

[19] 中华人民共和国国家知识产权局



[12] 发明专利申请公开说明书

[21] 申请号 200480015338.9

[51] Int. Cl.

A61K 8/84 (2006.01)

A61Q 5/00 (2006.01)

[43] 公开日 2006年7月5日

[11] 公开号 CN 1798542A

[22] 申请日 2004.4.16

[21] 申请号 200480015338.9

[30] 优先权

[32] 2003.4.17 [33] US [31] 60/463,497

[86] 国际申请 PCT/US2004/011881 2004.4.16

[87] 国际公布 WO2004/093834 英 2004.11.4

[85] 进入国家阶段日期 2005.12.2

[71] 申请人 克洛达股份有限公司

地址 美国新泽西州

[72] 发明人 A·G·佩雷拉 D·圣阿穆尔

H·S·巴里诺娃

[74] 专利代理机构 上海专利商标事务所有限公司

代理人 陶家蓉

权利要求书 8 页 说明书 40 页

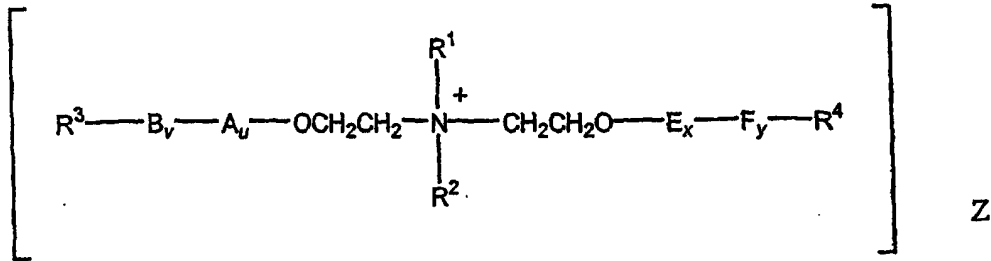
[54] 发明名称

含二酯季铵化合物的个人护理产品

[57] 摘要

本发明涉及一种含有至少一种个人护理成分和一种二酯季铵化合物的 pH 约为 4.0 - 10.0, 粘度约为 100 - 300,000 厘泊 (cp) 的混合物的个人护理产品, 以及制备个人护理产品二酯叔胺和季铵化合物的方法。

1.一种含有 pH 约为 4.0-10.0, 粘度约为 100-300,000 厘泊(cp)的混合物的个人护理产品, 所述混合物包含至少一种个人护理成分和通式 I 的二酯季铵化合物,



通式 I

其中,  $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  为含有约 1-22 个碳原子的相同或不同, 支链或直链, 取代或未取代, 饱和或不饱和的烷基, 环状或芳族基团;

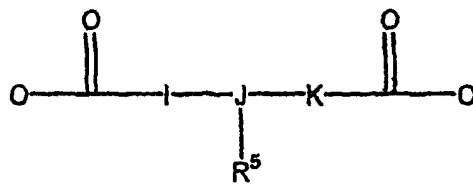
A 和 E 相同或不同, 可为乙氧基或丙氧基, 其中, A 和 E 中至少一个为丙氧基;

u 和 x 可相同或不同, 至少为 2、至多约为 80, 前提是通式 I 中大多数烷氧基为乙氧基;

B 和 F 可相同或不同, 为通式 II 或通式 III



通式 II



通式 III

其中, G 为取代或未取代, 饱和或不饱和, 直链或支链的烷基、环状或芳族  $\text{C}_0$ - $\text{C}_{36}$  基团, I 和 K 为  $\text{C}_0$ - $\text{C}_{18}$  基团, J 为 CH,  $\text{R}^5$  为 H 或  $[-\text{L}-\text{COO}-\text{R}^6]$ , 其中, L 可为饱和或不饱和, 取代或未取代, 直链或支链的烷基、环状或芳族基团, 可为  $\text{C}_0$ - $\text{C}_{36}$  基团; 和

$v$  和  $y$  可相同或不同，为 0 或 1；

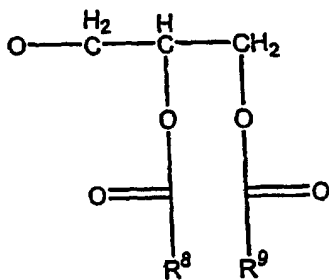
当  $v$  为 0 时， $R^3$  可为通式 IV 的含羧基官能团的 UV 保护基团或聚脂肪酸，  
当  $y$  为 0 时， $R^4$  可为通式 IV 的含羧基官能团的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



通式 IV

$R^7$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；

当  $v$  为 1 时， $R^3$  可为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，并且当  $y$  为 1 时， $R^4$  可为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



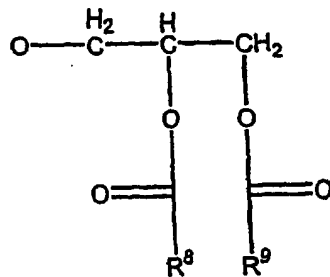
通式 V,



通式 VI

$R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；

当  $v$  或  $y$  为 1，B 或 F 为通式 III 时， $R^6$  为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



通式 V,



## 通式 VI

$\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$  和  $\text{R}^{10}$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；和

Z 是抗衡离子。

2.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述混合物的 pH 约为 5.0-9.0。

3.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述 A 或所述 E 是乙氧基。

4.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述 A 和所述 E 都是乙氧基。

5.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $\text{R}^1$  是  $\text{C}_1$ - $\text{C}_7$  的支链或直链、取代或未取代、饱和或不饱和烷基、环状或芳族基团。

6.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $\text{R}^1$  是  $\text{CH}_3$ 。

7.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $\text{R}^2$  是  $\text{C}_1$ - $\text{C}_7$  的支链或直链、取代或未取代、饱和或不饱和烷基、环状或芳族基团。

8.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $\text{R}^2$  是  $\text{CH}_3$ 。

9.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  是相同基团。

10.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  是  $\text{CH}_3$ 。

11.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，u 为 5-30。

12.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，x 为 5-30。

13.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，u 和 x 相同，都为 5-20。

14.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，v 和 y 为 0， $\text{R}^3$  和  $\text{R}^4$  具有通式 IV 的结构，是羊毛脂脂肪酸。

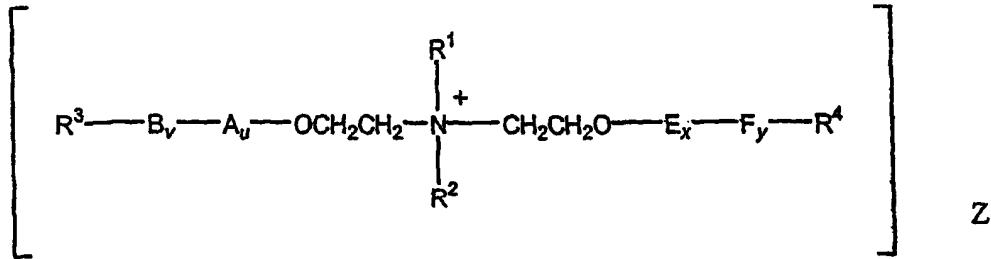
15.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述粘度约为 11,000-300,000cp。

16.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于，所述个人护理成分是表面活性剂、季铵化合物、溶剂、UV 保护成分、芳香剂、着色剂、染料、乳化剂、润湿剂、聚合物或稳定剂。

17.如权利要求 1 所述的个人护理产品，其特征在于， $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$  和  $\text{R}^{10}$

是脂肪取代基。

18.一种含有 pH 约为 4.0-10.0, 粘度约为 100-300,000cp 的混合物的个人护理产品, 所述混合物包含至少一种个人护理成分和通式 I 的二酯季铵化合物



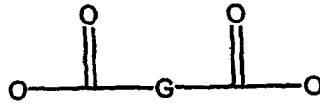
通式 I

其中,  $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  为含有约 1-22 个碳原子的相同或不同, 支链或直链, 取代或未取代, 饱和或不饱和的烷基, 环状或芳族基团;

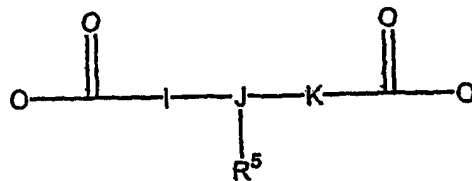
A 和 E 相同或不同, 可为乙氧基或丙氧基, 其中, A 和 E 中至少一个为丙氧基;

u 和 x 可相同或不同, 至少为 2、至多约为 80, 前提是通式 I 中大多数烷氧基为丙氧基;

B 和 F 可相同或不同, 为通式 II 或通式 III



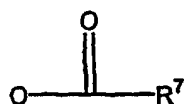
通式 II



通式 III

其中, G 为取代或未取代, 饱和或不饱和, 直链或支链的烷基、环状或芳族  $\text{C}_0$ - $\text{C}_{36}$  基团, I 和 K 为  $\text{C}_0$ - $\text{C}_{18}$  基团, J 为 CH,  $\text{R}^5$  为 H 或  $[-\text{L}-\text{COO}-\text{R}^6]$ , 其中, L 可为饱和或不饱和, 取代或未取代, 直链或支链的烷基、环状或芳族基团, 可为  $\text{C}_0$ - $\text{C}_{36}$  基团; 及 v 和 y 可相同或不同, 为 0 或 1;

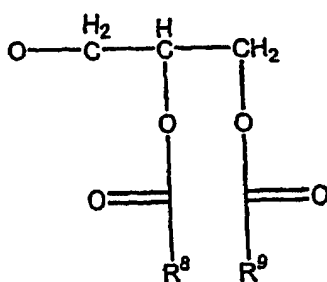
当 v 为 0 时,  $\text{R}^3$  可为通式 IV 的含羧基官能团的 UV 保护基团或聚脂肪酸, 当 y 为 0 时,  $\text{R}^4$  可为通式 IV 的含羧基官能团的 UV 保护基团或聚脂肪酸,



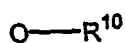
通式 IV

$\text{R}^7$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；

当  $v$  为 1 时， $\text{R}^3$  可为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，并且当  $y$  为 1 时， $\text{R}^4$  可为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



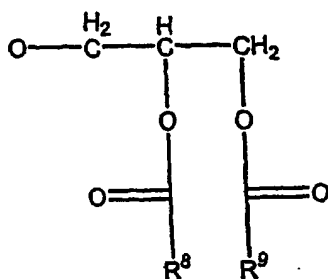
通式 V,



通式 VI

$\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$  和  $\text{R}^{10}$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；

当  $v$  或  $y$  为 1，B 或 F 为通式 III 时， $\text{R}^6$  为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



通式 V,



通式 VI

$\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$  和  $\text{R}^{10}$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或

未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；和

Z 是抗衡离子。

19.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述混合物的 pH 约为 5.0-9.0。

20.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $R^1$  是  $C_1-C_7$  的支链或直链、取代或未取代、饱和或不饱和烷基、环状或芳族基团。

21.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $R^1$  是  $CH_3$ 。

22.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $R^2$  是  $C_1-C_7$  的支链或直链、取代或未取代、饱和或不饱和烷基、环状或芳族基团。

23.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $R^2$  是  $CH_3$ 。

24.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $R^1$  和  $R^2$  是相同基团。

25.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述  $R^1$  和  $R^2$  是  $CH_3$ 。

26.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，u 为 5-30。

27.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，x 为 5-30。

28.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，u 和 x 相同，都为 5-20。

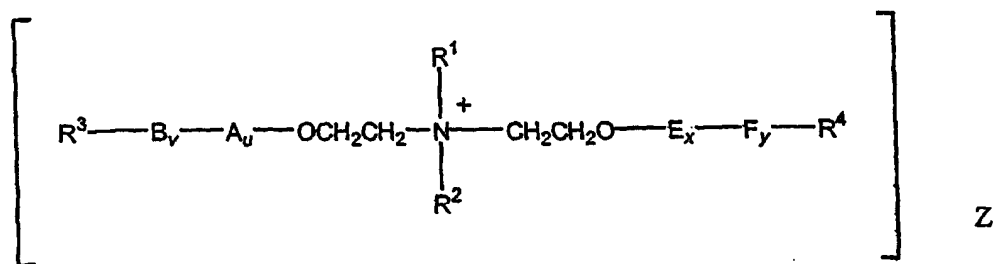
29.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，v 和 y 为 0， $R^3$  和  $R^4$  具有通式 IV 的结构，是羊毛脂脂肪酸。

30.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述粘度约为 11,000-300,000 cp。

31.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于，所述个人护理成分是表面活性剂、季铵化合物、溶剂、UV 保护成分、芳香剂、着色剂、染料、乳化剂、润湿剂、聚合物或稳定剂。

32.如权利要求 18 所述的个人护理产品，其特征在于， $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  是脂肪取代基。

33.一种含有 pH 约为 4.0-10.0，粘度约为 100-300,000 cp 的混合物的个人护理产品，所述混合物包含至少一种个人护理成分和通式 I 的二酯季铵化合物

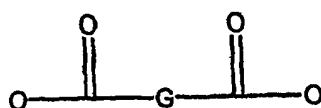


通式 I

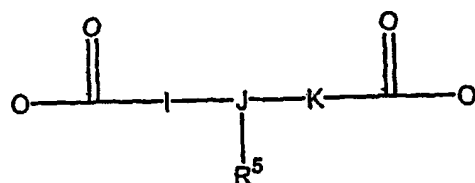
其中， $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  为含有约 1-22 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基，环状或芳族基团；

A 和 E 都是丙氧基；

u 和 x 可相同或不同，至少为 2、至多约为 80，B 和 F 可相同或不同，为通式 II 或通式 III



通式 II

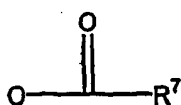


通式 III

其中，G 为取代或未取代，饱和或不饱和，直链或支链的烷基、环状或芳族  $\text{C}_0 - \text{C}_{36}$  基团，I 和 K 为  $\text{C}_0 - \text{C}_{18}$  基团，J 为 CH， $\text{R}^5$  为 H 或  $[-\text{L}-\text{COO}-\text{R}^6]$ ，其中，L 可为饱和或不饱和，取代或未取代，直链或支链的烷基、环状或芳族基团，可为  $\text{C}_0 - \text{C}_{36}$  基团；和

v 和 y 可相同或不同，为 0 或 1；

当 v 为 0 时， $\text{R}^3$  可为通式 IV 的含羧基官能团的 UV 保护基团或聚脂肪酸，当 y 为 0 时， $\text{R}^4$  可为通式 IV 的含羧基官能团的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



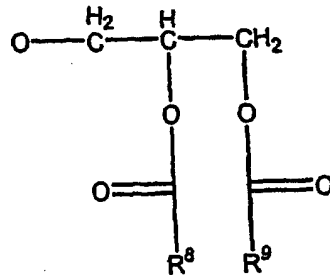
通式 IV

$\text{R}^7$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同支链或直链，取代或未取代，饱



和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；

当  $v$  为 1 时， $R^3$  可为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，并且当  $y$  为 1 时， $R^4$  可为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



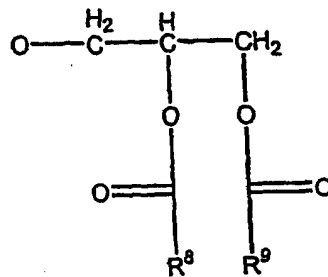
通式 V,



通式 VI

$R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；和

当  $v$  或  $y$  为 1，B 或 F 为通式 III 时， $R^6$  为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或聚脂肪酸，



通式 V,



通式 VI

$R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  为含有约 1-36 个碳原子的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团；和

Z 是抗衡离子。

34. 如权利要求 33 所述的个人护理产品，其特征在于，所述混合物的 pH 约为 5.0-9.0。

---

## 含二酯季铵化合物的个人护理产品

### 背景技术

已知许多类型的四元化合物或“季铵化合物”，它们已经应用于许多领域中。季铵化合物可是非常有用的化合物。然而，某些季铵化合物特别对环境有害。这些季铵化合物分解非常慢，可构成环境污染。因为其含有活性氮物质，它们可具有以前未发现的活性。

