

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 653 672**

51 Int. Cl.:

<b>C08G 18/70</b>	(2006.01)
<b>C08G 18/73</b>	(2006.01)
<b>C08G 18/75</b>	(2006.01)
<b>C08G 18/78</b>	(2006.01)
<b>C08G 18/79</b>	(2006.01)
<b>C08G 18/28</b>	(2006.01)
<b>C08G 18/32</b>	(2006.01)
<b>C08G 18/36</b>	(2006.01)
<b>D06M 15/564</b>	(2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **28.03.2014 PCT/US2014/032095**
- 87 Fecha y número de publicación internacional: **02.10.2014 WO14160905**
- 96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **28.03.2014 E 14718888 (2)**
- 97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **01.11.2017 EP 2978788**

54 Título: **Revestimientos basados en uretano no fluorado**

30 Prioridad:

**29.03.2013 US 201361806465 P**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

**08.02.2018**

73 Titular/es:

**THE CHEMOURS COMPANY FC, LLC (100.0%)  
1007 Market Street  
Wilmington DE 19801, US**

72 Inventor/es:

**SWOREN, JOHN, CHRISTOPHER;  
BROWN, GERALD, ORONDE;  
VINCENZINI, MARIO y  
SPARSOE, FLEMMING, VANG**

74 Agente/Representante:

**ELZABURU, S.L.P**

ES 2 653 672 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

**DESCRIPCIÓN**

Revestimientos basados en uretano no fluorado

**Campo de la invención**

5 Esta invención se refiere a una composición que comprende un compuesto orgánico de uretano útil para impartir repelencia durable al agua y opcionalmente eliminación de manchas a materiales textiles, el compuesto derivado de isocianatos y compuestos orgánicos de origen biológico tales como sorbitanos, citratos y pentaeritrioles.

**Antecedentes de la invención**

10 Se sabe que diversas composiciones son útiles como agentes de tratamiento para proporcionar repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos textiles. Muchos de estos agentes de tratamiento son polímeros y copolímeros fluorados o polímeros y copolímeros no fluorados. Los compuestos no fluorados son copolímeros predominantemente basados en poliacrilato o basados en uretano.

15 Los copolímeros fluorados proporcionan buena repelencia al agua y el aceite. Se han realizado diversos intentos de producir un repelente al agua no fluorado. Se sabe que los copolímeros no fluorados proporcionan repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a materiales textiles, pero son menos eficaces que los homólogos fluorados.

Moore, en la Patente de EE. UU. N° 6.864.312, divulga un polímero de poliuretano que proporcionan resistencia a la humedad. Moore reivindica dispersiones de partículas de polímero de poliuretano, donde los polímeros de poliuretano son prepolímeros terminados en isocianato preparados a partir de una formulación que incluye un poliisocianato y un polioli.

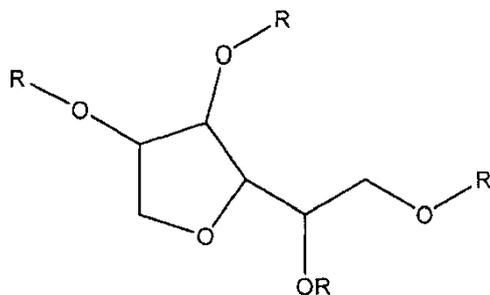
**20 Compendio de la invención**

Existe la necesidad de compuestos no fluorados que proporcionen repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas para materiales textiles, con resultados de comportamiento comparables a los agentes de tratamiento fluorados. También es deseable un compuesto no fluorado que pueda ser de origen biológico. La presente invención satisface estas necesidades.

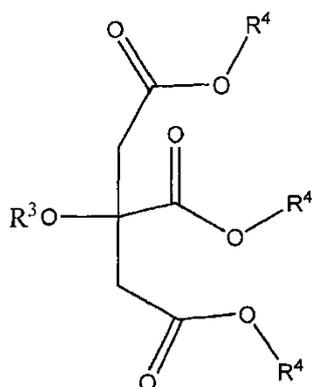
25 La presente invención comprende un compuesto orgánico de uretano no fluorado útil para impartir repelencia durable al agua y opcionalmente eliminación de manchas a materiales textiles, el copolímero derivado de sorbitanos e isocianatos orgánicos biológicos. Estos uretanos no fluorados proporcionan repelencia durable al agua y opcionalmente eliminación de manchas a materiales textiles y son comparables a varios compuestos fluorados repelentes de agua.

30 La presente invención comprende una composición que comprende una dispersión acuosa de un compuesto que no tiene grupos isocianato sin reaccionar para impartir repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos, en donde el compuesto se prepara mediante el procedimiento que comprende:

35 (i) hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib):



(Ia)



(Ib)

en las que cada R es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n es independientemente de 0 a 20;

5 cada m es independientemente de 0 a 20;

m+n es mayor que 0;

cada R<sup>1</sup> es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

10 cada R<sup>2</sup> es independientemente -H o un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

o mezclas de los mismos,

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ia) entonces al menos uno de R o R<sup>2</sup> sea -H;

cada R<sup>3</sup> es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

15 cada R<sup>4</sup> es independientemente -H, un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado, o combinaciones de los mismos; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n' es independientemente de 0 a 20;

cada m' es independientemente de 0 a 20;

20 m'+n' es mayor que 0;

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ib), entonces el compuesto esté monosustituido, disustituido o trisustituido con grupos alquilo y al menos un R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> o R<sup>4</sup> sea un -H.

El compuesto puede comprender además reaccionantes adicionales tales como un segundo compuesto orgánico y/o agua. El agua se puede usar para reticular isocianatos sin reaccionar para crear enlaces urea.

25 En una segunda realización, la presente invención es un método para preparar una composición de comprende: (i) hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib).

30 En una tercera realización, la presente invención es un método para tratar un sustrato fibroso que comprende aplicar a la superficie del sustrato un uretano orgánico no fluorado según se describe anteriormente.

En una cuarta realización, la presente invención es un sustrato fibroso que tiene aplicado en su superficie un compuesto o una composición como los divulgados anteriormente.

### Descripción detallada de la invención

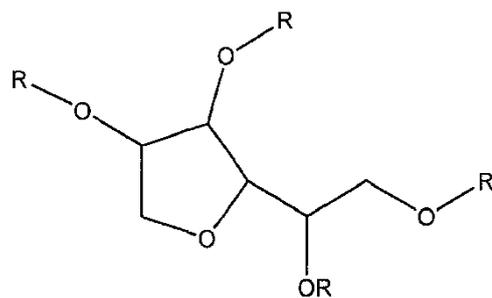
En la presente memoria, todas las marcas registradas se indican con mayúsculas.

35 La presente invención proporciona un compuesto para impartir repelencia al agua y opcionalmente eliminación de

manchas a sustratos fibrosos. Los compuestos resultantes proporcionan un comportamiento mejorado y durabilidad de repelencia al agua a sustratos tratados en comparación con agentes de tratamiento disponibles comercialmente no fluorados tradicionales. Las materias primas de la presente invención se pueden derivar de materiales de origen biológico.

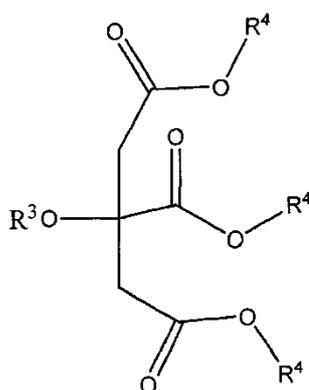
- 5 La presente invención comprende un compuesto para impartir repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos, en donde el compuesto se prepara mediante el procedimiento que comprende:

(i) hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianatos seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib):



(Ia)

10



(Ib)

en las que cada R es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n es independientemente de 0 a 20;

- 15 cada m es independientemente de 0 a 20;

m+n es mayor que 0;

cada R<sup>1</sup> es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

- 20 cada R<sup>2</sup> es independientemente -H, o un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

o mezclas de los mismos,

con la condición de que cuando el compuesto sea de Fórmula (Ia) entonces al menos uno de R o R<sup>2</sup> sea -H;

cada R<sup>3</sup> es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

- 25 cada R<sup>4</sup> es independientemente -H, un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado, o combinaciones de los mismos; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n' es independientemente de 0 a 20;

cada m' es independientemente de 0 a 20;

$m'+n'$  es mayor que 0;

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ib), entonces el compuesto esté monosustituido, disustituido o trisustituido con grupos alquilo y al menos un  $R^2$ ,  $R^3$  o  $R^4$  sea un -H.

5 Para compuestos de Fórmula (Ia) o (Ib), el  $-(CH_2CH_2O)-$  representa grupos oxietileno (EO) y  $-(CH(CH_3)CH_2O)-$  representa grupos oxipropileno (PO). Estos compuestos pueden contener solamente grupos EO, solamente grupos PO o mezclas de los mismos. Estos compuestos también pueden estar presentes como un copolímero de tres bloques denominado PEG-PPG-PEG (polietilenglicol-polipropilenglicol-polietilenglicol), por ejemplo.

10 En una realización, un compuesto para impartir repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos se prepara al: (i) hacer reaccionar (a) al menos un isocianato, diisocianato, poliisocianato que contiene grupos isocianato, o una mezcla de los mismos, y compuestos de Fórmula (Ia). Los compuestos de Fórmula (Ia) en la que al menos uno de R es -H y al menos un R se selecciona de  $-C(O)R^1$  se conocen comúnmente como alquilsorbitanos. Estos sorbitanos pueden estar monosustituidos, disustituidos o trisustituidos con  $-C(O)R^1$ . Se sabe que los sorbitanos disponibles comercialmente, tales como SPAN, contienen una mezcla de los diversos sorbitanos que varía desde cuando cada R es H (no sustituido) y sorbitanos en los que cada R es  $-C(O)R^1$  (totalmente sustituidos); en donde  $R^1$  es un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos; y mezclas de diversas sustituciones de los mismos. Los sorbitanos disponibles comercialmente también pueden incluir cantidades de sorbitol, isosórbido u otros productos intermedios o subproductos.

20 En una realización preferida, al menos un R es  $-C(O)R^1$ , y  $R^1$  es un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos, más preferiblemente de 7 a 21 carbonos, y lo más preferiblemente de 11 a 21 carbonos. Compuestos preferidos incluyen sorbitanos mono-, di- y trisustituidos derivados de ácido caprílico, ácido cáprico, ácido láurico, ácido mirístico, ácido palmítico, ácido esteárico, ácido araquídico, ácido behénico, ácido lignocérico y mezclas de los mismos. Compuestos particularmente preferidos incluyen estearatos de sorbitano o sorbitanobeheninas mono-, di- y trisustituidos.

25 Opcionalmente,  $R^1$  es un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende al menos 1 enlace insaturado. Ejemplos de compuestos de Fórmula (Ia) en la que al menos un R se selecciona de  $-C(O)R^1$  y  $R^1$  contiene al menos 1 enlace insaturado incluyen, pero no se limitan a, trioleato de sorbitano (es decir, en donde  $R^1$  es  $-C_7H_{14}CH=CHC_8H_{17}$ ). Otros ejemplos incluyen, pero no se limitan a, sorbitanos mono-, di- y trisustituidos derivados de ácido palmítico, ácido linoleico, ácido araquidónico y ácido erúrico.

30 En una realización, se emplea un compuesto de Fórmula (Ia), en la que al menos un R es independientemente  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ . Compuestos de Fórmula (Ia), en la que al menos un R es  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ , en donde cada m es independientemente de 0 a 20, cada n es independientemente de 0 a 20 y  $n+m$  es mayor que 0 se conocen como polisorbatos y están disponibles comercialmente bajo el nombre comercial TWEEN. Estos polisorbatos pueden estar monosustituidos, disustituidos o trisustituidos con grupos alquilo  $R^1$  o  $R^2$ . Se sabe que los polisorbatos disponibles comercialmente contienen una mezcla de los diversos polisorbatos que varía desde cuando cada  $R^2$  es H (no sustituidos) y polisorbatos en los que cada  $R^1$  es un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos (totalmente sustituidos); y mezclas de diversas sustituciones de los mismos. Ejemplos de compuestos de Fórmula (Ia) incluyen polisorbatos tales como triestearato de polisorbato y monoestearato de polisorbato. Ejemplos de compuestos de Fórmula (Ia) en los que  $m+n$  es mayor que 0 y en los que  $R^1$  comprende al menos 1 enlace insaturado incluyen, pero no se limitan a, trioleato de polisorbato (en el que  $R^1$  es  $C_7H_{14}CH=CHC_8H_{17}$ ) y son vendidos comercialmente bajo el nombre Polysorbate 80. Los reactivos pueden incluir mezclas de compuestos que tienen diversos valores para R,  $R^1$  y  $R^2$ , y también pueden incluir mezclas de compuestos en los que  $R^1$  comprende al menos un enlace insaturado con compuestos en los que  $R^1$  está totalmente saturado.

