



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년05월20일
(11) 등록번호 10-2400210
(24) 등록일자 2022년05월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
A61K 8/46 (2006.01) A61K 8/23 (2006.01)
A61K 8/41 (2006.01) A61Q 19/10 (2006.01)
A61Q 5/02 (2006.01) C11D 1/04 (2006.01)
C11D 1/12 (2006.01) C11D 1/28 (2006.01)
C11D 1/37 (2006.01) C11D 3/04 (2006.01)
(52) CPC특허분류
A61K 8/463 (2013.01)
A61K 8/23 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2018-7036431
(22) 출원일자(국제) 2017년05월11일
심사청구일자 2020년05월06일
(85) 번역문제출일자 2018년12월14일
(65) 공개번호 10-2019-0008563
(43) 공개일자 2019년01월24일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2017/061324
(87) 국제공개번호 WO 2017/198537
국제공개일자 2017년11월23일
(30) 우선권주장
16170204.8 2016년05월18일
유럽특허청(EPO)(EP)
(56) 선행기술조사문헌
JP63230799 A*
US02195088 A1*
W02015117840 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
바스프 에스이
독일 루트비히스펜 67056, 칼-보슈-스트라세 38
(72) 발명자
브룬 클라우디아
독일 40589 뒤셀도르프-홀트하우젠 헨켈슈트라세 67
베홀러 안스가르
독일 40589 뒤셀도르프-홀트하우젠 헨켈슈트라세 67
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 8 항

심사관 : 최경윤

(54) 발명의 명칭 수성 계면활성제 조성물

(57) 요약

본 발명은 하기를 포함하는 수성 계면활성제 조성물에 관한 것으로서:

- 일반식 (I) 의 하나 이상의 알파-술포 지방산 2염 (A),



[식 중, 기 R^1 은 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 기 M^1 및 M^2 는 서로 독립적으로 H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민으로 이루어지는 군으로부터 선택됨],

- 일반식 (II) 의 하나 이상의 술포숙시네이트 (B),



[식 중, 기 R^{31} 은 탄소수 6 내지 22 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 기 또는 탄소수 6 내지 22 의 알콕시화 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 기이고, 기 M^{16} 및 M^{17} 은 서로 독립적으로 H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민으로 이루어지는 군으로부터 선택됨],

- 물,

특허 청구범위에 상세하게 정의된 경계 조건이 소위 에스테르 술포네이트에 대하여 충족되어야 하는, 수성 계면 (뒷면에 계속)

활성제 조성물에 관한 것이다. 이러한 조성물은 양호한 발포력 및 양호한 피부 내성을 갖고, 폼은 쾌적한 감각적 느낌을 가지며, 미용제뿐 아니라 세제 및 세정제에 적합하다.

(52) CPC특허분류

A61K 8/41 (2013.01)
A61K 8/416 (2013.01)
A61Q 19/10 (2013.01)
A61Q 5/02 (2013.01)
C11D 1/04 (2013.01)
C11D 1/123 (2013.01)
C11D 1/28 (2013.01)
C11D 1/37 (2013.01)
C11D 3/046 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

하기를 포함하는 수성 계면활성제 조성물로서,

- 일반식 (I) 의 하나 이상의 **알파-술폰 지방산 2염 (A)**,



[식 중, 라디칼 R^1 은 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^1 및 M^2 는 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨],

- 디소듐 라우레스 술폰숙시네이트 및 디소듐 라우릴 술폰숙시네이트로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 **술폰숙시네이트 (B)**,

- 일반식 (III) 의 하나 이상의 **화합물 (C)**,



[식 중, 라디칼 R^4 는 탄소수 7 내지 19 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^5 는 H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨],

- 일반식 (IV) 의 하나 이상의 **황산의 무기 염 (D)**,



[식 중, M^6 은 Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨],

- **물**,

하기 조건이 적용되는, 수성 계면활성제 조성물:

- 알파-술폰 지방산 2염 (A) 대 술폰숙시네이트 (B) 의 중량비는 2:1 내지 1:2 임,
- 수성 계면활성제 조성물이 일반식 (V) 의 하나 이상의 **에스테르 술폰네이트 (E)** 를 포함하는 경우,



[식 중, 라디칼 R^2 는 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 R^3 은 탄소수 1 내지 20 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이며, 여기서 라디칼 R^3 은 논리적으로 알케닐 라디칼일 수 있거나, 오직 탄소수 3 초과로 분지형일 수 있고, 라디칼 M^7 은 Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨], 화합물 (A) 는 - 화합물 (A) 및 (E) 전체를 기준으로 - 90 중량% 이상의 정도로 존재해야 함.

