

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 676 187**

51 Int. Cl.:

C11D 3/39	(2006.01)
A01N 59/00	(2006.01)
A01N 37/16	(2006.01)
C07C 407/00	(2006.01)
C07C 409/24	(2006.01)
B01F 5/06	(2006.01)
B01J 19/24	(2006.01)
B01J 4/00	(2006.01)
B01F 15/02	(2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **20.12.2011 E 13185496 (0)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **02.05.2018 EP 2687094**

54 Título: **Generación de ácidos peroxcarboxílicos a pH alcalino y su uso como agentes blanqueantes textiles y antimicrobianos**

30 Prioridad:

29.12.2010 US 201061427965 P
29.12.2010 US 201061427951 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
17.07.2018

73 Titular/es:

ECOLAB USA INC. (100.0%)
370 Wabasha Street N
St. Paul, Minnesota 55102-1390, US

72 Inventor/es:

FAST, JONATHAN P.;
HEI, ROBERT D.P.;
STAUB, RICHARD;
DUERRSCHMIDT, THOMAS J.;
FORTH, PETER J.;
LI, JUNZHONG;
MCSHERRY, DAVID D.;
MERZ, THOMAS y
WINTER, JOHANNES

74 Agente/Representante:

ELZABURU, S.L.P

ES 2 676 187 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

Generación de ácidos peroxycarboxílicos a pH alcalino y su uso como agentes blanqueantes textiles y antimicrobianos

Campo de la invención

- 5 La presente descripción se refiere a métodos para formar composiciones de ácido percarboxílico mixto in situ.

Antecedentes de la invención

Los ácidos peroxycarboxílicos son conocidos para su uso como agentes antimicrobianos y blanqueadores. También se conocen sistemas mixtos de ácido peroxycarboxílico para su uso como agentes antimicrobianos y blanqueadores. Sin embargo, existen desventajas en el uso de estos agentes antimicrobianos y blanqueadores. Por ejemplo, se sabe que el ácido peroxycarboxílico más comúnmente utilizado, el ácido peroxiacético, tiene un fuerte olor acre. Además, los perácidos (por ejemplo, los peroxiacidos), tales como el ácido peroxycarboxílico, tienen desventajas químicas conocidas, a saber, son relativamente inestables en solución y se descomponen en oxiácidos ordinarios y oxígeno.

Las composiciones de ácido peroxycarboxílico convencionales se hacen a través de una reacción de equilibrio catalizada por ácido. Muy a menudo, los ácidos peroxycarboxílicos se generan en una planta química, y luego se envían a los clientes para su uso en el sitio. Debido a la limitada estabilidad en almacenamiento de los ácidos peroxycarboxílicos, los ácidos peroxycarboxílicos deben envasarse en contenedores especiales y enviarse bajo las estrictas directrices del Departamento de Transporte (DOT). Ciertas mejoras en la estabilidad del ácido peroxycarboxílico han demostrado ser ventajosas para los fines de envío, como se describe en la Solicitud de Patente de Estados Unidos con el N° de Serie 11/847,604, titulada "Shelf Stable, Reduced Corrosion, Ready to Use Peroxycarboxylic Acid Antimicrobial Compositions". La mayoría de los productos comercialmente disponibles en una mezcla en equilibrio contienen un exceso de peróxido de hidrógeno en presencia de estabilizadores y catalizadores ácidos, para estabilizar y mejorar la vida útil de la composición. A pesar de las mejoras en la estabilidad, están presentes en las composiciones cantidades en exceso de reactivos (por ejemplo, ácidos, agentes oxidantes y estabilizantes) para ayudar a formar la cantidad deseada de perácidos y evitar la descomposición durante el transporte y el almacenamiento. Existen estas y otras desventajas para el uso de composiciones de perácido de equilibrio.

Los activadores del blanqueo son compuestos orgánicos con al menos un grupo acilo reactivo junto con un grupo saliente. Cuando se hacen reaccionar con un anión perhidroxilo, los activadores del blanqueo proporcionan un perácido orgánico in situ. Convencionalmente esto significa dentro de una lavadora, ya sea lavadora-extractora o lote continuo, es decir, un túnel, una lavadora. Se han utilizado activadores de blanqueo para activar blanqueantes peroxigenados, tales como peróxido de hidrógeno, para mejorar la eliminación de manchas a temperaturas de lavado más bajas.

Los activadores de blanqueo tradicionales sufren de varias limitaciones. Debido a que la reacción entre el activador y el anión perhidroxilo tiene lugar en un baño de lavado diluido, tanto la velocidad como la extensión de la reacción se reducen en comparación del caso de que la solución de lavado esté más concentrada. Además, el activador del blanqueo debe equilibrar entre un pH altamente alcalino que promueve una perhidrólisis rápida y un pH menos alcalino donde el perácido formado es más efectivo. Se sabe que los perácidos proporcionan un blanqueo óptimo próximo a su valor pKa (por ejemplo, pKa 8,2 para el ácido peroxiacético). Sin embargo, los activadores de blanqueo convencionales exhibirán muy poca perhidrólisis a ese bajo pH. Para equilibrar estos objetivos, un valor de pH de aproximadamente 10 se utiliza convencionalmente para los activadores de blanqueo, aunque no es el punto óptimo para la formación de perácidos ni el rendimiento del perácido. Dadas estas limitaciones, sigue existiendo la necesidad de un sistema activador de blanqueo que, al aumentar tanto la concentración como el pH, pueda generar perácidos de manera más eficiente. Uno de tales métodos es la generación in situ de composiciones de perácidos que pueden generarse ex situ a una aplicación de lavado, tal como en una lavadora o lavadora de túnel, a una concentración y un pH más altos, y luego ser transferidos a un recipiente de lavado donde el perácido pueda actuar a un pH más bajo y pueda combinarse opcionalmente in situ con detergentes y/o tensioactivos para una eficacia sinérgica.

El documento US 2007/0274857 describe una composición para la producción de un esterilizador que comprende un éster de un alcohol polihídrico y un ácido orgánico que tiene un grupo hidrocarbonado y peróxido de hidrógeno. Los perácidos se estabilizan con ácidos.

El documento WO 93/01716 se refiere a concentrados microbianos peroxiacidos y usa disoluciones que pueden sanitizar diversas superficies tales como instalaciones y equipamiento encontrado en las industrias de procesamiento de alimentos y de servicio alimentario - y diversas superficies inanimadas en la industria del cuidado de la salud.

55 Por consiguiente, un objetivo de la invención reivindicada es generar ácidos percarboxílicos mixtos en el sitio bajo un pH alcalino para el blanqueo textil y la actividad antimicrobiana.

Un objetivo adicional de la invención reivindicada es desarrollar métodos de generación rápida de ácidos percarboxílicos mixtos a un pH alcalino para aplicaciones de blanqueo, incluyendo, por ejemplo, el cuidado textil.

Otro objetivo de la invención es desarrollar métodos de generación rápida de ácidos percarboxílicos mixtos a pH alcalino para aplicaciones antimicrobianas, incluyendo, por ejemplo, el cuidado de la salud y otras aplicaciones.

5 Breve resumen de la invención

En algunos aspectos, la presente descripción se refiere a un método para formar una composición de ácido percarboxílico mixto que comprende (a) proporcionar una mezcla de reacción que comprende: (i) un primer éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18; (ii) una fuente de alcalinidad seleccionada del grupo que consiste en un hidróxido de metal alcalino, un hidróxido de metal alcalino-térreo, un silicato de metal alcalino, boratos y mezclas de los mismos; y (iii) un agente oxidante; (b) permitir que la mezcla de reacción reacciones durante una cantidad suficiente de tiempo, y después añadir un segundo éster de un alcohol polihídrico y un C1 a C18; (c) después de la adición del segundo éster permitir que la mezcla reaccione durante una cantidad de tiempo suficiente tal que se forme ex situ una composición de ácido peroxicarboxílico mixto forma dicha actividad blanqueante y antimicrobiana y/o composición sanitizante y/o desinfectante a partir de dicha actividad blanqueante y antimicrobiana y/o aplicación sanitizante y/o desinfectante; en donde la mezcla de reacción tiene un pH mayor que 12, no está en equilibrio, y contiene menos de 0,5 % en peso de un agente estabilizante; y (d) opcionalmente proporcionar dicha actividad blanqueante y antimicrobiana y/o composición sanitizante y/o desinfectante con una fuente de tensioactivo para el blanqueo sinérgico y eficacia desinfectante en el sitio en el que se va a usar.

De acuerdo con los diversos aspectos de la invención, los métodos para preparar las composiciones de ácido percarboxílico individuales para las aplicaciones de blanqueo y actividad antimicrobiana y/o desinfección y/o esterilización se producen a un pH alcalino ex situ hasta un punto de uso y combinación con una fuente de tensioactivo y/o detergente para el blanqueo y la actividad antimicrobiana y/o desinfectar y/o esterilizar. Los métodos de fabricación de las composiciones pueden incluir cualquiera de las realizaciones de la invención descritas en la presente memoria, incluyendo el uso de diversos reactivos obtenidos como reactivos individuales y/o el uso de una variedad de formulaciones concentradas de premezcla. En algunos aspectos, la mezcla de reacción comprende: (i) una primera premezcla de reactivo que comprende dicho éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18 y dicho agente oxidante, y (ii) una segunda fuente de reactivo que comprende dicha fuente de alcalinidad, en el que dicha premezcla de reactivo comprende además al menos un reactivo seleccionado del grupo que consiste en un agente dispersante, un disolvente, agua y mezclas de los mismos.

30 Breve descripción de los dibujos

La figura 1 muestra una ilustración gráfica de las reducciones en log de esporas de *C. difficile* para diferentes sustancias de ensayo en tiempos de contacto variables que demuestran la eficacia de la invención reivindicada.

Se describirán en detalle diversas realizaciones de la presente invención con referencia a los dibujos, en los que los números de referencia similares representan partes similares a lo largo de las diversas vistas.

35 Descripción detallada de la invención

La presente descripción se refiere a composiciones de ácido peroxicarboxílico generadas ex situ para aplicaciones de blanqueo y/o actividad antimicrobiana y/o desinfectantes y/o esterilizantes. En particular, la presente invención utiliza métodos para generar composiciones de ácido peroxicarboxílico a partir de una reacción basada en éster sin equilibrio, así como métodos para fabricar y usar tales composiciones. Las composiciones descritas en la presente invención tienen muchas ventajas respecto a las composiciones de ácido peroxicarboxílico basadas en el equilibrio convencionales. Por ejemplo, después de la formación del ácido peroxicarboxílico de acuerdo con los métodos descritos en el presente documento, las composiciones tienen niveles significativamente más bajos de reactivos comparado con las composiciones de ácido peroxicarboxílico generadas usando reacciones de equilibrio junto con mayores cantidades de ácido peroxicarboxílico reaccionado y menos residuos reactivos sin reaccionar comparado con las composiciones de ácido peroxicarboxílico generadas usando reacciones de equilibrio. Además, a medida que las composiciones se generan en el sitio para una aplicación particular de blanqueo y/o actividad antimicrobiana y/o desinfección y/o esterilización, las composiciones, por tanto, pueden estar libres de estabilizantes. Además, debido a la capacidad de generar las composiciones de ácido peroxicarboxílico descritas en el sitio, puede eliminarse la etapa de enviar composiciones de ácido peroxicarboxílico peligrosas a un usuario final. Las composiciones de ácido peroxicarboxílico generadas en el sitio de acuerdo con la invención pueden combinarse opcionalmente con agentes tensioactivos para una sinergia adicional en la eficacia del blanqueo y/o de la actividad antimicrobiana y/o desinfectante y/o esterilizante. Notablemente, cuando se utiliza, el tensioactivo se añade después de la generación de las composiciones de ácido peroxicarboxílico (por ejemplo, hacia abajo de la línea, tal como un método de lavado en túnel) para aumentar la eficacia antimicrobiana y la eficacia del blanqueo (por ejemplo, se consiguen resultados sinérgicos). Estos y otros beneficios de la presente invención se describen en este documento.

Definiciones

Para que la presente invención pueda entenderse más fácilmente, se definen en primer lugar ciertos términos. A menos que se defina lo contrario, todos los términos técnicos y científicos usados en la presente memoria tienen el mismo significado que comúnmente entiende un experto en la técnica a la que pertenecen las realizaciones de la invención. Al describir y reivindicar las realizaciones de la presente invención, se utilizará la siguiente terminología de acuerdo con las definiciones que se exponen a continuación.

Tal como se usa en la presente memoria, el término "aproximadamente" se refiere a la variación en la cantidad numérica que puede ocurrir, por ejemplo, a través de procedimientos típicos de medición y manipulación de líquidos usados para hacer concentrados o usar soluciones en el mundo real; por error inadvertido en estos procedimientos; a través de diferencias en la fabricación, fuente o pureza de los ingredientes usados para preparar las composiciones o llevar a cabo los métodos. El término "aproximadamente" también abarca cantidades que difieren debido a diferentes condiciones de equilibrio para una composición resultante de una mezcla inicial particular. Tanto si son modificadas o no por el término "aproximadamente", las reivindicaciones incluyen equivalentes a las cantidades.

Como se usa en este documento, el término "alquilo" o la expresión "grupos alquilo" se refiere a hidrocarburos saturados que tienen uno o más átomos de carbono, incluyendo grupos alquilo de cadena lineal (por ejemplo, metilo, etilo, propilo, butilo, pentilo, hexilo, heptilo, octilo, nonilo, decilo, etc.), grupos alquilo cíclicos (o grupos "cicloalquilo" o "alicíclicos" o "carbocíclicos") (por ejemplo, ciclopropilo, ciclopentilo, ciclohexilo, cicloheptilo, ciclooctilo, etc.), grupos alquilo de cadena ramificada (por ejemplo, isopropilo, terc-butilo, sec-butilo, isobutilo, etc.), y grupos alquilo sustituidos con alquilo (por ejemplo, grupos cicloalquilo sustituidos con alquilo y grupos alquilo sustituidos con cicloalquilo).

A menos que se especifique lo contrario, el término "alquilo" incluye tanto a "alquilos no sustituidos" como a "alquilos sustituidos". Como se usa en el presente documento, la expresión "alquilos sustituidos" se refiere a grupos alquilo que tienen sustituyentes que reemplazan uno o más hidrógenos en uno o más carbonos del esqueleto hidrocarbonado. Tales sustituyentes pueden incluir, por ejemplo, alqueno, alquino, halógeno, hidroxilo, alquilcarbonilo, arilcarbonilo, alcoxycarbonilo, ariloxi, ariloxycarbonilo, carboxilato, alquilcarbonilo, arilcarbonilo, alcoxycarbonilo, aminocarbonilo, alquilaminocarbonilo, dialquilaminocarbonilo, alquiltiocarbonilo, alcoxilo, fosfato, fosfonato, fosfinato, ciano, amino (incluyendo alquilamino, dialquilamino, arilamino, diarilamino, y alquilarilamino), acilamino (incluyendo alquilcarbonilamino, arilcarbonilamino, carbamoilo y ureido), imino, sulfhidrido, alquiltio, ariltio, tiocarboxilato, sulfatos, alquilsulfino, sulfonatos, sulfamoilo, nitro, trifluorometilo, ciano, azido, heterocíclico, alquilarilo o aromático (incluyendo grupos heteroaromáticos).

En algunas realizaciones, los alquilos sustituidos pueden incluir un grupo heterocíclico. Tal como se utiliza en la presente memoria, la expresión "grupo heterocíclico" incluye estructuras de anillo cerradas análogas a grupos carbocíclicos en las que uno o más de los átomos de carbono en el anillo es un elemento distinto del carbono, por ejemplo nitrógeno, azufre u oxígeno. Los grupos heterocíclicos pueden estar saturados o insaturados. Ejemplos de grupos heterocíclicos incluyen, pero sin limitación, aziridina, óxido de etileno (epóxidos, oxiranos), tiorano (episulfuros), dioxirano, azetidina, oxetano, tietano, dioxetano, ditinetano, ditio, azolidina, pirrolidina, pirrolina, oxolano, y furano.

El término "limpieza", tal como se utiliza en la presente memoria, significa llevar a cabo o ayudar en la eliminación de la suciedad, el blanqueo, la reducción de la población microbiana o una combinación de los mismos.

Para el propósito de esta solicitud de patente, se logra una reducción microbiana satisfactoria cuando las poblaciones microbianas se reducen en al menos aproximadamente el 50%, o significativamente más de lo que se logra mediante un lavado con agua. Las mayores reducciones en las poblaciones microbianas proporcionan mayores niveles de protección.

Como se usa en la presente memoria, el término "desinfectante" se refiere a un agente que mata todas las células vegetativas incluyendo la mayoría de los microorganismos patógenos reconocidos, de acuerdo con un estándar aplicable para el lavado y/u otros tratamientos superficiales suaves. La definición de desinfectante para superficies duras se refiere a menudo al procedimiento descrito en A.O.A.C. Use Dilution Methods, métodos oficiales de análisis de la Asociación de químicos oficiales de análisis, párrafo 955.14 y secciones aplicables, 15ª edición, 1990 (Directiva EPA 91-2). Según la invención, estas definiciones pueden requerir la adaptación para la colada y/u otras aplicaciones de superficies blandas en oposición a los tratamientos de superficies duras. Tal como se utiliza en la presente memoria, la expresión "desinfección de alto nivel" o "desinfectante de alto nivel" se refiere a un compuesto o composición que mata sustancialmente todos los organismos, excepto los altos niveles de esporas bacterianas, y se efectúa con un germicida químico registrado para la comercialización como esterilizante por la Administración de Drogas y Alimentos.

Como se usa en el presente documento, la expresión "desinfección de nivel intermedio" o "desinfectante de nivel intermedio" se refiere a un compuesto o composición que mata micobacterias, la mayoría de virus y bacterias con un germicida químico registrado como tuberculocida por la Environmental Protection Agency (EPA). Tal como se utiliza

en la presente memoria, la expresión "desinfección de bajo nivel" o "desinfectante de bajo nivel" se refiere a un compuesto o composición que mata a algunos virus y bacterias con un germicida químico registrado como desinfectante de hospitales por la EPA.

5 Tal como se utiliza en la presente memoria, el término "ensuciamiento" se entenderá que significa la presencia indeseable de cualquier deposición de material orgánico o inorgánico en la composición o química aplicable.

10 Tal como se utiliza en la presente memoria, el término "libre" o la expresión "sustancialmente libre" se refiere a una composición, mezcla o ingrediente que no contiene un compuesto particular o al que no se ha añadido un compuesto particular o un compuesto que contiene un compuesto particular. Si el compuesto particular estuviera presente por contaminación y/o uso en una cantidad mínima de una composición, mezcla o ingredientes, la cantidad del compuesto será inferior a aproximadamente 3% en peso. Más preferiblemente, la cantidad del compuesto es menor que 2% en peso, menor que 1% en peso, y más preferiblemente la cantidad del compuesto es menor que 0,5% en peso.