45 Los compuestos de Fórmula (Ib) se conocen como citratos de alquilo. Estos citratos pueden estar presentes como monosustituidos, disustituidos o trisustituidos con grupos alquilo. Se sabe que los citratos disponibles comercialmente contienen una mezcla de los diversos citratos así como ácidos cítricos desde cuando  $R^3$  y cada  $R^4$  es -H, variando hasta citratos en los que cada  $R^4$  es un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado; y mezclas de diversas sustituciones de los mismos. Se pueden usar mezclas de citratos que tienen diversos valores para  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$  y  $R^4$ , y también pueden incluir mezclas de compuestos en los que  $R^1$  comprende al menos un enlace insaturado con compuestos en los que  $R^1$  está totalmente saturado. También están disponibles comercialmente citratos de alquilo en los que  $m'+n'$  es mayor que 0,  $R^4$  es  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$  y están presentes en las diversas sustituciones desde cuando  $R^3$  y cada  $R^2$  es H hasta cuando cada  $R^1$  y/o  $R^2$  es un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado. Ejemplos de compuestos de Fórmula (Ib) incluyen, pero no se limitan a, citratos de trialquilo.

55 Todos los compuestos de Fórmulas (Ia) y (Ib) se pueden ser de origen biológico. Por "de origen biológico" se entiende que al menos 10% del material se puede producir a partir de fuentes distintas al crudo de petróleo, tales como plantas, otra vegetación y sebo. En una realización, los compuestos de fórmulas (Ia) y (Ib) son de aproximadamente 10% a 100% de origen biológico. En una realización, los compuestos de fórmulas (Ia) y (Ib) son

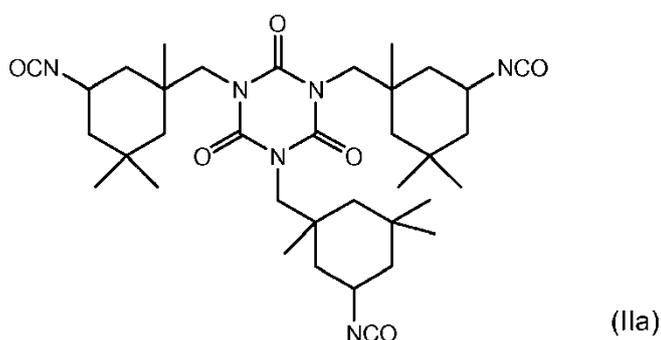
de aproximadamente 35% a 100% de origen biológico. En una realización, los compuestos de fórmulas (Ia) y (Ib) son de aproximadamente 50% a 100% de origen biológico. En una realización, los compuestos de fórmulas (Ia) y (Ib) son de aproximadamente 75% a 100% de origen biológico. En una realización, los compuestos de fórmulas (Ia) y (Ib) son 100% de origen biológico. Al menos un R, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup> de cada una de las fórmulas (Ia) y (Ib) es -H para permitir la reactividad con grupos isocianato. El índice medio de OH de los compuestos puede variar de justo más de 0 a aproximadamente 230, preferiblemente de aproximadamente 10 a aproximadamente 175, y lo más preferiblemente de aproximadamente 25 a aproximadamente 140.

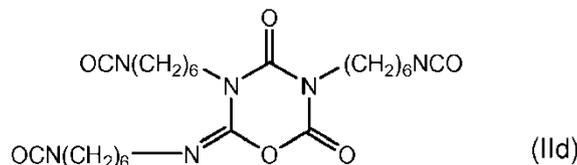
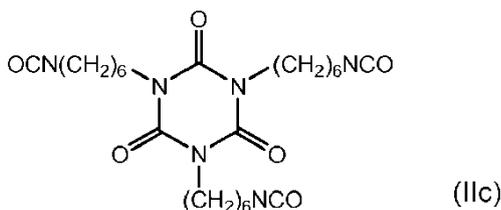
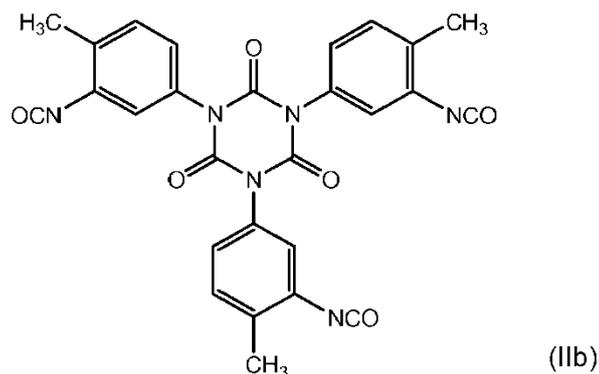
Para elaborar los compuestos de la presente invención, un compuesto de fórmula (Ia) o (Ib), o mezclas de los mismos, se hace reaccionar con un isocianato, diisocianato, poliisocianato que contiene grupos isocianato, o una mezcla de los mismos. El compuesto que contiene grupos isocianato se suma a la naturaleza ramificada del polímero. El término "poliisocianato" se define como isocianatos difuncionales y de funcionalidad superior, y el término incluye oligómeros. Cualquier monoisocianato o poliisocianato que tenga predominantemente dos o más grupos isocianato, es adecuado para el uso en esta invención. Por ejemplo, los homopolímeros de diisocianato de hexametileno son adecuados para el uso en la presente memoria y están disponibles comercialmente. Se sabe que pueden permanecer pequeñas cantidades de diisocianatos en productos que tienen múltiples grupos isocianato. Un ejemplo de esto es un biuret que contiene pequeñas cantidades residuales de diisocianato de hexametileno.

También son adecuados para el uso como el reaccionante de poliisocianato trimeros de isocianurato derivados de diisocianato de hidrocarburo. Se prefiere DESMODUR N-100 (uno basado en diisocianato de hexametileno disponible de Bayer Corporation, Pittsburgh, PA). Otros triisocianatos útiles para los propósitos de esta invención son los obtenidos al hacer reaccionar tres moles de diisocianato de tolueno. El trímero de isocianurato de diisocianato de tolueno y el de isocianato de 3-isocianatometil-3,4,4-trimetilciclohexilo son otros ejemplos de triisocianatos útiles para los propósitos de esta invención, como lo es el tris-(fenilisocianato) de metano. Precursores de poliisocianato, tales como diisocianato, también son adecuados para el uso en la presente invención como sustratos para los poliisocianatos. DESMODUR N-3300, DESMODUR N-3600, DESMODUR Z-4470, DESMODUR H, DESMODUR N3790 y DESMODUR XP 2410, de Bayer Corporation, Pittsburgh, PA, y bis-(4-isocianatociclohexil)metano también son adecuados en la invención.

Reaccionantes de poliisocianato preferidos son los poliisocianatos alifáticos y aromáticos que contienen estructuras de biuret, o isocianatos que contienen polidimetilsiloxano. Estos poliisocianatos también pueden contener sustituyentes tanto alifáticos como aromáticos.

Particularmente preferidos como el reaccionante de (poli)isocianato para todas las realizaciones de la presente invención son copolímeros de diisocianato de hexametileno disponibles comercialmente, a modo de ejemplo como DESMODUR N-100, DESMODUR N-75 y DESMODUR N-3200 de Bayer Corporation, Pittsburgh, PA; isocianato de 3-isocianatometil-3,4,4-trimetilciclohexilo, a modo de ejemplo como DESMODUR I (Bayer Corporation); bis-(4-isocianatociclohexil)metano, a modo de ejemplo como DESMODUR W (Bayer Corporation) y trimeros de diisocianato de fórmulas (IIa), (IIb), (IIc) y (IId):



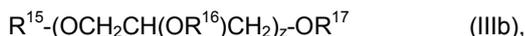


5 Los trómeros de diisocianato (IIa-d) están disponibles, a modo de ejemplo, como DESMODUR Z4470, DESMODUR IL, DESMODUR N-3300 y DESMODUR XP2410, respectivamente, de Bayer Corporation.

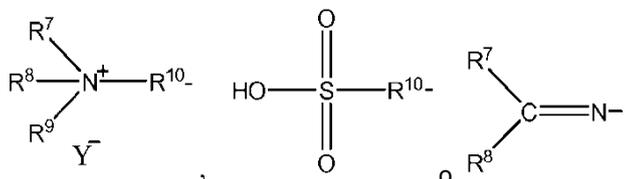
En una realización, el producto de reacción de (a) un compuesto que contiene isocianato con (b) un compuesto reactivo con isocianato contiene grupos isocianato sin reaccionar que se hacen reaccionar además con (c) al menos un segundo compuesto seleccionado de agua, compuestos orgánicos de Fórmula (IIIa)



10 compuestos orgánicos de Fórmula (IIIb)



15 o mezclas de los mismos, en donde  $R^5$  se selecciona de un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  que comprende opcionalmente al menos un grupo insaturado, un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad hidroxil, un poliéter  $C_1$  a  $C_{30}$  lineal o ramificado con funcionalidad hidroxil, un poliéster lineal o ramificado con funcionalidad hidroxil, un organosiloxano lineal o ramificado con funcionalidad hidroxil, un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad tiol, un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad amino,



20 en donde  $R^7$ ,  $R^8$  y  $R^9$  son cada uno independientemente -H, alquilo  $C_1$  a  $C_6$ , o combinaciones de los mismos;  $R^{10}$  es un grupo alquilo divalente de 1 a 20 carbonos; X es un grupo funcional reactivo con isocianato tal como -OH, -C(O)OH, -SH, -NH( $R^{12}$ ), -O-(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>s</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)-H o -[C(O)]-O-(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>s</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)-H;  $R^{12}$  es -H o un grupo alquilo  $C_1$  a  $C_6$  monovalente;  $R^{15}$ ,  $R^{16}$  y  $R^{17}$  son cada uno independientemente un -H;  $-R^{18}$ , -C(O) $R^{18}$ , con la condición de que al menos un  $R^{15}$ ,  $R^{16}$  o  $R^{17}$  sea un -H;  $R^{18}$  es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado; z es de 1 a 15; Y es -Cl; s es un número entero de 0 a 50; t es un número entero de 0 a 50; s+t es mayor que 0. El término "ramificado", según se usa en la presente memoria, significa que la cadena funcional puede estar ramificada en cualquier punto, por ejemplo como un carbono sustituido cuaternario, y puede contener cualquier número de sustituciones ramificadas.

En una realización, el segundo compuesto está presente y reacciona con de aproximadamente 0,1% en moles a aproximadamente 60% en moles de dichos grupos isocianato. Preferiblemente, la concentración de compuestos de compuesto reactivo con isocianato (b) es mayor que la concentración del segundo compuesto o compuestos (c).

5 En una realización, el segundo compuesto (c) es agua. El agua se puede usar para reticular grupos isocianato sin reaccionar mediante un enlace urea. En una realización adicional, el segundo compuesto (c) es de Fórmula (IIIa). El compuesto de fórmula (IIIa) puede ser un material hidrosoluble hidrófilo que comprende al menos un poliéter terminado en hidroxilo de fórmula (IIIa) en el que el grupo X reactivo con isocianato es  $-O-(CH_2CH_2O)_s(CH(CH_3)CH_2O)_t-H$  o  $-[C(O)]-O-(CH_2CH_2O)_s(CH(CH_3)CH_2O)_t-H$ . En esta realización,  $-(CH_2CH_2O)-$  representa grupos oxietileno (EO) y  $-(CH(CH_3)CH_2O)-$  representa grupos oxipropileno (PO). Estos poliéteres pueden contener solamente grupos EO, solamente grupos PO o mezclas de los mismos. Estos poliéteres también pueden estar presentes como un copolímero de tres bloques denominado PEG-PPG-PEG (polietilenglicol-polipropilenglicol-polietilenglicol). Preferiblemente, los poliéteres son los metoxipolietilenglicoles (MPEG) disponibles comercialmente, o mezclas de los mismos. También están disponibles comercialmente, y son adecuados para la preparación de las composiciones de la presente invención, butoxipolioxialquilenos que contienen cantidades en peso iguales de grupos oxietileno y oxipropileno (Union Carbide Corp. 50-HB Series UCON Fluids and Lubricants) y que tienen un peso molecular medio mayor de aproximadamente 1.000. Lo poliéteres hidroxiterminales de Fórmula (IIIa) tienen preferiblemente un peso molecular medio igual a o mayor de aproximadamente 200, y lo más preferiblemente entre 350 y 2.000.