청구항 2

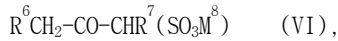
제 1 항에 있어서, 화학식 (I) 중 라디칼 R^1 이 탄소수 10 내지 16 의 포화 선형 알킬 라디칼이고, 화합물 (A) 에 관하여, 라디칼 R^1 이 테실 또는 도데실 라디칼인 화합물 (A) 의 비율이 - 화합물 (A) 의 총량을 기준으로 - 90 중량% 이상인 수성 계면활성제 조성물.

청구항 3

제 1 항에 있어서, 라디칼 M^1 및 M^2 가 H (수소) 및 Na (소듐) 을 포함하는 군으로부터 선택되는 수성 계면활성제 조성물.

청구항 4

제 1 항에 있어서, 조성물이 일반식 (VI) 의 하나 이상의 **모노술포케톤 (F)** 를 추가로 포함하고, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (F) 의 양을 초과해야 하는 수성 계면활성제 조성물:



[식 중, 라디칼 R^6 및 R^7 은 - 서로 독립적으로 - 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고, 라디칼 M^8 은 H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨].

청구항 5

제 1 항에 있어서, 조성물이 일반식 (VII) 의 하나 이상의 **디술포케톤 (G)** 를 추가로 포함하고, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (G) 의 양을 초과해야 하는 수성 계면활성제 조성물:



[식 중, 라디칼 R^8 및 R^9 는 - 서로 독립적으로 - 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고, 라디칼 M^9 및 M^{10} 은 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨].

청구항 6

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, 미용 제품, 및 또한 세제 및 세정제를 위해 사용되는 수성 계면활성제 조성물.

청구항 7

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, 모발 샴푸, 샤워 젤, 비누, 합성 세제, 세척용 페이스트, 세척용 로션, 스크럽 제제 (scrub preparation), 폼 배쓰 (foam bath), 오일 배쓰 (oil bath), 샤워 배쓰 (shower bath), 면도용 폼, 면도용 로션, 면도용 크림 및 치아 케어 제품 형태의 미용 제품을 위해 사용되는 수성 계면활성제 조성물.

청구항 8

제 1 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서, 경질 표면 세정용 저 pH 제품, 또는 욕실 및 화장실 세정제 등, 및 또한 위생 설비에 사용되는 세정 및/또는 방향용 겔을 위해 사용되는 수성 계면활성제 조성물.

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 알파-술포 지방산 2염 및 술포숙시네이트를 함유하는 수성 계면활성제 조성물에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 음이온성 계면활성제는 가장 널리 보급된 계면-활성 화합물 중 일부이며, 세제 및 세정제에서 사용되는 것 이외에, 또한 미용품 분야에서 다양한 용도로 사용된다. 특히 미용품에서 사용되는 통상적인 음이온성 계면활성제는 알킬 에테르 술포이트 (알킬 폴리테르 술포이트, 지방 알코올 폴리글리콜 에테르 술포이트, 간단하게 또한 에테르 술포이트) 의 염이다. 이는 강력한 발포력, 높은 세정력, 경도 및 그리스에 대한 낮은 민감성을

특징으로 하며, 예를 들어 모발 샴푸, 폼 배쓰 (foam bath) 또는 샤워 배쓰 (shower bath) 와 같은 미용 제품뿐 아니라, 핸드 식기세척용 세제의 제조에 널리 사용된다.

[0003] 현재 다수의 적용 분야의 경우, 양호한 계면-활성 효과 이외에, 음이온성 계면활성제에 대한 추가적인 요건이 있다. 특히 미용품에서는 높은 피부과적 적합성이 요구된다. 또한, 양호한 발포력 및 폼에 대한 쾌적한 감각적 느낌이 일반적으로 바람직하다. 나아가, 생물기원 공급원 및 특히 또한 재생 가능한 원료로부터 적어도 부분적으로 제조될 수 있는 음이온성 계면활성제에 대한 요구가 존재한다.