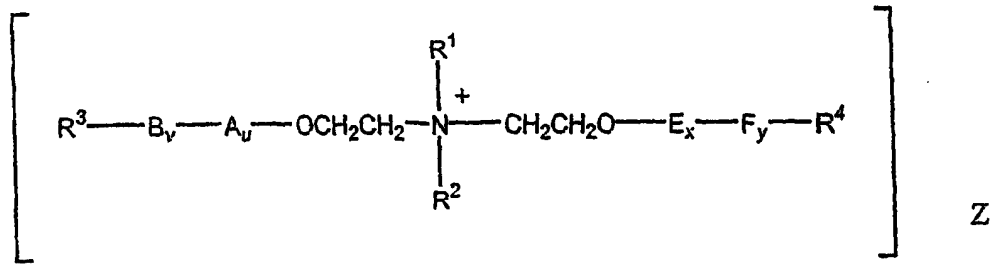
其它季铵化合物如酯类季铵化合物，包含酯键，由于其更易于降解而更善待环境。通常，以单、二或三酯或是单、二或三酯的混合物形式，形成酯类季铵化合物。

酯类季铵化合物由于其善待环境的特性而常常用于洗衣柔软剂中。然而，酯类季铵化合物常常只在相对较窄、通常是酸性 pH 范围内稳定。用于洗衣柔软剂的酯类季铵化合物通常具有酸性 pH(pH 约小于 5.0)。用于洗衣柔软剂的酯类季铵化合物对于用作头发或皮肤的个人护理产品来说，通常太酸。酯类季铵化合物特别公开于美国专利 6,465,419、6,462,014、6,323,167、6,037,315、5,880,086、5,854,201、5,750,490、5,681,915 和 5,463,094 以及公布的美国专利申请 US 2003/0013627 中。

因此，非常需要具有改善的环境特性，在较高 pH 下具有提高的稳定性和改善的实质性的化合物。

### 发明概述

本发明通过提供具有 pH 约为 4.0-10.0，更优选约 5.0-9.0，粘度约为 100-300,000 厘泊(cp)的个人护理产品，满足上述需要。根据本发明的一方面，这些个人护理产品是含有至少一种个人护理成分和通式 I 的二酯季铵化合物的混合物。



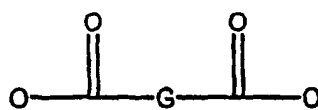
通式 I

在通式 I 中,  $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  是含有约 0-22 个碳原子的相同或不同, 支链或直链, 取代或未取代, 饱和或不饱和的烷基, 环状或芳族基团。然而,  $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  中至少一个必须至少是  $\text{C}_1$ 。此外, 如果  $\text{R}^1$  和  $\text{R}^2$  中任一个是  $\text{C}_0$ , 那么通式 I 的分子就不是季铵化合物, 不带有正电荷。在这种情况下, 不需要抗衡离子。这些叔胺酯也是本发明的一部分。

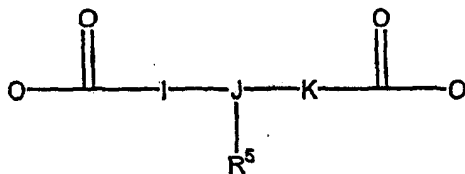
A 和 E 相同或不同, 可以是乙氧基、丙氧基或丁氧基。当是丙氧基或丁氧基时, 它们为直链或支链。在本发明一个具体的优选实施例中, 通式 I 的化合物包含至少一个丙氧基或丁氧基, 最优选至少一个丙氧基。这表示在通式 I 中, 至少一个 A 和/或至少一个 E 基团或单元是丙氧基。符号 u 和 x 可相同或不同, 各自至少为 2、至多约为 80, 前提是每个 A 和 E 的乙氧基的数目约为 80 或更少, 每个 A 和 E 的丙氧基和丁氧基的数目约为 30 或更少。这就是说, 如果所有的 A 单元都是乙氧基且所有的 E 单元都是丙氧基的话, u 可为 80(80 个乙氧基单元的链), x 可为 30(30 个丙氧基单元的链)。如果 A 是这些烷氧基单元的混合物, u 可为 80, 其中, 不多于约 30 个 A 单元是丙氧基。

优选至少一个 u 或 x 至少为 2, 更优选 u 和 x 都至少为 5。优选通式 I 中大多数烷氧基单元是乙氧基单元。例如, 当 u 和 x 各自是 2, A 和 E 都是 1 个丙氧基单元和 1 个乙氧基单元时, 因为直接结合氮的乙氧基, 所有烷氧基中大多数是乙氧基, 4 个乙氧基对 2 个丙氧基。尤其更优选在 A 和 E 中乙氧基单元的数目占大多数。

B 和 F 可相同或不同, 分别为通式 II 或通式 III。

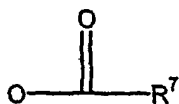


通式 II



通式 III

通式 II 是二酸或二元质子酸，通式 III 是三酸或三元质子酸。在通式 II 和 III 中，G 是取代或未取代，饱和或不饱和，直链或支链的烷基、环状或芳族 C<sub>0</sub>-C<sub>36</sub> 基团。“C<sub>0</sub>”表明，在此位置不需要碳原子。“C<sub>36</sub>”是包含 36 个碳原子的分子，本文将通篇使用这种通用型术语。I 和 K 为 C<sub>0</sub>-C<sub>18</sub>。J 优选为 CH。R<sup>5</sup> 为 H 或 [-L-COO-R<sup>6</sup>]，其中，L 可是饱和或不饱和，取代或未取代，直链或支链的烷基、环状或芳族基团，可是 C<sub>0</sub>-C<sub>12</sub> 基团；v 和 y 可相同或不同，是 0 或 1；当 v 为 0 时，R<sup>3</sup> 为通式 IV 的末端为反应性羧基的 UV 保护基团或末端为羧基结尾的聚脂肪酸。

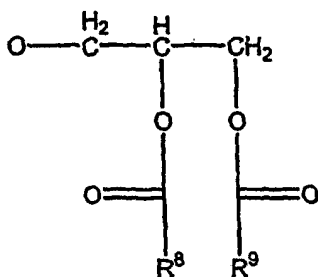


通式 IV

R<sup>7</sup> 为碳原子总数 C<sub>1</sub>-C<sub>36</sub> 的支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基(碳链如链烷基或链烯基)，环状(不具有共振的环结构)或芳族基团。优选 R<sup>7</sup> 是脂肪取代基。

当 y 为 0 时，R<sup>4</sup> 可选自如 R<sup>3</sup> 所述的相同基团。

当 v 为 1 时，R<sup>3</sup> 可是通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或末端为反应性羟基的聚脂肪酸。



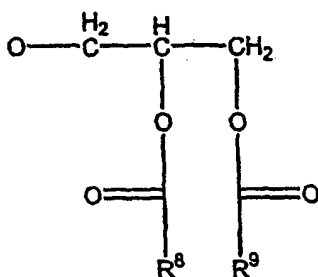
通式 V



通式 VI

$R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  为碳原子总数  $C_1 - C_{36}$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团。优选  $R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  是脂肪取代基。

当  $y$  为 1 时， $R^4$  可是通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或末端为反应性羟基的聚脂肪酸。



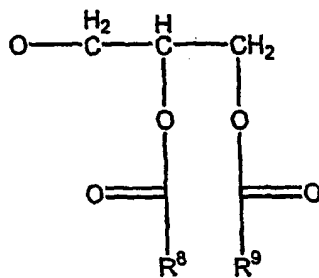
通式 V,



通式 VI

$R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  为碳原子总数  $C_1-C_{36}$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团。优选  $R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  是脂肪取代基。

当  $v$  或  $y$  为 1，B 或 F 为通式 III 时， $R^6$  为通式 V 或 VI 的末端为反应性羟基的 UV 保护基团或末端为反应性羟基的聚脂肪酸。



通式 V,



通式 VI

$R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  为碳原子总数  $C_1-C_{36}$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团。优选  $R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  是脂肪取代基。

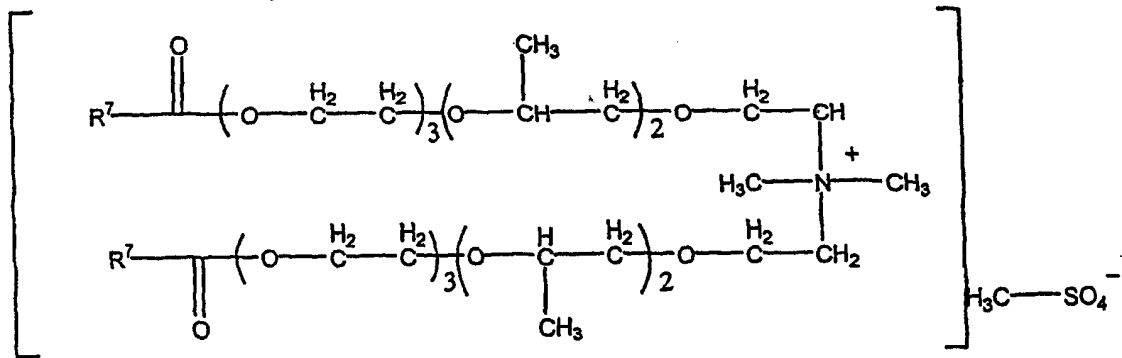
在另一个优选的实施例中，通式 I 中大多数烷氧基单元是丙氧基。例如，

当  $u$  和  $x$  各自为 2, A 和 E 全是丙氧基时, 即使加上直接结合氮的乙氧基, 所有烷氧基的大多数是丙氧基, 4 个丙氧基对 2 个乙氧基。尤其更优选 A 和 E 都是丙氧基, A 或 E 部分中没有任何乙氧基。

通式 I 的二酯季铵化合物通常带正电荷, 常常但不总是结合抗衡离子 Z。

所述至少一种个人护理成分可非限制性地包括, 任何溶剂、表面活性剂、调节剂、颜料、UV 保护剂或 UV 保护基团、着色剂、芳香剂、染料、赋形剂或添加剂, 用于配制个人护理产品, 例如但不限于, 化妆品、防晒剂和遮光剂、香波、润肤霜、凝胶或洗剂、调理剂、柔软剂等。

尤其优选的是具有 pH 范围约为 5.5-8.5, 更优选约为 6-8 的个人护理产品。也优选使用具有通式 VII 的二酯季铵化合物的个人护理产品。



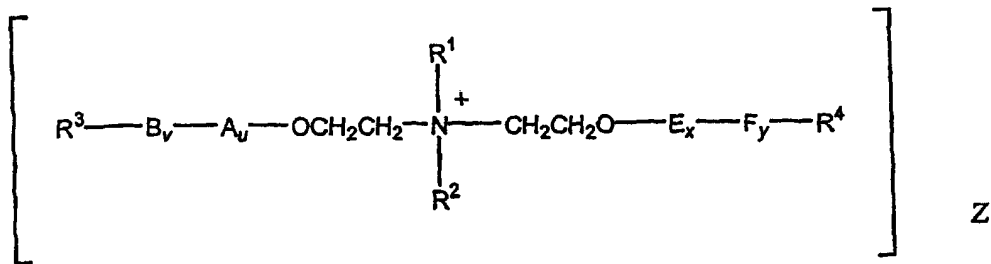
通式 VII

通式 VII 中, 两个  $R^7$  基团优选是来自羊毛脂脂肪酸的脂肪取代基的混合物。本发明还涉及制备这些产品的方法以及适用于这些个人护理产品的二酯叔胺和二酯季铵化合物。

### 发明内容

本发明二酯季铵化合物是四元含氮化合物, 其所结合四个取代基( $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ - $B_v$ - $A_u$ - $O(CH_2)_2$ -和  $R^4$ - $F_y$ - $E_x$ - $O(CH_2)_2$ -)中的两个, 包括至少一个酯基或酯键。更具体地说, 每个  $R^3$ - $B_v$ - $A_u$ - $O(CH_2)_2$ -和  $R^4$ - $F_y$ - $E_x$ - $O(CH_2)_2$ -包括至少一个这种酯。例如, 当  $v$  为 1, B 为通式 III 的三酸时, 取代基可包含 3 个酯键。

本发明二酯季铵化合物包括那些具有通式 I 的化合物。



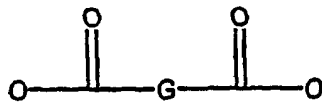
通式 I

在通式 I 中， $R^1$  和  $R^2$  是含有碳原子总数约  $C_1-C_{22}$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团。 $R^1$  和  $R^2$  优选是含有碳原子约  $C_1-C_7$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团。更优选  $R^1$  和  $R^2$  中至少一个是甲基，最优选都是甲基。可能  $R^1$  和  $R^2$  中一个是  $C_0$ ，但不都是  $C_0$ ，在这种情况下，通式 I 可不具有正电荷或抗衡离子。也考虑了这些二酯叔胺。

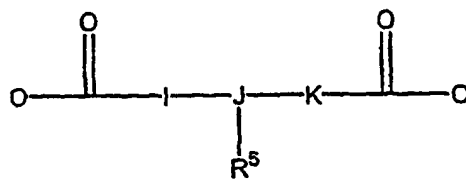
A 和 E 可相同或不同，是烷氧基，优选是乙氧基、丙氧基或丁氧基。也可能是长达  $C_8$  的基团。当用丙氧基、丁氧基或更长的基团时，其可是直链或支链。在本发明一个具体的优选实施例中，通式 I 的化合物包括至少一个丙氧基或丁氧基，最优选至少一个丙氧基。这表示在通式 I 中，至少一个 A 和/或至少一个 E 基团或单元是丙氧基。符号 u 和 x 可相同或不同，并且至少是 2，至多约为 80，前提是每个 A 和 E 的乙氧基数目约为 80 或更少，每个 A 和 E 的丙氧基和丁氧基的数目约为 30 或更少。这就是说，如果所有的 A 单元都是乙氧基且所有的 E 单元都是丙氧基的话，u 可为 80(80 个乙氧基单元的链)，x 可为 30(30 个丙氧基单元的链)。如果 A 是这些烷氧基单元的混合，u 可为 80，其中，不多于 30 个 A 单元是丙氧基。优选至少一个 u 或 x 至少为 2，更优选 u 和 x 都至少为 5。优选通式 I 中大多数烷氧基单元是乙氧基单元。例如，当 u 和 x 各自为 2，A 和 E 都为 1 个丙氧基单元和 1 个乙氧基单元时，由于直接结合氮的乙氧基(其不是 A 或 E 的部分)，通式 I 中所有烷氧基中大多数是乙氧基，4 个乙氧基对 2 个丙氧基。甚至更优选 A 和 E 中乙氧基单元的数目占大多数。在另一个优选的实施例中，u 和 x 相同或不同，并且至少为 2，至多约为 30，甚至更优选 u 和 x 相同或不同，并且至少为 2，至多约为 20。最优选 u 和 x 为 5，由两个嵌段组成，第一个嵌段由 2 个支链丙氧基- $(CH_2CH(CH_3)O)$ -组成，第二个嵌段由 3 个乙氧基- $(CH_2CH_2O)$ -组成。

在另一个优选的实施例中，通式 I 中大多数烷氧基单元是丙氧基。例如，当 u 和 x 各自为 2，A 和 E 全是丙氧基时，即使加上直接结合氮的乙氧基单元，所有烷氧基中大多数是丙氧基，4 个丙氧基对 2 个乙氧基。尤其更优选 A 和 E 都是丙氧基，A 或 E 部分没有任何乙氧基。

B 和 F 可相同或不同，分别为通式 II 或通式 III。



通式 II



通式 III

通式 II 是二酸或二元质子酸，通式 III 是三酸或三元质子酸。在通式 II 和 III 中，G 是  $C_0$ - $C_{36}$ ，取代或未取代，饱和或不饱和，直链或支链的烷基、环状或芳族基团。“ $C_0$ ”表明，在此位置不需要碳原子。“ $C_{36}$ ”是包含 36 个碳原子的分子，本文将通篇使用这种通用型适用于。I 和 K 为  $C_0$ - $C_{18}$ 。J 优选为 CH。 $R^5$  为 H 或  $[-L-COO-R^6]$ ，其中，L 可是饱和或不饱和，取代或未取代，直链或支链的烷基、环状或芳族基团，可是  $C_0$ - $C_{12}$  基团；v 和 y 可相同或不同，为 0 或 1。