20 En otra realización, el segundo compuesto (c) es un compuesto orgánico de Fórmula (IIIa), donde el grupo X reactivo con isocianato es  $-OH$ ,  $-C(O)OH$ ,  $-SH$ ,  $-NH(R^{12})$ ; y  $R^5$  se selecciona de un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  que comprende opcionalmente al menos un grupo insaturado, un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad hidroxilo, un poliéter  $C_1$  a  $C_{30}$  lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo, un poliéster lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo, un organosiloxano lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo o amino, un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad tiol, un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad amino.

30 Cuando el grupo X reactivo con isocianato es  $-OH$ , ejemplos de la Fórmula (IIIa) incluyen, pero no se limitan a, alcoholes alquílicos tales como propanol, butanol, o alcoholes grasos incluyendo alcohol estearílico ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  que comprende opcionalmente al menos un grupo insaturado); dioles o polioles alquílicos tales como etanodiol, propanodiol, butanodiol o hexanodiol ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad hidroxilo); éteres de alquilenglicol tales como trietilenglicol, tetraetilenglicol, poli(etilenglicol) (PEG), poli(propilenglicol) (PPG), poli(tetrahidrofurano), o ésteres glicólicos que tienen mezclas de unidades de PEG, PPG o THF ( $R^5$  es un poliéter  $C_1$  a  $C_{30}$  lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo); polioles de poliéster ( $R^5$  es un poliéster lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo); polioles de prepolímeros silicónicos ( $R^5$  es un organosiloxano lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo); N,N-dimetilaminoetanol ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad amino); cloruro de colina o HCl de betaína ( $R^5$  es  $Y^-(R^7)(R^8)(R^9)N^+R^{10}-$ ); butanonaoxima ( $R^5$  es  $(R^7)(R^8)C=N-$ ). Los polioles de poliéter pueden contener solamente grupos EO, solamente grupos PO, solamente grupos THF, o mezclas de los mismos. Estos poliéteres también pueden estar presentes como un copolímero de bloques, tal como el indicado por PEG-PPG-PEG (polietilenglicol-polipropilenglicol-polietilenglicol). Preferiblemente, los polieterglicoles tienen un peso molecular medio igual a o mayor de aproximadamente 200, y lo más preferiblemente entre 350 y 2.000.

40 Cuando el grupo X reactivo con isocianato es  $-C(O)OH$ , ejemplos de la Fórmula (IIIa) incluyen, pero no se limitan a, ácidos grasos tales como ácido caprílico, ácido cáprico, ácido láurico, ácido mirístico, ácido palmítico, ácido esteárico, ácido araquídico, ácido behénico, ácido lignocérico, ácido palmitoleico, ácido linoleico, ácido araquidónico, ácido oleico o ácido erúcico ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  que comprende opcionalmente al menos un grupo insaturado); ácidos que contienen hidroxilo tales como ácido hidroxicaprílico, ácido hidroxicáprico, ácido hidroxiláurico, ácido hidroximirístico, ácido hidroxipalmítico, ácido hidroxiesteárico, ácido hidroxiaquirídico, ácido hidroxibehénico, ácido hidroxilignocérico, ácido hidroxipalmitoleico, ácido hidroxilinoico, ácido hidroxiaquiridónico, ácido hidroxioleico o ácido hidroxierúcico ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad hidroxilo); y ácidos mercaptoalcanos tales como ácido mercaptopropiónico ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad tiol).

55 Cuando el grupo X reactivo con isocianato es  $-SH$ , ejemplos específicos de la Fórmula (IIIa) incluyen, pero no se limitan a, alquiltioles tales como laurilmercaptano o dodecilmercaptano ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  que comprende opcionalmente al menos un grupo insaturado). Cuando el grupo X reactivo con isocianato es  $-NH(R^{12})$ , ejemplos específicos de la Fórmula (IIIa) incluyen, pero no se limitan a, alquilaminas tales como diisopropilamina, propilamina, hexilamina o laurilamina ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  que comprende opcionalmente al menos un grupo insaturado); alcanolaminas tales como etanolamina o propanolamina ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad hidroxilo); poliaminas de prepolímeros silicónicos ( $R^5$  es un organosiloxano lineal o ramificado con funcionalidad amino); alquildiaminas ( $R^5$  es un alquilo lineal o ramificado  $C_1$  a  $C_{30}$  con funcionalidad amino); y ácidos aminoalcanosulfónicos tales como ácido 2-aminoetanosulfónico ( $R^5$  es  $HO-S(O)_2R^{10}-$ ).

En una realización adicional, el segundo compuesto (c) es de fórmula (IIIb). Estos compuestos se denominan

comúnmente poligliceroles. Estos poligliceroles pueden estar presentes cuando  $R^{15}$ ,  $R^{16}$  y  $R^{17}$  son cada uno independientemente un -H;  $-R^{18}$ ;  $-C(O)R^{18}$  con la condición de que al menos un  $R^{15}$ ,  $R^{16}$  o  $R^{17}$  sea un -H; y en donde  $R^{18}$  es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado. Ejemplos específicos incluyen, pero no se limitan a, monoestearato de triglicerol, diestearato de triglicerol, monoestearato de hexaglicerol, diestearato de hexaglicerol, mono(caprilato/caprato) de decaglicerilo, di(caprilato/caprato) de decaglicerilo, decaglicerol, poliglicerol-3 y diglicérido C18.

En una realización, el producto de reacción de (a) un compuesto que contiene isocianato con (b) un compuesto reactivo con isocianato contiene grupos isocianato sin reaccionar que se hacen reaccionar adicionalmente con múltiples segundos compuestos (c) que comprenden tanto los compuestos de fórmula (IIIa) o (IIIb) como agua.

Los compuestos de la presente invención se pueden elaborar en una etapa. Los compuestos de la presente invención que comprenden uno o más de un compuesto orgánico de Fórmula (Ia) o (Ib) y/o uno o más segundos compuestos (c) también se pueden elaborar en una etapa. Preferiblemente, si se usa más de un compuesto orgánico de Fórmula (Ia) o (Ib) y/o uno o más segundos compuestos (c), entonces la síntesis se puede completar secuencialmente. Una adición secuencial es especialmente útil cuando se emplean compuestos de Fórmula (Ia) o (Ib) con altos índices de OH, o cuando se usan compuestos polifuncionales (c). Estas etapas comprenden hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia), (Ib) o (Ic) en las que cada R es independientemente un -H;  $-R^1$ ;  $-C(O)R^1$ ;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ; cada n es independientemente de 0 a 20; cada m es independientemente de 0 a 20;  $m+n$  es mayor que 0; cada  $R^1$  es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado; cada  $R^2$  es independientemente -H, o un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado; o una mezcla de los mismos, con la condición de que cuando el compuesto sea de Fórmula (Ia), entonces al menos uno de R o  $R^2$  sea -H; cada  $R^3$  es independientemente un -H;  $-R^1$ ;  $-C(O)R^1$ ;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ; cada  $R^4$  es independientemente -H, un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado, o combinaciones de los mismos;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ; cada  $n'$  es independientemente de 0 a 20; cada  $m'$  es independientemente de 0 a 20;  $m'+n'$  es mayor que 0; con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ib), entonces el compuesto esté monosustituido, disustituido o trisustituido con grupos alquilo, y al menos un  $R^2$ ,  $R^3$  o  $R^4$  sea un -H. Cuando se usa el segundo compuesto (c), las concentraciones molares del al menos un compuesto seleccionado de la Fórmula (Ia) o (Ib) son tales que quedan grupos isocianato sin reaccionar para reaccionar con el uno o más segundos compuesto o compuestos (c).

Se hacen reaccionar el al menos un isocianato, diisocianato, poliisocianato, o mezcla de los mismos, y al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib), o una mezcla de los mismos. Esta reacción se efectúa típicamente al cargar un recipiente de reacción con el isocianato, diisocianato o poliisocianato y al menos un compuesto seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib), o una mezcla de los mismos, y opcionalmente un segundo compuesto (c). El orden de adición de reactivos no es crítico, pero si se usa agua, el agua se debe añadir después de los isocianatos y se hace reaccionar al menos un compuesto seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib), o una mezcla de los mismos.

El peso específico de los reaccionantes cargados se basa en sus pesos equivalentes y en la capacidad de trabajo del recipiente de reacción, y se ajusta de modo que el compuesto seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib) se consuma en la primera etapa. Un disolvente orgánico seco adecuado libre de grupos reactivos con isocianato se usa típicamente como un disolvente. Las cetonas son los disolventes preferidos, y la metilisobutilcetona (MIBK) se prefiere particularmente por comodidad y disponibilidad. La carga se agita y la temperatura se ajusta hasta aproximadamente de 40°C a 70°C. Típicamente, a continuación se añade un catalizador tal como cloruro de hierro(III) en un disolvente orgánico, típicamente en una cantidad de aproximadamente 0,01 a aproximadamente 1,0% en peso basado en el peso seco de la composición, y la temperatura se eleva hasta aproximadamente de 80°C a 100°C. También se puede usar un cocatalizador, tal como carbonato sódico. Si se va a añadir agua, la reacción inicial se efectúa de modo que se hagan reaccionar menos de 100% de los grupos isocianato. En la segunda etapa, después de esperar varias horas, se añaden disolvente adicional, agua y opcionalmente un segundo compuesto (c), y la mezcla se deja reaccionar durante varias horas más o hasta que se haya hecho reaccionar todo el isocianato.

En otra realización, la presente invención es una composición para impartir repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos que comprende una solución o dispersión acuosa de al menos un compuesto preparado al hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib). La composición comprende al menos un compuesto de la presente invención y un disolvente o agua y opcionalmente uno o más tensioactivos. En el procedimiento para preparar las soluciones o dispersiones acuosas de la presente invención, se puede añadir agua adicional junto con los tensioactivos, si de desea, a los compuestos de uretano y agitarse hasta que se mezcle a fondo. Después de una

etapa de homogeneización o ultrasonidos, el disolvente orgánico se puede retirar mediante evaporación a presión reducida, y la solución o dispersión acuosa restante del compuesto de la presente invención se puede usar según está o se puede someter a procesamiento adicional.

5 Además de los compuestos de la presente invención que se describen en la presente memoria, estas composiciones también pueden comprender compuestos que están presentes de sorbitanos, citratos de alquilo o pentaeritritoles disponibles comercialmente. Estos compuestos pueden estar presentes como una mezcla de los diversos compuestos orgánicos sustituidos de Fórmula (Ia) o (Ib) desde totalmente sin sustituir hasta totalmente sustituidos, y las diversas sustituciones intermedias, y, opcionalmente, el grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos comprende al menos 1 enlace insaturado.

10 Será evidente para un experto en la técnica que se pueden usar muchos cambios en cualquiera o todos los procedimientos anteriores para optimizar las condiciones de reacción para obtener un rendimiento, una productividad o una calidad de producto máximos.

En otra realización, la presente invención es un método para tratar un sustrato fibroso que comprende aplicar a la superficie del sustrato un compuesto preparado al: (i) hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib) en las que cada R es independientemente un -H;  $-R^1$ ;  $-C(O)R^1$ ;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ; cada n es independientemente de 0 a 20; cada m es independientemente de 0 a 20; m+n es mayor que 0; cada  $R^1$  es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado; cada  $R^2$  es independientemente -H o un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado; o una mezcla de los mismos, con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ia), entonces al menos uno de R o  $R^2$  sea -H; cada  $R^3$  es independientemente un -H;  $-R^1$ ;  $-C(O)R^1$ ;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ; cada  $R^4$  es independientemente -H, un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado, o combinaciones de los mismos;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ; cada n' es independientemente de 0 a 20; cada m' es independientemente de 0 a 20; m'+n' es mayor que 0; con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ib), entonces el compuesto esté monosustituido, disustituido o trisustituido con grupos alquilo, y al menos un  $R^2$ ,  $R^3$  o  $R^4$  sea un -H, proporcionando dicho compuesto repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos que entran en contacto con el mismo.