발명의 내용

[0004] 본 발명의 목적은 하기 명시된 특성을 특징으로 하는 수성 계면활성제 조성물을 제공하는 것이었다:

[0005] · 양호한 발포력

[0006] · 폼에 대한 쾌적한 감각적 느낌

[0007] · 양호한 피부 적합성

[0008] 본 발명은 우선 하기를 포함하는 수성 계면활성제 조성물로서,

[0009] · 일반식 (I) 의 하나 이상의 **알파-술포 지방산 2염 (A)**,

[0010] $R^1CH(SO_3M^1)COOM^2$ (I)

[0011] [식 중, 라디칼 R^1 은 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^1 및 M^2 는 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨],

[0012] · 일반식 (II) 의 하나 이상의 **술포숙시네이트 (B)**,

[0013] $R^{31}-O-CO-CH(SO_3M^{16})-CH_2-COOM^{17}$ (II)

[0014] [식 중, 라디칼 R^{31} 은 탄소수 6 내지 22 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼 또는 탄소수 6 내지 22 의 알콕시화 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^{16} 및 M^{17} 은 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨],

[0015] · 물,

[0016] 하기 조건이 적용되는, 수성 계면활성제 조성물을 제공한다:

[0017] · 수성 계면활성제 조성물이 일반식 (V) 의 하나 이상의 에스테르 술포네이트 (E) 를 포함하는 경우,

[0018] $R^2CH(SO_3M^7)COOR^3$ (V)

[0019] [식 중, 라디칼 R^2 는 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 R^3 은 탄소수 1 내지 20 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이며, 여기서 라디칼 R^3 은 논리적으로 알케닐 라디칼일 수 있거나, 오직 탄소수 3 초과로 분지형일 수 있고, 라디칼 M^7 은 Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨], 화합물 (A) 는 - 화합물 (A) 및 (E) 전체를 기준으로 - 50 중량% 이상의 정도 - 특히 90 중량% 이상의 정도로 존재해야 함.

[0020] 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 하기 유리한 특성을 특징으로 한다:

[0021] · 양호한 발포력 및 폼에 대한 쾌적한 감각적 느낌. 이와 관련하여, 특히 미용품 분야에서, 발포력은 상이한 양상을 의미하는 것으로 이해될 수 있으며, 예를 들어 폼을 평가하기 위한 목적으로, 폼 부피, 폼 안정성, 폼 탄력성, 폼의 물 함량뿐 아니라, 예를 들어 기공 크기와 같은 폼의 광학적 특징 중 임의의 것을 사용할 수 있다고 명시될 수 있다. 본 발명에 따른 조성물은 발포 동안 큰 폼 부피를 갖는다. 실제로, 초기 발포는 비교적 짧은 기간 (수 초 내지 1 분) 내에 일어난다. 전형적으로, 초기 발포 동안, 샤워 젤 또는 샴푸를 펴 바르고, 손, 피부 및/또는 모발 사이에서 문지름으로써 발포가 유발된다. 실험실에서, 수성 계면활성제 용액의 발포 거동은, 예를 들어 교반, 흔들기, 펌핑, 가스 스트림을 통한 버블링에 의해 또는 다른

방식으로, 비교적 짧은 기간 내에 용액을 진탕시킴으로써 평가될 수 있다. 폼의 감각적 느낌의 주관적 평가는 시험 대상에 의해 이루어질 수 있다. 이러한 목적을 위해, 폼의 크림성 (creaminess), 탄력성, 성형성과 같은 측면이 평가될 수 있다.

[0022] · 양호한 피부 및 점막 적합성. 이는 당업자에게 공지된 시험관내 방법에 의해 (예를 들어, RBC 또는 HET-CAM) 및 또한 시험 대상에 의해 (예를 들어, 패치 시험) 확인될 수 있다.

[0023] · 피부 및 모발에 대한 뛰어난 케어 성능. 이는, 예를 들어 주관적인 피부 느낌 (매끄러움, 건조함 등), 또는 처리된 모발의 촉각 및 느낌을 참조로 시험 대상에서 평가될 수 있다. 기계적 측정 방법, 예컨대 모발의 빗질성 (combability) 이, 또한 사용될 수 있다.