$R^3$ 、 $R^4$  和  $R^6$  通常是脂肪酸、醇或甘油酯， $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$  和  $R^{10}$  通常是这些分子的脂肪取代基(碳链部分)。通式 IV 的脂肪酸、通式 VI 的脂肪醇和甘油酯可是纯的、基本上纯(另一种脂肪类型小于 10%)或是两种或多种脂肪类型的混合物，其中，甘油酯可为通式 V 的甘油单酸酯或甘油二酸酯。也可使用人造混合物，该混合物非限制性地包括顺 9-二十碳烯酸( $C_{20:1}$ )、芥酸( $C_{22:1}$ )、花生四烯酸( $C_{20:4}$ )和 culpodonic( $C_{22:5}$ )。可从含脂肪酸的油、甘油三酸酯得到脂肪取代基，可将其转化产生通式 V 的甘油单酸酯和甘油二酸酯、脂肪酸、脂肪醇、酯或盐。事实上，用于本发明的脂肪酸物质可来自天然或合成来源，包括纯脂肪酸、脂肪混合物、甘油三酸酯、油、蜡，例如希蒙得木油(脂肪酸和脂肪醇)。

通常，适用于  $R^3$ 、 $R^4$  和  $R^6$ - $R^{10}$  的脂肪酸或脂肪取代基的混合物不仅可由不同链长度和饱和度的脂肪酸组成，而且可由结构差异的反-异或异脂肪酸组



成。一种可用的混合物如表 I 所示。

表 I

碳链	反-异酸(%)	正酸(%)	异酸
C <sub>8-15</sub>	<5	<5	<5
C <sub>16</sub>	0-10	0.1-20	0.1-20
C <sub>17</sub>	0-5	0-5	0.1-10
C <sub>18</sub>	0-10	0.1-20	0.1-20
C <sub>19</sub>	0-50	0-10	0-10
C <sub>20</sub>	0-5	0-10	1-40
C <sub>21</sub>	0-95	0-5	0-5
C <sub>22</sub>	0-5	0-10	1-20
C <sub>23</sub>	0-25	0-5	0-10
C <sub>24</sub>	0-5	1-15	1-20
C <sub>25</sub>	0-30	0.1-10	0.1-10
C <sub>26</sub>	0-5	0.1-10	0.1-20
C <sub>27</sub>	0-10	0-5	0-5
总量	8-95	1.5-50	3.5-60

一种可用于生产本发明二酯季铵化合物的更优选的脂肪酸混合物的脂肪酸含量分布如表 II 所示。

表 II

碳链	反-异酸(%)	正酸(%)	异酸(%)
C <sub>8-15</sub>	<3	<3	<3
C <sub>16</sub>	1-5	0.2-10	0.2-10
C <sub>17</sub>	0-3	0-3	0.2-5
C <sub>18</sub>	1-5	0.2-10	0.2-10
C <sub>19</sub>	4-25	1-5	1-5
C <sub>20</sub>	0-3	1-5	2-20
C <sub>21</sub>	7-50	0-3	0-3
C <sub>22</sub>	0-3	1-5	2-10
C <sub>23</sub>	2-15	0-3	1-5
C <sub>24</sub>	0-3	2-10	2-10
C <sub>25</sub>	2-20	0.2-5	0.2-5
C <sub>26</sub>	0-3	0.2-5	1-10
C <sub>27</sub>	0-10	0-5	0-5
总量	15-75	10-50	10-50

R<sup>3</sup>, 甚至 R<sup>4</sup> 和 R<sup>6</sup> 一般是市售羊毛脂、也称为羊毛脂酸中存在的脂肪酸混合物。当然, 其也可是相同含量和比例的脂肪醇的混合物, 也取决于胺的端基是酸或羟基。考虑到每种情况下, 必须形成酯。羊毛脂酸中含有的脂肪酸的典

型分布如表 III 所示。

表 III

碳链	反-异酸(%)	正酸(%)	异酸	羟基酸(%)	异羟基酸(%)
C <sub>10</sub>	0	0.27	0.31	0	0
C <sub>11</sub>	0.80	0	0	0	0
C <sub>12</sub>	0	0.29	0.92	0	0
C <sub>13</sub>	0	0	1.20	0	0
C <sub>14</sub>	0	1.51	1.93	2.0	0.23
C <sub>15</sub>	3.07	0.47	0.31	0.91	0.54
C <sub>16</sub>	0.30	2.73	2.19	20.77	0.82
C <sub>17</sub>	1.69	0	0.23	0.21	0
C <sub>18</sub>	0	1.58	2.37	1.41	6.97
C <sub>19</sub>	4.30	0	0	0.76	0
C <sub>20</sub>	0	0.80	4.0	0.42	0
C <sub>21</sub>	3.81	0	0	0	0
C <sub>22</sub>	0	0.77	1.99	0.25	0
C <sub>23</sub>	1.28	0	0	0	0
C <sub>24</sub>	0	2.42	1.95	0	0
C <sub>25</sub>	0	0	3.23	0	0
C <sub>26</sub>	0	1.08	2.0	0	0
C <sub>27</sub>	1.22	0	0	0	0
总量	17.67	12.87	21.43	26.73	8.56

反-异酸符合以下通式：



其中，“z”可是任何正整数，R 是烷基、取代或未取代、直链或支链，饱和或不饱和。烷基可被取代或未取代。

羟基脂肪酸包括至少一个连接脂肪酸链的-OH 基团。异脂肪酸类似于反-异脂肪酸，除了连接的烷基与羰基更近，通常在第二个相邻的碳上。也包括羟基脂肪醇。

用于 R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup> 和 R<sup>6</sup>-R<sup>10</sup> 的脂肪酸、醇和甘油酯通常来源于，或可由天然存在和人工合成的油得到。本发明的油非限制性地包括 HEAR 油、鳕鱼肝油、鲱鱼油、步鱼油、芥油、青鳞鱼油、HEAR 油、鲑鱼油、沙丁鱼油、道氏池花精油和鲨鱼肝油。上述一些油的 C20+组成如下：鱼肝油 8.8-14.6%二十碳烯酸(C20:1)、2.6-9%二十碳五烯酸(C20:5)、4.6-13.3%二十二碳烯酸(芥酸)(C22:1)、1-2%二十二

碳五烯酸(C22:5)和 8.6-19%二十二碳六烯酸(C22:6); 鲱鱼油-1.5-19.2%二十碳烯酸(C20:1)、4.6-10.2%二十碳五烯酸(C20:5)、2.8-19.9%二十二碳烯酸(芥酸)(C22:1)、1-3.7%二十二碳五烯酸(C22:5)和 3.8-24.1%二十二碳六烯酸(C22:6); 步鱼油-0.9-2.7%二十碳烯酸(C20:1)、0.6-1.2%二十碳四烯酸(C20:4)、10.2-13.5%二十碳五烯酸(C20:5)、0.7-1.7%二十二碳烯酸(芥酸)(C22:1)、1.1-2.3%二十二碳五烯酸(C22:5)和 3.3-14%二十二碳六烯酸(C22:6); 青鳞鱼(沙丁鱼)油-3.2%二十碳烯酸(C20:1)、1.6%二十碳四烯酸(C20:4)、16.9%二十碳五烯酸(C20:5)、3.6%二十二碳烯酸(芥酸)(C22:1)、2.5%二十二碳五烯酸(C22:5)和 12.9%二十二碳六烯酸(C22:6); HEAR 油-0.8-13.5%二十碳烯酸(C20:1)、20.1-59.4%二十二碳烯酸(芥酸)(C22:1)、0.1-1.4%廿四碳酸(C24:0); 芥油-7%二十碳烯酸(C20:1)、44.2%二十二碳烯酸(芥酸)(C22:1)。也可使用富含廿四碳烯酸(神经酸)(C24:1)的油, 例如遗传改变的 HEAR 油也能很好起作用。当然, 含量可变化。见“Bailey's Industrial Oil and Fat Products”(Daniel Swern, John Wiley & Sons, 第四版 1979)第 416, 417, 447, 449, 450 和 452 页, 所有内容通过引用包括在此。

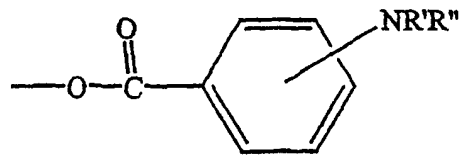
每个上述油的脂肪酸分布(通常是甘油三酸酯形式)优选包含至少 30%的 C-20 或更长的组分, 优选这种长链脂肪取代基。脂肪酸、醇以及甘油单酸酯和甘油二酸酯可来自这些或其它甘油三酸酯。

UV 保护基团包括 UV-活性部分。如果原子或分子部分的基团能够吸收或阻挡电磁波谱紫外区域的电磁波, 那么这种原子或分子部分的基团可作为 UV-活性部分。例如, UV 保护基团可是任何适于在 UV 光谱区激发、具有分子能量量子化能级的有机部分。并且, 例如, 通过 UV 辐射照射含有这种有机部分的化合物, 可在黑暗中观察到该化合物。特别有用的部分吸收 UVA 和/或 UVB 区的电磁辐射。UV 保护基团末端可以是酸或醇。如果其以  $R^3$ 、 $R^4$  或  $R^6$  连接烷基化胺, 那么它们将是具有反应性羧基的酸形式以形成酯。如果它们以  $R^3$ 、 $R^4$  或  $R^6$  连接二酸或三酸, 而二酸或三酸自身结合烷基化胺, 那么其应具有反应性醇或羟基。当然, 这些酸形式也可用于连接二酸、三酸基团, 但是需要具有诸如二醇的桥键。

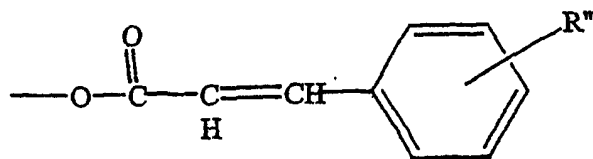
与许多已知的防晒剂不同, 本发明二酯季铵化合物具有对头发良好的附着性, 因而保留在头发上发挥其防晒作用。同时, 这些化合物也可用作产品和制剂中非防晒目的的活性头发调理成分。

优选地, UV-保护基团包括具有多键(例如双键和/或三键)和/或芳香系统的

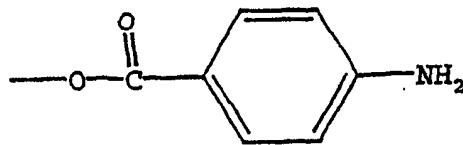
原子或分子部分的基团，在各种组合中为共轭和非共轭。优选的例子包括氨基苯甲酸酯系统



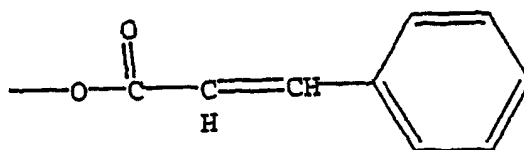
其中，R'和R''的例子包括氢、甲基、甲氧基、乙基和已知在常用UV吸收化合物中作为氨基苯甲酸酯系统部分的其它基团，-NR'R''优选在对位。优选的例子包括肉桂酸酯系统



其中，R'''的例子包括氢、甲基、甲氧基、和已知在常用UV吸收化合物中作为肉桂酸酯系统部分的其它基团。尤其优选的例子包括对氨基苯甲酸酯系统



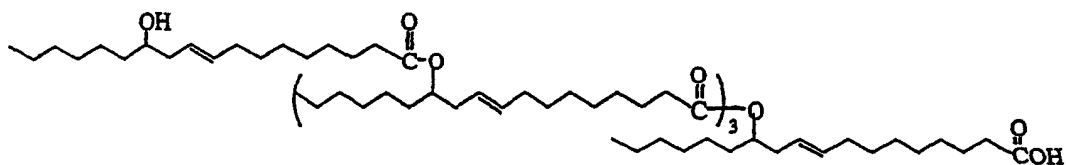
和肉桂酸酯系统



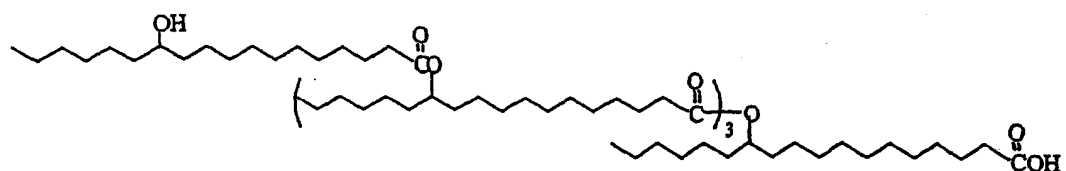
这些基团以形成共轭多键和芳香环的方式排列。虽然本发明不限于任何具体理论，但是相信，这些共轭有助于UV吸收/阻挡能力。

优选地，UV保护基团包括来自适合用作化妆品和/或个人护理产品的防晒成分的化合物的基团。这些化合物的非限制性例子包括对氨基苯甲酸(PABA)、PABA二甲酯、二苯甲酮-1、二苯甲酮-2、二苯甲酮-3、二苯甲酮-4、二苯甲酮-6、二苯甲酮-8、二苯甲酮-12、甲氧基肉桂酸酯、二羟基丙基-PABA乙酯、PABA甘油酯、胡莫柳酯、邻氨基苯甲酸甲酯、氰双苯丙烯酸辛酯、二甲基PABA辛酯、甲氧基肉桂酸辛酯、水杨酸辛酯、PABA、2-苯基苯并咪唑-5-磺酸、水杨酸三乙醇胺、3-(4-甲基亚苄基)-樟脑、阿伏苯宗、和2,6-二羧基萘二甲酸。

聚脂肪酸优选是疏水的，常常通过脂肪酸的酸基团与其脂肪取代基上的羟基反应产生。这些聚脂肪酸的末端可以是醇或酸，用于连接本发明二酯季铵化合物。含有 4-36 个碳原子的取代或未取代(但至少被羟基取代)脂肪醇和脂肪酸包括，例如乳酸、异硬脂酸、羟基硬脂酸和蓖麻油酸、及其衍生物，用于产生具有以下结构的聚脂肪酸：

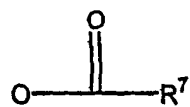


和



虽然这两者都包括总计 5 个单元，但单元的数目可为 2-15。而且，例如，可制成不同的羟基脂肪酸或不同的脂肪酸和脂肪醇等组合的杂化物。并且，如果烷氧基化胺末端为 OH 或 O<sup>-</sup>，聚脂肪酸用于 R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup> 或 R<sup>6</sup> 时，该聚脂肪酸的末端是反应羧基，即是酸。当烷氧基化胺与二酸或三酸反应时，聚脂肪酸的末端是将是反应性醇或羟基。通过使用二醇，聚脂肪酸可与酸基团反应。

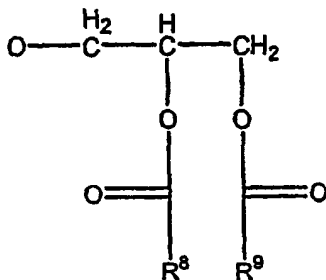
当 v 或 y 为 0 时，适当的话，R<sup>3</sup> 和/或 R<sup>4</sup> 分别为通式 IV



通式 IV,

末端为羧酸的 UV 保护基团或末端为羧基的聚脂肪酸。R<sup>7</sup>，如上所述为 UV 保护基团和聚脂肪酸。

当 v 为 1 时，R<sup>3</sup> 可为通式 V、VI，



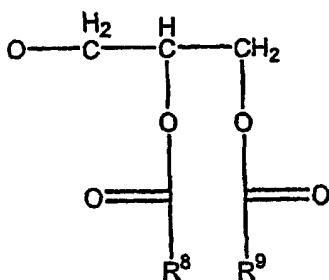
通式 V,



通式 VI,

末端为羟基或醇基的 UV 保护基团或是末端为羟基或醇基的聚脂肪酸。 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$  和  $\text{R}^{10}$  为碳原子总数  $\text{C}_1\text{-C}_{36}$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团，是如上所述的 UV 保护基团和聚脂肪酸。