El compuesto o la composición de la presente invención que se describe anteriormente se pone en contacto con el sustrato mediante cualquier método adecuado. Estos métodos incluyen, pero no se limitan a, la aplicación mediante agotamiento, espuma, cilindro flexible, cilindro, taco, rodillo tangencial, cubeta, madeja, tina con aspadera, inyección de líquido, desbordamiento, rodillo, cepillo, laminador, aerosol, remojo, inmersión y similares. La composición también se pone en contacto mediante el uso de un procedimiento de tinción en cubeta, un procedimiento de tinción continua o aplicación a la unidad productora de filamentos.

El compuesto o la composición de la presente invención se aplica al sustrato como tal o en combinación con otros acabados textiles opcionales o agentes de tratamiento de superficies. Estos componentes adicionales opcionales incluyen agentes de tratamiento o acabados para alcanzar efectos superficiales adicionales, o aditivos usados comúnmente con estos agentes o acabados. Estos componentes adicionales comprenden compuestos o composiciones que proporcionan efectos superficiales tales como sin planchado, fácil de planchar, control del encogimiento, libre de arrogas, planchado permanente, control de la humedad, suavidad, resistencia, antideslizante, antiestático, antienganchones, antibolas, eliminación de manchas, repelencia a la suciedad, eliminación de suciedad, repelencia al agua, control del olor, antimicrobiano, protección solar, capacidad de limpieza y efectos similares. Uno o más de estos agentes de tratamiento o acabados se aplican al sustrato antes, después o simultáneamente con la composición de la presente invención. Por ejemplo, para sustratos fibrosos, cuando se tratan telas sintéticas o de algodón, puede ser deseable el uso de un agente humectante, tal como ALKANOL 6112 disponible de E. I. du Pont de Nemours and Company, Wilmington, DE. Cuando se tratan telas de algodón o combinadas con algodón, se puede usar una resina resistente a las arrugas tal como PERMAFRESH EFC disponible de Omnova Solutions, Chester, SC.

Otros aditivos comúnmente usados con estos agentes de tratamiento o acabados también están opcionalmente presentes, tales como tensioactivos, ajustadores del pH, reticuladores, agentes humectantes, extendedores de ceras y otros aditivos conocidos por los expertos en la técnica. Tensioactivos adecuados incluyen tensioactivos aniónicos, catiónicos, no iónicos, N-óxidos y anfóteros. Ejemplos de estos aditivos incluyen adyuvantes del procesamiento, agentes espumantes, lubricantes, agentes antimanchas y similares. La composición se aplica en una instalación de fabricación, un minorista o antes de la instalación y el uso, o por el consumidor.

Opcionalmente, se añade un isocianato bloqueado con la composición de la presente invención para promover adicionalmente la durabilidad (es decir, como una composición combinada). Un ejemplo de un isocianato bloqueado adecuado para el uso en la presente invención es PHOBOL XAN disponible de Huntsman Corp, Salt Lake City, UT. Otros isocianatos bloqueados disponibles comercialmente también son adecuados para el uso en la presente

memoria. La conveniencia de añadir un isocianato bloqueado depende de la aplicación particular para el copolímero. Para la mayoría de las aplicaciones actualmente previstas, no necesita estar presente para alcanzar una reticulación satisfactoria entre cadenas o una unión al sustrato. Cuando se añade como un isocianato combinado, se añaden cantidades de hasta aproximadamente 20% en peso.

5 El tratamiento óptimo para un sustrato dado depende de (1) las características del compuesto o la composición de la presente invención, (2) las características de la superficie del sustrato, (3) la cantidad de compuesto o composición de la presente invención aplicada a la superficie, (4) el método de aplicación del compuesto o la composición de la presente invención sobre la superficie y muchos otros factores. Algunos compuestos o composiciones de la presente invención funcionan bien sobre muchos sustratos diferentes y son repelentes al agua. Las dispersiones preparadas a partir de compuestos de la presente invención se aplican generalmente a sustratos fibrosos mediante pulverización, remojo, impregnación u otros métodos muy conocidos. Después de que se haya retirado líquido en exceso, por ejemplo mediante rodillos escurridores, el sustrato fibroso tratado se seca y a continuación se cura mediante calentamiento, por ejemplo, hasta de aproximadamente 100°C a aproximadamente 190°C, durante al menos 30 segundos, típicamente de aproximadamente 60 a aproximadamente 240 segundos. Este curado mejora la repelencia al aceite, el agua y la suciedad y la durabilidad de la repelencia. Aunque estas condiciones de curado son típicas, algún aparato comercial puede funcionar fuera de estos intervalos debido a sus características de diseño específicas.

En otra realización, la presente invención es un sustrato fibroso que tiene aplicado en su superficie un compuesto o una composición como los divulgados anteriormente. La presente invención comprende además sustratos tratados con un compuesto o una composición de la presente invención como los descritos anteriormente. Sustratos adecuados incluyen sustratos fibrosos. Los sustratos fibrosos incluyen fibras, hilos, telas, mezclas de telas, materiales textiles, materiales no tejidos, papel, cuero y alfombras. Estos se elaboran a partir de fibras naturales o sintéticas incluyendo algodón, celulosa, lana, seda, rayón, nailon, aramida, acetato, material acrílico, yute, sisal, algas marinas, fibra de coco, poliamida, poliéster, poliolefina, poliácridonitrilo, polipropileno, poliaramida o mezclas de los mismos. Por "mezclas de telas" se entiende una tela elaborada de dos o más tipos de fibras. Típicamente, estas mezclas son una combinación de al menos una fibra natural y al menos una fibra sintética, pero también pueden incluir una mezcla de dos o más fibras naturales o de dos o más fibras sintéticas. Los sustratos no tejidos incluyen, por ejemplo, materiales no tejidos hidroligados, tales como SONTARA disponible de E. I. du Pont de Nemours and Company, Wilmington, DE, y materiales no tejidos hidroligados-soplados en estado fundido-hidroligados. Los sustratos tratados de la presente invención tienen propiedades de excelente repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas.

Los compuestos, las composiciones, el método y los sustratos de la presente invención son útiles para proporcionar excelente repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos tratados. Las propiedades superficiales se obtienen usando un uretano orgánico no fluorado según se define anteriormente. Se ha encontrado que el uso de uretano orgánico no fluorado proporciona una repelencia superior al agua y una repelencia durable al agua en comparación con repelentes al agua no fluorados tradicionales y son comparables a repelentes al agua fluorados disponibles comercialmente. Los sustratos tratados de la presente invención son útiles en una variedad de aplicaciones y productos tales como ropa, prendas protectoras, alfombras, tapicería, mobiliario y otros usos. Las excelentes propiedades superficiales descritas anteriormente ayudan a mantener la limpieza superficial y por lo tanto pueden permitir un uso más prolongado.

#### Métodos y materiales de prueba

45 Todos los disolventes y reactivos, a menos que se indique otra cosa, se adquirieron de Sigma-Aldrich, St. Louis, MO, y se usaron directamente según se suministraban. MPEG 750 y MPEG 1000 se definen como éter metílico de poli(etilenglicol) 750 y éter metílico de poli(etilenglicol) 1000, respectivamente, y están disponibles comercialmente de Sigma-Aldrich, St. Louis, MO. Tergitol® TMN-10 está disponible comercialmente de Sigma-Aldrich, St. Louis, MO.

50 El triestearato de sorbitano y el monoestearato de sorbitano están disponibles comercialmente de Croda, East Yorkshire, Inglaterra, o DuPont Nutrition & Health, Copenhague, Dinamarca. El triestearato de sorbitano de bajo OH (índice de OH <65), los ésteres de dipentaeritritol, el éster de sorbitano - ácido láurico, la sorbitanotribehenina 40, la sorbitanotribehenina 50, la sorbitanotribehenina 88 y el diestearato de glicerol se obtuvieron de DuPont Nutrition & Health, Copenhague, Dinamarca.

DESMODUR N-100, DESMODUR H, DESMODUR I, DESMODUR N3300, DESMODUR N3790BA, DESMODUR Z4470 y DESMODUR XP2410 se obtuvieron de Bayer Corporation, Pittsburgh, PA.

JEFFAMINE M-1000, JEFFAMINE M-2070 y PHOBOL XAN se obtuvieron de Huntsman Corp., Salt Lake City, UT.

55 PRIPOL 2033 (diol dímero amorfo), PRIAMINE 1075 (diamina dímera), PRIPLAST 3293 (poliol de poliéster semicristalino), el trioleato de sorbitano, el triestearato de polioxietilensorbitano, el trioleato de polioxietilensorbitano, el monoestearato de tetraetoxisorbitano, el monoestearato de polioxietilensorbitano y el monoestearato de polioxietilen(4)sorbitano se obtuvieron de Croda, East Yorkshire, Inglaterra.

El citrato de tri(2-octadecilo) está disponible comercialmente de Lubrizol, Wickliffe, Ohio.

SILMER OH Di-10 (un prepolímero silicónico terminado en hidroxilo difuncional lineal pequeño) y SILMER NH Di-8 (una silicona lineal con grupos terminales amino reactivos) están disponibles de Siltech Corporation, Toronto, Canadá.

PLURONIC L35 está disponible comercialmente de BASF, Ludwigshafen, Alemania.

5 ARMEEN DM-18D se obtuvo de Akzo-Nobel, Bridgewater, NJ.

El monoestearato de glicerol y el diestearato de hexaglicerol se obtuvieron de Lonza, Allendale, NJ.

El mono(caprilato/caprato) de decaglicerilo se obtuvo de Stepan, Northfield, Illinois.

El poliglicerol-3 se obtuvo de Solvay Chemicals, Houston, TX.

Los siguientes métodos de prueba y materiales se usaron en los ejemplos de la presente memoria.

10 Método 1 - Repelencia al agua

La repelencia al agua de un sustrato tratado se midió según el DuPont Technical Laboratory Method que se esboza en el envase con información de TEFLON Global Specifications and Quality Control Tests. La prueba determina la resistencia de un sustrato tratado al humedecimiento con líquidos acuosos. Gotas de mezclas de agua-alcohol, de tensiones superficiales variables, se ponen sobre el tejido y se determina visualmente el grado de humedecimiento superficial. La prueba proporciona un índice aproximado de la resistencia a manchas acuosas. Cuanto mayor sea la valoración de la repelencia al agua, mejor será la resistencia que el sustrato acabado tiene a las manchas por sustancias a base de agua. La composición de los líquidos de prueba estándar se muestra en la siguiente Tabla 1. Las valoraciones de incrementos de 0,5 se determinan al sustraer un medio de los números de la Tabla 1 para el paso límite del líquido de prueba.

20 Tabla 1. Líquidos de prueba estándar

Índice de valoración de la repelencia al agua	Composición % en vol., Alcohol isopropílico	Composición, % en vol. de agua destilada
1	2	98
2	5	95
3	10	90
4	20	80
5	30	70
6	40	60
7	50	50
8	60	40
9	70	30
10	80	20
11	90	10
12	100	0

Método de prueba 2 - Prueba de pulverización

25 La repelencia dinámica al agua de sustratos tratados se midió según the American Association of Textile Chemists and Colorists (AATCC) TM-22. Las muestras se puntuaron visualmente mediante referencia a patrones publicados, indicando una valoración de 100 sin penetración de agua o adherencia superficial. Una valoración de 90 indica ligero pegado aleatorio o humedecimiento sin penetración; valores inferiores indican humedecimiento y penetración progresivamente mayores. El Método de prueba 2, la prueba de repelencia dinámica al agua, es una prueba exigente y realista de la repelencia al agua.

## Método de prueba 3 - Eliminación de manchas

Esta prueba mide la capacidad de una tela para eliminar manchas oleosas durante la colada doméstica.

Los materiales textiles tratados se ponen sobre una superficie plana. Usando un cuentagotas, 5 gotas de aceite de maíz MAZOLA o aceite mineral (0,2 ml) se pusieron sobre la tela para formar 1 gota de aceite. Se pone una pesa (2,27 kg, 5 libras) sobre la gota de aceite con un trozo de papel cristal que separa la gota de aceite. La pesa se deja en su lugar durante 60 segundos. Después de 60 segundos, la pesa y el papel cristal se retiran. A continuación, los materiales textiles se lavaron usando una lavadora con programa intenso durante 12 minutos con AATCC 1993 Standard Reference Detergent WOB12 o detergente granular (100 g). A continuación, los materiales textiles se secaron a temperatura alta durante 45-50 minutos. A continuación, los materiales textiles se evaluaron con respecto a la mancha residual de 1 a 5, teniendo 1 la mayor mancha residual remanente y siendo 5 sin mancha residual visible.