[0024] · 양호한 저장 안정성. 이는, 수성 조성물이 임의의 시각적인 (예를 들어 혼탁함, 변색, 상 분리) 또는 측정 가능한 (예를 들어 pH, 점도, 활성 물질 함량) 변화를 나타내지 않는 경우이다.

[0025] · 양호한 적용성 및 가공성. 조성물은 물의 도입시 열의 공급 없이 신속하게 용해될 수 있다.

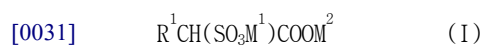
[0026] · 양호한 투명 가용성 및 투명성. 수성 계면활성제 조성물은 침전 또는 혼탁되는 경향을 갖지 않는다.

[0027] · 충분히 높은 점도, 이는 본 발명의 맥락에서 1000 mPas 이상의 값을 의미하는 것으로 이해됨 (23°C, 12 rpm 에서, 스피들 세트 RV 02 내지 07 (점도 범위에 따른 스피들 선택) 로 Brookfield RV 실험실 레오미터를 이용하여 측정됨). 공지된 바와 같이, "mPas" 는 밀리파스칼 초를 의미한다.

[0028] · 양호한 세정 성능. 수성 계면활성제 조성물은 고체 또는 텍스타일 표면으로부터 오염물, 특히 지방 또는 오일-함유 오염물을 제거 및 유화시키는데 적합하다.

[0029] 화합물 (A)

[0030] 본 발명의 맥락에서 **알파-sulfo 지방산 2염**으로서 언급되는 화합물 (A) 는, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물에 필수적이다. 이는 상기 명시된 화학식 (I) 을 갖는다:



[0032] [식 중, 라디칼 R^1 은 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^1 및 M^2 는 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨]. 이 와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.

[0033] 하나의 구현예에서, 라디칼 R^1 이 알케닐 라디칼인 수성 계면활성제 조성물 중 화합물 (A) 의 비율이 - 화합물 (A) 의 총량을 기준으로 - 3 중량% 이하라는 조건이 적용된다.

[0034] 바람직한 구현예에서, 화학식 (I) 중 라디칼 R^1 은 탄소수 10 내지 16 의 포화 선형 알킬 라디칼이고, 화합물 (A) 에 관하여, 라디칼 R^1 이 데실 및/또는 도데실 라디칼인 화합물 (A) 의 비율은 - 화합물 (A) 의 총량을 기준으로 - 70 중량% 이상, 바람직하게는 90 중량% 이상이다.

[0035] 바람직하게는, 화학식 (I) 중 라디칼 M^1 및 M^2 는 H (수소) 및 Na (소듐) 을 포함하는 군으로부터 선택된다.

[0036] 화합물 (A) 는 당업자에게 적절하게 공지된 모든 방법에 의해 제조될 수 있다. 본원에서 특히 바람직한 제조 방법은, 상응하는 카르복실산의 황산화이다. 여기서, 상응하는 카르복실산 및 특히 상응하는 지방산은 가스 삼산화황과 반응시키며, 삼산화황은 바람직하게는 SO_3 대 지방산의 몰비가 1.0 : 1 내지 1.1 : 1 범위가 되는 양으로 사용된다. 이어서, 산성 황산화 생성물인, 이러한 방식으로 수득된 미정제 생성물을 부분적으로 또는 완전히 중화시키는데, 수성 NaOH 를 이용하여 완전히 중화시키는 것이 바람직하다. 목적하는 경우, 정제 단계 및/또는 블리칭 (bleaching) (생성물의 목적하는 옅은 색상 조정을 위해) 을 수행할 수도 있다.

[0037] 특히 바람직한 구현예에서, 화합물 (A) 는 공업용 등급 형태로 사용된다. 이는, 상응하는 카르복실산, 특히 천연 지방산을, 가스 삼산화황으로 황산화하고, 그 결과 수득되는 산성 황산화 생성물을 부분적으로 또는 완전히 중화시킨 후, 화합물 (A), (C) 및 (D) 의 혼합물을 수득하는 것을 의미한다. 반응 파라미터 (특히 카르

복식산과 삼산화황의 몰비, 및 또한 반응 온도)의 상응하는 조정에 의해, 화합물 (A), (C) 및 (D)의 비를 제어할 수 있다. 화합물 (C) 및 (D)는 하기 "바람직한 구현예" 챕터에 기재되어 있다.