15 Tal como se utiliza en este documento, el término "lavado" se refiere a elementos o artículos que se limpian en una lavadora de ropa. En general, el lavado de ropa se refiere a cualquier elemento o artículo hecho o que incluye materiales textiles, telas tejidas, telas no tejidas y tejidos de punto. Los materiales textiles pueden incluir fibras naturales o sintéticas tales como fibras de seda, fibras de lino, fibras de algodón, fibras de poliéster, fibras de poliamida, tales como nilón, fibras acrílicas, fibras de acetato y mezclas de las mismas incluyendo mezclas de algodón y poliéster. Las fibras pueden ser tratadas o no tratadas.

20 Tal como se utiliza en la presente memoria, el término "microorganismo" se refiere a cualquier organismo no celular o unicelular (incluyendo colonias). Los microorganismos incluyen todos los procariontes. Los microorganismos incluyen bacterias (incluyendo cianobacterias), esporas, líquenes, hongos, protozoos, virinos, viroides, virus, fagos y algunas algas. Tal como se utiliza en este documento, el término "microbio" es sinónimo de microorganismo.

25 Como se usa en la presente memoria, los términos "mezclado" o "mezcla" cuando se usan en relación con la "composición de ácido peroxicarboxílico" o "ácidos peroxicarboxílicos" se refieren a una composición o mezcla que incluye más de un ácido peroxicarboxílico, tal como una composición o mezcla que incluye ácido peroxiacético POAA) y ácido peroxioctanoico (POOA).

30 Tal como se utilizan en el presente documento, los términos "mezclado", "mezcla" o la expresión "más de uno", cuando se usan en relación con ésteres adecuados para usar en la formación de las composiciones descritas en la presente memoria se refieren a una composición o mezcla que incluye más de un grupo éster sometido a una reacción de perhidrólisis para formar la composición peroxicarboxílica. El uso de al menos un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico de C1 a C18 de acuerdo con la invención incluye el uso de diversas formas del éster, tales como las mono, di, tri formaciones y/o mezclas de las mismas del éster particular. Por consiguiente, los ejemplos de formas adecuadas de ésteres para uso como "mezclas" o que comprenden "más de una" incluyen, pero no se limitan a, monoctanoato de glicerol, dioctanoato de glicerol, trioctanoato de glicerol, monoctanoato de sorbitán, dioctanoato de sorbitán, trioctanoato de sorbitán y mezclas y derivados de los mismos. Además, como un experto en la técnica deberá determinar basándose en la descripción de la invención descrita en la presente memoria, el uso de una fuente de éster, tal como octanoato de glicerol, puede comprender además el uso de mono, diésteres y triésteres y/o mezclas de los mismos.

40 De acuerdo con diversas realizaciones de la invención, el uso de "un" éster, tal como glicérido octanoico, puede incluir el uso de una "mezcla" de ésteres en la que está presente más de una formación del éster, incluyendo por ejemplo las mono-, di- y tri-formaciones y/o mezclas de los mismos.

45 Tal como se usa en este documento, las frases "olor desagradable", "olor irritante", o "mal olor" se refieren a un olor fuerte, acre o agrio o un ambiente atmosférico del que una persona típica se retira si es capaz de hacerlo. El tono hedónico proporciona una medida del grado en que un olor es agradable o desagradable. Un "olor desagradable", un "olor irritante" o un "mal olor" tienen un tono hedónico que lo considera desagradable o más desagradable que una solución de ácido acético al 5% en peso, ácido propiónico, ácido butírico o mezclas de los mismos.

Como se usa en la presente memoria, los términos "perácido" o "peroxiácido" se refieren a un ácido que tiene el hidrógeno del grupo hidroxilo reemplazado por un grupo hidroxilo. Los perácidos de oxidación se denominan en este documento ácidos peroxicarboxílicos.

50 Tal como se usa en la presente memoria, la expresión "alcohol polihídrico" o el término "poliol" se refiere a un alcohol que tiene dos o más grupos hidroxilo. Los alcoholes polihídricos adecuados para uso en las composiciones incluyen, pero no se limitan a, azúcares, alcoholes de azúcar, y mezclas y derivados de los mismos.

55 Tal como se usa en la presente memoria, el término "desinfectante" se refiere a un agente que reduce el número de contaminantes bacterianos a niveles seguros. De acuerdo con una realización, la reducción se puede juzgar por requisitos de salud pública, tales como normas aplicables para la reducción de niveles bacterianos en la colada y/u otras aplicaciones de superficies blandas. En una realización, los desinfectantes para uso en esta invención proporcionarán al menos una reducción del 99,999% (reducción de orden de 5 log). Estas reducciones pueden

evaluarse utilizando un procedimiento establecido en "Germicidal and Detergent Sanitizing Action of Disinfectants, Official Methods of Analysis of the Association of Official Analytical Chemists", párrafo 960.09 y secciones aplicables, 15ª edición, 1990 (Directiva EPA 91-2), con adaptación para el uso en aplicaciones de lavandería en oposición a tratamientos de superficies duras. De acuerdo con esta referencia, un desinfectante de superficies duras debe proporcionar una reducción del 99,999% (reducción del orden de 5 log) en 30 segundos a temperatura ambiente, 25 ± 2°C, contra varios organismos de ensayo.

Tal como se utiliza en esta invención, el término "esporicida" se refiere a un agente o proceso físico o químico que tiene la capacidad de causar una reducción superior al 90% (reducción de 1 logaritmo) en la población de esporas de *Bacillus cereus* o *Bacillus subtilis* en 10 segundos a 60°C. En ciertas realizaciones, las composiciones esporicidas descritas en la presente memoria proporcionan una reducción superior al 99% (reducción de 2 logaritmos), superior a una reducción del 99,99% (reducción de 4 logaritmos) o superior a una reducción del 99,999% (reducción de 5 logaritmos) en dicha población en 10 segundos a 60°C. Para los propósitos de la presente invención, un esporicida proporciona los mismos niveles de reducción en la población de esporas en condiciones de lavado de ropa y/u otras aplicaciones de superficies blandas, en oposición a los tratamientos de superficies duras.

La diferenciación de la actividad "biocida" o "estática" antimicrobiana, cuyas definiciones describen el grado de eficacia, y los protocolos oficiales de laboratorio para medir esta eficacia son consideraciones para comprender la relevancia de los agentes antimicrobianos y las composiciones. Las composiciones antimicrobianas pueden afectar a dos tipos de daño celular microbiano. El primero es una acción letal e irreversible que resulta en la destrucción o incapacitación completa de las células microbianas. El segundo tipo de daño celular es reversible, de modo que si el organismo se libera del agente, puede multiplicarse nuevamente. El primero se denomina microbiocida y el último, microbiostático. Un antiséptico y un desinfectante son, por definición, agentes que proporcionan actividad antimicrobiana o microbiocida. Por el contrario, un conservante se describe generalmente como un inhibidor o composición microbiostática.

Como se usa en este documento, el término "azúcar" se refiere a hidratos de carbono que incluyen uno, dos o más grupos de sacarosa. Los azúcares son un grupo de compuestos orgánicos relacionados por su estructura molecular que comprenden miembros más simples de la clase general de hidratos de carbono. Cada azúcar consiste en una cadena de 2 a 7 átomos de carbono (generalmente 5 ó 6). Los azúcares tienen la fórmula general $C_nH_{2n}O_n$, donde n está entre 2 y 7. Uno de los carbonos lleva oxígeno aldehídico o cetónico que puede combinarse en formas acetales o cetales y los átomos de carbono restantes normalmente llevan átomos de hidrógeno y grupos hidroxilo. En general, los azúcares son más o menos dulces, solubles en agua, incoloros, inodoros, sustancias ópticamente activas que pierden agua, que se caramelizan y carbonizan cuando se calientan. Los azúcares ejemplares incluyen, pero no se limitan a glucosa, sacarosa, lactosa y mezclas de los mismos.

Tal como se utiliza en la presente memoria, la expresión "alcohol de azúcar" se refiere a la forma hidrogenada de un carbohidrato, en la que el grupo carbonilo del carbohidrato se ha reducido a un grupo hidroxilo primario o secundario. Ejemplos de alcoholes de azúcar incluyen, pero no se limitan a, glicerol, eritritol, pentaeritritol, treitol, arabitol, xilitol, ribitol, manitol, sorbitol, sorbitano, dulcitol, iditol, inositol, isomalt, maltitol, lactitol, poliglicitol, 1,4-ciclohexanodiol, y mezclas y derivados de los mismos. En algunas realizaciones, el alcohol de azúcar se selecciona entre glicerol, poliglicerol, sorbitol, sorbitán, y mezclas y derivados de los mismos.

Tal como se usa en la presente memoria, el término "aguas" incluye las aguas de proceso o de transporte de alimentos. Las aguas de proceso o de transporte de alimentos incluyen las aguas de transporte de productos (por ejemplo, como se encuentran en canales, transportadores de tuberías, rebanadoras, cortadoras, blanqueadoras, sistemas de retorta, lavadoras), aguas de aerosoles de cinta para líneas de transporte de alimentos, equipo para lavado de botas y manos, aclarador de tres fregaderos. Las aguas también incluyen aguas domésticas y recreativas tales como piscinas, balnearios, canales recreativos y toboganes de agua, fuentes.

Tal como se usa en la presente memoria descriptiva, el "porcentaje en peso", el "% en peso", el "porcentaje en peso", el "% en peso" y sus variaciones se refieren a la concentración de una sustancia como el peso de esa sustancia dividida por el peso total de la composición y multiplicado por 100. Se entiende que, tal como se usa en este documento, "porcentaje", "%" y similares están destinados a ser sinónimos de "porcentaje en peso", "% en peso", etc.

Debe tenerse en cuenta que, tal como se utiliza en esta memoria descriptiva y en las reivindicaciones adjuntas, las formas singulares "un" "uno/a" y "el/la" incluyen a los referentes plurales a menos que el contenido indique claramente lo contrario. Así, por ejemplo, la referencia a una composición que contiene "un compuesto" incluye una composición que tiene dos o más compuestos. También debe observarse que el término "o" se emplea generalmente en su sentido que incluye "y/o" a menos que el contenido indique claramente lo contrario.

Realizaciones de la invención

En algunos aspectos, la presente descripción se refiere a la generación de composiciones formadoras de ácido peroxycarboxílico, no equilibradas o estequiométricas (también denominadas composiciones de ácido peroxycarboxílico) para su uso en diversos blanqueos textiles y/o actividades antimicrobiana y/o desinfección y/o

esterilización, opcionalmente usando la sinergia de tales composiciones con tensioactivos. También se describen métodos para usar las composiciones de ácido peroxicarboxílico para diversas aplicaciones, incluyendo el blanqueo textil y/o la actividad antimicrobiana y/o desinfección y/o esterilización en el uso combinado con tensioactivos.

5 Los ácidos peroxicarboxílicos son conocidos para su uso como antimicrobianos y agentes blanqueadores. Las composiciones de ácido peroxicarboxílico convencionales se forman a través de una reacción de equilibrio catalizada por ácido. Aunque las reacciones de equilibrio catalizadas con ácido se usan comúnmente para generar ácidos peroxicarboxílicos, hay muchas desventajas de tales composiciones, incluyendo, pero no limitadas al uso de cantidades en exceso de reactivos requeridos para impulsar la reacción de equilibrio, junto con las condiciones de envío peligrosas requeridas para proporcionar a un cliente las composiciones de ácido peroxicarboxílico. Los presentes procedimientos para formar las composiciones de ácido peroxicarboxílico adecuadas para su uso sinérgico con agentes tensioactivos para el blanqueo y/o la actividad antimicrobiana y/o desinfección y/o esterilización de acuerdo con la invención evitan estas cuestiones.

15 Aunque no es necesario comprender el mecanismo para poner en práctica la presente invención y aunque la presente invención no se limita a ningún mecanismo particular de acción, se contempla que, en algunas realizaciones, los beneficios proporcionados de acuerdo con la invención resulten de la producción de un química de no equilibrio. De manera beneficiosa, los perácidos reaccionados de acuerdo con la invención se obtienen en mayores cantidades que en la química de equilibrio en la que estarían presentes cantidades mayores de peróxido de hidrógeno sin reaccionar y otros reactivos. De acuerdo con la presente invención, una solución acuosa del o de los ácidos peroxicarboxílicos producidos contiene una concentración relativamente más alta de ácido(s) peroxicarboxílico en comparación con el componente de peróxido de hidrógeno sin reaccionar. Esto es significativamente ventajoso para las aplicaciones antimicrobianas, desinfectantes, blanqueadoras y otras aplicaciones de limpieza descritas en este documento como deseables de acuerdo con las realizaciones de la invención.

25 En algunos aspectos, los métodos de la invención generan perácido de aproximadamente 0,25% a aproximadamente 20%. En algunos aspectos, los métodos de la invención generan perácido de aproximadamente 2%, al menos aproximadamente 3%, preferiblemente al menos aproximadamente 4%, más preferiblemente al menos aproximadamente 5%, y aún más preferiblemente al menos aproximadamente 6% de perácido de las mezclas de reacción (reactivos) según la invención, a saber, la reacción de un éster o una mezcla de ésteres de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18, una fuente de alcalinidad, un agente oxidante y opcionalmente un agente acidulante. En lugar de proporcionar una composición de perácido en una mezcla en equilibrio, la generación in situ de la composición de perácido permite que los perácidos se produzcan estequiométricamente seleccionando la composición de los materiales de partida. Por lo tanto, los sistemas in situ según la invención generan concentraciones más elevadas del(de los) ácido(s) peroxicarboxílico(s) que están disponibles en sistemas de equilibrio. En particular, de acuerdo con la invención, los sistemas generan concentraciones más altas del(los) ácido(s) peroxicarboxílico(s) y concentraciones más bajas de peróxido de hidrógeno (por ejemplo, reactivos sin reaccionar) que las alcanzadas en sistemas de equilibrio. Además, los métodos de la presente invención generan ácido(s) peroxicarboxílico(s) en condiciones alcalinas. Opcionalmente, las soluciones alcalinas se pueden ajustar después a condiciones ácidas para estabilizar el(los) ácido(s) peroxicarboxílico(s) y asegurar que las composiciones de ácido(s) peroxicarboxílico(s) no se disocien, proporcionando de este modo estabilidad durante un tiempo suficiente para permitir el uso de las composiciones en sitio tras la generación, preferiblemente en cuestión de horas o días. Como se describe de acuerdo con la invención, los diversos métodos de uso descritos en la presente memoria no requieren la acidificación de las composiciones.

45 Como se hace referencia en la presente memoria, las composiciones que forman ácido peroxicarboxílico de acuerdo con la invención se refieren a la generación de ácidos peroxicarboxílicos ex situ al punto de aplicación (por ejemplo, lavadora-extractor o lavadora de túnel), en una reacción de no equilibrio. En realizaciones particulares de la invención, los métodos producen la base conjugada del perácido que se protonará al ácido peroxicarboxílico tras la acidificación. De acuerdo con aspectos adicionales de la invención, los métodos pueden producir composiciones de ácido peroxicarboxílico tras la acidificación.

Composiciones

50 En algunos aspectos, la presente descripción se refiere a composiciones que forman ácido peroxicarboxílico. Es decir, las composiciones son capaces de generar ácidos peroxicarboxílicos en el sitio, en una reacción de no equilibrio. Sorprendentemente, se ha encontrado que las composiciones de ácido peroxicarboxílico mixto, viz. Composiciones que forman dos o más ácidos peroxicarboxílicos, pueden formarse a un pH mayor que aproximadamente 12, o un pH mayor que aproximadamente 13. Los ácidos peroxicarboxílicos (o percarboxílicos) tienen generalmente la fórmula $R(CO_3H)_n$, donde, por ejemplo, R es un grupo alquilo, arilalquilo, cicloalquilo, aromático o heterocíclico, y n es uno, dos o tres y nombra prefijando el ácido original con peroxi. El grupo R puede estar saturado o insaturado así como sustituido o no sustituido.

60 En una realización de la invención, las composiciones que forman ácido peroxicarboxílico comprenden reactivos individuales combinados de acuerdo con la invención. Estos reactivos se describen en este documento individualmente a lo largo e incluyen al menos un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18, un

agente oxidante, una fuente de alcalinidad, disolventes y otros grupos funcionales. Alternativamente, puede haber beneficios de proporcionar los reactivos en diversas formulaciones de premezcla para disminuir el número de reactivos y/o aumentar la sencillez de la invención.

5 Además de la descripción relacionada con los reactivos y/o las premezclas concentradas adecuadas para uso de acuerdo con la invención, diversas realizaciones de las formulaciones de premezcla son particularmente adecuadas para su uso de acuerdo con la presente invención. En un aspecto particular, una formulación de premezcla concentrada comprende al menos un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico, un agente oxidante y un disolvente.

10 De acuerdo con una realización de la invención, el uso de un disolvente (por ejemplo, metanol) promueve el uso de diversas mezclas de ésteres. Como la selección de las diversas formas de un éster se ve afectada por la solubilidad en agua de las composiciones, el uso de un disolvente para aumentar la solubilidad en agua de la composición proporcionará beneficios para las composiciones usando una mezcla de ésteres, es decir, la forma de éster menos soluble (por ejemplo, tri-formaciones). Los disolventes adecuados para las formulaciones concentradas de premezcla según la invención incluyen, por ejemplo, disolventes orgánicos tales como alcohol, éter o cetona.
15 Preferiblemente, el disolvente es un alcohol soluble en agua, tal como etanol o metanol.

De acuerdo con una realización preferida de la invención, una formulación de premezcla concentrada puede comprender, consistir en y/o consistir esencialmente en al menos un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico, peróxido de hidrógeno y un disolvente de alcohol soluble en agua. Más preferiblemente, la formulación de premezcla concentrada puede comprender, consistir en y/o consistir esencialmente en octanoato de glicerol y/u
20 otras fuentes de éster de acuerdo con la invención, peróxido de hidrógeno y etanol. De acuerdo con una realización de la invención, la formulación de premezcla concentrada se combina a continuación con la fuente de alcalinidad y agua para formar la composición de ácido peroxicarboxílico de la invención.

Estos y otros reactivos y/o formulaciones concentradas de premezcla pueden usarse de acuerdo con la invención descrita en la presente memoria.