## Método de prueba 4 - Tratamientos de telas

Las telas tratadas en este estudio eran sarga de algodón caqui al 100% en peso disponible de SDL Atlas Textile Testing Solutions, Rock Hill, South Carolina 29732 y tela de poliéster roja al 100% en peso disponible de L. Michael OY, Finlandia. La tela se trató con las dispersiones acuosas de diversos polímeros en emulsión usando un procedimiento de baño de impregnación (remojo) convencional. La dispersión concentrada preparada de las emulsiones de polímero se diluyó con agua desionizada para alcanzar un baño de impregnación que tenía 60 g/l o 100 g/ de la emulsión final en el baño.

Ejemplos de los compuestos y las composiciones de esta invención se pueden elaborar a partir de diversos isocianatos y compuestos orgánicos de fórmulas (Ia), (Ib), o mezclas de los mismos. La presente invención no se debe limitar por los ejemplos posteriores.

## Preparación de citrato de trioctadecilo

En un matraz de fondo redondo de 4 bocas equipado con un agitador elevado, un termopar, un aparato de Dean-Stark/condensador se añadieron alcohol estearílico (100,0 g), ácido cítrico (20 g), tolueno (150 g) y ácido sulfúrico (2 g). La solución se sometió a reflujo durante 8 horas para facilitar la retirada del agua generada durante la esterificación. Después de las 8 horas, el citrato en bruto se precipitó a 0°C, se filtró y se recristalizó usando etanol.

**Ejemplos**

## Ejemplo 1

En un matraz de fondo redondo de 4 bocas equipado con un agitador elevado, un termopar, un aparato de Dean-Stark/condensador se añadieron triestearato de sorbitano (116,0 g; índice de hidróxido = 77,2 mg de KOH/g) y 4-metil-2-pentanona (MIBK, 150 g). La solución se sometió a reflujo durante 1 hora para retirar cualquier humedad residual. Después de la hora, la solución se enfrió hasta 50°C y se añadió DESMODUR N-100 (30 g) seguido por un catalizador y la solución se calentó hasta 80°C a lo largo de una hora.

## Ejemplo 2

Se preparó una dispersión acuosa del compuesto que se describe en el Ejemplo 1. Se añadieron agua (300 g), ARMEEN DM-18D (5,6 g), TERGITOL TMN-10 (2,8 g) y ácido acético (3,4 g) a un vaso de precipitados y se agitaron para formar una solución de tensioactivo. La solución se calentó hasta 60°C. La solución de sorbitanuretano/MIBK, que se prepara en el Ejemplo 1, se enfrió hasta 60°C y la solución de tensioactivo se añadió lentamente para producir una emulsión lechosa. La mezcla se homogeneizó a 41 MPa [6.000 psi] y la emulsión resultante se destiló bajo presión reducida para retirar el disolvente, dando una dispersión de uretano no inflamable con 25% de sólidos. Esta dispersión de uretano se aplicó a materiales textiles y se probó según los métodos de prueba anteriores.

## Ejemplos 3 a 23

Los Ejemplos 3 a 23 muestran diversos compuestos de la presente invención preparados según se describe en los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones) con un isocianato (DESMODUR N100) y uno o más compuestos de Fórmula (Ia) diferentes tales como triestearato de sorbitano, trioleato de sorbitano, monoestearato de sorbitano y mezclas de los mismos. Cuando se usaba más de un reactivo de éster de sorbitano, se añadía el segundo reactivo de sorbitano y la mezcla acuosa se calentaba a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 3 a 23 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba anteriores.

## Ejemplo comparativo A

El Ejemplo comparativo A representa una dispersión acuosa elaborada usando el compuesto de Fórmula (Ia), sin un compuesto de isocianato. Se añadieron agua (166,0 g), ARMEEN DM-18D (2,29 g), TERGITOL TMN-10 (1,6 g) y ácido acético (1,4 g) a un vaso de precipitados y se agitaron para formar una solución de tensioactivo. La solución se

## ES 2 653 672 T3

calentó hasta 60°C. Se añadió triestearato de sorbitano (60,52 g; índice de hidroxí = 69,5 mg de KOH/g), se calentó hasta 80°C y la solución de tensioactivo se añadió lentamente para producir una emulsión lechosa. La mezcla se homogeneizó a 41 MPa [6.000 psi] y la emulsión resultante se destiló bajo presión reducida para retirar el disolvente, dando una dispersión no inflamable con 25% de sólidos. Esta dispersión se aplicó a materiales textiles y se probó según los métodos de prueba anteriores.

5

Tabla 2. Composiciones de los Ejemplos 2 a 23.

	Componente (a)	Componente (b)		
	Desmodur N100 (g)	Triestearato de sorbitano (g)	Trioleato de sorbitano (g)	Monoestearato de sorbitano (g)
Ej. 2	30,0	116,0	0	0
Ej. 3	30,1	0	147,0	0
Ej. 4	30,0	58,0	70,0	0
Ej. 5	30,0	113,5	0	1,2
Ej. 6	30,0	81,2	0	10,8
Ej. 7	30,0	98,6	0	5,4
Ej. 8	30,0	0	102,5	11,2
Ej. 9	30,2	0	125,0	5,4
Ej. 10	30,0	113,5	0	1,2
Ej. 11	30,2	49,3	62,0	5,4
Ej. 12	30,0	49,3	62,0	5,4
Ej. 13	30,1	49,3	62,0	5,4
Ej. 14	30,0	49,3	59,5	5,4
Ej. 15	30,0	40,6	49,0	10,8
Ej. 16	30,0	49,3	59,5	5,4
Ej. 17	30,0	74,0	45,0	1,4
Ej. 18	30,0	1,2	135,25	0
Ej. 19	30,0	105,5	0	3,5
Ej. 20	30,0	127,5	0	1,25
Ej. 21	30,0	115,4	0	1,25
Ej. 22	30,0	113,8	0	1,25
Ej. 23	15,0	60,1	0	0,61
Ej. Comp. A	0	60,52	0	0

Tabla 3. Datos de comportamiento de los Ejemplos 2 a 23 y el Ejemplo comparativo A

	Algodón		Poliéster	
	Gota de agua	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 2	4	100	--	--
Ej. 3	2	75	0	80
Ej. 4	3	--	3	--
Ej. 5	4	100	--	--
Ej. 6	3	--	3	--
Ej. 7	3	--	3	--
Ej. 8	2	80	2	0
Ej. 9	2	75	0	0
Ej. 10	3	80	3	100
Ej. 11	4	90	3	100
Ej. 12	4	90	3	100
Ej. 13	4	90	3	100
Ej. 14	3	--	3	--
Ej. 15	3	--	3	--
Ej. 16	3	--	3	--
Ej. 17	4	100	--	--
Ej. 18	3	80	--	--
Ej. 19	4	100	--	--
Ej. 20	3	80	3	100
Ej. 21	3	100	3	100
Ej. 22	3	100	3	100
Ej. 23	3	90	--	--
Comp. Ej. A	3	50	1	50

## Ejemplos 24 a 31

5 Los Ejemplos 24 a 31 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando diversos isocianatos y a partir de uno a dos compuestos de Fórmula (Ia) diferentes según se describe en la Tabla 4. Cuando se usaba más de uno de los compuestos de Fórmula (Ia), el segundo compuesto se añadía y la mezcla de reacción se calentaba a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 24 a 31 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Tabla 4. Composiciones de los Ejemplos 24 a 31

Ej.	Componente (a)		Componente (b)		
	Compuesto	Cantidad (g)	Triestearato de sorbitano (g)	Trioleato de sorbitano (g)	Monoestearato de sorbitano (g)
24	Desmodur H	26,4	113,5	0	1,2
25	Desmodur I	24,7	0	212,8	0
26	Desmodur N3300	30,4	0	135,25	1,2
27	Desmodur N3790BA	15,0	45,35	0	0,5
28	Desmodur Z4470BA	22,5	44,25	0	0,75
29	Desmodur XP2410	15,0	59,5	0	0,9
30	Desmodur I	24,7	0	212,8	0
31	Desmodur I	30,2	113,5	0	1,2

Tabla 5. Datos de comportamiento de los Ejemplos 24 a 31

	Algodón		Poliéster	
	Gota de agua	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 24	3	85	3	100
Ej. 25	3	70	3	80
Ej. 26	3	75	--	--
Ej. 27	3	90	--	--
Ej. 28	3	100	--	--
Ej. 29	3	100	--	--
Ej. 30	4	100	--	--
Ej. 31	3	70	--	--

## 5 Ejemplos 32 a 36

Los Ejemplos 32 a 36 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando isocianato DESMODUR N-100, de uno a dos compuestos de Fórmula (1a) diferentes y un monómero ácido como el descrito en la Tabla 6. El Ejemplo 36 también incluía un monómero de alcohol estearílico. El monómero ácido, el alcohol estearílico y cualesquiera compuestos de Fórmula (1a) adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (1a) inicial y el isocianato hubieran reaccionado durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 32 a 36 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

10

Tabla 6. Composiciones los Ejemplos 32 a 36

	Comp. (a)	Componente (b)		Componente (c)	
	Desmodur N100 (g)	Triesteurato de sorbitano (g)	Monoesteurato de sorbitano (g)	Compuesto	Cant. (g)
Ej. 32	29,9	72,2	1,4	Ácido behénico	16,5
Ej. 33	30,0	73,3	1,4	Ácido erúxico	16,8
Ej. 34	30,0	36,1	1,4	Ácido behénico	41,5
Ej. 35	29,9	41,1	1,4	Ácido behénico	45,5
Ej. 36	30,0	73,4	1,4	Ácido behénico / Alcohol estearílico	8,2 / 6,8

Tabla 7. Datos de comportamiento de los Ejemplos 32 a 36

	Algodón		Poliéster	
	Gota de agua	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 32	3	85	3	100
Ej. 33	3	90	3	100
Ej. 34	3	80	2	100
Ej. 35	3	50	2	50
Ej. 36	3	85	3	85

## 5 Ejemplos 37 a 54

Los Ejemplos 37 a 54 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando un isocianato, de uno a dos compuestos de Fórmula (1a) diferentes y MPEG 750 según se describe en la Tabla 8. El MPEG 750 y cualesquiera compuestos de Fórmula (1a) adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (1a) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 37 a 54 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Tabla 8. Composiciones de los Ejemplos 37 a 54

Ej	Componente (a)		Componente (b)				Componente (c)
	Compuesto	Cant (g)	Triesteurato de sorbitano (g)	Monoesteurato de sorbitano (g)	Diesteurato de sorbitano (g)	Tetraesteurato de sorbitano (g)	MPEG 750 (g)
37	Desmodur N100	27,4	50,0	1,3	0	0	51,6
38	Desmodur N100	22,8	50,0	1,1	0	0	34,4
39	Desmodur	34,2	50,0	1,7	0	0	77,5

ES 2 653 672 T3

Ej	Componente (a)		Componente (b)				Componente (c)
	Compuesto	Cant (g)	Triesteurato de sorbitano (g)	Monoesteurato de sorbitano (g)	Diesteurato de sorbitano (g)	Tetraesteurato de sorbitano (g)	MPEG 750 (g)
	N100						
40	Desmodur N3300	24,9	50,0	4,2	0	0	46,5
41	Desmodur H	10,8	50,0	4,2	0	0	46,5
42	N3790BA	30,5	50,0	4,2	0	0	46,5
43	Z4470BA	45,6	50,0	4,2	0	0	46,5
44	Desmodur N100	24,6	50,0	4,2	0	0	46,5
45	Desmodur N100	24,6	50,0	0	0	0	46,5
46	Desmodur N100	12,0	17,2	2,2	0	0	23,6
47	Desmodur N100	12,0	0	4,5	0	0	33,0
48	Desmodur N100	12,5	36,9	0	0	0	14,7
49	Desmodur N3300	12,0	15,1	0	0	0	32,6
50	Desmodur N3300	12,0	20,0	4,4	0	0	13,9
51	Desmodur N100	12,3	15,6	0	0	0	33,9
52	Desmodur N3300	12,0	35,1	0	0	0	14,0
53	Desmodur N100	12,7	0	0	23,0	0	24,9
54	Desmodur N100	12,1	0	0	0	40,8	23,8

Tabla 9. Datos de comportamiento de los Ejemplos 37 a 54

	Algodón			
	Gota de agua	Aceite de maíz	Aceite mineral	Pulverización
Ej. 37	3	3,5	3	75
Ej. 38	3	3,5	3	75
Ej. 39	3	3,5	3	75
Ej. 40	3	4	3	--