[0038] 본 발명의 맥락에서, 하기 조성을 갖는 알파-술포 지방산 2염의 공업용 등급의 혼합물이 바람직하다:

[0039] · (A)의 함량은 60 내지 100 중량% 범위이고,

[0040] · (C)의 함량은 0 내지 20 중량% 범위이고,

[0041] · (D)의 함량은 0 내지 20 중량% 범위이며,

[0042] 단, 상기 혼합물 중 구성 성분 (A), (C) 및 (D)의 합은 100 중량% 임.

[0043] **화합물 (B)**

[0044] 본 발명의 맥락에서 **술포숙시네이트**로서 언급되는 화합물 (B)는 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물에 필수적이다. 이는 상기 명시된 화학식 (II)를 갖는다:

[0045]
$$R^{31}-O-CO-CH(SO_3M^{16})-CH_2-COOM^{17} \quad (II)$$

[0046] [식 중, 라디칼 R^{31} 은 탄소수 6 내지 22의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼 또는 탄소수 6 내지 22의 알콕시화 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^{16} 및 M^{17} 은 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨].

[0047] 화합물 (B)는 당업자에게 공지된 모든 적절한 방법에 의해 제조될 수 있다. 화합물 (B)에 대한 중요한 접근법은 하기와 같다: 2-단계 방법에서, 말레산 무수물은 알코올 또는 알코올 알콕실레이트와 초기에 에스테르화되고, 이는 알코올로의 에틸렌 옥사이드의 첨가 생성물로서 이해되어야 한다. 이러한 경우 수득된 말레산 에스테르는 이후 소듐 히드로겐술포파이트 수용액에서 가수분해된다.

[0048] 하나의 구현예에서, 라디칼 R^{31} 이 알케닐 라디칼인 수성 계면활성제 화합물 중 화합물 (B)의 비율이 - 화합물 (B)의 총량을 기준으로 - 3 중량% 이하라는 조건이 적용된다.

[0049] 하나의 구현예에서, 화학식 (II) 중 라디칼 R^{31} 은 탄소수 12 내지 18의 포화, 선형 알킬 라디칼이고, 화합물 (B)에 관하여, 라디칼 R^{31} 이 도데실 및/또는 테트라데실 라디칼인 화합물 (B)의 비율은 - 화합물 (B)의 총량을 기준으로 - 70 중량% 이상, 바람직하게는 90 중량% 이상이다.

[0050] 하나의 구현예에서, 화학식 (II) 중 라디칼 R^{31} 은 탄소수 8 내지 18, 특히 12 내지 18의 선형 알킬 라디칼이다.

[0051] 추가의 바람직한 구현예에서, 화학식 (II) 중 라디칼 R^{31} 은 $-(CH_2-CH_2-O)_p-R^5$ 기이고, 여기서 p는 1 내지 4 범위의 수이고, 라디칼 R^5 는 탄소수 12 내지 18의 선형 알킬 라디칼이다.

[0052] 특히 바람직한 것은 INCI 명칭이 디소듐 라우레스 술포숙시네이트 및 디소듐 라우릴 술포숙시네이트인 화합물 (B)이다.

[0053] 화학식 (II) 중 라디칼 M^{16} 및 M^{17} 은 바람직하게는 H (수소) 및 Na (소듐)을 포함하는 군으로부터 선택된다.

[0054] **바람직한 구현예**

[0055] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은, 화합물 (A), (B) 및 물 이외에, 일반식 (III)의 하나 이상의 **화합물 (C)**를 추가로 포함한다:

[0056]
$$R^4COOM^5 \quad (III)$$

[0057] 화학식 (III)에서, 라디칼 R^4 는 탄소수 7 내지 19의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^5 는 H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택된다. 이와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.