25 Ésteres

En algunos aspectos, las composiciones incluyen un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18. De acuerdo con una realización, el alcohol polihídrico también puede incluir un alcohol de azúcar. Las composiciones pueden incluir también más de una o una mezcla de ésteres de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18. Por ejemplo, en algunas realizaciones, las composiciones incluyen dos, tres o cuatro ésteres.
30 Cuando están presentes más de un éster, los ésteres pueden ser diferentes. Por ejemplo, en algunas realizaciones, las composiciones pueden incluir un primer éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C4, y un segundo éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C5 a C11. Para otro ejemplo, en algunas realizaciones, las composiciones pueden incluir un primer éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18 en una mono-, di- o tri-formación y un segundo éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18 en una mono-, di- o tri-formación. Cualquier experto en la técnica apreciará las diversas combinaciones de ésteres que se pueden usar para las composiciones de acuerdo con la invención.
35

Un ejemplo de un éster adecuado para su uso de acuerdo con la invención es el octanoato de glicerol. El octanoato de glicerol tiene múltiples componentes de éster y otros, incluyendo mono-octanoato de glicerol, dioctanoato de glicerol, tri-octanoato de glicerol y otros (glicerina, ácido graso, agua). Se aproxima un porcentaje de componentes estimado de aproximadamente 39,6% de mono-octanoato de glicerol, 24,5% de dioctanoato de glicerol, 1,42% de tri-octanoato de glicerol y 34,5% de otros (glicerina, ácido graso, agua).
40

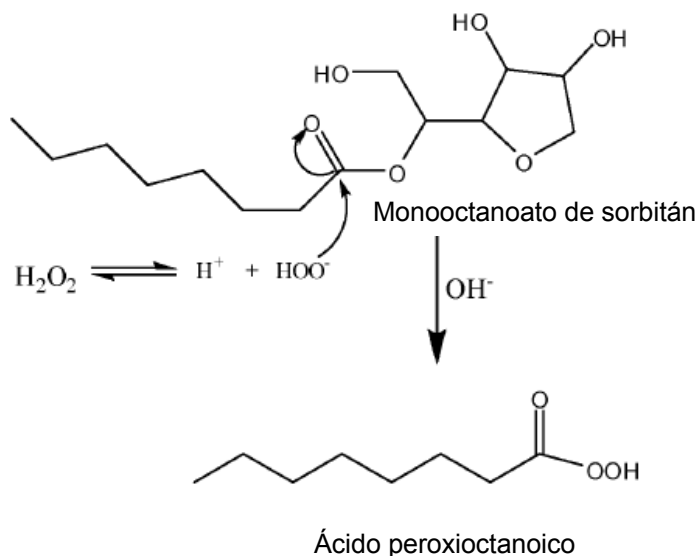
El uso de diversas formas de un éster (por ejemplo mono-, di- y/o tri-formaciones) para comprender una mezcla de ésteres afectará al rendimiento del perácido de una composición particular de acuerdo con la invención. Por ejemplo, las diversas formas del éster tendrán diferentes cinéticas en la generación de los perácidos de acuerdo con los métodos de la invención. Por ejemplo, en un aspecto, un éster de glicerol de mono-octanoato es más rápido en la generación del perácido que los ésteres de glicerol de di- o tri-octanoato. Además, la selección de las diversas formas de un éster se verá afectada adicionalmente por la solubilidad en agua de las composiciones y si se combinan ingredientes adicionales para afectar a la solubilidad (por ejemplo, disolventes) que favorecerían el uso de formas de éster menos solubles (por ejemplo, tri-formaciones). Por consiguiente, cualquier experto en la técnica de las cinéticas de reacción determinará los beneficios de usar diversas combinaciones o mezclas de ésteres de acuerdo con las composiciones y métodos de la invención.
45
50

Los ésteres para uso en la presente invención incluyen ésteres de alcoholes polihidroxilados con grupos salientes basados en ácido carboxílico. Se pueden incluir una variedad de ácidos carboxílicos. Los ácidos carboxílicos tienen generalmente la fórmula $R(\text{COOH})_n$, donde, por ejemplo, R es un grupo alquilo, arilalquilo, cicloalquilo, aromático o heterocíclico, y n es uno, dos o tres. En algunas realizaciones, el grupo saliente de ácido carboxílico es un ácido carboxílico C₅ a C₁₁. En algunas realizaciones, el grupo saliente de ácido carboxílico es un ácido carboxílico C₁ a C₄. En otras realizaciones, las composiciones incluyen dos ésteres de alcoholes polihídricos, teniendo cada éster un grupo saliente de ácido carboxílico diferente. Por ejemplo, las composiciones pueden incluir un éster de alcohol
55

polihídrico con un grupo saliente de ácido carboxílico de C₁ a C₄, e incluyen también un éster de alcohol polihídrico con un grupo saliente de ácido carboxílico de C₅ a C₁₁.

5 Ejemplos de ácidos carboxílicos adecuados incluyen, aunque sin limitación, los ácidos fórmico, acético, propiónico, butanoico, pentanoico, hexanoico, heptanoico, octanoico, noanoico, decanoico, undecanoico, dodecanoico, así como sus isómeros ramificados, láctico, maleico, ascórbico, cítrico, hidroxiacético, neopentanoico, neoheptanoico, neodecanoico, oxálico, malónico, succínico, glutárico, adipico, súbrico pimélico y sus mezclas.

10 Sin pretender estar limitado por ninguna teoría en particular, se piensa que los ésteres incluidos en las composiciones experimentan una reacción de perhidrólisis, formando de este modo la composición peroxicarboxílica. Una reacción ejemplar de perhidrólisis de acuerdo con la presente descripción se ilustra a continuación:



15 Como se puede ver en esta ilustración, se piensa que el agente oxidante, H₂O₂, perhidroliza el enlace éster, formando así el ácido percarboxílico correspondiente al grupo de ácido carboxílico escindido. En contraste con una reacción de equilibrio catalizada por ácido, la reacción es estequiométrica, es decir, no se requieren cantidades en exceso de los reactivos para la reacción. La cinética de la reacción depende del pH, y la reacción puede alcanzar el rendimiento máximo en el orden de los minutos. Los ésteres adecuados para uso incluyen, pero no se limitan a, glicérido mono-octanoico, glicérido dioctanoico, glicérido tri-octanoico, octanoato de poliglicerol, mono-octanoato de sorbitán, dioctanoato de sorbitán, tri-octanoato de sorbitán, laurato de sucrosido y mezclas y derivados de los mismos.

20 Las composiciones incluyen los ésteres en una cantidad suficiente para generar la cantidad deseada de ácido percarboxílico. En algunas realizaciones, las composiciones incluyen aproximadamente de 0,01% en peso a aproximadamente 95% en peso del éster, de aproximadamente 0,1% en peso a aproximadamente 50% en peso del éster, o de aproximadamente 1% en peso a aproximadamente 10% en peso del éster. En algunas realizaciones, más de un éster está presente en las composiciones. Cada éster puede estar presente en las composiciones en los porcentajes en peso anteriormente indicados.

30 A diferencia de las composiciones formadoras de ácidos peroxicarboxílicos de equilibrio ácido catalizadas convencionales, las composiciones de la presente invención pueden formarse usando una reacción de perhidrólisis de no equilibrio. Por lo tanto, no se necesita una cantidad en exceso de los reactivos de partida. Por consiguiente, después de la formación del ácido peroxicarboxílico, las composiciones contienen menos ácido carboxílico y más ácido peroxicarboxílico que una reacción de equilibrio equivalente. En algunas realizaciones, las composiciones contienen aproximadamente 1 parte de ácido percarboxílico por cada aproximadamente 1 parte de ácido carboxílico después de la perhidrólisis, o aproximadamente 6 partes de ácido percarboxílico por cada aproximadamente 1 parte de ácido carboxílico después de la perhidrólisis. En algunas realizaciones, las composiciones están libres o sustancialmente libres de ácidos carboxílicos después de la reacción de perhidrólisis.

35 Fuente de Alcalinidad

Las composiciones también incluyen una fuente de alcalinidad. La fuente de alcalinidad incluye un hidróxido de metal alcalino, un hidróxido de metal alcalinotérreo, un silicato de metal alcalino, boratos y mezclas de los mismos. Los hidróxidos de metal alcalino adecuados incluyen, pero no se limitan a, hidróxido de sodio, hidróxido de potasio y mezclas de los mismos. Los hidróxidos de metal alcalinotérreo adecuados incluyen, pero no se limitan a, hidróxido

de magnesio, hidróxido de calcio y mezclas y derivados de los mismos. Los silicatos de metales alcalinos adecuados incluyen, pero no se limitan a, silicato sódico y sus derivados.

5 La fuente de alcalinidad puede estar presente en las composiciones en una cantidad suficiente para proporcionar el pH deseado. En algunas realizaciones, las composiciones tienen un pH mayor que aproximadamente 12, mayor que aproximadamente 12,5 o mayor que aproximadamente 13. En algunas realizaciones, la fuente alcalina está presente en la composición de aproximadamente 0,001% en peso a aproximadamente 50% en peso, de aproximadamente 1% en peso a aproximadamente 30% en peso, o aproximadamente 10% en peso a aproximadamente 25% en peso. En algunas realizaciones, la fuente alcalina está presente desde aproximadamente el 25% en peso hasta aproximadamente el 50% en peso de la composición. Debe entenderse que todos los intervalos y valores entre estos intervalos y valores están abarcados por la presente descripción.

Agente oxidante

15 Las composiciones también incluyen un agente oxidante. El agente oxidante puede incluir una fuente de peróxido. Los agentes oxidantes adecuados para uso con las composiciones incluyen los siguientes tipos de compuestos o fuentes de estos compuestos, o sales de metales alcalinos que incluyen estos tipos de compuestos, o que forman un aducto con ellos: peróxido de hidrógeno, complejos de urea-peróxido de hidrógeno o donadores de peróxido de hidrógeno de: agentes oxidantes del grupo 1 (IA), por ejemplo peróxido de litio, peróxido de sodio; agentes oxidantes del grupo 2 (IIA), por ejemplo peróxido de magnesio, peróxido de calcio, peróxido de estroncio, peróxido de bario; agentes oxidantes del grupo 12 (IIB), por ejemplo peróxido de cinc; los agentes oxidantes del grupo 13 (IIIA), por ejemplo compuestos de boro, tales como perboratos, por ejemplo, el perborato sódico hexahidratado de la fórmula $\text{Na}_2[\text{B}_2(\text{O}_2)_2(\text{OH})_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (también llamado perborato sódico tetrahidratado); peroxiborato de sodio tetrahidratado de la fórmula $\text{Na}_2\text{B}_2(\text{O}_2)_2[(\text{OH})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (también denominado perborato sódico trihidratado); peroxiborato de sodio de la fórmula $\text{Na}_2[\text{B}_2(\text{O}_2)_2(\text{OH})_4]$ (también llamado monohidrato de perborato de sodio); agentes oxidantes del grupo 14 (IVA), por ejemplo persilicatos y peroxicarbonatos, que también se denominan percarbonatos, tales como persilicatos o peroxicarbonatos de metales alcalinos; agentes oxidantes del grupo 15 (VA), por ejemplo ácido peroxinitroso y sus sales; ácidos peroxifosfóricos y sus sales, por ejemplo, perfosfatos; agentes oxidantes del grupo 16 (VIA), por ejemplo ácidos peroxisulfúricos y sus sales, tales como ácidos peroximonosulfúricos y peroxidisulfúricos, y sus sales, tales como persulfatos, por ejemplo, persulfato sódico; y agentes oxidantes del grupo VIIa tales como periodato de sodio, perclorato de potasio. Otros compuestos activos de oxígeno inorgánico pueden incluir peróxidos de metal de transición; y otros compuestos de peróxígeno de este tipo, y mezclas de los mismos.

30 En algunas realizaciones, las composiciones de la presente invención emplean uno o más de los agentes oxidantes inorgánicos listados anteriormente. Agentes oxidantes inorgánicos adecuados incluyen ozono, peróxido de hidrógeno, aducto de peróxido de hidrógeno, agente oxidante del grupo IIIA, o donantes de peróxido de hidrógeno del agente oxidante del grupo VIA, agente oxidante del grupo VA, agente oxidante del grupo VIIA o mezclas de los mismos. Ejemplos adecuados de tales agentes oxidantes inorgánicos incluyen percarbonato, perborato, persulfato, perfosfato, persilicato, o mezclas de los mismos.

En algunas realizaciones, el agente oxidante incluye peróxido de hidrógeno, o una fuente o donante de peróxido de hidrógeno. En otras realizaciones, el agente oxidante incluye una fuente de peróxido seleccionada entre un percarbonato, un peróxido de hidrógeno de perborato de urea, peróxidos de PVP y mezclas de los mismos.

40 Las composiciones pueden contener una cantidad eficaz de un agente oxidante. En algunas realizaciones, las composiciones incluyen aproximadamente 0,001% en peso a aproximadamente 60% en peso del agente oxidante, o aproximadamente 1% en peso a aproximadamente 25% en peso del agente oxidante. En algunas realizaciones, las composiciones incluyen aproximadamente 30% en peso a aproximadamente 50% en peso del agente oxidante. Debe entenderse que todos los intervalos y valores entre estos intervalos y valores están abarcados por la presente invención.

45 Disolvente

En algunas realizaciones, las composiciones descritas en la presente memoria incluyen además un disolvente. En algunas realizaciones, el disolvente es agua. El agua puede proporcionarse mediante el uso de reactivos acuosos, es decir, el agente oxidante, fuente de alcalinidad. En otras realizaciones, se añade una cantidad adicional de agua a las composiciones. Las composiciones pueden estar libres o sustancialmente libres de cualquier agua añadida. También se puede usar un disolvente no acuoso en las composiciones. Por ejemplo, en algunas realizaciones, se incluye un alcohol como disolvente en las composiciones.

55 Las composiciones pueden incluir una cantidad eficaz de disolvente. En algunas realizaciones, las composiciones pueden incluir aproximadamente 10% en peso a aproximadamente 99% en peso de un disolvente, o aproximadamente 20% en peso a aproximadamente 80% en peso de un disolvente. En otras realizaciones, las composiciones pueden incluir más de aproximadamente 30% en peso, más de aproximadamente 50% en peso, más de aproximadamente 60% en peso o más de 70% de un disolvente. Debe entenderse que todos los valores e intervalos entre estos valores e intervalos están abarcados por la presente invención.

Ingredientes funcionales eliminados

A diferencia de las composiciones de ácido peroxicarboxílico basadas en equilibrio convencionales, las composiciones descritas en la presente invención se forman a partir de una reacción de no equilibrio. Además, la composición descrita en este documento puede usarse inmediatamente después de la generación. Por lo tanto, muchos de los ingredientes adicionales requeridos en composiciones basadas en equilibrio no necesitan ser incluidos en las presentes composiciones. De manera beneficiosa, el uso de la química de no equilibrio de acuerdo con la presente invención proporciona que las composiciones puedan contener menos que 0,5% en peso de un agente estabilizante.

Los agentes estabilizantes se añaden comúnmente a composiciones de ácido peroxicarboxílico de equilibrio para estabilizar el perácido y el peróxido de hidrógeno e impedir la descomposición de estos constituyentes dentro de las composiciones. Varias realizaciones de la invención no requieren el uso de al menos uno o más de dichos agentes estabilizantes. Ejemplos de agentes estabilizantes pueden incluir, por ejemplo, tensioactivos, acopladores, hidrótrofos, catalizadores ácidos que se usan convencionalmente en composiciones de perácido de equilibrio para estabilizar y mejorar la vida útil de la composición.

Otros ejemplos de agentes estabilizantes incluyen, por ejemplo, agentes quelantes o secuestrantes. Tales secuestrantes incluyen, pero no se limitan a, compuestos quelantes orgánicos que secuestran iones metálicos en disolución, particularmente iones de metales de transición. Tales secuestrantes incluyen agentes complejantes de ácidos orgánicos de amino o hidroxipolifosfónicos (ya sea en forma de ácidos o de sales solubles), ácidos carboxílicos (por ejemplo, policarboxilato polimérico), ácidos hidroxicarboxílicos, ácidos aminocarboxílicos o ácidos carboxílicos heterocíclicos, por ejemplo ácido piridina-2,6-dicarboxílico (ácido dipicolínico). El ácido dipicolínico, ácido 1-hidroxietilideno-1,1-difosfónico (CH₃C(PO₃H₂)₂OH) (HEDP), es otro ejemplo de agente estabilizante.

Ejemplos adicionales de agentes estabilizantes comúnmente utilizados en la química de equilibrio para estabilizar el perácido y el peróxido de hidrógeno y/o prevenir la oxidación prematura de la composición incluyen ácido fosfónico o sal de fosfonato. Los ácidos fosfónicos y las sales de fosfonato incluyen HEDP; ácido etilendiamino tetraquis metileno fosfónico (EDTMP); ácido dietilentriamina pentaquis metileno fosfónico (DTPMP); ácido ciclohexano-1,2-tetrametileno fosfónico; amino[ácido tri(metileno fosfónico)]; (etilendiamina [ácido tetrametileno-fosfónico]); ácido 2-fosfeno butano-1,2,4-tricarboxílico; o sales de los mismos, tales como sales de metales alcalinos, sales de amonio o sales de alquiloil amina, tales como sales de mono, di o tetra-etanolamina; picolínico, ácido dipicolínico o mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, los fosfonatos orgánicos, por ejemplo, HEDP son bien conocidos como agentes estabilizantes usados.

Ejemplos de agentes quelantes de aditivos alimenticios comercialmente disponibles incluyen los fosfonatos vendidos bajo el nombre comercial de DEQUEST® que incluye, por ejemplo, ácido 1-hidroxietilideno-1,1-difosfónico, disponible en Monsanto Industrial Chemicals Co., St. Louis, MO, como DEQUEST® 2010; amino(ácido tri(metileno fosfónico)), (N[CH₂PO₃H₂]₃), disponible en Monsanto como DEQUEST® 2000; etilendiamina [ácido tetra(metileno fosfónico)] disponible en Monsanto como DEQUEST® 2041; y ácido 2-fosfonobutano-1,2,4-tricarboxílico disponible de Mobay Chemical Corporation, División de Productos Químicos Inorgánicos, Pittsburgh, PA, como Bayhibit AM. Otro secuestrante ejemplar puede ser o incluir un secuestrante del tipo ácido aminocarboxílico. Los secuestrantes del tipo ácido aminocarboxílico adecuados incluyen los ácidos o sales de metal alcalino de los mismos, por ejemplo, aminoacetatos y sales de los mismos. Los aminocarboxilatos adecuados incluyen el ácido N-hidroxietilaminodiacético; ácido hidroxietilnodiaminotetraacético, ácido nitrilotriacético (NTA); ácido etilendiaminotetraacético (EDTA); ácido N-hidroxietil-etilendiaminotriacético (HEDTA); ácido dietilentriaminopentaacético (DTPA); y ácido alanina-N,N-diacético; y mezclas de los mismos. Otros secuestrantes más incluyen policarboxilatos, incluyendo, por ejemplo, ácido poliacrílico, copolímero maleico/olefínico, copolímero acrílico/maleico, ácido polimetacrílico, copolímeros de ácido acrílico-ácido metacrílico, poliacrilamida hidrolizada, polimetacrilamida hidrolizada, copolímeros de poliamida-metacrilamida hidrolizados, poliacrilonitrilo hidrolizado, polimetacrilonitrilo hidrolizado, copolímeros de acrilonitrilo-metacrilonitrilo hidrolizados, ácido polimaleico, ácido polifumárico, copolímeros de ácido acrílico e itacónico, policarboxilato de fosfina, formas de ácidos o sales de los mismos y mezclas de los mismos.