## ES 2 653 672 T3

	Algodón			
	Gota de agua	Aceite de maíz	Aceite mineral	Pulverización
Ej. 41	2	4	3	--
Ej. 42	3	3,5	3	--
Ej. 43	3	3,5	3	--
Ej. 44	2	4,5	4,5	--
Ej. 45	2	4	4	--
Ej. 46	3	4	3	70
Ej. 47	1	3,5	3,5	0
Ej. 48	3,5	2	1	85
Ej. 49	3	4,5	3	50
Ej. 50	3,5	3	1	85
Ej. 51	3	4,5	3	50
Ej. 52	3,5	3	1	85
Ej. 53	4	3	2	75
Ej. 54	4	2,5	1	80

### Ejemplos 55 a 62

Los Ejemplos 55 a 62 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando isocianato DESMODUR N-100, triestearato de sorbitano, un glicol o monómero alcoxilado y hasta un reactivo adicional según se describe en la Tabla 10. El glicol o el monómero alcoxilado y los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 55 a 62 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

10 Tabla 10. Composiciones de los Ejemplos 55 a 62

Ej	Componente (a)	Componente (b)	Componente (c) Fórmula (IIIa)		Componente (c) Adicional	
	Desmodur N100 (g)	Triestearato de sorbitano (g)	Compuesto	Cant (g)	Compuesto	Cant (g)
55	12,7	14,6	MPEG 1000	44,2	N,N-Dimetilaminoetanol	0,3
56	12,5	14,3	MPEG 1000	43,5	Cloruro de colina	0,5
57	13,3	15,2	MPEG 1000	46,2	Ácido 2-aminoetanosulfónico	0,4
58	12,1	14,6	Jeffamine M-1000	44,3		
59	12,3	14,8	Jeffamine M-2070	90,1		
60	1,7	6,2	Polipropilenglicol	0,1		

ES 2 653 672 T3

Ej	Componente (a)	Componente (b)	Componente (c) Fórmula (IIIa)		Componente (c) Adicional	
	Desmodur N100 (g)	Triestearato de sorbitano (g)	Compuesto	Cant (g)	Compuesto	Cant (g)
61	1,7	6,2	Éter dodecílico de tetraetilenglicol	0,2		
62	1,7	5,9	Éter dodecílico de tetraetilenglicol	0,3		

Tabla 11. Datos de comportamiento de los Ejemplos 55 a 62

	Algodón				Poliéster	
	Gota de agua	Aceite de maíz	Aceite mineral	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 55	1	3	3	50	--	--
Ej. 56	2	4	3	50	--	--
Ej. 57	2	3	2,5	50	--	--
Ej. 58	2	3,5	3	60	--	--
Ej. 59	0,5	3,5	3	25	--	--
Ej. 60	3	--	--	80	3	95
Ej. 61	3	--	--	85	3	65
Ej. 62	3	--	--	80	3	90

Ejemplos 63 y 64

- 5 Los Ejemplos 63 y 64 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando isocianato DESMODUR N-100, un éster de sorbitano alcoxilado y hasta un reactivo adicional según se describe en la Tabla 12. Los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 63 y 64 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Ejemplo 65

- 15 El Ejemplo 65 emplea el uso de isocianato DESMODUR N-100, un éster de sorbitano alcoxilado y MPEG 750 según se describe en la Tabla 12. Se cargaron monoestearato de tetraetoxisorbitano (0,8 g) y 8,5 g de 4-metil-2-pentanona (MIBK) a un vial de centelleo de 40 ml, se pusieron en una placa calentadora/un agitador con un conducto de nitrógeno y una barra agitadora. La solución se agitó y se calentó hasta 55°C durante 10 minutos bajo nitrógeno. Se añadió Desmodur N-100 (1,7 g) y la temperatura de reacción se incrementó hasta 80°C. Se añadió una solución de cloruro de hierro(III) al 0,5% en peso (en MIBK) y la temperatura de reacción se incrementó hasta 95 °C. Después de seis horas, se añadió MPEG 750 (4,5 g). La temperatura de reacción se redujo hasta 80°C y se agitó durante la noche. La mezcla resultante se normalizó hasta 25% de sólidos, se aplicó a materiales textiles en 60 g/l y se probó según los métodos de prueba anteriores.

Ejemplos 66 a 69

- 25 Los Ejemplos 66 a 69 siguen los procedimientos de los Ejemplo 65, usando isocianato DESMODUR N-100, un éster de sorbitano alcoxilado y hasta un reactivo adicional según se describe en la Tabla 12. Los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 6 horas, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante la noche. Los Ejemplos 66 a 69 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos

anteriormente.

Tabla 12. Composiciones de los Ejemplos 63 a 69

	Ej.	63	64	65	66	67	68	69
Componente (a)	Desmodur N100 (g)	8,2	7,2	1,7	1,5	1,5	1,5	1,5
Componente (b)	Triestearato de polioxietilensorbitano (g)	50	0	0	4,8	9,1	0	0
	Trioleato de polioxietilensorbitano (g)	0	50	0	0	0	0	0
	Monoestearato de tetraetoxisorbitano (g)	0	0	0,8	0	0	0	0
	Monoestearato de polioxietilensorbitano (g)	1,1	0	0	0	0	0	0
	Monoestearato de polioxietilen(4)sorbitano (g)	0	0	0	0	0	0,12	0,24
Componente (c)	Laurilamina (g)	0	0	0	0,36	0,04	0	0
	MPEG 750 (g)	0	0	4,5	0	0		

Tabla 13. Datos de comportamiento de los Ejemplos 63 a 69

	Algodón				Poliéster	
	Gota de agua	Aceite de maíz	Aceite mineral	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 63	0	4	3	0	--	--
Ej. 64	0	3,5	3	0	--	--
Ej. 65	0	--	--	25	--	--
Ej. 66	3	--	--	70	3	50
Ej. 67	3	--	--	70	3	50
Ej. 68	3	--	--	70	3	90
Ej. 69	3	--	--	90	3	100

5

Ejemplos 70 a 94

Los Ejemplos 70 a 94 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando un isocianato, un compuesto de Fórmula (Ia), al menos reactivo alcohólico y hasta un reactivo adicional según se describe en la Tabla 14. El reactivo alcohólico y los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. En los Ejemplos 88 a 91, se combinó carbonato sódico (0,5% en peso del reactivo total) con el triestearato de sorbitano antes de la reacción. Los Ejemplos 70 a 94 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

10

15 Ejemplo 95

El Ejemplo 95 sigue el procedimiento del Ejemplo 65, usando isocianato DESMODUR N-100, triestearato de sorbitano y PRIPOL 2033 según se describe en la Tabla 14. El PRIPOL 2033 se añadió a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 6 horas, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante la noche. El Ejemplo 93 se aplicó como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probó según los métodos de prueba descritos anteriormente.

20

ES 2 653 672 T3

Tabla 14. Composiciones de los Ejemplos 70 a 95

Ej	Componente (a)		Componente (b)	Componente (c)			
	Desmodur N100 (g)	Desmodur H (g)	Triestearato de sorbitano (g)	Compuesto	Cant (g)	Compuesto	Cant (g)
70	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	1,3-propanodiol	0,8
71	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	Silmer OH Di-10	10,6
72	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	Silmer NH Di-8	9,9
73	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	trietilenglicol	1,6
74	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	polipropilenglicol	2,3
75	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	Pripol 2033	2,9
76	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	Priamine 1075	5,6
77	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	Pluronic F68	88,7
78	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	Pluronic L35	20,1
79	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	Ácido 12-hidroxiesteárico	4,0
80	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	decaglicerol	8,0
81	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	poli(tetrahidrofurano) 250	2,6
82	24,6	0	50,0	MPEG 750	46,5	poli(tetrahidrofurano) 650	6,7
83	30,0	0	113,4	t-butanol	1,66	-	-
84	30,0	0	113,4	agua	0,4	-	-
85	30,1	0	102,12	agua	1,71		
86	15,0	0	47,68	t-butanol	0,32		
87	0	10,1	78,63	agua	0,91		
88	25,1	0	99,80	n-butanol	0,50		
89	25,1	0	100,33	agua	0,72		
90	15,5	0	57,41	n-butanol	0,31		
91	15,0	0	55,48	PRIPLAST 3293	3,87		
92	15,0	0	55,75	n-butanol	0,285		
93	15,0	0	105,5	n-butanol	0,285		
94	15,0	0	52,05	n-butanol	0,285		
95	1,5	0	5,6	Pripol 2033	0,06		

Tabla 15. Datos de comportamiento de los Ejemplos 70 a 95

	Algodón				Poliéster	
	Gota de agua	Aceite de maíz	Aceite mineral	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 70	2	4,5	4,5	--	--	--
Ej. 71	2	4,5	4,5	--	--	--
Ej. 72	2	3,5	3	--	--	--
Ej. 73	2	4	3	--	--	--
Ej. 74	2	4,5	4	--	--	--
Ej. 75	2	4	3	--	--	--
Ej. 76	2	4	3	--	--	--
Ej. 77	2	3,5	3	--	--	--
Ej. 78	2	3,5	3	--	--	--
Ej. 79	2	4	3,5	--	--	--
Ej. 80	2	3,5	3	--	--	--
Ej. 81	2	4	3	--	--	--
Ej. 82	2	4,5	4	--	--	--
Ej. 83	3	--	--	100	3	90
Ej. 84	3	--	--	100	3	100
Ej. 85	3	--	--	100	3	100
Ej. 86	4	--	--	100	4	90
Ej. 87	3	--	--	75	3	70
Ej. 88	3	--	--	100	3	100
Ej. 89	3	--	--	100	3	100
Ej. 90	3	--	--	100		
Ej. 91	3	--	--	95	3	95
Ej. 92	3	--	--	100	3	90
Ej. 93	3	--	--	100	3	100
Ej. 94	4	--	--	100	3	100
Ej. 95	3	--	--	90	3	90

## Ejemplos 96 a 102 y 108 a 110

5 Los Ejemplos 96 a 102 y 108 a 110 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando isocianato DESMODUR N-100, uno o más compuestos de Fórmula (Ia) o Fórmula (Ib) y al menos un reactivo adicional según se describe en la Tabla 16. Los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y (Ib) el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 96 a 102 y 108 a

## ES 2 653 672 T3

110 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Ejemplos 103 a 107

- 5 Los Ejemplos 103 a 107 siguen el procedimiento del Ejemplo 65, usando isocianato DESMODUR N-100, uno o más compuestos de Fórmula (Ia) o Fórmula (Ib) y al menos un reactivo adicional según se describe en la Tabla 16. Los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y (Ib) el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 6 horas, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante la noche. En el Ejemplo 105, se combinó carbonato sódico (0,07 g) con el triestearato de sorbitano y citrato de sorbitano antes de la adición del isocianato. Los Ejemplos 103 a 104 y 106 a 107 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l (el Ejemplo 105 se aplicó en 100 g/l) y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Tabla 16. Composiciones de los Ejemplos 96 a 110

Ej.	Componente (a)	Componente (b)		Componente (c)	
	Desmodur N100 (g)	Compuesto(s)	Cantidad(es) (g)	Compuesto	Cant (g)
96	30,0	Sorbitanotribehenina 40/monoestearato de sorbitano	123,66/1,25		
97	15,0	Sorbitanotribehenina 50	62,5	n-butanol	0,285
98	15,0	Sorbitanotribehenina 88	69,1	n-butanol	0,285
99	15,0	Sorbitanotribehenina 40	66,3	n-butanol	0,285
100	15,0	Ésteres de dipentaeritritol	68,05	n-butanol	0,855
101	15,0	Triestearato de sorbitano, bajo índice de OH	171,1	n-butanol	0,855
102	15,0	Éster de sorbitano-ácido láurico	145,9	n-butanol	0,855
103	1,5	Citrato de tri(2-octildodecilo)	7,54	Hexilamina	0,02
104	1,5	Citrato de tri(2-octildodecilo)	4,0	Hexilamina	0,2
105	1,5	Triestearato de sorbitano /citrato de trioctildodecilo	2,75/3,81	n-butanol	0,11
106	1,5	Citrato de trioctadecilo	6,9	estearilmercaptano	0,11
107	1,5	Citrato de trioctadecilo	3,65	estearilmercaptano	1,1
108	12,0	Sorbitanotribehenina 50	26,5	MPEG 750	23,6
109	12,1	Sorbitanotribehenina 88	29,6	MPEG 750	23,8
110	12,4	Sorbitanotribehenina 40	29,0	MPEG 750	24,3