- [0058] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은, 화합물 (A), (B) 및 물 이외에, 일반식 (IV)의 하나 이상의 **황산의 무기 염 (D)** 을 추가로 포함한다:
- [0059] $(M^6)_2SO_4$ (IV)
- [0060] [식 중, M^6 은 Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨]. 이와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.
- [0061] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B), (C) 및 (D) 를 포함한다. 이러한 경우, 특히 바람직한 것은 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 , 화합물 (B) 의 라디칼 M^{16} 및 M^{17} , 화합물 (C) 의 라디칼 M^5 및 화합물 (D) 의 라디칼 M^6 이 H (수소) 및 Na (소듐) 을 포함하는 군으로부터 선택되는 것이다.
- [0062] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B) 및 물 이외에, 일반식 (VI)의 하나 이상의 **화합물 (F)** 를 추가로 포함한다.
- [0063] $R^6CH_2-CO-CHR^7(SO_3M^8)$ (VI)
- [0064] [식 중, 라디칼 R^6 및 R^7 은 - 서로 독립적으로 - 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고, 라디칼 M^8 은 H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨]. 이와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.
- [0065] 본 발명의 맥락에서, 화합물 (F) 는 모노술포케톤으로 언급된다.
- [0066] 바람직한 구현예에서, 화학식 (VI) 중 라디칼 R^6 및 R^7 은 - 서로 독립적으로 - 탄소수 10 내지 16 의 포화 선형 라디칼이고, 화합물 (F) 에 관하여, 라디칼 R^6 및 R^7 이 테실 및/또는 도테실 라디칼인 화합물 (F) 의 비율은 - 화합물 (F) 의 총량을 기준으로 - 70 중량% 이상, 바람직하게는 90 중량% 이상이다. 바람직하게는, 화학식 (VI) 중 라디칼 M^8 은 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택된다.
- [0067] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B) 및 물 이외에, 일반식 (VII)의 하나 이상의 **화합물 (G)** 를 추가로 포함한다.
- [0068] $(SO_3M^9)R^8CH-CO-CHR^9(SO_3M^{10})$ (VII)
- [0069] [식 중, 라디칼 R^8 및 R^9 는 - 서로 독립적으로 - 탄소수 6 내지 18 의 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고, 라디칼 M^9 및 M^{10} 은 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨]. 이와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.
- [0070] 본 발명의 맥락에서, 화합물 (G) 는 디술포케톤으로 언급된다.
- [0071] 바람직한 구현예에서, 화학식 (VII) 중 라디칼 R^8 및 R^9 는 - 서로 독립적으로 - 탄소수 10 내지 16 의 포화 선형 라디칼이고, 화합물 (G) 에 관하여, 라디칼 R^8 및 R^9 가 테실 및/또는 도테실 라디칼인 화합물 (G) 의 비율은 - 화합물 (G) 의 총량을 기준으로 - 70 중량% 이상, 바람직하게는 90 중량% 이상이다. 바람직하게는, 화학식 (VII) 중 라디칼 M^9 및 M^{10} 은 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택된다.
- [0072] 화합물 (F) 및 (G) 의 제조는 임의의 특별한 제한이 없으며, 당업자에게 공지된 모든 방법에 의해 제조될 수 있다.
- [0073] 하나의 구현예에서, 화합물 (F) 및 (G) 는 독일 공개 공보 DE-A-42,20,580 에 기재된 바와 같이, 가스 삼산화황을 이용한 상응하는 케톤의 술포화에 의해 제조된다.