Además, a diferencia de las composiciones de ácido peroxicarboxílico basadas en equilibrio convencionales, las presentes composiciones también pueden estar libres de, o sustancialmente libres de, acopladores o tensioactivos. Esto es especialmente ventajoso para composiciones que incorporan ácidos peroxicarboxílicos C5 a C18. Es decir, en condiciones de perhidrólisis, los aniones de ácido peroxicarboxílico C5-C18 generados son solubles en agua. Si se acidifican los aniones (por ejemplo, composiciones formadoras de ácido peroxicarboxílico) para aplicaciones de uso final, las concentraciones de ácidos peroxicarboxílicos están por debajo del límite de solubilidad en agua de los ácidos peroxicarboxílicos. Por lo tanto, no se necesitan acopladores para acoplar los ácidos peroxicarboxílicos en solución.

Ingredientes funcionales adicionales

Las composiciones también pueden incluir ingredientes funcionales adicionales. Los ingredientes funcionales adicionales adecuados para uso en las presentes composiciones incluyen, pero no se limitan a, acidulantes,

hidrótopos, dispersantes, agentes antimicrobianos, trazadores ópticos, agente de solidificación, agente estimulante estético (es decir, colorante (por ejemplo, pigmento), odorante o perfume), entre cualquier número de constituyentes que se puedan añadir a la composición. Por ejemplo, los ingredientes funcionales adecuados para diversas realizaciones de la invención son hidrótopos, que pueden ser deseados para producir composiciones o dispersantes transparentes que son más eficientes en la producción de dispersiones homogéneas. Tales coadyuvantes pueden preformularse con las presentes composiciones o añadirse a las composiciones después de la formación, pero antes de su uso. Las composiciones también pueden contener cualquier número de otros constituyentes según sea necesario por la aplicación, los cuales son conocidos y que pueden facilitar la actividad de las presentes composiciones.

10 Formulaciones premezcla

En una realización, los reactivos descritos en la presente memoria (por ejemplo, al menos un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico, fuente de alcalinidad, agente oxidante) se pueden combinar en varias formulaciones de premezcla para reducir el número de materiales de partida crudos requeridos para los métodos y composiciones y simplificar adicionalmente los métodos de la invención. De acuerdo con una realización de este tipo, el suministro de formulaciones de premezcla asegura una entrega consistente y estable de los reactivos.

Las formulaciones de premezclas adecuadas para su uso de acuerdo con la invención pueden comprender, constar y/o consistir esencialmente en al menos un éster, un agente oxidante y mezclas de los mismos. Las formulaciones de premezclas adecuadas para uso de acuerdo con la invención pueden comprender, constar y/o consistir esencialmente en al menos un éster, un agente oxidante, un disolvente y mezclas de los mismos. Las formulaciones de premezclas adecuadas para uso de acuerdo con la invención también pueden comprender, constar y/o consistir esencialmente en al menos un éster, un agente oxidante, agua, disolventes, agentes dispersantes y mezclas de los mismos.

Como cualquier experto en la técnica sabrá, el uso de premezclas hace uso de ingredientes funcionales adicionales con el propósito de estabilizar el concentrado de premezcla para su uso en las composiciones y métodos de acuerdo con la invención. Por ejemplo, pueden ser deseables hidrotropos, agentes dispersantes y/u otros disolventes para mantener la solubilidad y estabilidad de una premezcla concentrada particular. El uso de cualquier acoplador o agente dispersante (tal como un tensioactivo) dentro de una formulación de premezcla es distinto del uso de tensioactivos en la generación y almacenamiento convencionales de las químicas de perácidos, en donde los acopladores son críticos para establecer y mantener una solución estable y transparente de la química del perácido generada.

De acuerdo con la invención, el uso de agentes dispersantes solos dentro de una formulación de premezcla concentrada no estabiliza la composición de la premezcla. Más bien, los agentes dispersantes se proporcionan en una cantidad adecuada para proporcionar composiciones de perácidos meta-estables generadas a partir de la premezcla después de la acidificación, antes de una dilución adicional para su aplicación. Se encontró que los agentes dispersantes más eficaces eran tensioactivos aniónicos, y se sabe que este tipo de tensioactivo tiene un alto perfil espumante. Para aplicaciones que implican acciones mecánicas (p. ej., desinfectante CIP), la alta propiedad espumante de la composición es indeseable. Por lo tanto, además de las razones económicas, se prefiere utilizar una cantidad mínima del agente dispersante para conseguir una composición de perácido meta-estable para satisfacer la aplicación de los requisitos de uso.

De acuerdo con una realización de la invención menos de aproximadamente 10 ppm, preferiblemente menos de aproximadamente 9 ppm, menos de aproximadamente 8 ppm, menos de aproximadamente 7 ppm, menos de aproximadamente 6 ppm, menos de aproximadamente 5 ppm, menos de aproximadamente 4 ppm, menos de aproximadamente 3 ppm, menos de aproximadamente 2 ppm o menos de aproximadamente 1 ppm de un agente dispersante se incluye en la química del perácido generado como resultado del uso de un agente dispersante de tensioactivo en una formulación de premezcla concentrada de acuerdo con la invención. Esto es distinto del nivel de tensioactivos en las soluciones de uso de una química de perácidos tradicional, donde las cantidades de tensioactivos son normalmente superiores a aproximadamente 50 ppm, superiores a aproximadamente 60 ppm, superiores a aproximadamente 70 ppm, superiores a aproximadamente 80 ppm, superiores a aproximadamente 90 ppm, o superiores a aproximadamente 100 ppm.

De acuerdo con una realización adicional de la invención, menos de aproximadamente 2% del agente dispersante está presente en la composición de premezcla, en la que se requieren al menos aproximadamente 5%, aproximadamente 6%, aproximadamente 7%, aproximadamente 8% o aproximadamente 9% para proporcionar la solución clara y estable de una química del perácido generado cuando se acidifica. Esto es distinto de la química del perácido generada de acuerdo con la invención en la que se genera una química meta-estable. Aunque no se desea limitarse a ninguna teoría particular del mecanismo de acción de la invención, la composición metaestable generada es una composición de color lechoso que tiene estabilidad durante al menos unas pocas horas.

De acuerdo con una realización de la invención, el uso de un disolvente (por ejemplo, etanol) es una manera eficiente de preparar una composición de premezcla estable. Los disolventes adecuados para las formulaciones concentradas de premezcla según la invención incluyen, por ejemplo, disolventes orgánicos tales como alcohol, éter

o cetona. Preferiblemente, el disolvente es un alcohol soluble en agua, tal como etanol, metanol, propanol, isopropanol y/o butanol. Como cualquier experto en la técnica determinará, los diversos isómeros de los disolventes, incluyendo los alcoholes, se incluyen adicionalmente dentro del alcance de los disolventes adecuados para su uso con las formulaciones concentradas de la premezcla de la invención.

- 5 De forma beneficiosa, el uso de una formulación de premezcla concentrada todavía no requiere el uso de quelantes y/o estabilizadores. Como resultado, independientemente de si se utilizan reactivos individuales o formulaciones de premezcla concentradas de acuerdo con la invención, tanto los reactivos como las composiciones de perácidos generados de acuerdo con la invención proporcionan químicas sostenibles como resultado de la eliminación del uso de diversos estabilizadores y/o cantidades adicionales de química requeridas para impulsar la formación de la
- 10 química del perácido tradicional. Como resultado de una entrada reducida de reactivos para las composiciones de acuerdo con la invención (por ejemplo, resultante del uso de una reacción de no equilibrio) hay una corriente de residuos significativamente reducida (por ejemplo, cualquier reactivo y/o porcentaje de composición que no impacte la micro-eficacia de las composiciones). En su lugar, la presente invención proporciona cantidades incrementadas de productos post-reacción (por ejemplo, perácidos) con cantidades disminuidas de reactivos sin reaccionar.
- 15 En un aspecto de la invención, una formulación de premezcla puede suministrar el éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico y el agente oxidante. En un aspecto, una formulación de premezcla incluye un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico, un agente oxidante y un agente dispersante. En otro aspecto, una formulación de premezcla incluye un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico, un agente oxidante, un agente dispersante y agua.
- 20 Los agentes dispersantes adecuados para usar de acuerdo con las formulaciones de premezcla concentradas de la invención incluyen polímeros, agentes tensioactivos o cualquier compuesto que ayudará a conseguir una solución metaestable después de la perhidrólisis del éster a través de la interacción con los peroxi ácidos grasos generados por la perhidrólisis. Estos pueden incluir, por ejemplo, ácidos oleicos sulfonados (SOA), ácido 1-octanosulfónico (NAS), laurilsulfonatos de sodio (SLS) y similares.
- 25 En otro aspecto, una formulación de premezcla incluye un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico, un agente oxidante y un disolvente. El etanol y el metanol son ejemplos de disolventes adecuados para su uso en la estabilización de la formulación de premezcla concentrada de acuerdo con la invención. El uso del disolvente en ciertas realizaciones evita el uso de un agente dispersante para la estabilidad de la premezcla. Sin embargo, en realizaciones alternativas una formulación de premezcla puede incluir un éster de un alcohol polihídrico y un ácido
- 30 carboxílico, un agente oxidante, un agente dispersante y un disolvente. Sin pretender limitarse a ninguna teoría o mecanismo de acción particular de la invención, el uso combinado de un agente dispersante y un disolvente dentro de una formulación de premezcla concentrada reduce la necesidad general de un agente dispersante tensioactivo en la composición de premezcla.
- 35 En aún otro aspecto, una formulación de premezcla concentrada incluye un agente oxidante y un agente dispersante.
- En ciertas realizaciones, la composición de premezcla concentrada incluye aproximadamente de 0,001 a aproximadamente 90% en peso del éster del alcohol polihídrico y un ácido carboxílico, de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 90% en peso de éster, de aproximadamente 1 a aproximadamente 75% en peso de éster, de aproximadamente 10 a aproximadamente 75% en peso de éster, de aproximadamente 25 a aproximadamente 75%
- 40 en peso de éster, de aproximadamente 30 a aproximadamente 70% en peso de éster, o de aproximadamente 30 a aproximadamente 65% en peso de éster.
- En ciertas realizaciones, la composición de premezcla concentrada incluye además de aproximadamente 0,001 a aproximadamente 99% en peso de agente oxidante, de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 95% en peso de agente oxidante, de aproximadamente 1 a aproximadamente 90% en peso de agente oxidante, de aproximadamente 2,5 a aproximadamente 60% en peso de agente oxidante, de 5 a 50% en peso de agente oxidante o de 10 a 40% en peso de agente oxidante.
- 45 En ciertas realizaciones, la composición de premezcla concentrada incluye además aproximadamente de 0,001 a aproximadamente 50% en peso de agente dispersante, de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 40% en peso de agente dispersante, de aproximadamente 1 a aproximadamente 30% en peso de agente dispersante, de aproximadamente 5 a aproximadamente 30% en peso de agente dispersante, de 5 a 20% en peso de agente dispersante o de 5 a 15% en peso de agente dispersante. La cantidad de agente dispersante se selecciona para asegurar que solo suficiente agente dispersante obtiene una solución meta-estable después de la perhidrólisis y la acidificación. De manera beneficiosa de acuerdo con la invención, las formulaciones de premezcla no contienen suficiente agente dispersante para obtener una solución de premezcla de una fase.
- 50 En ciertas realizaciones, la composición de premezcla concentrada incluye además aproximadamente de 0,001 a aproximadamente 80% en peso de disolvente, de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 40% en peso de disolvente, de aproximadamente 1 a aproximadamente 30% en peso de disolvente, de aproximadamente 5 a aproximadamente 30% en peso de disolvente, de aproximadamente 5 a aproximadamente 20% en peso de
- 55

disolvente, o de aproximadamente 5 a aproximadamente 15% en peso de disolvente. El nivel de disolvente se selecciona para asegurar la cantidad suficiente para solubilizar el(los) éster(es) de alcohol polihídrico en la formulación de premezcla concentrada. Como cualquier experto en la técnica determinará, la cantidad de disolvente requerida para tal solubilización variará dependiendo del tipo y nivel de éster(es) en la composición de premezcla.

- 5 En ciertas realizaciones, la composición de premezcla concentrada incluye además aproximadamente de 0,001 a aproximadamente 90% en peso de agua, de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 80% en peso de agua, de aproximadamente 1 a aproximadamente 75% en peso de agua, de aproximadamente 5 a aproximadamente 60% en peso de agua, de aproximadamente 10 a aproximadamente 50% en peso de agua, o de aproximadamente 20 a aproximadamente 40% en peso de agua. Las composiciones de premezcla pueden incluir cualquiera de estos intervalos o cantidades, incluyendo aquellas no modificados por aproximadamente.

10 El pH de la formulación de premezcla concentrada de acuerdo con la invención está preferiblemente entre 2 y aproximadamente 10, preferiblemente entre aproximadamente 3 y aproximadamente 9 y más preferiblemente entre aproximadamente 5 y aproximadamente 7. A continuación, el pH de la formulación de la premezcla se combina con una fuente de alcalinidad para aumentar el pH a un pH mayor que aproximadamente 12, superior a aproximadamente 12,5 o mayor que aproximadamente 13 de acuerdo con la invención.

Métodos para preparar usando reactivos individuales

20 En algunos aspectos, la presente descripción proporciona métodos para preparar las composiciones de ácido peroxycarboxílico descritas en la presente memoria. El método incluye combinar al menos un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18, una fuente de alcalinidad y un agente oxidante. Esta mezcla de reacción permite la perhidrólisis del éster para formar el correspondiente ácido peroxycarboxílico C1 a C18. Sin pretender estar limitado por ninguna teoría en particular, se cree que el agente oxidante presente perhidroliza los enlaces éster, formando de este modo los correspondientes ácidos percarboxílicos.

En algunas realizaciones, el pH de la mezcla de reacción es mayor que aproximadamente 12. En otras realizaciones, la mezcla de reacción es mayor que aproximadamente 12,5, o mayor que aproximadamente 13.

- 25 Los reactivos se pueden combinar de cualquier manera adecuada. Por ejemplo, los reactivos se pueden añadir secuencialmente a un recipiente de reacción, y mezclarse durante una cantidad de tiempo eficaz para formar la concentración deseada de ácido percarboxílico. Alternativamente, los reactivos pueden añadirse sustancialmente y simultáneamente a un recipiente de reacción, y mezclarse durante una cantidad de tiempo efectiva para formar la concentración deseada de ácido percarboxílico. En algunas realizaciones, los reactivos se mezclan durante aproximadamente 5 a aproximadamente 30 minutos. En otras realizaciones, los reactivos se mezclan durante aproximadamente 10, aproximadamente 15, aproximadamente 20 o aproximadamente 25 minutos.

35 De acuerdo con la presente invención, se forma una composición de ácido percarboxílico mixto usando un éster de alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18 como agentes de partida y/o más que forman un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18 como agentes de partida (por ej. mono, di, tri o mezclas de los mismos para las formaciones de éster). Por ejemplo, en algunas realizaciones, se forma una composición de ácido percarboxílico mixto que incluye ácido peracético y ácido peroctanoico. Para formar esta composición, se combina un éster de alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C2 se combina con un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C8, una fuente de alcalinidad y un agente oxidante.

40 Cuando se forma una composición perácida mixta, el orden de adición se puede modificar dependiendo de las condiciones de reacción. Por ejemplo, en algunas realizaciones, todos los reactivos se pueden combinar y mezclar en una etapa. Alternativamente, en algunas realizaciones, uno de los ésteres se puede añadir a la vasija de reacción, con un agente oxidante, y una fuente de alcalinidad añadida secuencialmente. Se puede permitir que esta mezcla reaccione durante una cantidad eficaz de tiempo antes de que se añada el segundo éster a la mezcla de reacción. La preparación del sistema de ácido percarboxílico mixto en etapas también permite el control de la temperatura de reacción. Por ejemplo, dividiendo las reacciones de perhidrólisis en dos etapas, la temperatura global de la mezcla de reacción es menor.

45 El orden de adición y el tiempo de reacción se pueden variar de acuerdo con la composición de ácido percarboxílico deseada. Es decir, la reacción se puede controlar para favorecer las condiciones de reacción para la formación de cada uno de los ácidos percarboxílicos individualmente. Por ejemplo, si se sabe que uno de los ésteres tiene una velocidad de reacción de la perhidrólisis cinéticamente más lenta, dicho éster puede añadirse primero al recipiente de reacción. Después de una cantidad de tiempo suficiente para maximizar la formación del ácido percarboxílico del primer éster, el segundo éster con una velocidad de reacción de perhidrólisis cinéticamente más rápida puede añadirse al recipiente de reacción.

55 El orden de mezcla y adición de los reactivos puede usarse para controlar la producción de la composición del ácido percarboxílico, concretamente para asegurar una salida consistente de la química sin ningún tipo de ensuciamiento (por ejemplo, precipitación) de los reactivos. En un aspecto de la invención, la fuente de alcalinidad (por ejemplo, hidróxido de sodio o sosa cáustica) se combina con agua (por ejemplo, diluida) antes de la adición de la fuente de éster.

La concentración de reactivos, además del orden de mezcla, se puede utilizar adicionalmente para controlar la producción de la composición de ácido percarboxílico. En una realización preferida, la concentración de la fuente de alcalinidad se diluye para producir una salida consistente de la química sin ningún tipo de ensuciamiento (por ejemplo, precipitación) de los reactivos. En un aspecto, la solución alcalina concentrada (p. ej., el NaOH) se diluye con una fuente de agua antes de que el componente éster se combine con los reactivos. Aunque no se pretende limitarse de acuerdo con ninguna teoría de la invención y/o mecanismo de acción, la invención demuestra una generación de química superior cuando un sistema entrega una fuente de alcalinidad (p. ej., una solución de NaOH) que no es más que aproximadamente 50%, preferiblemente no más de aproximadamente 40% sobre una base activa antes de combinar con el reactivo éster para iniciar la reacción de producción de perácido.

En algunos aspectos, la presente descripción proporciona métodos para formar una composición antimicrobiana. Los métodos incluyen proporcionar una composición que forma ácido peroxicarboxílico mixto. La composición de formación de ácido peroxicarboxílico mixto incluye: un primer éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18, por ejemplo un ácido carboxílico C1 a C4; un segundo éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18, por ejemplo un ácido carboxílico C8 a C11; una fuente de alcalinidad; y un agente oxidante. Después de dejar que la mezcla de reacción reaccione durante un tiempo suficiente, se forma una composición de ácido percarboxílico mixto. La composición de ácido peroxicarboxílico mixto se diluye con una solución acuosa ácida. En algunas realizaciones, la composición de ácido peroxicarboxílico mixto se diluye con una cantidad de una solución acuosa ácida eficaz para proporcionar la composición desinfectante diluida con un pH de aproximadamente 1,0 a aproximadamente 8,0. En otros aspectos, la presente descripción proporciona procedimientos para formar una composición desinfectante que incluye un solo ácido percarboxílico. Los métodos incluyen proporcionar una composición que forma ácido peroxicarboxílico. La composición incluye: un éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18; una fuente de alcalinidad; y un agente oxidante, en el que dicha composición tiene un pH mayor que 12.