Tabla 17. Datos de comportamiento de los Ejemplos 96 a 110

	Algodón				Poliéster	
	Gota de agua	Aceite de maíz	Aceite mineral	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 96	3	--	--	80	3	100
Ej. 97	3	--	--	100	3	90
Ej. 98	3	--	--	100	3	85

ES 2 653 672 T3

	Algodón				Poliéster	
	Gota de agua	Aceite de maíz	Aceite mineral	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 99	3	--	--	100	3	100
Ej. 100	3	--	--	100	3	95
Ej. 101	3	--	--	60	3	100
Ej. 102	3	--	--	60	2	50
Ej. 103	3	--	--	70	3	50
Ej. 104	3	--	--	70	3	50
Ej. 105	3	--	--	80	3	60
Ej. 106	3	--	--	100	3	100
Ej. 107	3	--	--	80	3	100
Ej. 108	4	3	2	75	--	--
Ej. 109	4	3	1	80	--	--
Ej. 110	4	3	1	75	--	--

Ejemplos 111 a 114

5 Los Ejemplos 111 a 114 siguen los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando isocianato DESMODUR N-100, uno o más compuestos de Fórmula (Ia) y al menos reactivo adicional según se describe en la Tabla 18. Los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. Los Ejemplos 111 a 114 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Ejemplos 115 a 117

10 Los Ejemplos 115 a 117 siguen el procedimiento del Ejemplo 65, usando isocianato DESMODUR N-100, uno o más compuestos de Fórmula (Ia) y al menos un reactivo adicional según se describe en la Tabla 18. Los reactivos adicionales se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 6 horas, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante la noche. Los Ejemplos 115 a 117 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Tabla 18. Composiciones de los Ejemplos 111 a 117

Ej.	Componente (a)	Componente (b)		Componente (c)	
	Desmodur N100 (g)	Triestearato de sorbitano (g)	Monoestearato de sorbitano (g)	Compuesto(s)	Cantidad (g)
111	30,0	108,29		HCl de betaína	1,21
112	30,49	73,24	1,4	alcohol estearílico	13,49
113	30,11	102,59		HCl de betaína	2,41
114	30,25	100,19		oxima de butanona	0,75

ES 2 653 672 T3

Ej.	Componente (a)	Componente (b)		Componente (c)	
	Desmodur N100 (g)	Triestearato de sorbitano (g)	Monoestearato de sorbitano (g)	Compuesto(s)	Cantidad (g)
115	1,9	5,6	0	N,N-dimetilaminoetanol	0,04
116	1,5	5,98		diisopropilamina	0,04
117	1,5	3,15		diisopropilamina	0,4

Tabla 19. Datos de comportamiento de los Ejemplos 111 a 117

	Algodón		Poliéster	
	Gota de agua	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 111	3	85	3	100
Ej. 112	3	80	3	100
Ej. 113	3	85	3	100
Ej. 114	4	90	4	90
Ej. 115	3	100	3	100
Ej. 116	3	75	3	90
Ej. 117	3	85	3	85

Ejemplo 118

- 5 El Ejemplo 118 sigue los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), haciendo reaccionar isocianato DESMODUR N-100 con triestearato de sorbitano según la Tabla 20, e incorporando carbonato sódico como un cocatalizador (0,375 g) durante la reacción. El Ejemplo 118 se aplicó como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probó según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Ejemplos 119 y 120

- 10 Los Ejemplos 119 y 120 siguen el procedimiento del Ejemplo 65, usando isocianato DESMODUR N-100, triestearato de sorbitano y ácido láurico según se describe en la Tabla 20. El ácido láurico se añadió a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 6 horas, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante la noche. Los Ejemplos 119 y 120 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 100 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

- 15 Tabla 20. Composiciones de los Ejemplos 118 a 120

	Componente (a)	Componente (b)		Componente (c)
	Desmodur N100 (g)	Compuesto	Cantidad (g)	Ácido láurico (g)
Ej. 118	15,0	triestearato de sorbitano	59,87	
Ej. 119	1,5	triestearato de sorbitano	5,68	0,08
Ej. 120	2,2	triestearato de sorbitano	5,95	0,68

Tabla 21. Datos de comportamiento de los Ejemplos 118 a 120

	Algodón		Poliéster	
	Gota de agua	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 118	3	100	3	100
Ej. 119	3	80	3	90
Ej. 120	2	70	2	90

Ejemplos 121 a 124

5 Los Ejemplos 121 a 124 siguen el procedimiento del Ejemplo 65, usando isocianato DESMODUR N-100, triestearato de sorbitano y un reactivo adicional según se describe en la Tabla 22. El reactivo adicional se añadió a la reacción después de que el triestearato de sorbitano y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 6 horas, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante la noche. Los Ejemplos 121 a 124 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

Tabla 22. Composiciones de los Ejemplos 121 a 124

	Componente (a)	Componente (b)	Componente (c)	
	Desmodur N100 (g)	triestearato de sorbitano (g)	dodecanomercaptano (g)	ácido 3-mercaptopropiónico (g)
Ej. 121	1,5	6,0	0,08	0
Ej. 122	1,5	3,2	0,78	0
Ej. 123	1,5	6,0	0	0,05
Ej. 124	1,5	3,2	0	0,41

10

Tabla 23. Datos de comportamiento de los Ejemplos 122 a 125

	Algodón		Poliéster	
	Gota de agua	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 121	3	90	3	100
Ej. 122	3	80	3	85
Ej. 123	4	75	3	100
Ej. 124	4	85	3	90

Ejemplos 125 a 131

15 Los Ejemplos 125 a 131 siguen el procedimiento del Ejemplo 65, usando isocianato DESMODUR N-100, triestearato de sorbitano y un reactivo adicional según se describe en la Tabla 24. El reactivo adicional se añadió a la reacción después de que el triestearato de sorbitano y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 6 horas, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante la noche. Para los ejemplos 130 a 132, se incluyó carbonato sódico (0,075 g) durante la reacción del isocianato y el triestearato de sorbitano. Los Ejemplos 125 a 131 se aplicaron como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l (Ejemplos 125 a 128) o 100 g/l (Ejemplos 129 a 131) y se probaron según los métodos de prueba descritos anteriormente.

20

Ejemplo 132

El Ejemplo 132 sigue los procedimientos de los Ejemplos 1 (compuestos) y el Ejemplo 2 (dispersiones), usando isocianato DESMODUR N-3300, dos compuestos de Fórmula (Ia) y un diglicérido C18 según se describe en la Tabla

24. El diglicérido C18 y monoestearato de sorbitano se añadieron a la reacción después de que el compuesto de Fórmula (Ia) inicial y el isocianato se hubieran hecho reaccionar durante 1 hora, y la mezcla de reacción se calentó a 80°C durante cuatro horas adicionales. El Ejemplo 132 se aplicó como dispersiones a materiales textiles en 60 g/l y se probó según los métodos de prueba descritos anteriormente.

5 Tabla 24. Composiciones de los Ejemplos 125 a 132

Ej.	Componente (a)		Componente (b)		Componente (c)	
	Desmodur N100 (g)	Desmodur N3300 (g)	Compuesto(s)	Cant(s) (g)	Compuesto	Cant (g)
125	1,5	0	triestearato de sorbitano	6,0	monoestearato de triglicerol	0,05
126	1,5	0	triestearato de sorbitano	3,15	monoestearato de triglicerol	0,5
127	1,5	0	triestearato de sorbitano	6,0	diestearato de hexaglicerol	0,07
128	1,5	0	triestearato de sorbitano	3,15	diestearato de hexaglicerol	0,65
129	1,5	0	triestearato de sorbitano	5,55	mono(caprilato/caprato) de decaglicerilo	0,38
130	1,6	0	triestearato de sorbitano	4,67	mono(caprilato/caprato) de decaglicerilo	1,58
131	1,5	0	triestearato de sorbitano	5,56	Poliglicerol-3	0,21
132	15,0	0	triestearato de sorbitano / monoestearato de sorbitano	48,08/ 1,35	Diestearato de glicerol	12,69

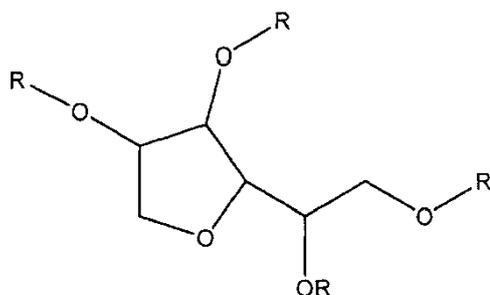
Tabla 25. Datos de comportamiento de los Ejemplos 126 a 133

	Algodón		Poliéster	
	Gota de agua	Pulverización	Gota de agua	Pulverización
Ej. 125	3	85	3	90
Ej. 126	3	85	3	90
Ej. 127	3	85	3	90
Ej. 128	3	75	3	85
Ej. 129	3	80	3	90
Ej. 130	3	70	3	70
Ej. 131	3	70	3	95
Ej. 132	4	80	3	85

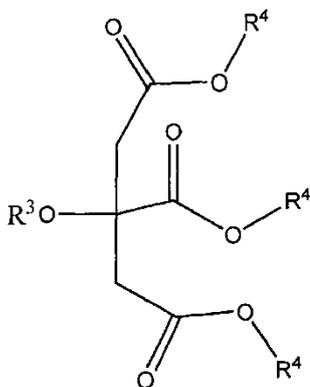
REIVINDICACIONES

1. Una composición que comprende una dispersión acuosa de un compuesto que no tiene grupos isocianato sin reaccionar para impartir repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos, en donde el compuesto se prepara mediante el procedimiento que comprende:

- 5 (i) hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (la) o (lb):



(la)



(lb)

- 10 en las que cada R es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n es independientemente de 0 a 20;

cada m es independientemente de 0 a 20;

m+n es mayor que 0;

- 15 cada R<sup>1</sup> es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

cada R<sup>2</sup> es independientemente -H o un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

o mezcla de los mismos,

- 20 con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (la) entonces al menos uno de R o R<sup>2</sup> sea -H;

cada R<sup>3</sup> es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada R<sup>4</sup> es independientemente -H, un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado, o combinaciones de los mismos;

- 25 -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n' es independientemente de 0 a 20;

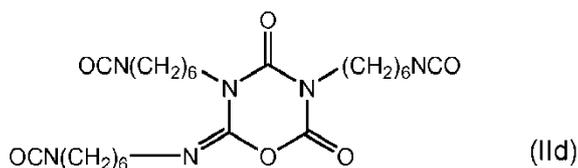
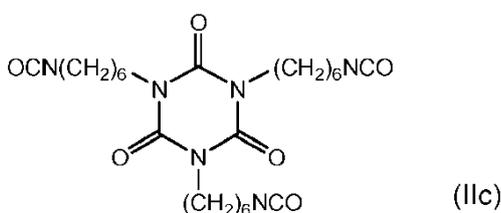
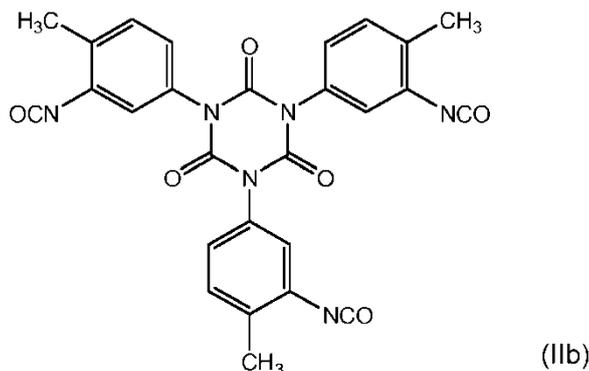
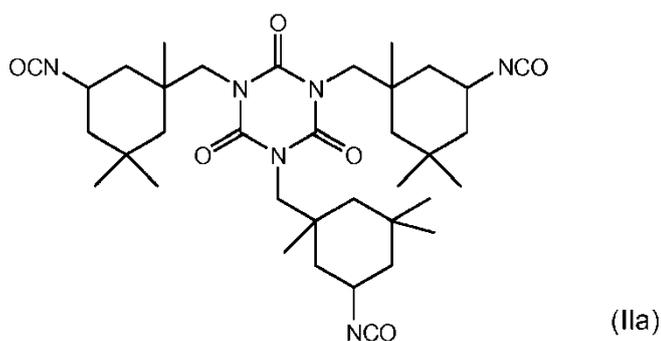
cada m' es independientemente de 0 a 20;

m'+n' es mayor que 0;

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ib), entonces el compuesto esté monosustituido, disustituido o trisustituido con grupos alquilo y al menos un R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> o R<sup>4</sup> sea un -H.