- [0074] 또 다른 구현예에서, 화합물 (F) 및 (G) 의 제조는 지방산으로부터 출발한다. 이러한 경우, 가스 삼산화황을 이용한 액체 지방산의 황산화는, 2염 (A) 이외에, 화합물 (F) 및 (G) 가 또한 형성되도록 수행되는데, 이는 하기와 같이 황산화를 수행한 결과로서 달성될 수 있다: 지방산(들)의 몰 당 1.0 내지 1.5 mol 및 특히 1.0 내지 1.25 mol 의 SO_3 가 사용되도록, 상이한 사슬 길이의 지방산의 혼합물 형태로 또한 사용될 수 있는 지방산 원료와 삼산화황의 비가 조정됨. 지방산은 70 내지 100°C 범위의 저장소 온도에서 반응기에 도입된다. 황산화 후, 수득된 액체 황산화 생성물은 온도-제어된 반응 후 코일에서 상기 온도에서 5 내지 20 분 동안 유지 및 에이징된다. 이어서, 일반적으로 5 내지 10, 특히 5 내지 7 의 pH 범위의 수성 염기, 바람직하게는 수산화소듐을 이용하여 중화가 수행된다. 이어서, 과산화수소를 이용하여 산성 블리칭 - 여기서 pH 는 7 이하의 값으로 조정됨 - 이 수행될 수 있다.
- [0075] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B) 및 (F) 를 포함한다. 이러한 경우, 특히 바람직한 것은 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 및 화합물 (B) 의 라디칼 M^{16} 및 M^{17} 이 H (수소) 및 Na (소듐) 을 포함하는 군으로부터 선택되는 것이다. 이러한 경우, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (F) 의 양을 초과해야 한다는 조건이 적용된다.
- [0076] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B) 및 (G) 를 포함한다. 이러한 경우, 특히 바람직한 것은 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 및 화합물 (B) 의 라디칼 M^{16} 및 M^{17} 은 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택되는 것이다. 이러한 경우, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (G) 의 양을 초과해야 한다는 조건이 적용된다.
- [0077] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B), (F) 및 (G) 를 포함한다. 이러한 경우, 특히 바람직한 것은 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 및 화합물 (B) 의 라디칼 M^{16} 및 M^{17} 은 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택되는 것이다. 이러한 경우, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (F) 및 (G) 의 양의 합을 초과해야 한다는 조건이 적용된다.
- [0078] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B), (C), (D) 및 (F) 를 포함한다. 이러한 경우, 특히 바람직한 것은 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 및 화합물 (B) 의 라디칼 M^{16} 및 M^{17} , 화합물 (C) 의 라디칼 M^5 및 화합물 (D) 의 라디칼 M^6 이 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택되는 것이다. 이러한 경우, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (F) 의 양을 초과해야 한다는 조건이 적용된다.
- [0079] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B), (C), (D) 및 (G) 를 포함한다. 이러한 경우, 특히 바람직한 것은 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 및 화합물 (B) 의 라디칼 M^{16} 및 M^{17} , 화합물 (C) 의 라디칼 M^5 및 화합물 (D) 의 라디칼 M^6 이 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택되는 것이다. 이러한 경우, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (G) 의 양을 초과해야 한다는 조건이 적용된다.
- [0080] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B), (C), (D), (F) 및 (G) 를 포함한다. 이러한 경우, 특히 바람직한 것은 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 및 화합물 (B) 의 라디칼 M^{16} 및 M^{17} , 화합물 (C) 의 라디칼 M^5 및 화합물 (D) 의 라디칼 M^6 이 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택되는 것이다. 이러한 경우, 화합물 (A) 의 양이 화합물 (F) 및 (G) 의 양의 합을 초과해야 한다는 조건이 적용된다.
- [0081] 목적하는 경우, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은, 구조적 관점에서, 상기 언급된 화합물 (A), (B), (D), (E), (F) 또는 (G) 에 속하지 않는, 하나 이상의 추가 계면활성제를 추가로 포함할 수 있다. 이러한 계면활성제는 음이온성, 양이온성, 비이온성 또는 양쪽성 계면활성제일 수 있다.
- [0082] **조성물의 용도**
- [0083] 본 발명의 추가의 주제는, 미용 제품, 및 또한 세제 및 세정제를 위한 상기 언급된 조성물의 용도이다.
- [0084] 미용 제품에 관하여, 특히 모발 샴푸, 샤워 젤, 비누, 합성 세제, 세척용 페이스트, 세척용 로션, 스크럽 제제 (scrub preparation), 폼 배쓰, 오일 배쓰, 샤워 배쓰, 면도용 폼, 면도용 로션, 면도용 크림 및 치아 케어 제품 (예를 들어 치약, 구강세정제 등) 의 형태로 존재하는 것들이 특히 바람직하다.
- [0085] 세정제에 관하여, 특히 본원에서는 경질 표면 세정용 저 pH 제품, 예컨대 욕실 및 화장실 세정제 등, 및 또한

위생 설비에서의 사용을 위한 세정 및/또는 방향용 겔이 바람직하다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

실시예

사용된 물질

DM 물 = 탈염수

SFA: 버진 $C_{12/14}$ -지방산 기준으로 공업용 등급 품질의 알파-술폰 지방산 2염; 조성: 74 중량% 디소듐 2-술폰라우레이트, 13 중량% 소듐 라우레이트, 11 중량% 소듐 술폰레이트, 2 중량% 물. 이러한 경우, 명칭 "라우레이트"는 이들이 기반으로 하는 버진 지방산의 혼합물의 $C_{12/14}$ 중량 비가 70 : 30 인 것을 의미한다.