Métodos para la fabricación usando formulaciones concentradas de premezcla

En algunos aspectos, la presente descripción proporciona métodos para preparar las composiciones de ácido peroxicarboxílico descritas en la presente memoria utilizando formulaciones de premezcla concentradas. Sin limitar el alcance de la invención y los métodos para fabricar las composiciones descritas en la presente memoria, se pueden emplear los mismos métodos de fabricación utilizando diversas formulaciones de premezcla concentradas para combinar al menos un éster de un alcohol polihidroxilado y un ácido carboxílico C1 a C18, una fuente de alcalinidad y un agente oxidante. El uso de formulaciones de premezcla concentradas minimiza el número de reactivos de composición de acuerdo con la invención para simplificar aún más los métodos.

El uso de diversas formulaciones concentradas de premezcla de acuerdo con la invención no altera las etapas restantes del método - sólo la entrada de reactivos a un sistema usando los métodos de la invención. Al combinar una formulación de premezcla concentrada particular con los reactivos restantes, la mezcla de reacción permite la perhidrólisis del éster para formar el correspondiente ácido peroxicarboxílico C1 a C18. Sin pretender estar limitado por ninguna teoría en particular, se cree que el agente oxidante presente perhidroliza los enlaces éster, formando de este modo los correspondientes ácidos percarboxílicos.

De acuerdo con un método ejemplar de fabricación de las composiciones de ácido peroxicarboxílico, se mezcla una formulación de premezcla concentrada que comprende el éster(es) y el agente oxidante con la fuente de alcalinidad para formar una química de perácido concentrada. Como se describe en el presente documento, la fuente de alcalinidad puede ser una solución alcalina diluida (p. ej., NaOH) obtenido diluyendo la fuente alcalina con una fuente de agua antes de combinar la premezcla concentrada que comprende el componente éster con la fuente alcalina diluida.

La química del perácido concentrado generado de acuerdo con la invención, independientemente de si se ha generado utilizando fuentes de reactivo individuales y/o formulaciones concentradas de premezcla, permanece estable desde unas pocas horas hasta unos pocos días. Las composiciones generadas en el sitio de acuerdo con la invención obvian la necesidad de diversos agentes estabilizadores, ya que la química se usa en el sitio y no se envía y/o se mantiene en almacenamiento durante un período de tiempo significativo.

La composición perácida concentrada generada puede diluirse de acuerdo con un uso particular. Por ejemplo, en una realización, la química del perácido concentrado se añade a un tanque o depósito de post-dilución en el que se puede usar agua para diluir la química concentrada en una dispersión de la solución alcalina en agua. Esta etapa puede denominarse como generadora de una dilución intermedia. Sin limitarse a ninguna teoría particular de la invención, la dilución de la química concentrada en una dilución intermedia en una solución alcalina mantiene la estabilidad de fase de la química del perácido. En un aspecto, la solución puede diluirse de aproximadamente 100 ppm a aproximadamente 10.000 ppm de solución, preferiblemente de aproximadamente 1.000 ppm a aproximadamente 4.000 ppm, y más preferiblemente a aproximadamente 1.000 ppm de solución (por ejemplo, aproximadamente 0,1% de perácido activo). Posteriormente, la acidificación de la química del perácido diluido puede tener lugar sin ningún tipo de ensuciamiento de la química. Posteriormente, la química del perácido diluido puede ser fuente de diversas aplicaciones de uso a cantidades muy diluidas como resultado de la generación in situ. Por ejemplo, la composición de perácido diluido puede añadirse a una solución de uso con concentraciones inferiores a

aproximadamente 10 ppm, inferiores a aproximadamente 50 ppm o inferiores a aproximadamente 100 ppm, sin el derroche del envío de dichas sustancias químicas diluidas.

5 Como un experto en la técnica verificará, el método de fabricación de las composiciones de perácidos, en particular las diversas diluciones de las químicas de perácido concentrado y/o etapas de acidificación, puede no ser necesario dependiendo de las aplicaciones de uso particulares de la química. Por ejemplo, un ejemplo no limitativo incluye el uso de la química del perácido concentrado para ciertas aplicaciones textiles y/o de blanqueo. En tal realización, la química del perácido concentrado no requiere la dilución en una solución alcalina a una solución intermedia que tiene una concentración de química activa de aproximadamente 100 ppm a aproximadamente 10.000 ppm. Más bien, la química alcalina concentrada podría obtenerse inmediatamente a una aplicación de uso (por ejemplo, limpieza textil y/o blanqueo).

Métodos para el uso de composiciones para blanquear y agentes antimicrobianos

15 Las presentaciones relacionadas en este documento descritas proporcionan composiciones, métodos para fabricar las composiciones y/o métodos para usar o emplear las composiciones descritas en el presente documento junto con la descripción de diversas aplicaciones para su uso. De acuerdo con la invención presentada en este documento, varias aplicaciones de lavandería, incluyendo el cuidado textil y las aplicaciones de lavandería en el local son particularmente adecuadas para la aplicación de la presente invención.

20 En algunos aspectos, las composiciones pueden usarse en diversos procesos industriales, incluyendo, por ejemplo, el tratamiento de aguas residuales en las que se puede utilizar tanto su función antimicrobiana como sus propiedades oxidantes. Además de los usos antimicrobianos según la invención, a menudo se trata de que las aguas residuales sean ricas en compuestos malolientes de azufre, nitrógeno o fósforo reducidos. Un oxidante fuerte tal como el generado de acuerdo con la presente invención convierte estos compuestos eficientemente en sus derivados libres de olor, p. ej., los sulfatos, fosfatos y óxidos de amina. Estas mismas propiedades son muy útiles en la industria de la pulpa y el papel, donde la propiedad del blanqueo es también de gran utilidad.

25 En otro aspecto, las composiciones se pueden usar en una variedad de aplicaciones domésticas o industriales, por ejemplo, para reducir las poblaciones microbianas o virales sobre una superficie u objeto o en un cuerpo o corriente de agua, como se describe en las aplicaciones relacionadas. Por ejemplo, los compuestos se pueden aplicar en una variedad de áreas incluyendo una variedad de superficies duras o blandas que tienen topografía lisa, irregular o porosa. Las superficies duras adecuadas incluyen, por ejemplo, superficies arquitectónicas (por ejemplo, suelos, paredes, ventanas, fregaderos, mesas, mostradores y carteles); utensilios de comer; instrumentos y dispositivos médicos o quirúrgicos de superficie dura; y empaques de superficie dura. Dichas superficies duras pueden estar hechas de una variedad de materiales incluyendo, por ejemplo, cerámica, metal, vidrio, madera o plástico duro. Las superficies blandas adecuadas incluyen, por ejemplo, papel; medios de filtro; ropa de hospital y quirúrgica; instrumentos y dispositivos médicos o quirúrgicos de superficie blanda; y envases de superficie blanda. Tales superficies blandas pueden estar hechas de una variedad de materiales incluyendo, por ejemplo, papel, fibra, tela tejida o no tejida, plásticos blandos y elastómeros. Los compuestos de la invención también se pueden aplicar a superficies blandas tales como alimentos y piel (por ejemplo, una mano). Los presentes compuestos se pueden emplear como antisépticos o desinfectantes ambientales espumantes o no espumantes.

35 40 En algunos aspectos, la presente descripción incluye métodos para usar las composiciones de ácido peroxycarboxílico para la actividad antimicrobiana y/o blanqueadora para aplicaciones textiles y/o de lavandería. En un aspecto, los métodos incluyen usar composiciones mixtas de ácido peroxycarboxílico en las que más de un ácido peroxycarboxílico se forma en el sitio de acuerdo con los métodos de generación de la química para la sinergia en eficacia en comparación con el uso de composiciones de un solo ácido peroxycarboxílico. En un aspecto adicional, los métodos incluyen usar composiciones mixtas de ácido peroxycarboxílico en combinación con un tensioactivo para una eficacia sinérgica adicional más allá de la proporcionada por el uso con las composiciones de ácido peroxycarboxílico de acuerdo con la invención.

45 50 En algunos aspectos, la presente descripción incluye métodos de utilización de las composiciones de ácido peroxycarboxílico descritas en la presente memoria. En algunos aspectos, los métodos de uso de las composiciones emplean una química que tiene un pH de aproximadamente 0 a aproximadamente 5 para diversas aplicaciones antimicrobianas. En otros aspectos, los métodos de uso de las composiciones emplean una química que tiene un pH de aproximadamente 5 a aproximadamente 10 para diversas aplicaciones antimicrobianas. En otros aspectos más, los métodos de uso de las composiciones emplean una química que tiene un pH de aproximadamente 5 a aproximadamente 14 para diversas aplicaciones de blanqueo.

55 En algunas realizaciones, estos métodos emplean la actividad antimicrobiana y/o blanqueante de las composiciones para aplicaciones textiles y/o de lavandería. Por ejemplo, la invención incluye un método para reducir una población microbiana, un método para reducir la población de esporas, un método para reducir un olor y/o un método para blanquear. Estos métodos operan preferiblemente sobre un artículo, una superficie, en un cuerpo o una corriente de agua o un gas poniendo en contacto el artículo, superficie, cuerpo o corriente con las composiciones.

Las composiciones de la presente invención también se pueden usar para aplicaciones de lavandería o textiles. Las composiciones se pueden emplear enjuagando las superficies de lavandería o textiles con la solución de uso, manteniendo las superficies mojadas durante un tiempo suficiente para lavar, desmanchar, desinfectar, blanquear y/o enjuagar la superficie.

5 En realizaciones para tratamientos de lavandería, a saber, un método para tratar la colada, se pueden limpiar diversos elementos o artículos en una aplicación de lavandería, tal como una lavadora. El lavado adecuado para la limpieza, el blanqueo y/o la desinfección de acuerdo con la invención incluye, por ejemplo, cualquier elemento o artículo fabricado a partir de, o que incluye, materiales textiles, telas tejidas, telas no tejidas y tejidos de punto. Los materiales textiles pueden incluir fibras naturales o sintéticas tales como fibras de seda, fibras de lino, fibras de algodón, fibras de poliéster, fibras de poliamida tales como nilón, fibras acrílicas, fibras de acetato y mezclas de las mismas incluyendo mezclas de algodón y poliéster. Las fibras pueden ser tratadas o no tratadas. El término "lino" se utiliza a menudo para describir ciertos tipos de artículos de lavandería, incluyendo sábanas, fundas de almohada, toallas, ropa de mesa, manteles, trapos de barra y uniformes. La invención incluye adicionalmente la limpieza, blanqueo y/o desinfección de artículos y superficies que no son de lavandería, incluyendo superficies duras tales como platos, vasos y otros artículos.

Los métodos también pueden incluir poner en contacto el artículo, la superficie, en un cuerpo o corriente de agua o un gas en combinación con un tensioactivo para producir una eficacia sinérgica. El contacto puede incluir cualquiera de los numerosos métodos para aplicar las composiciones, tales como pulverizar las composiciones, sumergir el artículo en las composiciones, tratamiento con espuma o gel del artículo con las composiciones o una combinación de los mismos.

En algunos aspectos, las composiciones están presentes en una cantidad eficaz para matar uno o más de diversos microorganismos patógenos, incluyendo bacterias, incluyendo, pero no limitándose a, Salmonella, Staphylococcus, Campylobacter, Pseudomonas, Listeria, Streptococcus, Legionella, Escherichia coli, tuberculosis, fagos, micobacterias, levaduras, mohos, hongos, esporas o virus. Las composiciones de la presente invención tienen actividad contra una amplia variedad de microorganismos tales como bacterias Gram positivas (por ejemplo, Listeria monocytogenes o Staphylococcus aureus) y Gram negativas (por ejemplo, Escherichia coli o Pseudomonas aeruginosa), levaduras, mohos, esporas bacterianas, virus, etc. Además, las composiciones, como se ha descrito anteriormente, tienen actividad contra una amplia variedad de patógenos humanos.

Las composiciones pueden usarse para una variedad de aplicaciones domésticas o industriales, por ejemplo, para reducir poblaciones microbianas o virales en una superficie u objeto o en un cuerpo o corriente de agua. Las composiciones se pueden aplicar en una variedad de áreas y superficies, incluyendo una variedad de superficies duras o blandas que tienen topografía lisa, irregular o porosa. Dichas superficies duras y blandas se pueden fabricar a partir de una variedad de materiales como verificará cualquier experto en la técnica. Entre los ejemplos de superficies blandas adecuadas se incluyen textiles, incluyendo por ejemplo linos y prendas de vestir para hospitales y quirófanos. Tales superficies blandas pueden estar hechas de una variedad de materiales incluyendo, por ejemplo, papel, fibra, tela tejida o no tejida, plásticos blandos y elastómeros.

Las composiciones descritas en la presente memoria pueden incluirse en productos tales como esterilizantes, antisépticos, desinfectantes, conservantes, desodorantes, antisépticos, fungicidas, germicidas, esporicidas, virucidas, detergentes, blanqueadores, limpiadores de superficies duras, jabones de manos, desinfectantes para manos sin agua y fregador pre- o post-cirugía.

La composición de tratamiento de lavandería con ácido peroxycarboxílico puede proporcionar blanqueado y tratamiento antimicrobiano y puede denominarse composición de blanqueo y antimicrobiana o más simplemente la composición de tratamiento. La composición puede proporcionarse en forma de una química concentrada que se diluye con agua para proporcionar una solución de uso. La solución de uso se puede usar para lavar artículos tales como de lavandería.

Un concentrado o una concentración de uso de las composiciones pueden aplicarse o ponerse en contacto con una superficie y/o un objeto mediante cualquier método o aparato convencional para aplicar un compuesto antimicrobiano o de limpieza a un objeto. Por ejemplo, el objeto se puede limpiar, pulverizar, espumar, y/o sumergir en las composiciones, o una solución de uso hecha de las composiciones. Las composiciones pueden pulverizarse, espumarse o aplicarse sobre una superficie; las composiciones se pueden hacer fluir sobre la superficie, o la superficie se puede sumergir en las composiciones. El contacto puede ser manual o por máquina.

El método para el tratamiento de la colada de acuerdo con la invención puede proporcionarse como parte de un método general para la limpieza de ropa de acuerdo con la invención. Es decir, como parte de una operación de limpieza de ropa, la ropa puede ser tratada con una composición blanqueante y antimicrobiana para proporcionar propiedades blanqueantes y antimicrobianas. Además, la ropa puede ser tratada con una composición blanqueante y antimicrobiana en combinación con una fuente de tensioactivo para proporcionar propiedades de blanqueo sinérgicas y antimicrobianas. Se puede usar cualquier tensioactivo adecuado para uso en aplicaciones de lavandería de acuerdo con la invención. En particular, el tensioactivo se utiliza después de la generación de la composición de tratamiento de lavandería de ácido peroxycarboxílico de acuerdo con la invención. Por lo tanto, cualquier experto en

la técnica verificará que dicho tensioactivo no es un componente añadido al sistema para establecer y/o mantener la estabilidad de la composición de tratamiento de lavandería con ácido peroxicarboxílico. Como se ha descrito anteriormente en la presente memoria, la composición de ácido peroxicarboxílico no requiere y/o emplea el uso de agentes estabilizantes, incluyendo tensioactivos, para establecer y/o mantener la estabilidad de fase de la composición.

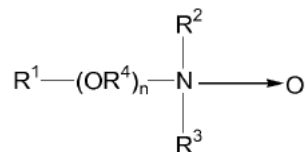
Los tensioactivos adecuados para uso en detergentes a combinar con las composiciones de tratamiento de lavandería de ácido peroxicarboxílico de acuerdo con la invención incluyen cualquier tensioactivo adecuado para uso en aplicaciones de lavandería, incluyendo, pero sin limitación, tensioactivos no iónicos, tensioactivos aniónicos, tensioactivos catiónicos y tensioactivos zwitteriónicos.

Tensioactivos no iónicos adecuados para uso con las composiciones de la presente invención incluyen tensioactivos alcoxilados. Los tensioactivos alcoxilados adecuados incluyen óxido de etileno, óxido de propileno, copolímeros de óxido de butileno (EO/PO/BO), copolímeros EO/PO/BO terminados, alcoxilatos de alcohol, alcoxilatos de alcohol terminados, mezclas de los mismos. Los tensioactivos no iónicos especialmente adecuados para su uso con la presente invención incluyen tensioactivos inferiores alquilados, incluyendo aquellos con una o dos unidades EO/PO/BO, tales como Lutensol TO 2, que contiene un hidrófobo C13 ramificado y dos unidades EO. Tensioactivos alcoxilados adecuados para uso como disolventes incluyen copolímeros de bloques EO/PO, tales como los tensioactivos Pluronic y Pluronic inverso; alcoxilatos de alcohol, tales como Dehypon LS-54 (R-(EO)₅(PO)₄) y Dehypon LS-36 (R-(EO)₃(PO)₆); y alcoxilatos de alcohol terminados, tales como Plurafac LF221 y Tegoten EC11; o mezclas de los mismos.

Tensioactivos no iónicos semi-polares

Los agentes tensioactivos no iónicos tipo semipolar son otra clase de tensioactivos no iónicos útiles en las composiciones de la presente invención. Los tensioactivos no iónicos semi-polares incluyen los óxidos de amina, óxidos de fosfina, sulfóxidos y sus derivados alcoxilados.

Los óxidos de amina son óxidos de amina terciaria que corresponden a la fórmula general:



en la que la flecha es una representación convencional de un enlace semipolar; y R¹, R², y R³ pueden ser alifáticos, aromáticos, heterocíclicos, alicíclicos o combinaciones de los mismos. Generalmente, para los óxidos de amina de interés detergente, R¹ es un radical alquilo de aproximadamente 8 a aproximadamente 24 átomos de carbono; R² y R³ son alquilo o hidroxialquilo de 1 - 3 átomos de carbono o una mezcla de los mismos; R² y R³ se pueden unir entre sí, p. ej., a través de un átomo de oxígeno o nitrógeno, para formar una estructura de anillo; R⁴ es un grupo alquileo o hidroxialquileo que contiene de 2 a 3 átomos de carbono; y n oscila entre 0 y aproximadamente 20. Se puede generar un óxido de amina a partir de la amina correspondiente y un agente oxidante, tal como el peróxido de hidrógeno.