当  $y$  为 1 时， $\text{R}^4$  可为通式 V、VI



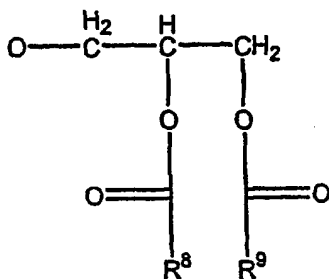
通式 V



通式 VI

末端为羟基或醇基的 UV 保护基团或是末端为羟基或醇基的聚脂肪酸。 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$  和  $\text{R}^{10}$  为碳原子总数  $\text{C}_1\text{-C}_{36}$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和或不饱和的烷基、环状或芳族基团，是如上所述的 UV 保护基团和聚脂肪酸。

当  $v$  或  $y$  为 1，B 或 F 为通式 III 时， $\text{R}^6$  为通式 V、VI，



通式 V



通式 VI

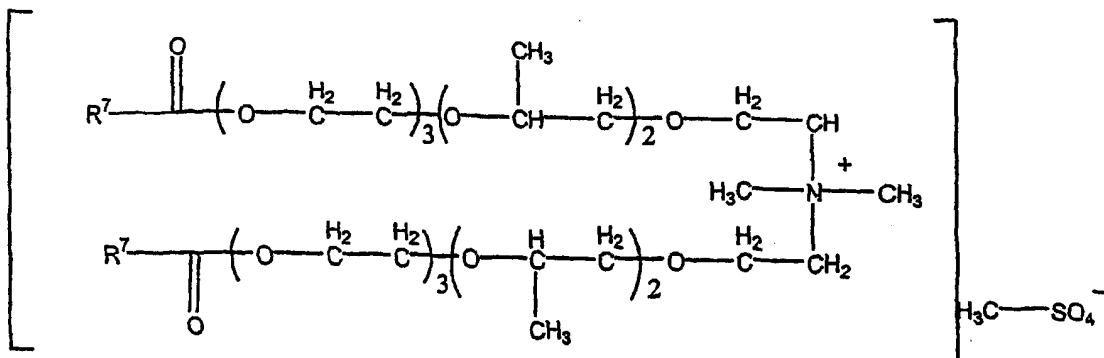
末端为羟基或醇基的 UV 保护基团或是末端为羟基或醇基的聚脂肪酸。 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$  和  $\text{R}^{10}$  为碳原子总数  $\text{C}_1\text{-C}_{36}$  的相同或不同，支链或直链，取代或未取代，饱和

或不饱和的烷基、环状或芳族基团，是如上所述的 UV 保护基团和聚脂肪酸。当然，对于所有上述分子，可使用桥连分子如二醇，使通式 IV 连接胺，其中，x 或 y 为 1。

通式 I 的二酯季铵化合物通常带正电荷，常常但未必总是结合抗衡离子 Z。这些反离子非限制性地包括卤素、烷基硫酸根和任何其它已知可用作季铵化合物抗衡离子的物质。包括，例如，使用其它脂肪酸类型如乳酸根形成阳离子盐。

所述至少一种个人护理成分可非限制性地包括，任何溶剂、表面活性剂、调理剂、颜料、UV 保护剂、着色剂、芳香剂、染料、赋形剂或添加剂，用于配制个人护理产品，例如但不限于，化妆品、防晒剂和遮光剂、香波、调理剂、柔软剂等。

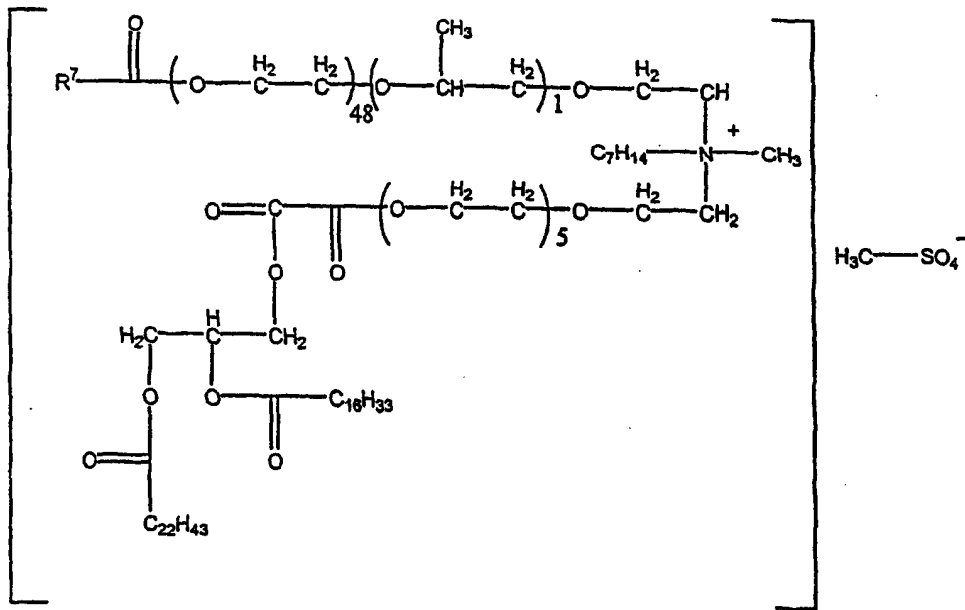
尤其优选的是具有 pH 范围约为 4.0-10.0，更优选约 5.0-9.0，甚至更优选约 5.5-8.5，还要更优选约 6-8 的个人护理产品。一种尤其优选的本发明二酯季铵化合物具有通式 VII。



通式 VII

在通式 VII 中，两个 R<sup>7</sup>、一部分 R<sup>3</sup> 和另一部分 R<sup>4</sup> 优选是来自羊毛脂脂肪酸的混合脂肪取代基。参考通式 I，通式 VII 中，u 和 x 相同，A 和 E 相同。事实上，u 和 x 各自为 5，A 中 3 个单元是乙氧基，2 个是支链丙氧基基团。对于 E 是同样的结果。R<sup>1</sup> 和 R<sup>2</sup> 都是甲基，v 和 y 都为 0，因此不存在 B 或 F。

另一方面，非限制性的例子考虑为通式 VIII 的结构：

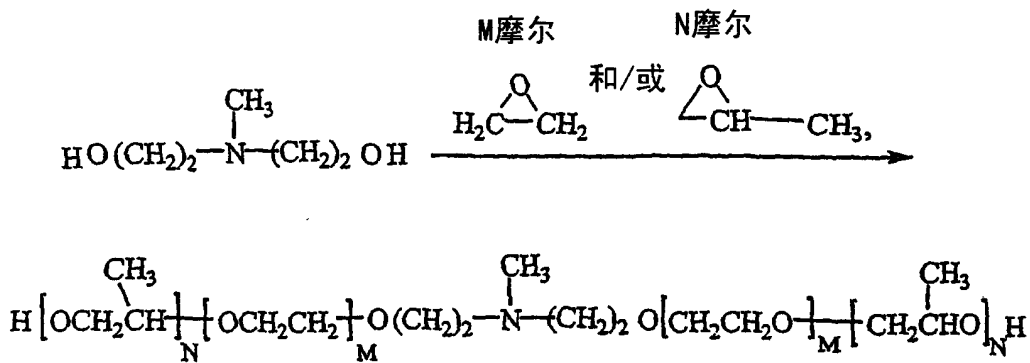


通式 VIII

在通式 VIII 中， $R^1$  是  $\text{CH}_3-$ ， $R^2$  是  $\text{C}_7\text{H}_{14}-$ ， $R^4$  是通式 V 的基团，其中， $R^8$  是含有 12 个碳原子的基于脂肪酸的饱和基团， $R^9$  是 22 个碳原子长度的不饱和脂肪酸基团。 $R^7$  是通过使用羊毛脂脂肪酸产生的各种长度和比例混合的脂肪基团或脂肪取代基。A 包括一个丙氧基基团和 48 个乙氧基基团， $u$  为 49， $v$  为 0。E 完全由乙氧基单元组成， $x$  为 5。F 具有通式 II 的结构，G 为  $\text{C}_0$ ， $y$  为 1。

根据公知的方法可制备本发明二酯季铵化合物。缩合反应是主要的。然而，简要地说，烷基二乙醇胺可与各种比例的烷氧基化合物反应，生成烷氧基胺。加入这些烷氧基试剂的量和顺序将决定其相对排列和比例。例如，如果在步骤 1AA 中，M 摩尔为 10，那么所得化合物将是对称的， $u$  和  $x$  都为 5，A 和 E 各自为 5 个连续的乙氧基基团。如果加入下一反应物 N 摩尔，即 2，那么每一侧第 6 个烷氧基将是丙氧基。要理解的是，可发生各种变化，因而结果可能是既不对称也不按所需顺序的混合物。然而，通常，生成的所有烷氧基胺的主要部分将为所需结构。对它们分离以得到所需结构的胺。反应按 1AA 所示进行。





## 步骤 1AA

然后，步骤 1AA 中烷氧基化的物质可与二酸或三酸反应或与本文所述  $R^3$  或  $R^4$  的其它基团之一反应。当使用酸时，所得中间体再与本文所述  $R^3$ 、 $R^4$  和可能有  $R^6$  的其它基团之一反应。

或者，最好分开生成各种烷氧基链，然后使其与脂肪酸、脂肪醇、甘油酯或烷基二乙醇胺反应。这可以更精确地满足烷氧基基团的具体链长和顺序的要求。的确，随着链的增长，可进行分离以除去混合物。或者，脂肪酸或脂肪醇可烷氧基化(对于脂肪醇，桥连二酸或三酸是必需的)，所得分子再与烷基二乙醇胺反应生成如通式 I 的化合物。然而，显然，这些化合物在季铵化之前是叔胺。

最后，形成季铵化合物。优选这在完全形成二酯叔胺后进行。例如，脂肪酸与烷氧基化胺反应后，再使用已知技术，用任何合适的能提供合适的  $R^1$  或  $R^2$  基团的烷基化试剂使所得的二酯叔胺季铵化。这些烷基化试剂包括氯甲烷、氯乙烷、苄基氯、卤代二十二烷(behyneal halide)、硫酸二甲酯、硫酸二乙酯等。

本发明个人护理产品的粘度范围约为 100-300,000cp，更优选约 500-300,000 cp，最优选约 1,000-300,000 cp。以阳离子活性物或阳离子活性计，所得个人护理产品中本发明二酯季铵化合物的量通常约为 0.1-20%。以阳离子活性计，更优选的量约为 0.5-15%，更优选约 1%-10%。以阳离子活性计，个人护理产品中本发明二酯季铵化合物最优选的量约为 1-5%。

可通过本领域技术人员几种容易理解的方法测定阳离子活性。一种方法利用了阴离子物质如月桂基硫酸钠的标准溶液。将该物质加入到含有季铵化合物的溶液中，直到完全配位季铵化合物的阳离子(终点)。可用电位或使用有色指示剂测定终点。

典型的测试涉及用月桂基醇硫酸钠标准溶液滴定通常溶解于溶剂中的季

铵化合物样品，直到达到终点。如共同待批和共同授权的美国专利申请 09/438,631 所述(所述专利通过引用包括在此)，一旦达到终点，可根据以下公式计算阳离子活性：

$$\% \text{阳离子活性} = \frac{\text{mL} \times \text{N} \times \text{MW} \times 100}{\text{S.wt.} \times 1000}$$

式中，mL=阴离子物质的毫升数

N=所使用的溶液的当量的浓度

MW=所分析的季铵化合物的当量

S.wt.=样品的重量(克)

测定阳离子活性的方法的其它信息见 W. Schempp 和 H. T. Trau, *Wochenblatt fur Papierfabrikation* 19, 1981, pp. 726-732, 或 J. P. Fischer 和 K. Lohr, *Organic Coatings Science Technology*, 第 8 卷, pp. 227-249, Marcel Dekker, Inc. April 1986, 这两篇专利的内容通过引用包括在此。

通常，也适于使用其它术语描述要求保护的物质的量。二酯很少以完全纯的形式生产和销售。无论是单一化合物或是混合物的组成部分，它们通常以液体或固体的形式存在，优选包含溶剂作为载体。因为可以除去所有、或基本上所有的溶剂，二酯比例的上限通常不太关键。然而，当混合于溶剂时，在所得溶液中二酯季铵化合物和二酯叔胺(如果没有形成季铵化合物)应至少约为溶液重量的 0.10%，更优选至少约为溶液重量的 5%，最优选至少约为溶液重量的 20%。如果存在溶剂或载体，二酯季铵化合物或胺多达约 99.0%。更典型的量至多达约 95%，更典型的量多达约 75%或更少。本文中溶剂或载体的有效量为足以溶解二酯、叔胺或季铵化合物的量，理解为其可以是固体溶液形式或其它可呈片状的形式，以更便于处置。可呈片状的季铵化合物的溶剂常常包含游离脂肪醇作为助溶剂。这通常表示，含二酯的添加剂产品中溶剂的量约为 1%-99.9 重量%，优选约为 5%-95 重量%。然而，更优选制品中 80%或更少是溶剂。然而，最优选配方的量为最小。

当二酯季铵添加剂(有或没有溶剂或载体)用于配制个人护理产品时，其量可根据多种因素而改变，其中，最重要的因素是整个二酯季铵化合物分子、最终产品以及二酯季铵化合物将起的作用。若二酯季铵化合物仅仅用于调理，则应作为一种量。当二酯季铵化合物还用于提供 UV 保护时，可指明有一些其它的量。而且，根据所使用的添加剂中二酯季铵化合物的浓度，需调节添加剂的总

量。相同体积的含有 20%溶剂和含有 80%溶剂的添加剂，显然提供明显不同量的二酯季铵化合物。这就是该量常常以阳离子活性表示的原因。各种情况下所使用的含季铵化合物的添加剂的量可明显不同，虽然所使用的二酯季铵化合物的预定量是相同的。而且，一般不存在所用二酯季铵化合物的量的上限。通常，成本是唯一限制性因素。当然，在某一点，二酯季铵化合物的用量可产生缩小的回归(return)。常常下限是更关键的。通常，至少约 0.05 重量%的成品配方(香波、调理剂、防晒剂、化妆品等)是如上所述的二酯季铵化合物或其混合物。更优选使用至少约 0.5 重量%的本发明二酯季铵化合物，更优选使用至少约 1 重量%的二酯季铵化合物。通常，不大于约 50%的配方重量，更优选不大于 25%的配方重量为本发明二酯季铵化合物。

宜以固体或半固体溶液或悬浮液提供一种具有高阳离子活性的浓缩形式的二酯季铵化合物。不希望局限于任何具体理论，相信可通过测定季铵化合物原料中的阳离子活性确定配方中给定季铵化合物或季铵化合物的混合物的所需量。具有高阳离子活性的二酯季铵混合物原料提供更好的输送效率，由于其提供相同量的所需季铵化合物的同时占据较小的空间。也宜生产除了具有高阳离子活性外，还易于工业处置和储存的原料季铵化合物。例如，该在较低温度熔化的原料季铵化合物分解最小并提高能效。出于这个目的，原料季铵化合物优选是可呈片状或可成锭剂(pastillatable)。

因此，本发明还提供了含有二酯季铵化合物和二酯季铵化合物混合物以及二酯季铵化合物与其它常用活性物质和添加剂的混合物的组合物。可以浓缩、常常是固体在合适的载体中、溶液或悬浮液的形式，将季铵化合物二酯和二酯季铵化合物与常用二酯和/或季铵化合物混合。然而，更可能的是二酯季铵化合物和非二酯季铵化合物的混合物，含有或不含有溶剂或载体。优选的载体或溶剂或是化妆品可接受和使用的，或是公认具有该用途的。优选的溶剂包括异丙醇、SDA-40、丙二醇、丁二醇、各种脂肪醇和它们的混合物。在这种情况下，载体与二酯季铵化合物的混合物可称为添加剂，二酯季铵化合物存在的量约为添加剂重量的 0.1%-99%。

