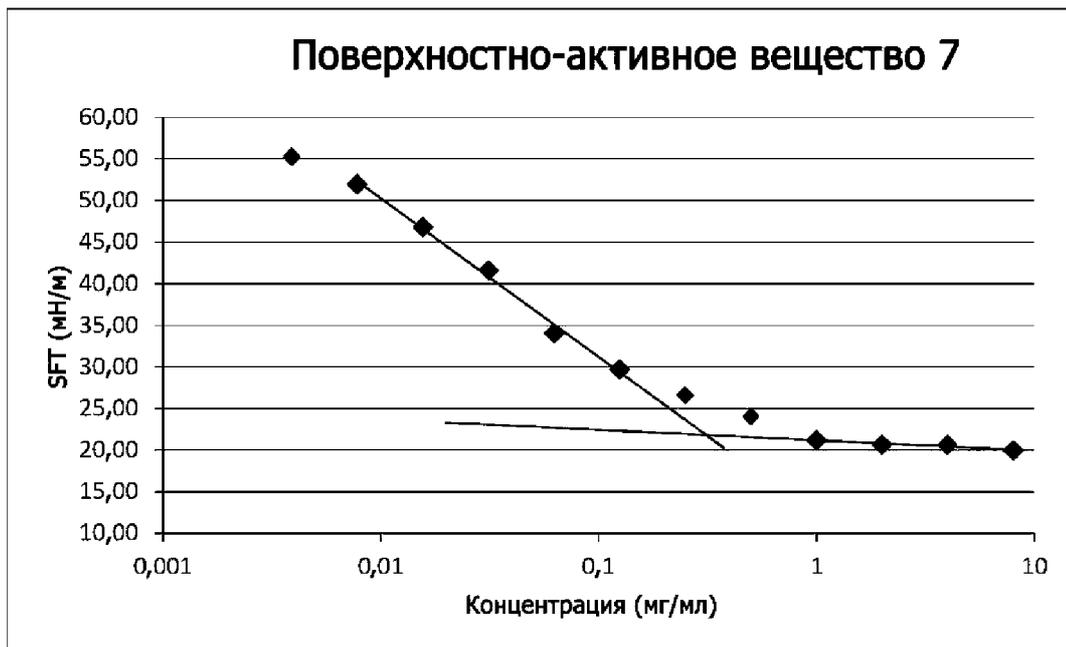
ФИГ. 4



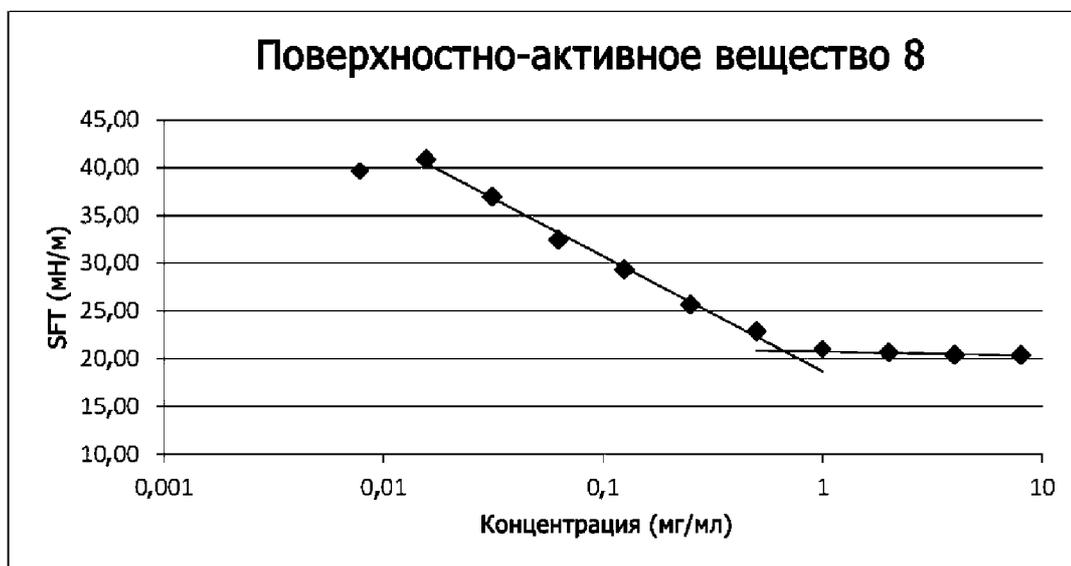
ФИГ. 5



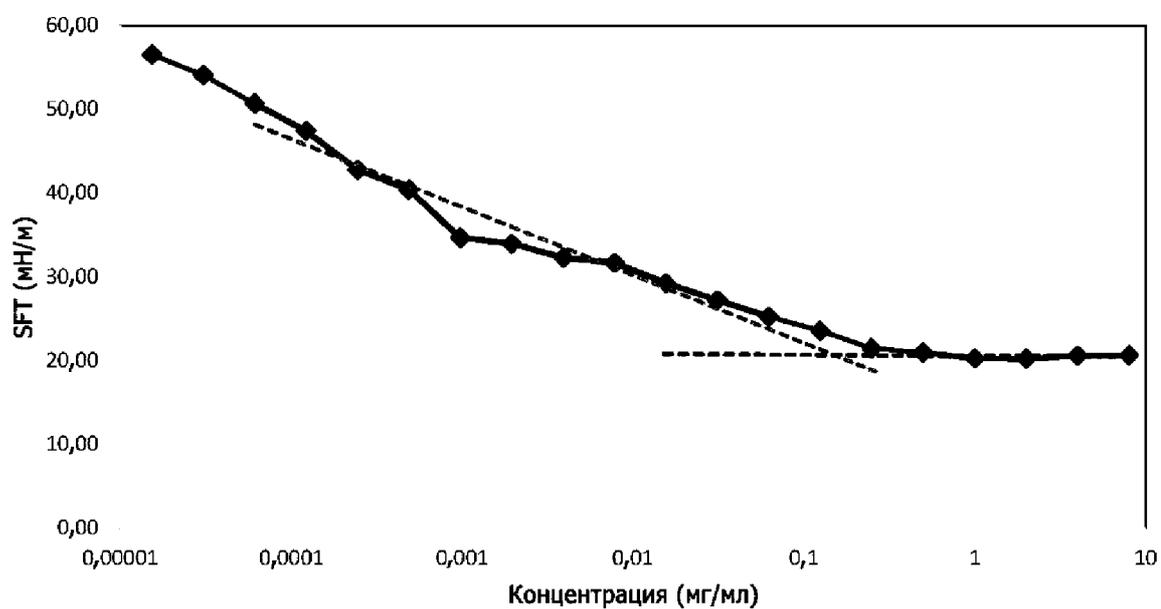