Los tensioactivos de óxido de amina solubles en agua útiles se seleccionan entre los óxidos de di-(alquilo inferior)amina de octilo, decilo, dodecilo, isododecilo, coco o sebo, ejemplos específicos de óxido de octildimetilamina, óxido de nonildimetilamina, óxido de decildimetilamina, óxido de undecildimetilamina, óxido de dodecildimetilamina, óxido de iso-dodecildimetilamina, óxido de tridecildimetilamina, óxido de tetradecildimetilamina, óxido de pentadecildimetilamina, óxido de hexadecildimetilamina, óxido de heptadecildimetilamina, óxido de octadecildimetilamina, óxido de dodecildipropilamina, óxido de tetradecildipropilamina, óxido de hexadecildipropilamina, óxido de tetradecildibutilamina, óxido de octadecildibutilamina, óxido de bis(2-hidroxietyl)dodecilamina, óxido de bis(2-hidroxietyl)-3-dodecoxi-1-hidroxi-propilamina, óxido de dimetil-(2-hidroxi-dodecil)amina, óxido de 3,6,9-trioctadecildimetilamina y óxido de 3-dodecoxi-2-hidroxi-propildi-(2-hidroxietyl)amina.

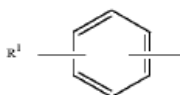
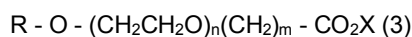
Tensioactivos aniónicos

Los tensioactivos aniónicos de sulfato adecuados para uso en las presentes composiciones incluyen sulfatos de alquil éter, sulfatos de alquilo, alquilsulfatos lineales y ramificados, primarios y secundarios, etoxisulfatos de alquilo, sulfatos de oleil glicerol grasos, sulfatos de éter de alquil fenol etileno óxido, los C₅-C₁₇ acil-N-(alquil C₁ - C₄) y sulfonatos de N - (hidroxialquil C₁ - C₂) glucamina y sulfatos de alquilpolisacáridos tales como los sulfatos de alquilpoliglucósido. También se incluyen los sulfatos de alquilo, alquil poli(etileno)éter-sulfatos y poli (etileno) sulfatos aromáticos tales como los sulfatos o productos de condensación de óxido de etileno y nonil fenol (usualmente con de 1 a 6 grupos de oxietileno por molécula).

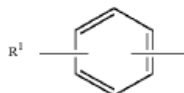
Los tensioactivos aniónicos de sulfonato adecuados para uso en las presentes composiciones incluyen también alquilsulfonatos, los alquilsulfonatos primarios y secundarios lineales y ramificados y los sulfonatos aromáticos con o sin sustituyentes.

Los tensioactivos de carboxilato aniónicos adecuados para uso en las presentes composiciones incluyen ácidos carboxílicos (y sales), tales como ácidos alcanóicos (y alcanóatos), ácidos carboxílicos de éster (por ejemplo, succinatos de alquilo), ácidos carboxílicos de éter. Tales carboxilatos incluyen tensioactivos y jabones de carboxilatos de alquil etoxi, carboxilatos de alquil aril etoxi, alquil polietoxi policarboxilato (por ejemplo, alquil carboxilos). Los carboxilatos secundarios útiles en las presentes composiciones incluyen aquellos que contienen una unidad carboxilo conectada a un carbono secundario. El carbono secundario puede estar en una estructura de anillo, p. ej., como en el ácido p-octil benzoico, o como en los carboxilatos de ciclohexilo sustituidos con alquilo. Los tensioactivos secundarios de carboxilato típicamente no contienen enlaces éter, ni enlaces éster ni grupos hidroxilo. Además, carecen típicamente de átomos de nitrógeno en el grupo de cabeza (parte anfifílica). Tensioactivos de jabón secundarios adecuados típicamente contienen 11-13 átomos de carbono totales, aunque pueden estar presentes más átomos de carbono (por ejemplo, hasta 16). Los carboxilatos adecuados también incluyen acilaminoácidos (y sales), tales como acilgluamatos, acil péptidos, sarcosinatos (p. ej., N-acil sarcosinatos), tauratos (p. ej., N-acil tauratos y amidas de ácidos grasos de metil taurida).

Tensioactivos aniónicos adecuados incluyen alquil o alquilaril etoxi carboxilatos de la siguiente fórmula:



en la que R es un grupo alquilo C_8 a C_{22} o C_{12} a C_{14} , en la que R^1 es un grupo alquilo $C_4 - C_{16}$; n es un número entero de 1 - 20; m es un número entero de 1 a 3; y X es un contraión, tal como hidrógeno, sodio, potasio, litio, amonio o una sal de amina tal como monoetanolamina, dietanolamina o trietanolamina. En algunas realizaciones, n es un número entero de 4 a 10 y m es 1. En algunas realizaciones, R es un grupo alquilo C_8-C_{16} . En algunas realizaciones, R es un grupo alquilo $C_{12}-C_{14}$, n es 4 y m es 1.



En otras realizaciones, R es un grupo alquilo C_9 , n es 10 y m es 1. y R^1 es un grupo alquilo C_6-C_{12} . En aún otras realizaciones, R^1 es un

Tales alquil y alquilaril etoxi carboxilatos están comercialmente disponibles. Estos etoxi carboxilatos están típicamente disponibles como las formas ácidas, que pueden convertirse fácilmente a la forma aniónica o de sal. Entre los carboxilatos comercialmente disponibles se incluyen Neodox 23-4, un alquil C_{12-13} polietoxi (4) ácido carboxílico (Shell Chemical) y Emcol CNP-110, un ácido alquilaril C_9 polietoxi carboxílico (Witco Chemical). Los carboxilatos también están disponibles en Clariant, p. ej. el producto Sandopan® DTC, un alquil C_{13} polietoxi (7) ácido carboxílico.

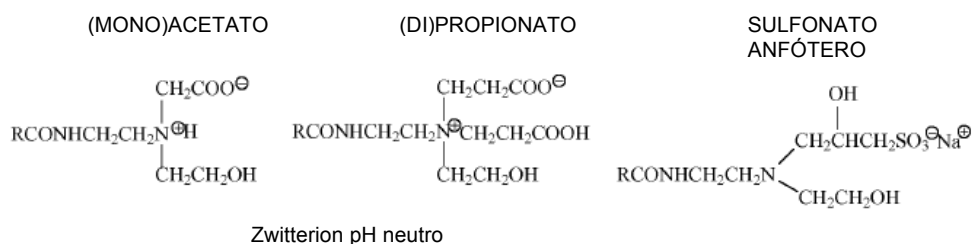
Tensioactivos anfóteros

Los tensioactivos anfóteros o anfólicos contienen tanto un grupo hidrófilo básico como ácido y un grupo hidrófobo orgánico. Estas entidades iónicas pueden ser cualquiera de los grupos aniónicos o catiónicos descritos en este documento para otros tipos de tensioactivos. Un grupo nitrógeno básico y un carboxilato ácido son los grupos funcionales típicos empleados como los grupos hidrófilos básicos y ácidos. En algunos tensioactivos, sulfonato, sulfato, fosfonato o fosfato proporcionan la carga negativa.

Los tensioactivos anfóteros se pueden describir ampliamente como derivados de aminas alifáticas secundarias y terciarias, en las que el radical alifático puede ser de cadena lineal o ramificada y en el que uno de los sustituyentes alifáticos contiene de aproximadamente 8 a 18 átomos de carbono y uno contiene un grupo aniónico solubilizante en agua, por ejemplo, carboxi, sulfo, sulfato, fosfato o fosfono. Los tensioactivos anfóteros se subdividen en dos clases principales conocidas por los expertos en la técnica y descritas en "Surfactant Encyclopedia" Cosmetics & Toiletries, Vol. 104 (2) 69 - 71 (1989). La primera clase incluye derivados de acil/dialquil etilendiamina (por ejemplo derivados de 2-alquil hidroxietilimidazolina) y sus sales. La segunda clase incluye N-alquilaminoácidos y sus sales. Algunos tensioactivos anfóteros se pueden contemplar como apropiados en ambas clases.

Los tensioactivos anfóteros se pueden sintetizar por métodos conocidos por los expertos en la técnica. Por ejemplo, la 2-alquil hidroxietil imidazolina se sintetiza por condensación y cierre del anillo de un ácido carboxílico de cadena larga (o un derivado) con dialquil etilendiamina. Los tensioactivos anfóteros comerciales se derivatizan mediante hidrólisis subsiguiente y apertura del anillo del anillo de imidazolina por alquilación, por ejemplo con ácido cloroacético o acetato de etilo. Durante la alquilación, uno o dos grupos carboxialquilo reaccionan para formar una amina terciaria y un enlace éter con diferentes agentes alquilantes produciendo diferentes aminas terciarias.

Los derivados de imidazol de cadena larga que tienen aplicación en la presente invención tienen generalmente la fórmula general:



5 en la que R es un grupo hidrofóbico acíclico que contiene de aproximadamente 8 a 18 átomos de carbono y M es un catión para neutralizar la carga del anión, generalmente sodio. Los anfotéricos derivados de imidazolina comercialmente prominentes que se pueden emplear en las presentes composiciones incluyen, por ejemplo: cocoanfopropionato, cocoanfocarboxi-propionato, cocoanfoglicinato, cocoanfocarboxi-glicinato, cocoanfopropilsulfonato, y cocoanfocarboxi-ácido propiónico. Los ácidos anfocarboxílicos pueden producirse a partir de imidazolinas grasas en las que la funcionalidad ácido dicarboxílico del ácido anfodicarboxílico es ácido diacético
10 y/o ácido dipropiónico.

Los compuestos carboximetilados (glicinatos) descritos anteriormente se denominan frecuentemente betaínas. Las betaínas son una clase especial de anfótero que se discute más adelante en la sección titulada, Tensioactivos Zwitterion.

15 Los N-alquilaminoácidos de cadena larga se preparan fácilmente por reacción de RNH₂, en la que R = alquilo C₈-C₁₈ de cadena lineal o ramificada, aminas grasas con ácidos carboxílicos halogenados. La alquilación de los grupos amino primarios de un aminoácido conduce a aminas secundarias y terciarias. Los sustituyentes alquilo pueden tener grupos amino adicionales que proporcionan más de un centro de nitrógeno reactivo. La mayoría de los ácidos comerciales de N-alquilamina son derivados de alquilo de beta-alanina o beta-N(2-carboxietil)alanina. Ejemplos de anfólitos comerciales de N-alquilaminoácidos que tienen aplicación en esta invención incluyen alquil-beta-amino
20 dipropionatos, RN(C₂H₄COOM)₂ y RNHC₂H₄COOM. En una realización, R puede ser un grupo hidrofóbico acíclico que contiene de aproximadamente 8 a aproximadamente 18 átomos de carbono, y M es un catión para neutralizar la carga del anión.

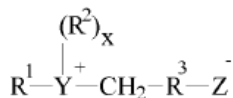
Los tensioactivos anfóteros adecuados incluyen los derivados de productos de coco tales como aceite de coco o ácido graso de coco. Otros tensioactivos derivados del coco adecuados incluyen como parte de su estructura un resto etilendiamina, un resto alcanolamida, un resto aminoácido, por ejemplo glicina, o una combinación de los mismos; y un sustituyente alifático de aproximadamente 8 a 18 (por ejemplo, 12) átomos de carbono. Un tensioactivo de este tipo también se puede considerar un ácido alquil-anfodicarboxílico. Estos tensioactivos anfóteros pueden incluir estructuras químicas representadas como: C₁₂-alquil-C(O)-NH-CH₂-CH₂-N⁺(CH₂-CH₂-CO₂Na)₂-CH₂-CH₂-OH o C₁₂-alquil-C(O)-N(H)-CH₂-CH₂-N⁺(CH₂-CO₂Na)₂-CH₂-CH₂-OH. El cocoanfo-dipropionato
30 disódico es un tensioactivo anfótero adecuado y está disponible comercialmente bajo el nombre comercial Miranol™ FBS de Rhodia Inc., Cranbury, N.J. Otro tensioactivo anfótero derivado de coco adecuado con el nombre químico de cocoanfo-diacetato disódico se vende bajo el nombre comercial Mirataine® JCHA, también de Rhodia Inc., Cranbury, NJ.

Una lista típica de clases anfóteras, y especies de estos tensioactivos, se da en la Patente de EE.UU. No. 3.929.678
35 concedida a Laughlin y Heuring el 30 de dic. de 1975. Otros ejemplos se dan en "Surface Active Agents and Detergents" (Vol. I y II de Schwartz, Perry y Berch).

Tensioactivos Zwitteriónicos

Los tensioactivos zwitteriónicos pueden considerarse como un subconjunto de tensioactivos anfóteros y pueden incluir una carga aniónica. Los tensioactivos zwitteriónicos se pueden describir ampliamente como derivados de
40 aminas secundarias y terciarias, derivados de aminas secundarias y terciarias heterocíclicas, o derivados de compuestos de amonio cuaternario, fosfonio cuaternario o sulfonio terciario. Típicamente, un tensioactivo zwitteriónico incluye un amonio cuaternario cargado positivo o, en algunos casos, un ion sulfonio o fosfonio; un grupo carboxilo cargado negativo; y un grupo alquilo. Los zwitteriónicos generalmente contienen grupos catiónicos y aniónicos que se ionizan a un grado casi igual en la región isoelectrónica de la molécula y que pueden desarrollar una atracción fuerte de "sal interior" entre centros de carga positiva-negativa. Ejemplos de tales tensioactivos sintéticos
45 zwitteriónicos incluyen derivados de compuestos de amonio cuaternario alifático, fosfonio y sulfonio, en los que los radicales alifáticos pueden ser de cadena lineal o ramificada y en donde uno de los sustituyentes alifáticos contiene de 8 a 18 átomos de carbono y uno contiene un grupo aniónico solubilizante en agua, por ejemplo, carboxi, sulfonato, sulfato, fosfato o fosfonato. Los tensioactivos de betaína y de sultaina son ejemplos de tensioactivos
50 zwitteriónicos para uso en la presente invención.

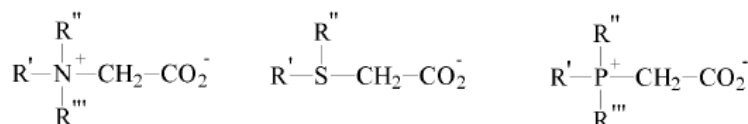
Una fórmula general para estos compuestos es:



en la que R¹ contiene un radical alquilo, alqueno o hidroxialquilo de 8 a 18 átomos de carbono que tiene de 0 a 10 restos de óxido de etileno y de 0 a 1 restos de glicerilo; Y se selecciona del grupo que consiste en átomos de nitrógeno, fósforo y azufre; R² es un grupo alquilo o monohidroxi alquilo que contiene de 1 a 3 átomos de carbono; x es 1 cuando Y es un átomo de azufre y 2 cuando Y es un átomo de nitrógeno o fósforo, R³ es un alqueno o hidroxialqueno o hidroxialqueno de 1 a 4 átomos de carbono y Z es un radical seleccionado del grupo que consiste en grupos carboxilato, sulfonato, sulfato, fosfonato y fosfato.

Ejemplos de tensioactivos zwitteriónicos que tienen las estructuras enumeradas anteriormente incluyen: 4-[N,N-di(2-hidroxi-etil)-N-octadecilamonio]-butano-1-carboxilato; 5-[S-3-hidroxi-propil-S-hexadecilsulfonio]-3-hidroxi-pentano-1-sulfato; 3-[P,P-dietil-P-3,6,9-trioxatetracosanofosfonio]-2-hidroxi-propano-1-fosfato; 3-[N,N-dipropil-N-3-dodecoxi-2-hidroxi-propil-amonio]-propano-1-fosfonato; 3-(N,N-dimetil-N-hexadecilamonio)-propano-1-sulfonato; 3-(N,N-dimetil-N-hexadecilamonio)-2-hidroxi-propano-1-sulfonato; 4-[N,N-di(2(2-hidroxi-etil)-N(2-hidroxi-dodecil)amonio)-butano-1-carboxilato; 3-[S-etil-S-(3-dodecoxi-2-hidroxi-propil)sulfonio]-propano-1-fosfato; 3-[P,P-dimetil-P-dodecilsulfonio]-propano-1-fosfonato y S[N,N-di(3-hidroxi-propil)-N-hexadecilamonio]-2-hidroxi-pentano-1-sulfato. Los grupos alquilo contenidos en dichos tensioactivos detergentes pueden ser lineales o ramificados y saturados o insaturados.

El tensioactivo zwitteriónico adecuado para su uso en las presentes composiciones incluye una betaína de estructura general:



Estas betaínas tensioactivas típicamente no exhiben fuertes caracteres catiónicos o aniónicos a pH extremos ni tampoco muestran una solubilidad reducida en agua en su intervalo isoelectrónico. A diferencia de las sales de amonio cuaternario "externas", las betaínas son compatibles con los aniónicos. Ejemplos de betaínas adecuadas incluyen acilamidopropildimetilbetaína de coco; hexadecil dimetilbetaína; acilamidopropilbetaína C₁₂₋₁₄; acilamidohexildietil C₈₋₁₄ betaína; 4-acilmetilamidodietilamonio C₁₄₋₁₆-1-carboxibutano; acilamidodimetilbetaína C₁₆₋₁₈; acilamidopentanoditilbetaína C₁₂₋₁₆; y acilmetilamidodimetilbetaína C₁₂₋₁₆.

Las sulfonas útiles en la presente invención incluyen aquellos compuestos que tienen la fórmula (R(R¹)₂N⁺R²SO³⁻), en la que R es un grupo hidrocarbilo C₆-C₁₈, R¹ es típicamente alquilo C₁-C₃ independientemente, por ejemplo, metilo y R² es un grupo hidrocarbilo C₁-C₆, por ejemplo un grupo alqueno C₁-C₃ o hidroxialqueno.

Una lista típica de clases zwitteriónicas, y especies de estos tensioactivos, se da en la Patente de EE.UU. No. 3.929.678 concedida a Laughlin y Heuring el 30 de dic. de 1975. Otros ejemplos se dan en "Surface Active Agents and Detergents" (Vol. I y II de Schwartz, Perry y Berch).

En una realización, las composiciones de la presente invención incluyen una betaína. Por ejemplo, las composiciones pueden incluir cocoamido propil betaína.