根据本发明的另一方面，本发明还提供各种含有一种或多种本发明二酯季铵化合物的个人护理产品形式的组合物。该组合物可是化妆品，头发和/或皮肤的防晒组合物如洗液、凝胶、喷雾、霜剂等，洗手液，沐浴组合物，晒黑油，止汗组合物，香水和科隆香水，冷霜，剃须前洗液，脱臭剂，药物制剂(软膏剂、

霜剂、洗剂、凝胶剂、处理的粉末剂、鼻腔喷雾剂、绷带添加剂或经皮给药涂覆剂(如贴剂), 皮肤润湿剂, 面部清洁剂, 清洁霜, 皮肤凝胶, 香波, 头发调理剂(包括清水洗去的和保留在头发上的调理剂), 润丝, 润丝膏, 洗涤剂, 化妆产品, 永久性卷发剂, 唇膏, 睫毛油, 腮红, 粉底, 胭脂, 摩丝, 喷雾剂, 美发凝胶, 指甲护理产品包括抛光和指甲护理剂, 染料和染发产品。优选本发明最终产品组合是处理人头发的组合物, 如香波或调理剂。

本发明最终产品的性质决定了一系列参数, 包括所使用的二酯季铵化合物类型, 无论是使用单一类型的二酯季铵化合物或是与其它本发明二酯季铵化合物或其它类型的季铵化合物混合, 所使用的本发明二酯季铵化合物的量, 以及添加成分的类型和量。例如, 在一局部皮肤调理剂中, 最好省去着色剂。然而, 例如, 在染发剂、指甲抛光剂或腮红中, 特别考虑在使用中或使用后一定时间内产生颜色的颜料、染料或颜色、或物质。染发剂中颜料的类型和量可与腮红中颜料的类型和量有很大不同。

本发明个人护理产品通常包括常常在可接受的溶剂中的本发明二酯季铵化合物; 以所述二酯化合物和溶剂的总重量计, 所述二酯季铵化合物的量约为0.01重量%-99.0重量%; 至少一种添加的个人护理成分, 只要其量能有效用于其预定的用途。当然, 可省去溶剂。本领域普通技术人员可容易地用本发明二酯季铵化合物代替现有配方, 二酯季铵化合物的量接近在相同类型和功能的现有配方中的功能类似化合物的用量。例如, 在调理香波中, 可用本发明二酯季铵化合物配方代替一些或所有以前包含的调理剂。然而, 在这种情况下, 个人护理成分是用于洗发的表面活性剂。因此, 这种情况下, 表面活性剂的量必须满足“预定用途”。在给定的配方中, 如果一比一地用本发明二酯季铵化合物代替常用调理剂, 得到调理不足, 那么, 使用常用技术可较容易和常用来确定提供足够附加的调理所需的二酯季铵化合物的量。类似地, 若配方的目的或“预定用途”之一是作为皮肤或头发的防晒产品, 并且使用UV-活性化合物的衍生物作为连接基团之一得到的二酯季铵化合物作为UV吸收剂时, 则用量即为赋予所需皮肤保护因子或“SPF”的量。若通过含有或不含常用UV吸收季铵化合物的这些二酯季铵化合物的混合物提供UV保护, 则每种组分的量总体上使配方具有所需的SPF。

提供所需SPF水平时每种成分用量大小不仅由所得的SPF决定, 而且由每种成分的相对成本、其相对可获得性、配制的容易程度、它们所赋予的其它优

点(即二酯季铵化合物中的一种还是特别好的调理剂,且调理是合乎需要的)等。在这种情况下,个人护理成分可以是常用UV吸收物质或霜剂、洗液、或凝胶基料,而且有效量或是提供某些SPF因子所需的量,或是形成可用作成功和稳定地负载本发明二酯季铵化合物的个人护理产品的霜剂、凝胶或洗液所需的量,。

包含一种或多种本发明二酯季铵化合物的本发明个人护理产品通常含有本发明二酯季铵化合物重量约为0.05%-50%。更优选二酯季铵化合物的量约为0.5%-50%,甚至更优选约为成品重量的1%-25%。然而,要理解的是,对于给定具体的产品类型,优选不同量的二酯季铵化合物。

包含本发明二酯季铵化合物或其混合物的个人护理产品的形式可以是液体、软膏、洗液、喷雾、凝胶、霜剂、乳剂、泡沫、糊剂或固体;澄清或不透明;可是配制成水性或非水性制剂,包括但不限于局部制剂。优选最终产品是在水,或在水与合适的第二种溶剂的混合液中的分散体或溶液。合适的溶剂包括各种低级链烷醇和二醇。具有1-4个碳原子的低级链烷醇适用于本发明,优选具有2-3个碳原子的低级链烷醇。具有3-8个碳原子的二醇适用于本发明,优选具有3-6个碳原子的二醇。合适的低级链烷醇和二醇的例子包括:甲醇、乙醇、异丙醇、丁醇、己二醇、1,3-丁二醇、1,2-和1,3-丙二醇、2-甲基1,3-丙二醇、丙二醇、二甘醇等。

溶剂(包括水以及水和溶剂的混合物)的总量最多约为组合物重量的98%,优选约为20%-90%,更优选约为组合物重量的50%-90%。然而,根据产品的性质优选不同量的溶剂。若使用水和第二种溶剂的混合物,则第二种溶剂的量最多可为组合物中水重量的90%,优选约为25%-80%。

除了二酯季铵化合物,本发明配方还包含各种个人护理成分,常用和非常用的。当然,包含成分的决定和具体成分的选择视具体应用和产品配方而定。

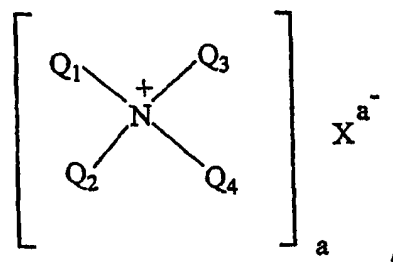
该个人护理成分可包含一种或多种物质如清洁剂、头发调理剂、皮肤调理剂、美发剂、去头屑剂、头发生长促进剂、香水、防晒化合物、颜料、润湿剂、成膜剂、保湿剂、 $\alpha$ -羟基酸、染发剂、化妆品、洗涤剂、增稠剂、乳化剂、防腐剂、脱臭活性剂和表面活性剂。它们可包括促进渗透进入或通过皮肤的物质、或局部药物制剂,非限制性地如皮质类固醇、镇痛药、抗炎剂、抗生素、麻醉剂等。这些药剂可以常用和/或认可的量使用。

通常可以多种形式包含个人护理成分。这些成分可以固体或液体形式包

含。固体可是结晶或无定形，颗粒、粉末、微粒等。然而，这些添加剂也可微囊化或是微粒形式。

可与本发明二酯季铵化合物一起用于产品的一种个人护理成分是含有一种或多种非离子表面活性剂、阴离子表面活性剂、阳离子表面活性剂、两性表面活性剂、两性离子表面活性剂或它们的混合物的表面活性剂。清洁剂或香波中的表面活性剂可是活性剂。在其它配方中，其可是乳化剂，因而是添加剂。一些可用于本发明组合物中的表面活性剂见 McCutcheon 的, *Detergents and Emulsifiers*, (1986), 以及美国专利 5,151,210、5,151,209、5,120,532、5,011,681、4,788,006、4,741,855、4,704,272、4,557,853、4,421,769 和 3,755,560; 所有内容通过引用包括在此。

适用于各种个人护理产品，尤其是头发护理产品如调理剂和香波的阳离子表面活性剂包括以下通式的季铵阳离子表面活性剂



其中，X 如上所述，Q<sub>1</sub> 是 C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 烷基、C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 烷基酰氨基 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> 亚烷基、C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 烷基羟基；Q<sub>2</sub> 是 C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 烷基、C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 烷基酰氨基 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> 亚烷基、C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 烷基羟基、苄基或 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> 烷基；Q<sub>3</sub> 和 Q<sub>4</sub> 独立地是 C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub> 烷基或苄基。

合适的季铵表面活性剂的例子包括十六烷基氯化铵、十六烷基溴化铵、十二烷基氯化铵、十二烷基溴化铵、硬脂基氯化铵、硬脂基溴化铵、十六烷基二甲基氯化铵、十六烷基二甲基溴化铵、十二烷基二甲基氯化铵、十二烷基二甲基溴化铵、硬脂基二甲基氯化铵、硬脂基二甲基溴化铵、十六烷基三甲基氯化铵、十六烷基三甲基溴化铵、十二烷基三甲基氯化铵、十二烷基三甲基溴化铵、硬脂基三甲基氯化铵、硬脂基三甲基溴化铵、十二烷基二甲基氯化铵、硬脂基二甲基十六烷基二牛油基二甲基氯化铵、双十六烷基氯化铵、双十六烷基溴化铵、双十二烷基氯化铵、双十二烷基溴化铵、二硬脂基氯化铵、二硬脂基溴化铵、双十六烷基甲基氯化铵、双十六烷基甲基溴化铵、双十二烷基甲基氯化铵、双十二烷基甲基溴化铵、二硬脂基甲基氯化铵、二硬脂基二甲基氯化铵、二硬脂基甲基溴化铵、和它们的混合物。

添加的季铵盐包括其中  $C_{12}$ - $C_{22}$  烷基来自牛油脂肪酸或来自椰油脂肪酸的盐。来自牛油脂肪酸和来自椰油来源的季铵盐的例子包括二牛油基二甲基氯化铵、二牛油基二甲基硫酸甲酯铵、二(氢化牛油基)二甲基氯化铵、二(氢化牛油基)二甲基醋酸铵、二牛油基二丙基磷酸铵、二牛油二甲基硝酸铵、二(椰油烷基)二甲基氯化铵、二(椰油烷基)二甲基溴化铵、牛油基氯化铵、椰油基氯化铵、硬脂酰氨基丙基 PG-二甲基氯化铵磷酸盐、硬脂酰氨基丙基乙基二甲基硫酸乙酯铵、硬脂酰氨基丙基二甲基(醋酸肉豆蔻酯)氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基十六/十八烷基甲苯磺酸铵、硬脂酰氨基丙基二甲基氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基乳酸铵、以及它们的混合物。

更优选的季铵表面活性剂是双十二烷基二甲基氯化铵、二硬脂基二甲基氯化铵、二肉豆蔻基二甲基氯化铵、二棕榈基二甲基氯化铵、二硬脂基二甲基氯化铵、硬脂酰氨基丙基 PG-二甲基氯化铵磷酸盐、硬脂酰氨基丙基乙基二甲基硫酸乙酯铵、硬脂酰氨基丙基二甲基(醋酸肉豆蔻酯)氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基十六/十八烷基甲苯磺酸铵、硬脂酰氨基丙基二甲基氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基乳酸铵、以及它们的混合物。

### 脂肪胺

本发明组合物也可包含  $C_{12}$ - $C_{22}$  的伯、仲和叔胺的盐。合适的胺的例子包括硬脂酰氨基丙基二甲基胺、二乙基氨基乙基硬脂酰胺、二甲基硬脂胺、二甲基豆油胺、豆油胺、三(癸基)胺、乙基硬脂胺、乙氧基化硬脂胺、二羟基乙基硬脂胺和二十烷基山萘胺。合适的胺盐包括卤化物、醋酸盐、磷酸盐、硝酸盐、柠檬酸盐、乳酸盐和烷基硫酸盐。这些盐包括盐酸硬脂胺、氯化豆油胺、甲酸硬脂胺、二氯化 N-牛油丙烷二胺和柠檬酸硬脂酰氨基丙基二甲胺。适用于本发明组合物的一些阳离子胺表面活性剂公开于美国专利 4,275,055, 通过引用包括在此。

### 酰氨基胺

本发明组合物可包含酰氨基胺, 如授权于 Croda Inc. 的美国专利申请 09/409,203 所述, 该专利通过引用包括在此。其它合适的阳离子表面活性剂见 McCutcheon, Detergents & Emulsifiers, (M. C. Publishing Co. 1979); 美国专利 3,155,591、3,929,678、3,959,461 和 4,387,090, 通过引用包括再此。本发明组

合物中阳离子表面活性剂的量和性质取决于组合物的性质。在最终的产品中，阳离子表面活性剂的总量约为产品组合物重量的 0.18-40%，更优选约 0.1%-15%，甚至更优选约 0.5%-2%。然而，不同量的阳离子表面活性剂优选取决于产品的性质。

本发明组合物也可包含各种非离子表面活性剂。合适的非离子表面活性剂是 C<sub>8</sub>-C<sub>30</sub> 醇与糖或淀粉聚合物的缩合产物。这些化合物可以通式(S)<sub>n</sub>-O-R 表示，其中，S 是糖部分如葡萄糖、果糖、甘露糖和半乳糖；n 是约为 1-1000 的整数，R 是 C<sub>8</sub>-C<sub>30</sub> 烷基。得到 R 基团的合适的 C<sub>8</sub>-C<sub>30</sub> 醇的例子包括癸基醇、十六烷基醇、硬脂醇、十二烷基醇、肉豆蔻醇、油醇等。这些表面活性剂的具体例子包括癸基多聚葡萄糖苷和十二烷基聚葡萄糖苷。

其它合适的非离子表面活性剂包括氧化烯与脂肪酸的缩合产物(即脂肪酸的氧化烯酯)。这些物质具有通式 RCO(X)<sub>n</sub>OH，其中，R 是 C<sub>10</sub>-C<sub>30</sub> 烷基，X 是 -OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- (来自环氧乙烷)或 -OCH<sub>2</sub>CHCH<sub>3</sub>- (来自环氧丙烷)，n 是约 1-200 的整数。

另一类合适的非离子表面活性剂是氧化烯与脂肪酸的缩合产物(即脂肪酸的氧化烯二酯)，其通式为 RCO(X)<sub>n</sub>OOCR，其中 R 是 C<sub>10</sub>-C<sub>30</sub> 烷基，X 是 -OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- (来自环氧乙烷)或 -OCH<sub>2</sub>CHCH<sub>3</sub>- (来自环氧丙烷)，n 是约 1-200 的整数。

再一类合适的非离子表面活性剂是氧化烯与脂肪醇的缩合产物(即脂肪醇的氧化烯醚)，其通式为 R(X)<sub>n</sub>OR'，其中，R 是 C<sub>10</sub>-C<sub>30</sub> 烷基，n 是约 1-200 的整数，R' 是 H 或 C<sub>10</sub>-C<sub>30</sub> 烷基。

还有一类非离子表面活性剂是具有通式 RCO(X)<sub>n</sub>OR' 的化合物，其中，R 和 R' 是 C<sub>10</sub>-C<sub>30</sub> 烷基，X 是 -OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>- (来自环氧乙烷)或 -OCH<sub>2</sub>CHCH<sub>3</sub>- (来自环氧丙烷)，n 是约 1-200 的整数。

来自氧化烯的非离子表面活性剂的例子包括十六烷基乙二醇醚、十六烷基聚氧乙烯(2)醚、十六烷基聚氧乙烯(6)醚、十六烷基聚氧乙烯(10)醚、十六烷基聚氧乙烯(12)醚、十六/十八醇聚氧乙烯(2)醚、十六/十八醇聚氧乙烯(6)醚、十六/十八醇聚氧乙烯(10)醚、十六/十八醇聚氧乙烯(12)醚、硬脂基乙二醇醚(1)醚、硬脂基聚氧乙烯(2)醚、硬脂基聚氧乙烯(6)醚、硬脂基聚氧乙烯(10)醚、硬脂基聚氧乙烯(12)醚、硬脂酸聚乙二醇(2)酯、硬脂酸聚乙二醇(4)酯、硬脂酸聚乙二醇(6)酯、硬脂酸聚乙二醇(10)酯、硬脂酸聚乙二醇(12)酯、聚氧乙烯(20)甘油醚