2. La composición según la reivindicación 1, en la que los compuestos de fórmula (Ia) y (Ib) son al menos 50% de origen biológico.

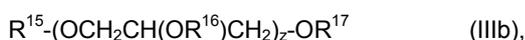
- 5 3. La composición según la reivindicación 1, en la que el diisocianato o poliisocianato se selecciona del grupo que consiste en homopolímero de diisocianato de hexametileno, isocianato de 3-isocianatometil-3,4,4-trimetilciclohexilo, bis-(4-isocianatociclohexil)metano y trimeros de diisocianato de las fórmulas (IIa), (IIb), (IIc) y (IId):



4. La composición según la reivindicación 1, en la que la etapa (i) comprende además hacer reaccionar (c) al menos un segundo compuesto seleccionado de agua, al menos un compuesto orgánico de Fórmula (IIIa)



15 compuestos orgánicos de Fórmula (IIIb)

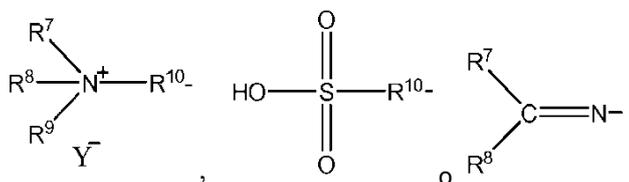


o mezclas de los mismos, en donde

R<sup>5</sup> se selecciona de un alquilo lineal o ramificado C<sub>1</sub> a C<sub>30</sub> que comprende opcionalmente al menos un grupo insaturado, un alquilo lineal o ramificado C<sub>1</sub> a C<sub>30</sub> con funcionalidad hidroxilo, un políeter C<sub>1</sub> a C<sub>30</sub> lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo, un poliéster lineal o ramificado con funcionalidad hidroxilo,

20

ramificado con funcionalidad hidroxilo o amina, un alquilo lineal o ramificado C<sub>1</sub> a C<sub>30</sub> con funcionalidad tiol, un alquilo lineal o ramificado C<sub>1</sub> a C<sub>30</sub> con funcionalidad amino,



en donde R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup> y R<sup>9</sup> son cada uno independientemente -H, alquilo C<sub>1</sub> a C<sub>6</sub>, o combinaciones de los mismos;

5 R<sup>10</sup> es un grupo alquilo divalente de 1 a 20 carbonos;

X es un grupo funcional reactivo con isocianato tal como -OH, -C(O)OH, -SH, -NH(R<sup>12</sup>), -O-(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>s</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>t</sub>-H o -[C(O)]-O-(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>s</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>t</sub>-H;

R<sup>12</sup> es -H o un grupo alquilo C<sub>1</sub> a C<sub>6</sub> monovalente;

10 R<sup>15</sup>, R<sup>16</sup> y R<sup>17</sup> son cada uno independientemente un -H; -R<sup>18</sup>, -C(O)R<sup>18</sup> con la condición de que al menos un R<sup>15</sup>, R<sup>16</sup> o R<sup>17</sup> sea un -H;

R<sup>18</sup> es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

z es de 1 a 15;

Y es -Cl;

15 s es un número entero de 0 a 50;

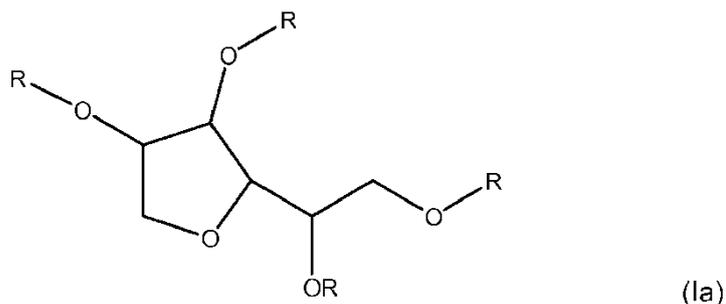
t es un número entero de 0 a 50;

s+t es mayor que 0.

5. La composición según la reivindicación 4, en la que el segundo compuesto (c) es de Fórmula (IIIa) y X es -O-(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>s</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>t</sub>-H o -[C(O)]-O-(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>s</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>t</sub>-H.

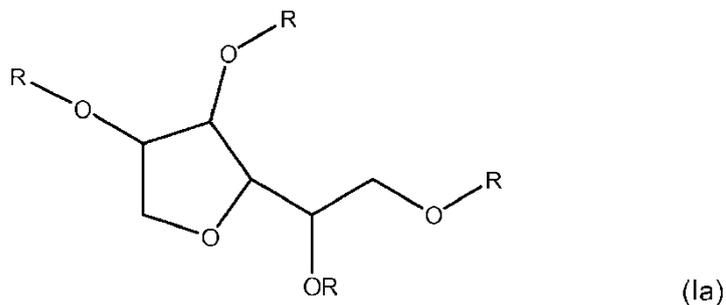
20 6. La composición según la reivindicación 4, en la que el segundo compuesto (c) es de Fórmula (IIIb).

7. La composición según la reivindicación 1, en la que (b) es al menos un compuesto seleccionado de la fórmula (Ia):



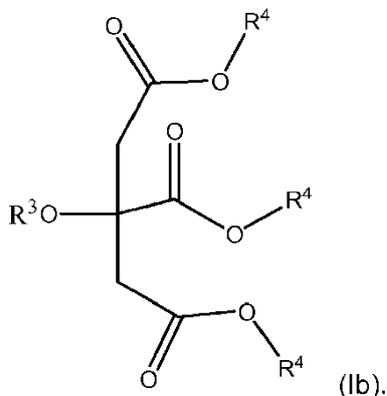
en la que R es independientemente un -H; -R<sup>1</sup> o -C(O)R<sup>1</sup>.

8. La composición según la reivindicación 1, en la que (b) es al menos un compuesto seleccionado de la fórmula (Ia):



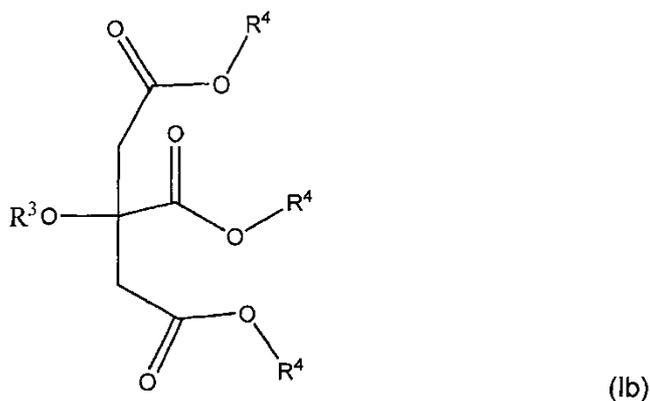
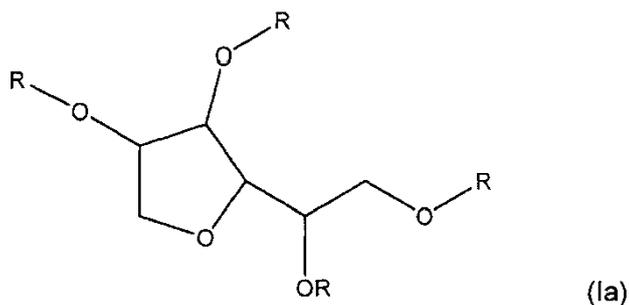
en la que R es independientemente un -H;  $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_n(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{O})_m\text{R}^2$  o  $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_n(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{O})_m\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ .

9. La composición según la reivindicación 1, en la que (b) es al menos un compuesto seleccionado de la fórmula (Ib):



5 10. Un método para preparar una composición acuosa, comprendiendo dicha composición un compuesto que no tiene grupos isocianato sin reaccionar, que comprende:

(i) hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib):



10 en las que cada R es independientemente un -H;  $-\text{R}^1$ ;  $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ ;  $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_n(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{O})_m\text{R}^2$  o  $-(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_n(\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{O})_m\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ ;

cada n es independientemente de 0 a 20;

cada m es independientemente de 0 a 20;

15  $m+n$  es mayor que 0;

cada  $\text{R}^1$  es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

cada  $\text{R}^2$  es independientemente -H o un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

o mezclas de los mismos,

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ia) entonces al menos uno de R o R<sup>2</sup> sea -H;

cada R<sup>3</sup> es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

- 5 cada R<sup>4</sup> es independientemente -H, un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado, o combinaciones de los mismos; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n' es independientemente de 0 a 20;

cada m' es independientemente de 0 a 20;

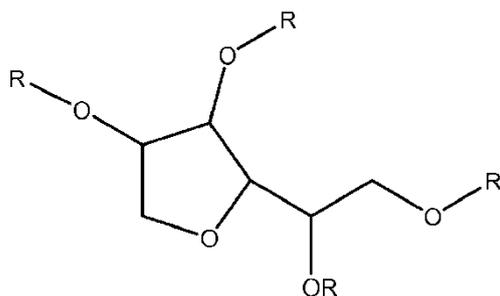
- 10 m'+n' es mayor que 0;

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ib), entonces el compuesto esté monosustituido, disustituido o trisustituido con grupos alquilo y al menos un R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> o R<sup>4</sup> sea un -H; y

(ii) añadir agua y tensioactivos opcionales al compuesto.

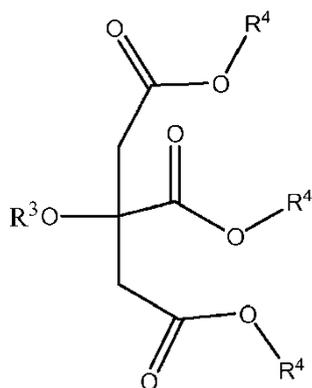
- 15 11. Un método para tratar un sustrato fibroso que comprende aplicar a la superficie del sustrato una composición acuosa que comprende un compuesto que no tiene grupos isocianato sin reaccionar, secar el sustrato fibroso tratado y curar el sustrato fibroso tratado mediante calentamiento, dicho compuesto preparado al

(i) hacer reaccionar (a) al menos un compuesto que contiene grupos isocianato seleccionado de isocianato, diisocianato, poliisocianato, o una mezcla de los mismos, y (b) al menos un compuesto reactivo con isocianato seleccionado de la fórmula (Ia) o (Ib):



20

(Ia)



(Ib)

en las que cada R es independientemente un -H; -R<sup>1</sup>; -C(O)R<sup>1</sup>; -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>R<sup>2</sup> o -(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>O)<sub>m</sub>C(O)R<sup>1</sup>;

cada n es independientemente de 0 a 20;

- 25 cada m es independientemente de 0 a 20;

m+n es mayor que 0;

cada R<sup>1</sup> es independientemente un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 5 a 29 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

cada  $R^2$  es independientemente -H o un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado;

o mezclas de los mismos,

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ia), entonces al menos uno de R o  $R^2$  sea -H;

5 cada  $R^3$  es independientemente un -H;  $-R^1$ ;  $-C(O)R^1$ ;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ;

cada  $R^4$  es independientemente -H, un grupo alquilo lineal o ramificado que tiene de 6 a 30 carbonos que comprende opcionalmente al menos 1 enlace insaturado, o combinaciones de los mismos;  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mR^2$  o  $-(CH_2CH_2O)_n(CH(CH_3)CH_2O)_mC(O)R^1$ ;

10 cada  $n'$  es independientemente de 0 a 20;

cada  $m'$  es independientemente de 0 a 20;

$m'+n'$  es mayor que 0;

con la condición de que cuando el compuesto sea de la Fórmula (Ib), entonces el compuesto esté monosustituido, disustituido o trisustituido con grupos alquilo, y al menos un  $R^2$ ,  $R^3$  o  $R^4$  sea un -H,

15 proporcionando dicho compuesto repelencia al agua y opcionalmente eliminación de manchas a sustratos que entran en contacto con el mismo.

12. Un sustrato tratado según el método según la reivindicación 11.

20 13. El sustrato según la reivindicación 12, que es una fibra, un hilo, una tela, una mezcla de telas, un material textil, un material no tejido hidroligado, una alfombra, papel o cuero de algodón, celulosa, lana, seda, rayón, aramida, acetato, un material acrílico, yute, sisal, algas marinas, fibra de coco, poliamida, poliéster, poliolefina, poliacrilonitrilo, polipropileno, poliaramida, o combinaciones de los mismos.