El uso de tensioactivos como detergentes de acuerdo con la invención es distinto del uso combinado de activadores de blanqueo (para generar ácidos peroxicarboxílicos in situ dentro de una rueda o máquina de lavado) y los detergentes descritos en diversas aplicaciones de la técnica anterior. Véase, por ejemplo, la descripción de la producción in situ descrita en la Patente de Estados Unidos N° 4.367.156, 4.681.593 y 5.019.292 y el documento WO1994018299. En particular, como se expone en los métodos de la presente invención, las composiciones de ácido peroxicarboxílico no se generan in situ (por ejemplo, dentro de una rueda o máquina de lavado), sino que las composiciones de ácido peroxicarboxílico se generan ex situ desde el punto de uso. Los métodos para preparar las composiciones de ácido peroxicarboxílico demuestran que la generación de los ácidos peroxicarboxílicos requiere condiciones no encontradas dentro del punto de lavado de uso. Por ejemplo, los métodos de preparación de las composiciones de ácido peroxicarboxílico requieren una mezcla de reacción que no está en equilibrio y se hace reaccionar durante un tiempo determinado a un pH de por lo menos 12. Posteriormente, la generación de las composiciones de ácido peroxicarboxílico puede combinarse opcionalmente con un tensioactivo y/o detergente a lo largo de la línea a partir de la generación de los ácidos peroxicarboxílicos. Por consiguiente, se proporciona una composición de ácido peroxicarboxílico ya generada (a una dilución preferida por el usuario y porcentajes activos) hasta un punto de uso, a saber, una aplicación de lavandería.

Los métodos de uso y generación según la invención son distintos de la generación in situ de ácidos peroxycarboxílicos en productos comerciales existentes. De forma beneficiosa, la generación de las composiciones de ácido peroxycarboxílico de acuerdo con los métodos de la presente invención reduce la necesidad de reactivos comparado con un sistema de perácido de equilibrio (por ejemplo, reducción de residuos) así como obtener una mayor cantidad de ácidos peroxycarboxílicos generados en comparación con la generación in situ en el baño de lavado mediante un activador de blanqueo convencional. De acuerdo con una realización, los métodos de la invención generan rendimientos de perácido de al menos aproximadamente 0,25% a aproximadamente 20%. En algunos aspectos, los métodos de la invención generan rendimientos de perácido de al menos aproximadamente 2%, al menos aproximadamente 3%, preferiblemente al menos aproximadamente 4%, más preferiblemente al menos aproximadamente 5%, y aún más preferiblemente al menos aproximadamente 6% de rendimiento de perácido de las mezclas de reacción (reactivos). Además de la mayor generación de rendimiento de perácido de acuerdo con la invención, las velocidades de generación son además preferenciales, obteniéndose el rendimiento de perácido deseado en cuestión de minutos, preferiblemente en aproximadamente 5 minutos.

De acuerdo con la invención, las propiedades blanqueadoras y/o antimicrobianas se pueden caracterizar como desinfectantes cuando hay una reducción sustancial de bacterias, hongos, esporas y otros microorganismos o materiales generadores de microorganismos sobre una superficie tratada para proporcionar una superficie desinfectada. Una reducción sustancial se refiere a una reducción de al menos tres órdenes de magnitud. Preferiblemente, la reducción puede ser de al menos cinco órdenes de magnitud. Un proceso de limpieza de acuerdo con la invención puede incluir las tres de la eliminación del suelo, la eliminación de la tinción o la aparición de tinción, y la reducción de una población de microbios.

El método para el tratamiento de la colada de acuerdo con la invención se puede proporcionar en una instalación de lavado de ropa comercial y/o industrial y puede proporcionarse en una lavadora de ropa residencial y/o doméstica. Ejemplos de instalaciones comerciales y/o industriales de lavado de ropa incluyen la limpieza de textiles para alquileres, atención de la salud y la industria de hospitalaria. Además, el método para tratar la colada puede ocurrir como parte de una operación que incluye etapas adicionales, tales como, lavado, aclarado, acabado y extracción. Además, debe entenderse que la etapa de tratar la colada puede incluir, como parte de la etapa, actividades adicionales tales como, por ejemplo, lavado y acabado.

Se espera que muchas máquinas lavadoras de ropa comerciales e industriales sean capaces de manejar el método para el tratamiento de ropa de acuerdo con la invención. Muchas máquinas comerciales e industriales de lavado de ropa son programables por ordenador, y se pueden proporcionar programas informáticos para operar las máquinas de acuerdo con la invención. Además, se espera que se puedan poner a disposición máquinas para tratar la ropa de acuerdo con la invención, y que estas máquinas puedan utilizarse tanto en aplicaciones tanto industriales como comerciales y en aplicaciones domésticas y residenciales. Además, la composición de tratamiento puede formularse de manera que pueda usarse en lavadoras de ropa comerciales e industriales y en lavadoras domésticas residenciales que son de uso común, que no son programables por ordenador y sin modificaciones. Es decir, se espera que las máquinas lavadoras de ropa convencionales se puedan usar para tratar la ropa de acuerdo con la invención.

En una realización de la invención, los objetos tratados bajo una etapa de lavado de ropa en presencia tanto de una solución de uso de detergente como de las composiciones de ácido peroxycarboxílico. En un aspecto, una parte de una solución de uso de detergente puede drenarse de la colada antes de la etapa de adición de las composiciones de ácido peroxycarboxílico de acuerdo con la invención. Alternativamente, al menos una parte de la solución de uso de detergente puede drenarse de la ropa y la ropa puede aclararse para eliminar adicionalmente la disolución de uso de detergente de la ropa antes de la etapa de tratar la ropa con las composiciones de ácido peroxycarboxílico. Se pueden utilizar varias técnicas para lavar la ropa con una solución de uso de detergente de acuerdo con la invención para limpiar la ropa antes y/o concomitantemente con la etapa de tratar con las composiciones de ácido peroxycarboxílico de acuerdo con la invención.

La solución de uso de detergente para uso en combinación con las composiciones de ácido peroxycarboxílico para eficacia sinérgica puede ser una solución de uso de detergente alcalino o ácido. Las técnicas para la limpieza con ácido se describen en la publicación alemana número DE 101 50 403. Técnicas adicionales para la limpieza con ácido se describen en la solicitud de EE.UU. 10/739.922. Varias técnicas de limpieza que incluyen la limpieza alcalina se describen en la publicación de solicitud de patente de los Estados Unidos número 20030162682 y en la patente de EE.UU. 6.194.371. Otras técnicas para limpiar la ropa se describen en la solicitud de EE.UU. 10/600.091.

En algunas realizaciones, se espera que un lavado alcalino se refiera a un lavado que tiene lugar a un pH entre aproximadamente 7 y aproximadamente 13, y puede incluir un pH entre aproximadamente 8 y aproximadamente 12. En general, se entiende que un lavado con ácido se refiere a un lavado que tiene un pH entre aproximadamente 1 y aproximadamente 6, y puede referirse a un lavado que tiene un pH en el intervalo de aproximadamente 2 a aproximadamente 4.

En algunas realizaciones, el pH de las composiciones de ácido peroxycarboxílico puede ajustarse mediante la introducción de un agente de ajuste del pH que puede ser un ácido o una base. En algunas realizaciones, los métodos pueden incluir el uso de un agente acidificante para disminuir el pH de las composiciones de ácido

peroxycarboxílico. Como se describe según las realizaciones de la fabricación de las composiciones de ácido peroxycarboxílico de la invención, puede usarse una solución ácida para acidificar la composición que forma el ácido peroxycarboxílico a la composición de ácido peroxycarboxílico. En un aspecto adicional, el uso de una solución ácida puede usarse para diluir las composiciones de ácido peroxycarboxílico concentrado. En una realización, el acidulante incluye un ácido inorgánico. Los ácidos inorgánicos adecuados incluyen, pero no se limitan a, ácido sulfúrico, bisulfato de sodio, ácido fosfórico, ácido nítrico, ácido clorhídrico. En algunas realizaciones, el acidulante incluye un ácido orgánico. Los ácidos orgánicos adecuados incluyen, pero no se limitan a, ácido metanosulfónico, ácido etanosulfónico, ácido propanosulfónico, ácido butanosulfónico, ácido xilensulfónico, ácido cumenosulfónico, ácido bencenosulfónico, ácido fórmico, ácido acético, ácidos mono, di, o tri-halocarboxílicos, ácido picolínico, ácido dipicolínico y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, las composiciones de la presente invención están libres o sustancialmente libres de un ácido basado en fósforo.

En una realización alternativa, se puede añadir un agente de ajuste del pH a la aplicación de lavado y/o en un punto de uso (a diferencia de la dilución de las composiciones de ácido peroxycarboxílico) para reducir el pH. Ejemplos de agentes acidificantes incluyen ácidos inorgánicos, ácidos orgánicos y mezclas de ácidos inorgánicos y ácidos orgánicos. Ejemplos de ácidos inorgánicos que se pueden usar incluyen ácidos minerales tales como ácido sulfúrico, ácido nítrico, ácido clorhídrico, ácido hidrofúosilícico y ácido fosfórico. Ejemplos de ácidos orgánicos que se pueden usar incluyen ácidos carboxílicos que incluyen ácidos monocarboxílicos y ácidos policarboxílicos tales como ácidos dicarboxílicos. Ejemplos de ácidos carboxílicos incluyen ácidos carboxílicos alifáticos y aromáticos. Ejemplos de ácidos carboxílicos alifáticos incluyen ácido acético, ácido fórmico, ácidos carboxílicos que contienen halógeno tales como ácido carboxílico cloroacético y ácidos carboxílicos modificados que contienen grupos laterales tales como -OH, -R, -OR, -(EO)_x, (PO)_x, -NH₂, y -NO₂ donde R es un grupo alquilo C₁-C₁₀. Ejemplos de ácidos carboxílicos aromáticos incluyen ácido carboxílico benzoico, ácido carboxílico salicílico y ácido carboxílico aromático modificado para incluir como grupo lateral al menos uno de halógeno, -OH, -R, -OR, -(EO)_x, (PO)_x, -NH₂, y -NO₂ donde R es un grupo alquilo C₁-C₁₀. Otros ácidos orgánicos ejemplares incluyen ácido oxálico, ácido ftálico, ácido sebáico, ácido adípico, ácido cítrico, ácido maleico y sus formas modificadas que contienen grupos laterales que incluyen halógeno, -OH, -R, -OR, -(EO)_x, -(PO)_x, -NH₂, y -NO₂ en los que R es un grupo alquilo de C₁ a C₁₀. Debe entenderse que el subíndice "x" se refiere a unidades repetitivas. Otros ácidos orgánicos ejemplares incluyen ácidos grasos tales como ácidos grasos alifáticos y ácidos grasos aromáticos. Ejemplos de ácidos grasos alifáticos incluyen ácido oleico, ácido palmítico, ácido esteárico, ácidos grasos C₃-C₂₆ que pueden ser saturados o insaturados y formas sulfonadas de ácidos grasos. Un ácido graso aromático ejemplar incluye el ácido fenilesteárico. Otros ácidos que se pueden usar incluyen el ácido peroxycarboxílico tal como el ácido peroxiacético y ácidos ftalimidopercarboxílicos. Otros agentes de ajuste del pH ácidos incluyen dióxido de carbono y ozono.

En realizaciones alternativas, puede producirse una modificación del pH que proporciona un aumento del pH mediante el uso de un agente alcalino. Ejemplos de agentes alcalinos incluyen hidróxidos de metales alcalinos, tales como hidróxido de sodio, hidróxido de potasio y mezclas de los mismos, silicatos de metales alcalinos tales como silicato metálico de sodio, carbonatos de metales alcalinos, bicarbonatos de metales alcalinos, sesquicarbonatos de metales alcalinos y boratos de metales alcalinos.

Ejemplos

Las realizaciones de la presente invención se definen adicionalmente en los siguientes Ejemplos no limitativos. Debe entenderse que estos Ejemplos, aunque indican ciertas realizaciones de la invención, se dan a modo de ilustración solamente.

Ejemplo 1

El porcentaje de eliminación de manchas de diversas manchas se analizó comparando la eficacia de la eliminación de manchas utilizando tanto una composición de ácido percarboxílico generada de acuerdo con la invención en comparación con un estándar comercial. Las composiciones de ácido percarboxílico se generaron usando un aparato o sistema de formulación de biocidas ajustable (ABF) para la generación in situ de químicas de perácidos.

El estándar comercial utilizado para la comparación fue Turbo Oxyzan® (Ecolab, Inc.), se utilizó como agente de control un blanqueador/desinfectante textil comercialmente disponible (indicado para uso en Europa a 40°C). El blanqueador/desinfectante de control se utilizó para demostrar los beneficios proporcionados por el uso de los perácidos generados por ABF de acuerdo con la invención que no tienen las mismas limitaciones que el blanqueador/desinfectante textil comercialmente disponible, incluyendo por ejemplo requisitos para el envío a un punto de uso, almacenamiento de la química del perácido, agentes adicionales requeridos para la estabilidad y tal almacenamiento, gasto de adición de usar más reactivos (por ejemplo, hidrotropos y otros ingredientes), potencial de malos olores después de la degradación de perácidos, etc.

Se ensayaron manchas de café, curry y té en muestras como se describe a continuación. La eliminación de las manchas se evaluó de acuerdo con los métodos de ensayo de detergencia usando un tergotómetro. El tergotómetro contiene seis recipientes llenos de 1 litro de agua que se encuentra en un baño de agua con temperatura controlada. Se usó un espectrofotómetro HunterLab Color Quest para determinar la claridad u oscuridad de cada muestra, medida por el valor de L*, antes del tratamiento. Durante cada pasada del tergotómetro, las muestras y la química de

5 ensayo (ya sea control o perácidos generados alcalinos) se añadieron a la solución de lavado y se agitó durante 10 min. Después de la terminación de ese tiempo, las muestras se retiraron de los recipientes, se aclararon con agua fría y se secaron a temperatura ambiente durante la noche. Después del secado, las muestras se volvieron a leer en el espectrofotómetro para determinar el valor L* posterior al lavado. El % de eliminación de manchas se calcula a partir de la diferencia entre el valor L* inicial (antes del lavado) y el valor L* final (después del lavado).

10 En lavandería, la suciedad es algo que se quita físicamente de los textiles por una combinación de detergentes químicos, calor y acción mecánica. Por el contrario, las manchas no se eliminan con detergentes convencionales. Los blanqueadores, típicamente oxidativos, funcionan destruyendo el cromóforo coloreado en las manchas, causando así que el color disminuya. El café, el curry y el té son ejemplos de manchas en las que el color de un textil se aclarará como resultado de la acción oxidante del blanqueador. La actividad de blanqueo de dos sistemas de perácidos generados por ABF diferentes se comparó con el estándar comercial de Turbo Oxysan®. Se probó un ácido peroxoctanóico ABF (POOA) solo, así como un sistema perácido mixto con ácido peroxioctanoico (POOA) y ácido peroxiacético (POAA). Las diferencias de formulación entre Turbo Oxysan®, los ingredientes usados para generar la composición de ácido peroxioctanoico ABF (POOA) y la composición de peroxiácido mixto ABF (POOA y POAA) se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1

	Turbo Oxysan®	Cantidades ABF POOA (gramos) para las fórmulas analizadas en el Ej. 1	ABF POOA/ POAA
Octanoato de sorbitano		8,23	8,21
Agua		73,17	69,75
Peróxido de hidrógeno al 35%	9,8	9,89	
Hidróxido sódico al 50%		8,84	8,78
Triacetina		0	3,52
Niveles titulados de perácido (%)			
POAA	5,4	-	3,3
POOA	1,5	2,6	2,7

El pH de uso se normalizó a 8 entre los tres sistemas. El porcentaje de eliminación de manchas de los sistemas probados se muestra en la Tabla 2.

20 Tabla 2

	% de eliminación de manchas de perácidos ABF vs. control comercial		
	Turbo Oxysan®	ABF POOA	ABF POOA/ POAA
Café sobre poli/algodón	40,5	40,6	43,6
Curry sobre algodón	14,2	33,5	24,4
Té sobre algodón	29,5	23,7	30,4
Té sobre poli/algodón	42,3	40,5	45,2

Como se muestra en la Tabla 2, el POOA ABF solo da un rendimiento que es claramente superior sobre el control en la mancha de curry, pero ligeramente deficiente en el té. El sistema ABF de perácido mixto es superior al control en todas las manchas ensayadas.

Ejemplo 2

La eficacia antimicrobiana de sistemas de perácidos generados por ABF de acuerdo con la invención se ensayó en textiles. La eficacia bactericida de la composición de peroxiácido individual (POAA o POOA) producida por ABF mostrada en la Tabla 3 se generó de acuerdo con la cantidad (%) de cada materia prima usada para generar los sistemas de perácidos ABF para determinar la eficacia antimicrobiana. Los sistemas se valoraron para ser POAA al 2,03% y POOA al 4,09%, respectivamente.

Las químicas se ensayaron contra *Staphylococcus aureus* ATCC 6538, *Enterococcus hirae* ATCC 10541 y *Escherichia coli* ATCC 10536. El análisis se realizó de acuerdo con la Norma Europea EN1276: Ensayo de Suspensión Cuantitativa para la Evaluación de la Actividad Bactericida de Desinfectantes Químicos y Antisépticos utilizados en Aplicaciones de Alimentos, Industriales, Domésticos e Institucionales. Las condiciones estándar de EN 1276 incluyen: 15 ppm POOA, 25 ppm POAA, pH 3,5, 5 min, 20°C en presencia de suciedad. Los resultados se muestran en la Tabla 4.

Tabla 3

	POAA Cantidad (%) para la Fórmula analizada	POOA Cantidad (%) para la Fórmula analizada
Agua	42,31	13,4
Peróxido de hidrógeno al 35%	10,58	14,3
Hidróxido de sodio al 10%	42,21	61,5
Triacetina	4,90	-
Mono/octanoato de diglicerol	-	10,8

15 Tabla 4

Organismo	Log Reducción
<i>Staphylococcus aureus</i>	> 5,28
<i>Enterococcus hirae</i>	> 5,15
<i>Escherichia coli</i>	> 5,20

La composición de peroxiácido mixto generada por ABF dio una reducción de más de 5 log en todas las bacterias ensayadas, excediendo el umbral de 5 log requerido para pasar la norma EN 1276 para la eficacia antimicrobiana.

Ejemplo 3

También se ensayó la eficacia esporicida de las composiciones de perácido y peroxiácido generadas por ABF de acuerdo con la invención. Además de la actividad bactericida, los sistemas ABF tienen eficacia contra esporas tales como el *Clostridium difficile*, que son típicamente más difíciles de erradicar que las bacterias. La eficacia esporicida de la composición de peroxiácido mixto (POAA/POOA) generada con ABF del Ejemplo 1 se ensayó frente a *Clostridium difficile* ATCC 700792 utilizando la Norma Europea EN13704: Ensayo de Suspensión Cuantitativa para la Evaluación de la Actividad Esporicida de Desinfectantes Químicos y Antisépticos Utilizados en Aplicaciones de Alimentos, y Áreas Institucionales. EN 13704 define la actividad esporicida como la "capacidad del producto para producir al menos una reducción de 10³ en el número de esporas bacterianas en las condiciones definidas por esta Norma Europea".