硬脂酸酯、聚氧乙烯(80)甘油醚牛油酸酯、聚氧丙烯(10)甘油醚硬脂酸酯、聚氧乙烯(30)甘油醚椰油酸酯、聚氧乙烯(80)甘油醚椰油酸酯、聚氧乙烯(200)甘油醚牛油酸酯、二月桂酸聚乙二醇(8)酯、二硬脂酸聚乙二醇(10)酯以及它们的混合物。

还有一类有用的非离子表面活性剂包括例如公开于美国专利 2,965,576、2,703,798 和 1,985,424 中的多羟基脂肪酸酰胺, 这些专利的内容通过引用包括在此。

使用非离子表面活性剂时, 其量将根据配方、其余成分以及所用的任何表面活性剂(有的话)的类型而改变。通常, 用于本发明的非离子表面活性剂的量约为最终配方重量的 0.1%-40%, 更优选约 0.1%-15%, 还要更优选约 0.5%-2%。然而, 如上所述, 取决于产品性质, 优选不同量的非离子表面活性剂。

本发明组合物还包含各种阴离子表面活性剂。合适的阴离子表面活性剂的一些例子见美国专利 3,929,678, 该专利通过引用包括在此。其它合适的阴离子表面活性剂的例子包括烷酰基(alkoyl)羟乙基磺酸盐和烷基醚硫酸盐。

典型的烷酰基羟乙基磺酸盐具有通式  $\text{RCO--OCH}_2\text{CH}_2\text{-SO}_3\text{M}$ , 其中, R 是  $\text{C}_{10}\text{-C}_{30}$  烷基, M 是水溶性阳离子, 如铵、钠、钾或三乙醇胺。合适的羟乙基磺酸盐的例子包括椰油酰基羟乙基磺酸铵、椰油酰基羟乙基磺酸钠、月桂酰基羟乙基磺酸钠、硬脂酰基羟乙基磺酸钠以及它们的混合物。优选是椰油酰基羟乙基磺酸铵、椰油酰基羟乙基磺酸钠以及它们的混合物。

典型的烷基醚硫酸盐具有通式  $\text{ROSO}_3\text{M}$  和  $\text{RO}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_x\text{SO}_3\text{M}$ , 其中, R 是  $\text{C}_{10}\text{-C}_{30}$  烷基, x 约为 1-10, M 是水溶性阳离子如铵、钠、钾和三乙醇胺。

另一类合适的阴离子表面活性剂是  $\text{C}_8\text{-C}_{30}$  羧酸的碱金属盐和通式  $\text{R}_1\text{-SO}_3\text{M}$  的烷基磺酸盐(其中,  $\text{R}_1$  是  $\text{C}_8\text{-C}_{30}$  烷基; 优选  $\text{C}_{12}\text{-C}_{22}$  烷基, M 是阳离子), 包括琥珀酰胺酸盐、 $\text{C}_{12}\text{-C}_{24}$  烯烴磺酸盐和羧酸盐。

使用离子表面活性剂时, 其量将根据配方、其余成分以及所用的任何表面活性剂(有的话)的类型而改变。通常, 用于本发明的离子表面活性剂的量约为最终配方重量的 0.1%-40%, 更优选约 0.1%-15%, 还要更优选约 0.5%-2%。然而, 如上所述, 取决于产品性质, 优选不同量的离子表面活性剂。

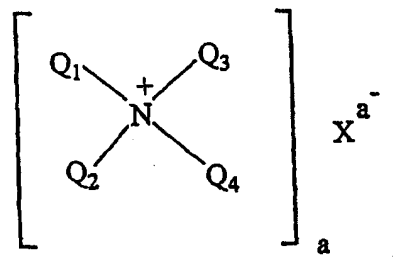
本发明组合物还包含两性离子和两性表面活性剂。例如, 合适的两性和两性离子表面活性剂是单或二- $\text{C}_8\text{-C}_{24}$  仲胺和叔胺的衍生物如烷基亚氨基醋酸盐、羧酸盐、磺酸盐、硫酸盐、磷酸盐和膦酸盐, 包括通式  $\text{RN}(\text{CH}_2)_m\text{CO}_2\text{M}_2$  和

$\text{RNH}(\text{CH}_2)_m\text{CO}_2\text{M}$  的亚氨基二链烷酸盐和氨基链烷酸盐，其中， $m$  是 1-4， $R$  是  $\text{C}_8$ - $\text{C}_{30}$  烷基；优选是  $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{22}$  烷基， $M$  是 H、碱金属、碱土金属、铵或链烷醇铵。

其它合适的两性和两性离子表面活性剂是咪唑啉鎓和铵衍生物。这种两性表面活性剂合适的例子包括 3-十二烷基-氨基丙酸钠、3-十二烷基氨基丙烷磺酸钠、 $N$ -烷基牛磺酸； $N$ -高级烷基天冬氨酸和椰油酰氨基(coamido)丙基 PG-二甲基氯化铵磷酸盐。合适的两性和两性离子表面活性剂的其它例子见美国专利 2,658,072、2,438,091 和 2,528,378，其内容通过引用包括在此。

另一类合适的两性和两性离子表面活性剂的例子是甜菜碱。合适的甜菜碱的例子包括椰油二甲基羧甲基甜菜碱、十二烷基二甲基羧甲基甜菜碱、十二烷基二甲基  $\alpha$ -羧乙基甜菜碱、十六烷基二甲基羧甲基甜菜碱、十六烷基二甲基甜菜碱、十二烷基二-(2-羟乙基)羧甲基甜菜碱、硬脂基二-(2-羟丙基)羧甲基甜菜碱、油基二甲基  $\gamma$ -羧丙基甜菜碱、十二烷基二-(2-羟丙基)  $\alpha$ -羧乙基甜菜碱、椰油二甲基磺基丙基甜菜碱、硬脂基二甲基磺基丙基甜菜碱、十二烷基二甲基磺基乙基甜菜碱、十二烷基二-(2-羟乙基)磺基丙基甜菜碱、酰氨基甜菜碱和酰氨基磺基甜菜碱、油基甜菜碱和椰油酰氨基基丙基甜菜碱。

本发明组合物可包含以下通式的季铵组合物



其中， $X$  和  $a$  如上所述， $Q_1$  是  $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{22}$  烷基、 $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{22}$  烷基酰氨基  $\text{C}_1$ - $\text{C}_6$  亚烷基、 $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{22}$  烷基羟基； $Q_2$  是  $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{22}$  烷基、 $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{22}$  烷基酰氨基  $\text{C}_1$ - $\text{C}_6$  亚烷基、 $\text{C}_{12}$ - $\text{C}_{22}$  烷基羟基、苄基或  $\text{C}_1$ - $\text{C}_6$  烷基； $Q_3$  和  $Q_4$  独立地是  $\text{C}_1$ - $\text{C}_6$  烷基或苄基。这些季铵化合物可单独使用或与本发明二酯季铵化合物组合使用。因此，本发明配方可包含二酯季铵化合物以及二酯季铵化合物和常用季铵化合物。

合适的季铵化合物的例子包括：十六烷基氯化铵、十六烷基溴化铵、十二烷基氯化铵、十二烷基溴化铵、硬脂基氯化铵、硬脂基溴化铵、十六烷基二甲基氯化铵、十六烷基二甲基溴化铵、十二烷基二甲基氯化铵、十二烷基二甲基溴化铵、硬脂基二甲基氯化铵、硬脂基二甲基溴化铵、十六烷基三甲基氯化铵、十六烷基三甲基溴化铵、十二烷基三甲基氯化铵、十二烷基三甲基溴化铵、硬

脂基三甲基氯化铵、硬脂基三甲基溴化铵、十二烷基二甲基氯化铵、硬脂基二甲基十六烷基二牛油基二甲基氯化铵、双十六烷基氯化铵、双十六烷基溴化铵、双十二烷基氯化铵、双十二烷基溴化铵、二硬脂基氯化铵、二硬脂基溴化铵、双十六烷基甲基氯化铵、双十六烷基甲基溴化铵、双十二烷基甲基氯化铵、双十二烷基甲基溴化铵、二硬脂基甲基氯化铵、二硬脂基二甲基氯化铵、二硬脂基甲基溴化铵以及它们的混合物。

其它季铵盐包括其中 C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 烷基来自牛油脂肪酸和椰油脂肪酸的盐。来自牛油和椰油来源的季铵盐的例子包括二牛油基二甲基氯化铵、二牛油基二甲基硫酸甲酯铵、二(氢化牛油基)二甲基氯化铵、二(氢化牛油基)二甲基醋酸铵、二牛油基二丙基磷酸铵、二牛油基二甲基硝酸铵、二(椰油烷基)二甲基氯化铵、二(椰油烷基)二甲基溴化铵、牛油基氯化铵、椰油基氯化铵、硬脂酰氨基丙基 PG-二甲基氯化铵磷酸盐、硬脂酰氨基丙基乙基二甲基硫酸乙酯铵、硬脂酰氨基丙基二甲基(醋酸肉豆蔻酯)氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基十六/十八烷基甲苯磺酸铵、硬脂酰氨基丙基二甲基氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基乳酸铵以及它们的混合物。

更优选的季铵表面活性剂是双十二烷基二甲基氯化铵、二硬脂基二甲基氯化铵、二肉豆蔻基二甲基氯化铵、二棕榈基二甲基氯化铵、二硬脂基二甲基氯化铵、硬脂酰氨基丙基 PG 二甲基氯化铵磷酸盐、硬脂酰氨基丙基乙基二甲基硫酸乙酯铵、硬脂酰氨基丙基二甲基(醋酸肉豆蔻酯)氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基十六/十八烷基甲苯磺酸铵、硬脂酰氨基丙基二甲基氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基乳酸铵、以及它们的混合物。

如果存在,可以任何所需的量提供本发明季铵组合物(除那些得自二酯季铵化合物外),该量取决于上述各因素,包括最终配方及整个组合物的目的。然而,这就是说,这些季铵组合物的量约为最终组合物重量的 0-50%,优选约 0.1-25%,更优选约 1-10%。当本文所述季铵化合物与本发明二酯季铵化合物组合使用时,可降低这些季铵化合物的量,虽然在某些情况下,一种的存在对另一种的用量并没有影响。

本发明组合物还包含 C<sub>12</sub>-C<sub>22</sub> 伯胺、仲胺和叔胺的盐。合适的胺的例子包括硬脂酰氨基丙基二甲基胺、二乙基氨基乙基硬脂酰胺、二甲基硬脂胺、二甲基豆油胺、豆油胺、三(癸基)胺、乙基硬脂胺、乙氧基化硬脂胺、二羟基乙基硬脂胺和二十烷基山萮胺。合适的胺盐包括卤化物、醋酸盐、磷酸盐、硝酸盐、

柠檬酸盐、乳酸盐和烷基硫酸盐。这些盐包括盐酸硬脂胺、氯化豆油胺、甲酸硬脂胺、二氯化 N-牛油丙烷二胺和柠檬酸硬脂酰胺基丙基二甲胺。一些用于本发明组合物的阳离子胺表面活性剂见美国专利 4,275,055, 其内容通过引用包括在此。

本发明组合物也可包含酰氨基胺, 如授权于 Croda Inc. 的美国专利申请 09/409,203 所述, 该专利通过引用包括在此。通常, 脂肪胺和/或酰氨基胺的量在同样条件下随上述季铵化合物而改变。

当使用两性表面活性剂时, 其量将根据配方、其余成分以及所用的任何表面活性剂(有的话)的类型而改变。通常, 用于本发明的两性表面活性剂的量约为最终配方重量的 0.1%-40%, 更优选约 0.1%-15%, 还要更优选约 0.5%-2%。然而, 如上所述, 取决于产品性质, 优选不同量的两性表面活性剂。

多种防晒化合物适用于本发明组合物以提供 UV 保护。取决于组合物的性质, 防晒化合物加入的量最高约为组合物重量的 40%, 优选约为 1%-30%。然而, 取决于组合物性质, 优选的量可以不同。因此, 对于香波或调理剂形式的最终产品的组合物, 合适的防晒剂的含量至多约为组合物重量的 40%, 优选约为 0.5%-10%, 更优选约为组合物重量的 0.5%-5%。这不包括所用的二酯季铵化合物中 UV 保护基团的量。

防晒剂可是香波, 调理剂形式, 包括所谓“免洗”(leave in)调理剂, 美发喷雾以及特别用于头发和/或皮肤的防晒产品, 包括洗液、凝胶、喷雾等。

合适的防晒化合物包括, 例如, 对氨基苯甲酸、其盐及其衍生物; 邻氨基苯甲酸酯; 水杨酸酯; 肉桂酸衍生物; 二羟基肉桂酸衍生物; 三羟基肉桂酸衍生物; 碳氢化合物; 二压苄基丙酮和亚苄基乙酰苯; 萘酚磺酸盐; 二羟基萘甲酸(naphtholic acid)及其盐; 香豆素衍生物; 二唑盐; 奎宁盐; 喹啉衍生物; 羟基或甲氧基取代的二苯甲酮; 尿酸和 vilouric 酸; 鞣酸及其衍生物; 氢醌; 氨基苯甲酸酯, 水杨酸盐, 铁酸(ferrulic acid)衍生物, 苯基苯并咪唑磺酸, 二苯甲酮磺酸, 硫辛酸衍生物, 油溶性肉桂酸酯和二苯甲酮。其它合适的防晒化合物见 Segarin 等, *Cosmetics Science and Technology*, 第三章, 第 189 页及以下, 通过引用包括在此。

特别合适的防晒化合物包括对甲氧基肉桂酸 2-乙基己酯、4,4'-叔丁基甲氧基二苯甲酰基甲烷、2-羟基-4-甲氧基二苯甲酮、二甲基对氨基苯甲酸辛酯、二没食子酰三油酸酯、2,2-二羟基-4-甲氧基二苯甲酮、4-二(羟丙基)-氨基苯甲酸乙酯、2-氰基-3,3-二苯基丙烯酸 2-乙基己酯、水杨酸 2-乙基己酯、对氨基苯甲酸甘油酯、

水杨酸 3,3,5-三甲基环己酯、邻氨基苯甲酸甲酯、对二甲基-氨基苯甲酸或氨基苯甲酸酯、对二甲基氨基苯甲酸 2-乙基己酯、2-苯基苯并咪唑-5-磺酸、2-(对二甲基氨基苯基)-5-磺基苯并噁唑酸(sulfonicbenzoxazoic acid)、对氨基苯甲酸、二苯甲酮-1、二苯甲酮-1、二苯甲酮-2、二苯甲酮-3、二苯甲酮-4、二苯甲酮-5、二苯甲酮-6、二苯甲酮-8、二苯甲酮-12、甲氧基肉桂酸酯、阿伏苯宗、二羟丙基对氨基苯甲酸乙酯、对氨基苯甲酸甘油酯、邻氨基苯甲酸甲酯、氰双苯丙烯酸辛酯、二甲基对氨基苯甲酸辛酯、甲氧基肉桂酸辛酯、水杨酸辛酯、氧化锌、二氧化钛和红凡士林。

在本发明的一个实施例中，将本发明二酯季铵化合物，更优选本身包含一种或多种 UV 保护基团的二酯季铵化合物，与其它 UV 活性化合物或含有其它 UV 活性化合物的制剂混合或掺合。这些其它 UV 活性化合物的非限制性例子包括所有上述的 UV 活性化合物，优选对氨基苯甲酸(PABA)、二苯甲酮-1、二苯甲酮-2、二苯甲酮-3、二苯甲酮-4、二苯甲酮-6、二苯甲酮-8、二苯甲酮-12、甲氧基肉桂酸酯、二羟丙基-PABA 乙酯、PABA 甘油酯、胡莫柳酯、邻氨基苯甲酸甲酯、氰双苯丙烯酸辛酯、二甲基 PABA 辛酯、甲氧基肉桂酸辛酯、水杨酸辛酯、PABA、2-苯基苯并咪唑-5-磺酸、水杨酸三乙醇胺、3-(4-甲基亚苄基)-樟脑、阿伏苯宗和 2,6-二羧基萘二甲酸。它们可以上述其它防晒添加剂的量来使用。