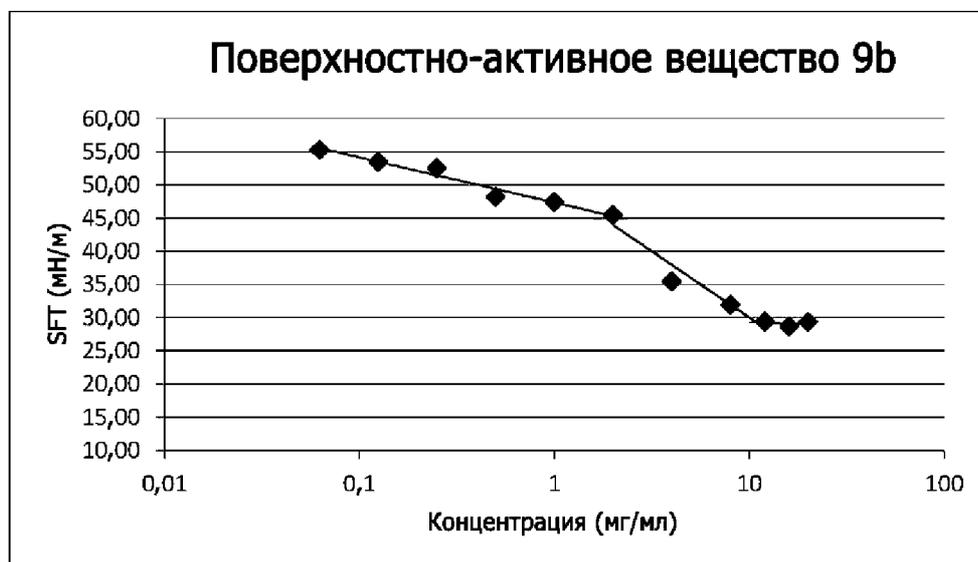
ФИГ. 6

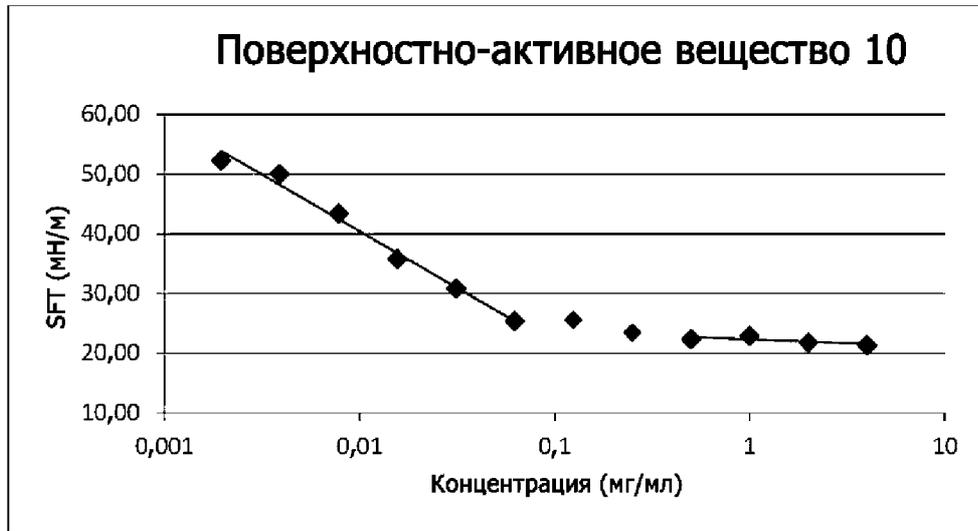


ФИГ. 7



ФИГ. 8

Поверхностно-активное вещество 9a**ФИГ. 9a****ФИГ. 9b**

**ФИГ.10**