SB3: Texapon SB3, 디소듐 라우레스 술폰숙시네이트 (INCI 명칭), 33 중량% 활성 물질, BASF PCN 의 상업용 제품

측정 및 시험 방법

발포 용량의 측정:

발포 거동 (로터 발포 방법) 을 시험하기 위해, 상업용 측정 기기 (Sita 발포 테스터 R-2000) 를 사용하였다. 먼저, 계면활성제 수용액을 하기와 같이 제조하였다: 1 g 의 시험될 각각의 샘플의 활성 물질 (샘플로서, SFA 또는 SB3 또는 이러한 물질의 혼합물이 사용됨, 하기 참조; SFA 의 경우 - 상기 언급된 바에 따름 - 활성 물질 함량은 2염 함량을 의미하는 것으로 이해됨) 을 20℃ 에서 1 L 의 DM 물에 용해시켰다. 용액의 pH 를 시트르산을 이용하여 5.5 로 조정하였다. 이에 따라 제조된 용액을 30℃ 에서 온도 제어하였다.

측정: 온도 제어 스톱으로부터, 250 ml 를 측정 기기로 운반하고, 10 초 동안 1300 분당 회전수의 회전 속도로 발포시키고, 존재하는 폼 부피 (ml) 를 측정한 후, 추가 10 초 동안 발포시키고, 존재하는 폼 부피 (ml) 를 측정한 후, 이와 같이 계속 진행하였다 (즉 발포 동안 매 10 초마다 폼 높이를 측정함). 80 초의 발포 시간 후, 측정을 종료하였다. 동일한 배치로부터의 각각 새로운 용액을 이용하여 각각의 샘플에 대해, 측정을 3 회 반복하고, 80 초 후 측정 결과를 이들 세 측정치의 평균으로서 언급하였다 (표 참조).

실시예

E1 = 실시예 1 (본 발명):

SFA 및 SB3 의 각각의 활성 물질의 중량 비가 2 : 1 의 값으로 설정된 SFA 및 Texapon SB3 의 혼합물을 사용하였다. 실험을 "발포 용량의 측정" 하 상기 기재된 바와 같이 수행하였다. 실험 데이터는 표 1 에서 확인할 수 있다.

E2 = 실시예 2 (본 발명):

SFA 및 SB3 의 각각의 활성 물질의 중량 비가 1 : 1 의 값으로 설정된 SFA 및 Texapon SB3 의 혼합물을 사용하였다.

E3 = 실시예 3 (본 발명):

SFA 및 SB3 의 각각의 활성 물질의 중량 비가 1 : 2 의 값으로 설정된 SFA 및 Texapon SB3 의 혼합물을 사용하였다.

E4 = 실시예 4 (본 발명):

SFA 및 SB3 의 각각의 활성 물질의 중량 비가 1 : 5 의 값으로 설정된 SFA 및 Texapon SB3 의 혼합물을 사용하였다.

C1 = 비교예 1:

오직 SFA 만을 사용하였다.

C2 = 비교예 2:

오직 SB3 만을 사용하였다.

[0108] 표 1: 발포 용량의 측정

	E1	E2	E3	E4	C1	C2
비 SFA : SB3	2:1	1:1	1:2	1:5	1:0	0:1
80 초 후 폼 부피	808 ml	858 ml	845 ml	844 ml	454 ml	865 ml

[0109]

[0110] SFA 단독은 불만족스러운 폼 부피를 나타내는 반면 (비교예 1), 모든 SB3 와의 SFA 의 혼합물은 매우 높은 폼 부피를 갖고 (놀랍게도, 심지어 유의한 과량의 SFA 를 갖는 실시예 1 에서도), 이는 SB3 의 것과 비교할 만하다.