本发明组合物也可包含一种或多种润肤化合物如脂肪、蜡、脂质、硅氧烷、碳氢化合物、脂肪醇和多种溶剂物质。润肤剂的量取决于应用。最终产品组合物中润肤剂的含量至多为组合物重量的 50%，优选约为 0.1%-20%，更优选约为组合物重量的 0.5%-10%。

合适的润肤剂的例子包括  $C_{8-30}$  羧酸的  $C_{8-30}$  烷基酯； $C_{8-30}$  羧酸的  $C_{1-6}$  二醇单酯和二酯； $C_{8-30}$  羧酸的甘油单酯、甘油二酯和甘油三酯； $C_{8-30}$  羧酸的胆固醇酯，胆固醇和碳氢化合物。这些物质的例子包括己二酸二异丙酯、肉豆蔻酸异丙酯、棕榈酸异丙酯、棕榈酸乙基己酯、新戊酸异癸酯、 $C_{12-15}$  醇苯甲酸酯、马来酸二乙基己酯、聚氧丙烯(14)丁醚、聚氧丙烯(2)肉豆蔻基醚丙酸酯、蓖麻油酸十六烷酯、硬脂酸胆固醇酯、异硬脂酸胆固醇酯、醋酸胆固醇酯、希蒙得木油、可可脂、牛油树脂、羊毛脂、羊毛脂酯、矿物油、凡士林以及直链和支链  $C_{16}-C_{30}$  碳氢化合物。

也可使用  $C_8-C_{30}$  直链和支链脂肪醇，例如硬酯醇、异硬酯醇、乙烯醇、十

六烷醇、异十六烷醇以及它们的混合物。其它合适的润肤剂的例子公开于美国专利 4,919,934；其内容通过引用包括在此。

其它合适的润肤剂是各种烷氧基化醚、二醚、酯、二酯和三酯。合适的烷氧基化醚的例子包括聚氧丙烯(10)丁醚、聚氧丙烯(11)丁醚、聚氧丙烯(12)丁醚、聚氧丙烯(13)丁醚、聚氧丙烯(14)丁醚、聚氧丙烯(15)丁醚、聚氧丙烯(16)丁醚、聚氧丙烯(17)丁醚、聚氧丙烯(18)丁醚、聚氧丙烯(19)丁醚、聚氧丙烯(20)丁醚、聚氧丙烯(22)丁醚、聚氧丙烯(24)丁醚、聚氧丙烯(30)丁醚、聚氧丙烯(11)硬脂醚、聚氧丙烯(15)硬脂醚、聚氧丙烯(10)油酸醚、聚氧丙烯(7)十二烷基醚、聚氧丙烯(30)异十六烷基醚、聚氧丙烯(10)甘油醚、聚氧丙烯(15)甘油醚、聚氧丙烯(10)丁二醇醚、聚氧丙烯(15)丁二醇醚、聚氧丙烯(27)甘油醚、聚氧丙烯(30)十六烷基醚、聚氧丙烯(28)十六烷基醚、聚氧丙烯(10)十六烷基醚、聚氧丙烯(10)己二醇醚、聚氧丙烯(15)己二醇醚、聚氧丙烯(10)1,2,6-己三醇醚、聚氧丙烯(15)1,2,6-己三醇醚以及它们的混合物。

烷氧基化二醚的例子包括聚氧丙烯(10)1,4-丁二醇二醚、聚氧丙烯(12)1,4-丁二醇二醚、聚氧丙烯(14)1,4-丁二醇二醚、聚氧丙烯(2)丁二醇二醚、聚氧丙烯(10)1,6-己二醇二醚、聚氧丙烯(12)1,6-己二醇二醚、聚氧丙烯(14)己二醇二醚、聚氧丙烯(20)己二醇二醚以及它们的混合物。优选选自：聚氧丙烯(10)1,4-丁二醇二醚、聚氧丙烯(12)1,4-丁二醇二醚、聚氧丙烯(10)1,6-己二醇二醚、聚氧丙烯(12)己二醇二醚以及它们的混合物。

合适的烷氧基化二酯和三酯的例子见授权于 Croda Inc. 的美国专利 5,382,377、5,455,025 和 5,597,555，其内容通过引用包括在此。

合适的脂质包括 C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub> 醇单失水山梨醇酯、C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub> 醇失水山梨醇二酯、C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub> 醇失水山梨醇三酯、C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub> 醇蔗糖单酯、C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub> 醇蔗糖二酯、C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub> 醇蔗糖三酯和 C<sub>2</sub>-C<sub>62</sub> 羟基酸的 C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub> 脂肪醇酯。合适脂质的具体例子是失水山梨醇二异硬脂酸酯、失水山梨醇二油酸酯、失水山梨醇二硬脂酸酯、失水山梨醇异硬脂酸酯、失水山梨醇月桂酸酯、失水山梨醇油酸酯、失水山梨醇棕榈酸酯、失水山梨醇倍半油酸酯、失水山梨醇倍半硬脂酸酯、失水山梨醇硬脂酸酯、失水山梨醇三异硬脂酸酯、失水山梨醇三油酸酯、失水山梨醇三硬脂酸酯、蔗糖椰油酸酯、蔗糖二月桂酸酯、蔗糖二硬脂酸酯、蔗糖月桂酸酯、蔗糖肉豆蔻酸酯、蔗糖油酸酯、蔗糖棕榈酸酯、蔗糖蓖麻油酸酯、蔗糖硬脂酸酯、蔗糖三山萘酸酯、蔗糖三硬脂酸酯、乳酸肉豆蔻酯、乳酸硬脂酯、乳酸异硬脂酯、乳酸

十六烷酯、乳酸棕榈酯、乳酸椰油酯以及它们的混合物。

其它合适的润肤剂包括矿物油、凡士林、胆固醇、聚二甲基硅氧烷、聚二甲基硅氧烷醇、硬脂醇、十六烷醇、山萘醇、己二酸二异丁酯、肉豆蔻酸异丙酯、肉豆蔻基肉豆蔻酸酯、十六烷基蓖麻油酸酯、失水山梨醇二硬脂酸酯、失水山梨醇二月桂酸酯、失水山梨醇硬脂酸酯、失水山梨醇月桂酸酯、蔗糖月桂酸酯、蔗糖二月桂酸酯、异硬脂酰基乳酰乳酰钠、氧脯氨酸十二烷酯、失水山梨醇硬脂酸酯、硬脂醇、十六烷醇、山萘醇、聚氧丙烯(14)丁醚、聚氧丙烯(15)硬脂醚以及它们的混合物。

本发明组合物也可包含各种乳化剂。在最终产品组合物中，乳化剂的含量至多约为组合物重量的 10%，优选约 0.5%-5%。合适的乳化剂的例子包括：硬脂酰氨基丙基 PG-二甲基氯化铵磷酸盐、硬脂酰氨基丙基乙基二甲基硫酸乙酯铵、硬脂酰氨基丙基二甲基(醋酸肉豆蔻酯)氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基十六/十八烷基甲苯磺酸铵、硬脂酰氨基丙基二甲基氯化铵、硬脂酰氨基丙基二甲基乳酸铵、聚乙二醇、聚丙二醇以及它们的混合物。

本发明组合物也可包含去头屑剂。合适的去头屑剂的例子包括硫氧吡啶锌、硫磺和二硫化硒。

本发明组合物也可包含头发氧化剂/还原剂。合适的头发氧化剂/还原剂的例子包括过氧化氢、过硼酸盐、巯基乙酸盐和过硫酸盐。

本发明组合物也可包含各种增稠剂如交联丙烯酸盐、非离子聚丙烯酰胺、黄原胶、瓜尔胶、结冷胶等；聚烷基硅氧烷、聚芳基硅氧烷和氨基硅氧烷。在本发明最终产品组合物中，增稠剂的含量至多约为组合物重量的 10%，优选约 0.2%-5%。

合适的增稠硅化合物的具体例子包括聚二甲基硅氧烷、苯基硅氧烷、聚二乙基硅氧烷和聚甲基苯基硅氧烷。一些合适的硅化合物如欧洲专利申请 EP 95,238 和美国专利 4,185,017 所述，其内容通过引用包括在此。本发明组合物也可包含硅氧烷聚合物材料，提供头发定型和调理作用。该材料如美国专利 4,902,499 所述，其内容提供引用包括在此。

本发明组合物也可包含水解动物蛋白头发调理剂。例如，Croda Incorporated 公司以商品名 Crotein Q-RTM 销售的市售物质。其它例子包括尿素、甘油和丙氧基化甘油，包括如美国专利 4,976,953 所述的物质，该专利提供引用包括在此。

本发明组合物也可包含头发定型剂，应用于头发具有定型效果。头发定型组合物可是均聚物、共聚物、三聚物等。为了便于描述聚合物，聚合物中的单体单元是指形成聚合物的单体。单体可是离子的(例如阴离子、阳离子、两性、两性离子)或非离子的。阴离子单体的例子包括：不饱和羧酸单体如丙烯酸、甲基丙烯酸、马来酸、马来酸半酯、衣康酸、富马酸和巴豆酸；不饱和多元酸酐如琥珀酸酐、邻苯二甲酸酐等的半酯，包括含羟基的丙烯酸酯和/或甲基丙烯酸酯，如丙烯酸羟乙酯和甲基丙烯酸羟乙酯、丙烯酸羟丙酯等；具有磺酸基团的单体如苯乙烯磺酸、丙烯酸磺基乙酯和甲基丙烯酸磺基乙酯等；具有磷酸基团的单体如酸式二氧磷基氧(phosphooxy)乙基丙烯酸酯和甲基丙烯酸酯、3-氯-2-酸式二氧磷基氧丙基丙烯酸酯和甲基丙烯酸酯等。

阳离子单体的例子包括来源于丙烯酸或甲基丙烯酸及  $C_1-C_5$  烷基的三烷基胺的四元表卤代醇(epihalohydrin)产物如(甲基)丙烯酰氧丙基三甲基氯化铵和(甲基)丙烯酰氧丙基三乙基溴化铵；来源于甲基丙烯酸或甲基丙烯酰胺和  $C_1-C_6$  烷基的二烷基烷醇胺的甲基丙烯酸的胺衍生物或甲基丙烯基酰胺的胺衍生物，如(甲基)丙烯酸二甲氨基乙酯、(甲基)丙烯酸二乙氨基乙酯、(甲基)丙烯酸二甲氨基丙酯或二甲基氨基丙基(甲基)丙烯酰胺。

两亲单体的例子包括上述(甲基)丙烯酸的胺衍生物或(甲基)丙烯酰胺的胺衍生物的两性离子衍生物，如(甲基)丙烯酸二甲氨基乙酯、二甲基氨基丙基(甲基)丙烯酰胺，通过卤代脂肪酸盐如一氯乙酸钾、一溴丙酸钠、一氯醋酸的氨基甲基丙醇盐、一氯醋酸的三乙醇胺盐等得到；如上所述，(甲基)丙烯酸或(甲基)丙烯酰胺的胺衍生物被丙烷磺内酯(propanesultone)改性。

非离子单体的例子是  $C_{12}-C_{24}$  醇的丙烯酸或甲基丙烯酸酯， $C_{12}-C_{24}$  醇如甲醇、乙醇、1-丙醇、2-丙醇、1-丁醇、2-甲基-1-丙醇、1-戊醇、2-戊醇、3-戊醇、2-甲基-1-丁醇、1-甲基-1-丁醇、3-甲基-1-丁醇、1-甲基-1-戊醇、2-甲基-1-戊醇、3-甲基-1-戊醇、叔丁醇、环己醇、2-乙基-1-丁醇、3-庚醇、苜醇、2-辛醇、6-甲基-1-庚醇、2-乙基-1-己醇、3,5-二甲基-1-己醇、3,5,5-三甲基-1-己醇、1-癸醇、1-十二烷醇、1-十六烷醇、1-十八烷醇；苯乙烯；氯苯乙烯；乙烯酯如乙酸乙烯酯；氯乙烯；偏二氯乙烯；丙烯腈； $\alpha$ -甲基苯乙烯；叔丁基苯乙烯；丁二烯；环己二烯；乙烯；丙烯；乙烯基甲苯；(甲基)丙烯酸烷氧基烷酯，(甲基)丙烯酸甲氧基乙酯，(甲基)丙烯酸丁氧基乙酯；丙烯酸烯丙酯，甲基丙烯酸烯丙酯，丙烯酸环己酯和甲基丙烯酸环己酯，丙烯酸油酯和甲基丙烯酸油酯，丙烯酸苜酯



和甲基丙烯酸苄酯, 丙烯酸四氢糠酯和甲基丙烯酸四氢糠酯, 乙二醇二-丙烯酸酯和-二甲基丙烯酸酯, 1,3-丁二醇二-丙烯酸酯和-甲基丙烯酸酯, 双丙酮丙烯酸酰胺、(甲基)丙烯酸异冰片酯、甲基丙烯酸正丁酯、甲基丙烯酸异丁酯、甲基丙烯酸 2-乙基己酯、甲基丙烯酸甲酯、丙烯酸叔丁酯、甲基丙烯酸叔丁酯以及它们的混合物。

阴离子头发定型聚合物的例子是: 乙酸乙烯酯和巴豆酸的共聚物、乙酸乙烯酯、巴豆酸和  $\alpha$ -支链饱和脂肪一元羧酸乙烯酯如新癸酸乙烯酯的三聚物; 甲基乙烯基醚和马来酸酐的共聚物、含丙烯酸和甲基丙烯酸的丙烯酸共聚物和三聚物。

阳离子头发定型聚合物的例子是氨基官能丙烯酸酯单体如低级烷氨基烷基丙烯酸酯或低级烷氨基烷基甲基丙烯酸酯单体, 如甲基丙烯酸二甲氨基乙酯, 与相容单体如 N-乙烯基吡咯烷酮或甲基丙烯酸烷酯, 如甲基丙烯酸甲酯和甲基丙烯酸乙酯和丙烯酸烷酯如丙烯酸甲酯和丙烯酸丁酯的共聚物。

本发明组合物也可包含多种其它成分。一些合适的在化妆品和个人护理工业中常用的其它成分见 *The CTFA Cosmetic Ingredient Handbook*, (第二版, 1992), 该手册的内容通过引用包括在此。这些成分的用量是常规量。

因此, 本发明组合物也可包含一种或多种吸收剂、抗粉刺剂、止汗剂、防结块剂、消泡剂、抗菌剂、抗氧化剂、去头屑剂、收敛剂、粘合剂、缓冲剂、生物添加剂、缓冲剂、填充剂、螯合剂、化学添加剂、偶联剂、调理剂、着色剂、化妆收敛剂、化妆品杀虫剂、变性剂、药物收敛剂、洗涤剂、分散剂、外用镇痛药、成膜形剂、起泡剂、芳香成分、湿润剂、角质层分离剂、遮光剂、pH 调节剂、防腐剂、推进剂、蛋白质、维生素 A 类、还原剂、多价螯合剂、皮肤漂白剂、皮肤调理剂(湿润剂、混合的和封闭的)、润肤剂、皮肤愈合剂、柔软剂、增溶剂、润肤剂、渗透剂、增塑剂、盐、精油和维生素。根据产品的不同, 每种成分的量变化较大。然而, 通常使用常规量。因此, 例如, 当香波通常使用约 0.1-5 重量% 的芳香剂, 这就是用一种或多种本发明二酯季铵化合物配制香波时通常使用的量。然而, 这些添加剂中每一种的用量小于 50 重量%, 更优选小于或等于 25 重量%。

合适的 pH 调节剂的例子包括氢氧化钠、三乙醇胺、氨基甲基丙醇、以及它们的混合物。最终产品组合物中存在 pH 调节剂时, 其量约为组合物重量的 0.01%-5%, 优选约 0.1%-2%。最重要的是使最终 pH 约为 4-10, 优选约为 5-9。