Se proporciona una descripción adicional del sistema de ensayo: Sistema de ensayo: *Clostridium difficile* ATCC 700792. Sustancia Interferente: Condiciones Limpas Solución de Albúmina Bovina (0,3g/100mL). Temperatura de ensayo: 40°C ± 1°C; 28 ppm POOA + 92 ppm POAA: 30°C ± 1°C. Tiempo de exposición: 10 minutos, 20 minutos, 30 minutos y 40 minutos. Neutralizador Medio: 8 ml 0,5% Tiosulfato sódico + 1 ml Agua MilliQ. Se realizó una selección neutralizadora como parte de la prueba, se verificó que el neutralizador neutralizaba adecuadamente el producto y no era perjudicial para los organismos sometidos a ensayo. Medio de Emplatao: Cicloserina-Cefoxitina Fructosa Agar con HS (CCFA-HT) - adquirida de Anaerobe Systems. Incubación: 35°C durante 72 horas anaerobiamente.

El objetivo de la prueba de microeficacia fue observar la sinergia esporicida entre los componentes individuales de las mezclas de ABF contra el *Tostridium difficile* ATCC 700792 a los tiempos de exposición de 10 minutos, 20 minutos, 30 minutos y 40 minutos. La menor concentración de la mezcla ABF ensayada se deconstruyó para evaluar la sinergia entre las combinaciones de tensioactivos de emulsión POOA, POAA y Turbo.

- 5 Además, se ensayó una mezcla ABF de 28 ppm POOA + 92 ppm POAA (equivalente a las concentraciones de control de Turbo Oxysan) a una temperatura inferior de 30°C, en oposición a 40°C que se probó antes con el fin de observar si la eficacia esporicida puede aún conseguirse a una temperatura más baja.

Tabla 5 - Mezcla de POOA ABF

Materia prima	Cantidad (g)
Octanoato de glicerol	10,10 g
H ₂ O ₂ (35%)	13,37 g
DI H ₂ O	18,94 g
NaOH (10%)	57,60 g
Titulado para ser 3,66% de POOA	

10 Tabla 6 - Mezcla ABF POAA

Materia prima	Cantidad (g)
Triacetina	4,9 g
H ₂ O ₂ (35%)	10,58 g
DI H ₂ O	42,31 g
NaOH (10%)	42,21 g
Titulado para ser 4,00% POAA	

Tabla 7 - Dilución de la sustancia de ensayo

Sustancia de ensayo	Concentración deseada*	Diluyente	Solución de ensayo (Volumen de sustancia de ensayo/Volumen total)	pH**
POOA + POAA	11ppm POOA + 38ppm POAA	Agua MilliQ estéril	0,0573g + 0,2054g / 200g Total	7,59
POOA + emulsión Turbo	11ppm POOA + 2625 ppm TE		0,0601g + 0,525g TE / 200g Total	7,50
POOA	11ppm POOA		0,0601g / 200g Total	7,53
POAA + emulsión Turbo	38 ppm POAA + 2625 ppm TE		0,190 g + 0,525 g TE / 200 g Total	7,54
POAA	38 ppm POAA		0,190 g / 200 g Total	7,51
POOA + POAA	28ppm POOA + 92ppm POAA		0,153g + 0,460g / 200g Total	7,51
POOA + POAA + Emulsión Turbo	11ppm POOA + 38ppm POAA + 2625ppm TE		0,0573g + 0,2054g + 0,525 gTE / 200g Total	7,57

* EN 13704 requiere que la concentración de la solución de ensayo sea 1,25 veces la concentración de ensayo deseada

- 15 ** pH ajustado a aproximadamente 7,50 por ácido fosfórico

ES 2 676 187 T3

Tabla 8 - Dilución de la sustancia de ensayo

Sustancia de ensayo	Tiempo de exposición	Promedio CFU/mL*	Promedio supervivientes Log10	Log Reducción
11 ppm POOA + 38 ppm POAA pH 7,59	10 min	$4,8 \times 10^4$	4,68	1,71
	20 min	$2,9 \times 10^4$	4,46	1,93
	30 min	$1,6 \times 10^4$	4,41	1,98
	40 min	$2,6 \times 10^4$	4,20	2,19
11ppm POOA + Tensioactivo pH 7,50	10 min	$2,6 \times 10^5$	5,41	1,07
	20 min	$1,6 \times 10^5$	5,20	1,28
	30 min	$1,6 \times 10^5$	5,20	1,28
	40 min	$1,7 \times 10^5$	5,23	1,25
11 ppm POOA pH 7,53	10 min	$1,49 \times 10^6$	6,17	0,31
	20 min	$1,54 \times 10^6$	6,19	0,29
	30 min	$1,48 \times 10^6$	6,17	0,31
	40 min	$1,44 \times 10^6$	6,16	0,32
38ppm POAA + Tensioactivo pH 7,54	0 min	$1,52 \times 10^6$	6,18	0,30
	20 min	$8,1 \times 10^5$	5,91	0,57
	30 min	$2,6 \times 10^5$	5,41	1,07
	40 min	$1,3 \times 10^5$	5,11	1,37
38 ppm POAA pH 7,51	10 min	$1,25 \times 10^6$	6,10	0,38
	20 min	$1,09 \times 10^6$	6,04	0,44
	30 min	$9,7 \times 10^5$	5,99	0,49
	40 min	$9,1 \times 10^5$	5,96	0,52
28ppm POOA + 92 ppm POAA pH 7,51	10 min	$8,0 \times 10^4$	4,90	1,58
	20 min	$3,1 \times 10^4$	4,49	1,99
	30 min	$1,0 \times 10^4$	4,00	2,48
	40 min	$1,0 \times 10^4$	4,00	2,48
11 ppm POOA + 38 ppm POAA + TE pH 7,57	10 min	$4,0 \times 10^3$	3,60	2,79
	20 min	$6,2 \times 10^2$	2,79	3,60
	30 min	$1,4 \times 10^2$	2,15	4,24
	40 min	$8,0 \times 10^1$	1,90	4,49

* Promedio de UFC / ml x 10 (ml de neutralizador)

Tabla 9 - Titulación de la solución después del uso

Concentración deseada (ppm)			Medida como				
POOA	POAA	TE	Rep	g muestra	EP1 (mL Tio 0,10 N)	ppm POAA	Promedio ppm POAA
11	38	0	1	87,85	0,44	19,03	18,3
			2	112,58	0,52	17,55	
11	38	2625	1	80,51	0,48	22,66	22,7
			2	113,66	0,68	22,73	

5 La EN 13704 define la actividad esporicida como la capacidad del producto para producir al menos una reducción de 10^3 en el número de esporas bacterianas en las condiciones definidas por esta Norma Europea. La Fig. 1 ilustra las reducciones logarítmicas de esporas de *C. difficile* observadas para cada sustancia de ensayo a 10, 20, 30 y 40 minutos de tiempo de contacto a 40°C, en comparación con la composición completa (11 ppm de POOA + 38 ppm de POAA + Tensioactivo).

10 Todas las soluciones de uso fueron tituladas después de la prueba, para asegurarse de que un nivel aceptable de perácido estaba presente en la solución de ensayo. Ninguno de los componentes individuales logró una reducción de más de 3 log de esporas de *C. difficile* y por lo tanto han fracasado en esta selección de la actividad esporicida EN 13704.

El sistema de química de perácidos mixtos con tensioactivo (11 ppm POOA + 38ppm POAA + Turbo Emulsión) fue la única solución para lograr una reducción mayor de 3 log de esporas de *C. difficile* después de 20, 30 y 40 minutos de exposición, pasando por la selección de actividad esporicida.

15 Los datos muestran un nivel significativo de sinergia que se produce entre el (1) POOA y POAA (sistema perácido mixto) y el (2) perácido y tensioactivo. Por consiguiente, no sólo existe una relación sinérgica resultante de una combinación de perácidos, sino un beneficio aún mayor cuando la combinación de perácidos se utiliza con tensioactivos.

20 Como verificará un especialista en la técnica, la cantidad de tiempo requerido para la exposición (por ejemplo, 20 minutos) para producir una reducción 10^3 puede reducirse a medida que aumenta la concentración de perácido. Se espera que el umbral 10^3 pueda pasar después de 10 min de exposición con una concentración de perácido incrementada de acuerdo con la invención. Esto coincide con el rendimiento del desinfectante comercial Turbo Oxysan® descrito en la presente memoria.

Ejemplo 4

25 La eficacia esporicida de las composiciones de perácido y peroxiácido generadas por ABF de acuerdo con la invención se comparó con un control (Turbo Oxysan®, comercialmente disponible) sobre textiles. La reducción logarítmica de las esporas de *C. difficile* se analizó después del tratamiento con la composición de peroxiácido mixto (POAA/POOA) mezclada con ABF del Ejemplo 1, en comparación con el desinfectante comercial Turbo Oxysan®. Ambos sistemas utilizaron el detergente comercialmente disponible Turbo Emulsion®, dosificado a 2625 ppm.

30 Tabla 10

Sustancia de ensayo	Tiempo de exposición	Log Reducción
Turbo Oxysan®	10 minutos	>3,70
	20 minutos	>3,70
	30 minutos	>3,70
	40 minutos	>3,70
28ppm POOA + 92 ppm POAA	10 minutos	>3,70
	20 minutos	>3,70
	30 minutos	>3,70
	40 minutos	>3,70

Como se muestra en la Tabla 10, las composiciones de perácidos generadas por ABF de acuerdo con la invención funcionan de manera equivalente al perácido de equilibrio disponible comercialmente Turbo Oxysan®, manteniéndose constantes todos los demás factores.

Ejemplo 5

- 5 Es bien conocido por los expertos en la técnica que los peroxiácidos proporcionan un blanqueo óptimo, es decir, la eliminación de manchas, cerca del pKa del perácido. Con un pKa de 8,2, el blanqueo a partir de ácido peroxiacético a un pH alcalino bajo, es decir, 8, es superior al blanqueo a un pH más alcalino, p. ej., a pH 11. Se generaron sistemas de peroxiácidos (POOA solo o POAA/POOA mixto) de acuerdo con el método del ejemplo 1. El blanqueo de estos sistemas se probó en el tergotómetro. En un caso, los sistemas de perácidos alcalinos se añadieron a los recipientes tergotométricos sin ningún ajuste de pH externo. En otro caso, se añadió ácido sulfúrico a las soluciones de perácido alcalino para reducir la solución de uso a pH 8. Como puede verse en la Tabla 11, cuando el pH se redujo, hubo un aumento significativo en el blanqueo para ambos sistemas en todas las muestras ensayadas. Esto demuestra que los perácidos alcalinos generados a través del método de esta invención se comportan de manera similar a los generados a través de un equilibrio ácido convencional.

15 Tabla 11

	% Eliminación de manchas a partir de Perácidos ABF a diferentes pH			
	POOA solo		POAA/POOA	
	pH 8	pH 11	pH 8	pH 11
Café sobre Poli/algodón	40,6	21,9	43,6	23,8
Curry sobre algodón	33,4	6,6	24,4	6,2
Té sobre algodón	23,6	17,8	30,4	15,7
Té sobre Poli/algodón	40,5	21,2	45,2	23,2

REIVINDICACIONES

1. Un método para formar una composición de ácido percarboxílico mixto in situ, que comprende:
- (a) proporcionar una mezcla de reacción que comprende:
- (i) un primer éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18;
- 5 (ii) una fuente de alcalinidad seleccionada del grupo que consiste en un hidróxido de metal alcalino, un hidróxido de metal alcalino-térreo, un silicato de metal alcalino, boratos y mezclas de los mismos y
- (iii) un agente oxidante,
- (b) permitir que la mezcla de reacción reaccione durante un tiempo suficiente y después añadir un segundo éster de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18; y
- 10 (c) después de la adición del segundo éster permitir que la mezcla reaccione durante una cantidad de tiempo suficiente tal que una composición de ácido peroxicarboxílico mixto se forma ex situ a partir de una aplicación blanqueante, antimicrobiana, sanitizante y/o desinfectante; en donde la mezcla de reacción tiene un pH mayor que 12, no está en equilibrio, y contiene menos de 0,5 % en peso de un agente estabilizante.
2. El método de la reivindicación 1, que comprende además proporcionar dicha composición con una fuente de tensioactivo en un punto de uso.
- 15 3. El método de la reivindicación 1, en el que el pH es mayor que 12,5 y en donde dichos dos ésteres incluyen un éster de ácido carboxílico C1 a C4 y un éster de ácido carboxílico C5 a C11, en donde dichos ésteres se seleccionan del grupo que consiste en triacetina, octanoato de sorbitán, octanoato de glicerol y mezclas de los mismos y en donde dicho alcohol polihídrico se selecciona del grupo que consiste en un azúcar, un alcohol de azúcar, y mezclas de los mismos.
- 20 4. El método de la reivindicación 1, en el que el alcohol de azúcar se selecciona del grupo que consiste en etilenglicol, propilenglicol, glicerol, sorbitol, sorbitán y mezclas de los mismos y en donde el éster se selecciona del grupo que consiste en glicérido monoctanoico, glicérido dioctanoico, glicérido trioctanoico, monoctanoato de sorbitán, dioctanoato de sorbitán, trioctanoato de sorbitán, laurato de sucrosido y mezclas de los mismos y en el que el agente oxidante comprende un donador de peróxido de hidrógeno.
- 25 5. El método de la reivindicación 1, en el que el agente oxidante comprende una fuente de peróxido seleccionada del grupo que consiste en percarbonato, perborato, peróxido de hidrógeno, peróxido de hidrógeno de urea, peróxidos de PVP y mezclas de los mismos.
- 30 6. El método según la reivindicación 1, en el que la mezcla de reacción comprende: (i) una primera premezcla de reactivo que comprende dicho éster de un alcohol polihidroxiado y un ácido carboxílico C1 a C18 y dicho agente oxidante, y (ii) una segunda fuente de reactivo que comprende dicha fuente de alcalinidad, en el que dicha premezcla de reactivo comprende además al menos un reactivo seleccionado del grupo que consiste en un agente dispersante, un disolvente, agua y mezclas de los mismos.
- 35 7. El método de la reivindicación 6, en el que dicho disolvente es un disolvente orgánico para solubilizar el éster y en donde dicho agente dispersante es suficiente para crear una solución físicamente metaestable tras la reacción con una fuente de alcalinidad.
8. El método de la reivindicación 1, en el que dicho punto de uso se selecciona del grupo que consiste en una superficie textil, un interior de un tambor y una rueda de lavado de una lavadora comercial o de túnel.
9. Un método no terapéutico para eliminar suciedad de una superficie que comprende:
- 40 (a) formar una composición blanqueante y desinfectante de ácido percarboxílico mixto que tiene un contenido de ácido peroxicarboxílico activo de 0,25% a 20% ex situ desde un punto de uso haciendo reaccionar una composición que comprende al menos dos ésteres de un alcohol polihídrico y un ácido carboxílico C1 a C18, una fuente de alcalinidad y un agente oxidante; y
- 45 (b) poner en contacto dicha superficie en un punto de uso con dicha composición de ácido peroxicarboxílico y opcionalmente una fuente de tensioactivo.
10. El método de la reivindicación 9, en donde dicha composición de ácido peroxicarboxílico generada ex situ además se diluye y/o acidifica antes de ponerla en contacto con dicha superficie.
11. El método de la reivindicación 9, en donde dicho punto de uso se selecciona del grupo que consiste en una superficie textil, un interior de un tambor y una rueda de lavado de una lavadora comercial o de túnel.

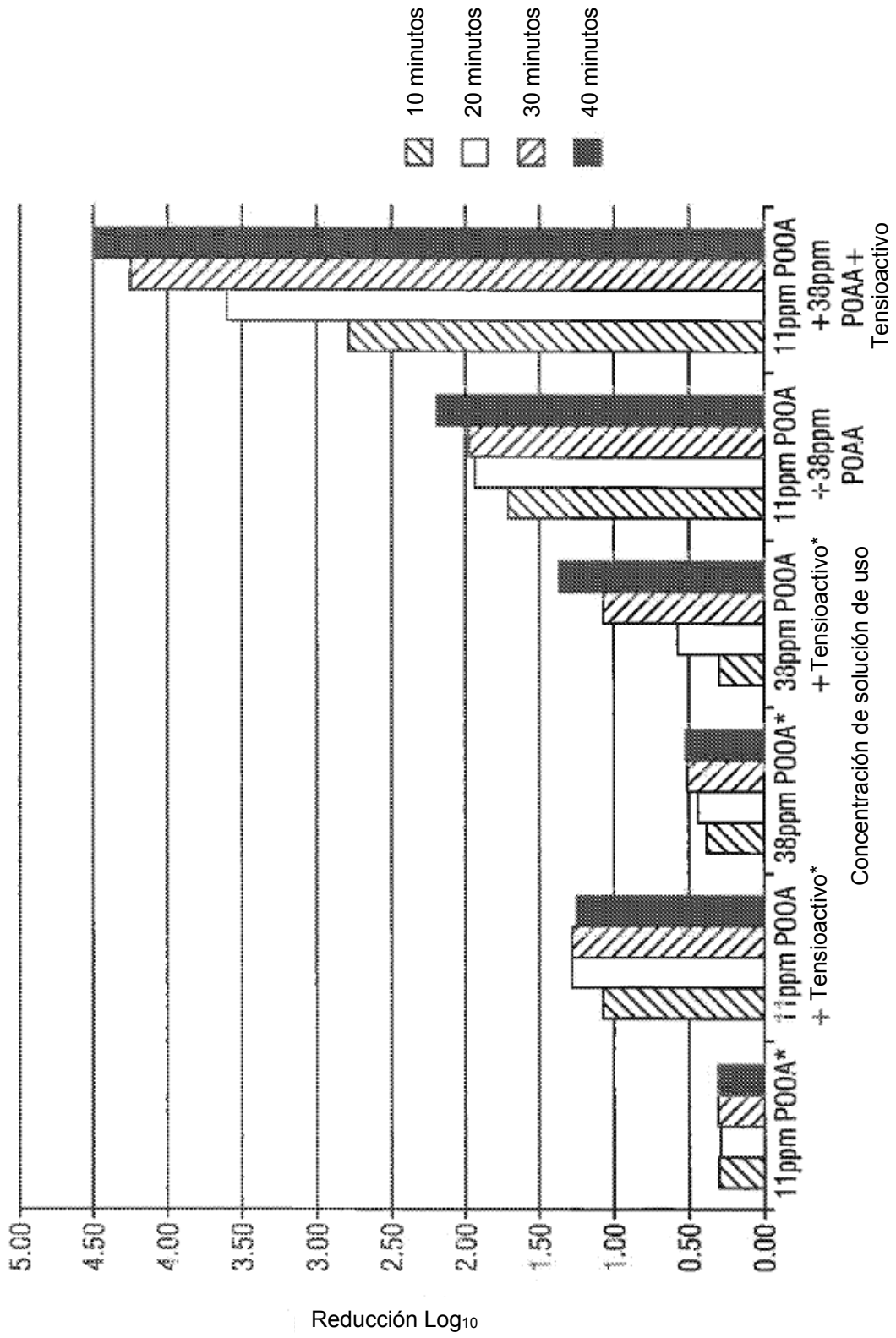


FIG. 1