合适的成膜剂的例子包括丙三醇/肉豆蔻酸二甘醇酯共聚物、丙三醇/己二酸二甘醇酯共聚物、PVM/MA 乙酯共聚物、PVP/聚二甲基硅氧烷基丙烯酸酯/聚氨甲酰基/聚乙二醇酯以及它们的混合物。最终产品组合物中存在成膜剂时，其量约为组合物重量的 0.1%-15.0%，优选约为组合物重量的 0.1%-2.5%。

合适的维生素的例子包括维生素 E、醋酸维生素 E、维生素 A 酸、维生素 A、和维生素 A 类。

合适的抗粉刺药物的例子包括间苯二酚、硫磺、水杨酸、红霉素、锌和过氧化苯甲酰。

合适的皮肤漂白剂和亮肤剂的例子包括氢醌和曲酸。合适的美容成分如芳香剂、颜料、着色剂等的例子包括：泛醇及其衍生物(如乙基泛醇)、芦荟、泛酸及其衍生物、丁香油、薄荷醇、樟脑、桉叶油、丁香酚、乳酸薄荷酯、金缕梅馏出物、尿囊素、没药醇和甘草酸二钾。

### 实施例

#### 实施例 1：制备聚氧丙烯(4)聚氧乙烯(6)N-甲基二乙醇胺

向带氮气进口的干净、干燥的搅拌压力釜，加入 482.08g (4.05 mol)N-甲基二乙醇胺，催化量(5.54g)的 45% KOH 和 0.92g 固色剂(color preservative)NaBH<sub>4</sub>。然后，用氮气吹扫该釜，并加热至 110°C。抽真空 1 小时以除去痕量的水，然后升温至 130°C。保持压力低于 50 psig，以一定的速率加入 939.88g (16.18 mol)环氧丙烷。加入所有环氧丙烷后，恒压下批料再反应 4 小时，然后升温至 160°C。维持压力低于 50 psig，以一定的速率加入 1069.02 g (24.26 mol)环氧乙烷。加入所有环氧乙烷后，恒压下批料再反应 1 小时，然后将温度降低至 110°C，完全抽真空 1 小时。将反应混合物冷却至 50°C，用 5.61g 50%次磷酸中和催化剂。所得产物为澄清琥珀色液体。

#### 实施例 2：制备聚氧丙烯(4)聚氧乙烯(6) N-甲基二乙醇胺双羊毛脂酸酯(lanolate)

向带蒸馏塔、氮气进口的干净干燥的搅拌压力釜，加入 1204.84 g(1.94 mol)实施例 1 的烷氧基化物，1290.28g (3.68mol)羊毛脂酸(得自 Croda, Inc.)和催化量(6.25 g)的 50%次磷酸。氮气鼓泡下，将批料加热至 220°C，保持 1 小时后，抽真空至 100mm Hg。抽真空过程中，通过测定酸值检测批料。当酸值达到 3.1

mg KOH 时，认为反应完全。最终产物是粘稠的琥珀色液体。

### 实施例 3：制备聚氧丙烯(4)聚氧乙烯(6)N-甲基二乙醇胺双山萿酸酯

向带蒸馏塔、氮气进口的干净干燥的搅拌压力釜，加入 268.16 g (0.44 mol) 实施例 1 的烷氧基化物，281.82g (0.83 mol)山萿酸和催化量(1.38 g)的 50%次磷酸。氮气鼓泡下，将该批料加热至 220℃，保持 1 小时后，抽真空至 100mm Hg。抽真空过程中，通过测定酸值检测批料。酸值优选小于 5mg KOH 时，认为反应完全。

### 实施例 4：制备聚氧丙烯(4)聚氧乙烯(6)N-甲基二乙醇胺双-18-甲基二十烷酸酯

向带蒸馏塔、氮气进口的干净干燥的搅拌压力釜，加入 348.14 g (0.57 mol) 实施例 1 的烷氧基化物 351.86g (1.07 mol)18-MEA Acid (得自 Croda, Inc. )和催化量(1.75 g)的 50%次磷酸。氮气鼓泡下，将该批料加热至 220℃，保持 1 小时后，抽真空至 100mm Hg。抽真空过程中，通过测定酸值检测批料。酸值优选小于 5mg KOH 时，认为反应完全。

### 实施例 5：聚氧丙烯(4)聚氧乙烯(6)N-甲基二乙醇胺二羊毛脂酸酯的硫酸二甲酯季铵化合物

向带有氮气进口、机械搅拌器、回流冷凝器、温度探头和滴液漏斗的四颈圆底烧瓶，2129.92g(1.62 mol)实施例 2 的二酯和 1377.93g 稀释剂双丙二醇。将批料加热至 50℃，逐滴加入 163.70g (1.30 mol)硫酸二甲酯以维持温度低于 55℃。加入所有硫酸二甲酯后，批料再反应 1 小时，然后测定碱值。当碱值为 5.36 mg KOH 时，认为反应完全。然后，过滤批料，得到 60%活性的季铵化合物。

根据实施例 5 所述，也可使实施例 3 和 4 试样季铵化。

### 实施例 6：制备聚氧丙烯(6)N-甲基二乙醇胺

向带有氮气进口的干净干燥的搅拌压力釜，加入 637.03g (5.35 mol) N-甲基二乙醇胺，催化量(5.55 g)的 45% KOH 和 1.00g 固色剂 NaBH<sub>4</sub>。然后，用氮气吹扫该釜，并加热至 110℃。抽真空 1 小时以除去痕量的水，然后加热至 130℃。维持压力低于 50 psig，以一定的速率加入 1862.97g (32.08 mol)环氧丙烷。

加入所有环氧丙烷后，恒压下批料再反应 4 小时，然后升温至 160℃。2 小时后将温度降低至 110℃，完全抽真空 1 小时。将反应化合物冷却至 50℃，用 5.61g 50%次磷酸中和催化剂。

#### 实施例 7：制备聚氧丙烯(6)N-甲基二乙醇胺双聚蓖麻油酸酯

向带氮气进口、蒸馏塔的干净干燥的搅拌压力釜，加入 369.22g (0.78 mol) 实施例 6 的丙氧基，2130.78 g(1.50 mol)蓖麻油酸(至少有 5 个重复单元的聚合蓖麻油酸)和催化量(6.25 g)的 50%次磷酸。氮气鼓泡下，将该批料加热至 220℃，保持 1 小时后，抽真空至 100mm Hg。抽真空过程中，通过测定酸值检测批料。酸值优选小于 5mg KOH 时，认为反应完全。

#### 实施例 8：制备聚氧丙烯(6)N-甲基二乙醇胺二羊毛脂酸酯

向带有氮气进口、蒸馏塔的干净干燥的搅拌压力釜，加入 288.71g (0.62 mol) 实施例 6 的丙氧基化物，411.29g(1.17 mol)羊毛脂酸(得自 Croda, Inc.)和催化量(1.75g)的 50%次磷酸。氮气鼓泡下，将该批料加热至 220℃，保持 1 小时后，抽真空至 100mm Hg。抽真空过程中，通过测定酸值检测批料。酸值优选小于 5mg KOH 时，认为反应完全。

#### 实施例 9：聚氧丙烯(4)聚氧乙烯(6)N-甲基二乙醇胺双聚蓖麻油酸酯的硫酸二甲酯季铵化合物

向带有氮气进口、机械搅拌器、回流冷凝器、温度探头和滴液漏斗的四颈圆底烧瓶，加入 408.45g (0.12 mol)实施例 7 的二酯和 279.02g 稀释剂双丙二醇。将批料加热至 50℃，逐滴加入 12.53 g (0.10 mol)硫酸二甲酯以维持温度低于 55℃。加入所有硫酸二甲酯后，批料再反应 1 小时，然后测定碱值。优选碱值小于 6 mg KOH 时，认为反应完全。

根据本实施例所述，也可使实施例 8 试样季铵化。

#### 实施例 10：制备聚氧丙烯(2)聚氧乙烯(10)N-甲基二乙醇胺

向带氮气进口的干净干燥的搅拌压力釜，加入 476.06g (4.00mol) N-甲基二乙醇胺，催化量(5.99 g)的 45% KOH 和 1.08g 固色剂 NaBH<sub>4</sub>。然后，用氮气吹扫该容器，并加热至 110℃。抽真空 1 小时以除去痕量的水，然后升温至 160

℃。维持压力低于 50 psig，以一定的速率加入 464.08g (8.00 mol)环氧丙烷和 1759.86 (40.00 mol)环氧乙烷。加入所有环氧丙烷和环氧乙烷后，恒压下批料再反应 2 小时。2 小时后，将温度降低至 110℃，完全抽真空 1 小时。将反应混合物冷却至 50℃，用 6.05g 50%次磷酸中和催化剂。

**实施例 11：制备聚氧丙烯(2)聚氧乙烯(10)N-甲基二乙醇胺山萘酸酯 18-甲基二十烷酸酯**

向带蒸馏塔、氮气进口的干净干燥的搅拌压力釜，加入 1392.32 g (2.06 mol) 实施例 10 的烷氧基化物，加入 641.10 g (1.96 mol)18-MEA Acid (得自 Croda, Inc.)、666.58g (1.96 mol)山萘酸和催化量(6.75 g)的 50%次磷酸。氮气鼓泡下，将该批料加热至 220℃，保持 1 小时后，抽真空至 100mm Hg。抽真空过程中，通过测定酸值检测批料。酸值优选小于 5mg KOH 时，认为反应完全。

**实施例 12：制备聚氧丙烯(2)聚氧乙烯(10)N-甲基二乙醇胺双-2-癸基十四烷酸酯**

向带氮气进口、蒸馏塔的干净干燥搅拌压力釜，加入 293.00g (0.43mol)实施例 10 的烷氧基化物，加入 257.00g (0.82mol) 2-癸基十四烷酸(得自 JarChem Industries 的 Jaric I-24)和催化量(1.38g)的 50%次磷酸。氮气鼓泡下，将该批料加热至 220℃，保持 1 小时后，抽真空至 100mm Hg。抽真空过程中，通过测定酸值检测批料。酸值优选小于 5mg KOH 时，认为反应完全。

**实施例 13：聚氧丙烯(2)聚氧乙烯(10)N-甲基二乙醇胺山萘酸酯 18-甲基二十烷酸酯的硫酸二甲酯季铵化合物**

向带有氮气进口、机械搅拌器、回流冷凝器、温度探头和滴液漏斗的四颈圆底烧瓶，加入 389.21 g (0.30 mol)实施例 11 的二酯和 220.76 g 稀释剂双丙二醇。将批料加热至 50℃，逐滴加入 30.03 g (0.24 mol)硫酸二甲酯以维持温度低于 55℃。加入所有硫酸二甲酯后，批料再反应 1 小时，然后测定碱值。优选碱值小于 6 mg KOH 时，认为反应完全。

根据上述方法，可对实施例 11 和 12 试样进行季铵化

保湿防晒露

成分

% W/W

## A 相

实施例 9 的季铵化合物	2.0
二十二烷基三甲基氯化铵	1.0
十六/十八烷醇	4.0
Crodamol OS (硬脂酸辛酯)	14.0
二苯甲酮 3	5.0
甲氧基肉桂酸辛酯	7.5
聚二甲基硅氧烷	1.0

## B 相

Cropeptide W(水解小麦蛋白(和)水解小麦淀粉)	1.0
水	63.5

## C 相

Germaben II (防腐剂)	1.0
-------------------	-----

方法：混合 A 相并加热至 75℃。在另一个独立的容器中，混合 B 相并加热至 75℃。搅拌下将 A 相加入到 B 相中，边搅拌边冷却至 40℃。加入 C 相，继续冷却至 25℃。

## 保湿露

成分	% W/W
A 相	
实施例 9 的季铵化合物	3.0
十六/十八烷醇	4.0
Crodamol OS(硬脂酸辛酯)	5.0
Cromollient DP3A (己二酸双聚氧丙烯(3)肉豆蔻酯)	5.0
凡士林	3.5
聚二甲基硅氧烷	3.0
Crodamol SS(十六烷酯)	2.0
B 相	
水	69.65

卡波泊尔 941(卡波姆)(增稠剂)	0.15
实施例 2 的聚酯聚胺(中和剂)	0.70

## C 相

Germaben II(防腐剂)	1.00
------------------	------

方法：搅拌下将 B 相的卡波泊尔 941 撒入水中。加热至 75-80℃，加入聚酯聚胺。混合 A 相成分，搅拌下加热至 75-80℃。边搅拌边将 B 相加入到 A 相中，冷却至 40℃。边搅拌边加入 C 相，冷却至所需温度。

## 头发调理剂

成分	% W/W
----	-------

## A 相

实施例 13 的季铵化合物	2.5
---------------	-----

Cromollient DP3A (己二酸双聚氧丙	2.0
---------------------------	-----

烯(3)肉豆蔻酯)

Incroquat CTC-30 (西曲氯铵)	2.0
-------------------------	-----

## B 相

水	92.5
---	------

## C 相

Germaben II (防腐剂)	1.0
-------------------	-----

方法：混合 A 相并加热至 75℃。在另一个独立的容器中，混合 B 相并加热至 75℃。搅拌下将 A 相加入到 B 相中，边继续搅拌边冷却至 40℃。加入 C 相并冷却至 25℃。

## 调理香波

成分	% W/W
----	-------

## A 相

Cromollient SCE (双-聚氧丙烯(2)十	4.0
-----------------------------	-----

四烷基聚氧乙烯(10)己二酸醚酯)

月桂基硫酸铵	25.0
--------	------

聚氧乙烯月桂基醚硫酸铵	12.0
-------------	------

Crosultaine C-50(椰油酰氨基丙基羟	3.0
---------------------------	-----

## 基磺基甜菜碱)

月桂酰胺 DEA	1.0
Germaben II (防腐剂)	1.0
水	52.0

## B 相

实施例 13 的季铵化合物	2.0
---------------	-----

方法：混合 A 相并加热至 60℃。加入 B 相，边继续搅拌边冷却至 25℃。

## UV 保护的调理香波

成分	% W/W
----	-------

## A 相

Cromollient SCE (双-聚氧丙烯(2)十 四烷基聚氧乙烯(10)己二酸醚酯)	4.0
月桂基硫酸铵	25.0
聚氧乙烯月桂基醚硫酸铵	12.0
Crosultaine C-50(椰油酰氨基丙基羟 基磺基甜菜碱)	3.0
月桂酰胺 DEA	1.0
Germaben II (防腐剂)	1.0
水	50.0

## B 相

实施例 13 的季铵化合物	2.0
Crodasorb UV-HPP (Polyquaternium 59)	2.0

方法：混合 A 相并加热至 60℃。加入 B 相，边继续搅拌边冷却至 25℃。

## 透明脱臭锭

成分	% W/W
A 部分	
硬脂酸钠 C-1	7.7
Incromide CA (椰油酰胺 DEA)	7.0



实施例 5 的季铵化合物	1.5
丙二醇	58.0
三氯生	0.3
Probutyl DB-10 (聚氧丙烯(10)丁二醇)	8.5
B 部分	
去离子水	17.0

方法：混合所有 A 部分成分，高速搅拌下升温至 70-80℃。到达温度后继续搅拌 5-10 分钟，然后，在 5-10 分钟内，缓慢加入 B 部分。倒入模具中。

#### 透明身体洗剂

成分	% W/W
A 部分	
去离子水	55.9
十二烷基醚硫酸钠	20.0
Crosultaine C-50(椰油酰氨基丙基羟基磺基甜菜碱)	12.0
EDTA 二钠	0.1
实施例 5 的季铵化合物	2.0
B 部分	
Incromide CA (椰油酰胺 DEA)	3.0
Glycerox 767(癸酸/辛酸聚氧乙烯(6)甘油三酯)	3.0
Crothix Liquid (聚氧乙烯(150)季戊四醇四硬脂酸酯(和)癸酸/辛酸聚氧乙烯(6)甘油酯)	3.0
C 部分	
Germaben II (防腐剂)	1.0

方法：搅拌下混合 A 部分。搅拌下混合 B 部分并加热至 50℃。缓慢将 B 部分加入到 A 部分中，边继续搅拌边冷却。