



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년05월20일

(11) 등록번호 10-2400208

(24) 등록일자 2022년05월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

A61K 8/46 (2006.01) **A61K 8/44** (2006.01)
A61Q 11/00 (2006.01) **A61Q 19/10** (2006.01)
A61Q 5/02 (2006.01) **A61Q 9/02** (2006.01)
C11D 1/12 (2006.01) **C11D 1/28** (2006.01)
C11D 1/37 (2006.01) **C11D 10/04** (2006.01)
C11D 3/00 (2006.01)

(52) CPC특허분류

A61K 8/466 (2013.01)
A61K 8/44 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2018-7036432

(22) 출원일자(국제) 2017년05월11일

심사청구일자 2020년05월04일

(85) 번역문제출일자 2018년12월14일

(65) 공개번호 10-2019-0009332

(43) 공개일자 2019년01월28일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2017/061266

(87) 국제공개번호 WO 2017/198527

국제공개일자 2017년11월23일

(30) 우선권주장

16170189.1 2016년05월18일
유럽특허청(EPO)(EP)

(56) 선행기술조사문헌

EP02990026 A1*

JP01153796 A*

US02195088 A1*

WO2015117840 A1*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

바스프 에스이

독일 루트빅샤펜 67056, 칼-보슈-스트라세 38

(72) 발명자

브룬 클라우디아

독일 40589 뒤셀도르프-홀트하우젠 헨켈슈트라세 67

베홀러 안스가르

독일 40589 뒤셀도르프-홀트하우젠 헨켈슈트라세 67

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 7 항

심사관 : 최경윤

(54) 발명의 명칭 **수정 계면활성제 조성물**

(57) 요약

수성 계면활성제 조성물로서,

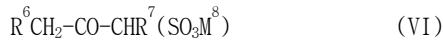
- 일반식 (I) 의 하나 이상의 **알파-술포 지방산 2염 (A)**,



[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],

- 화합물 (F) 및 화합물 (G) 로부터 선택되는 하나 이상의 **술포케톤 (B)**,

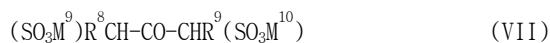
{여기서, 화합물 (F) 는 일반식 (VI) 를 갖고,



[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],

(뒷면에 계속)

화합물 (G) 는 일반식 (VII) 를 가짐:



[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}], 및

- 물

을 포함하는 수성 계면활성제 조성물로서,

화합물 (A) 의 양이 화합물 (B) 의 양보다 크고 (둘 모두 전체 수성 계면활성제 조성물을 기준으로 함), 특허 청구범위에 상세하게 정의된 경계 조건이 소위 에스테르 술포네이트에 대하여 충족되어야 하는, 수성 계면활성제 조성물을 제안한다. 상기 조성물은 양호한 발포력 및 양호한 피부 적합성 및 폼에 대한 쾌적한 감각적 느낌을 가지며, 미용 제품 뿐 아니라 세제 및 세정제에 적합하다.

(52) CPC특허분류

A61Q 11/00 (2013.01)

A61Q 19/10 (2013.01)

A61Q 5/02 (2013.01)

A61Q 9/02 (2013.01)

C11D 1/12 (2013.01)

C11D 1/28 (2013.01)

C11D 1/37 (2013.01)

C11D 10/042 (2013.01)

C11D 3/0094 (2013.01)

(72) 발명자

라트스 한스-크리슈티안

독일 40589 뒤셀도르프-홀트하우젠 헨켈슈트라세 67

슈타니슬로브스키 데틀레프

독일 40589 뒤셀도르프-홀트하우젠 헨켈슈트라세 67

헤르만스 게르하르트

독일 42699 졸링겐 뢰히도르프 2

명세서

청구범위

청구항 1

수성 계면활성제 조성물로서,

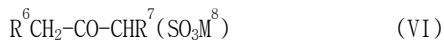
- 일반식 (I) 의 하나 이상의 **알파-술폰 지방산 2염 (A)**,



[식 중, 라디칼 R^1 은 탄소수 10 내지 16 의 포화된 선형 알킬 라디칼이고, 라디칼 M^1 및 M^2 는 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨],

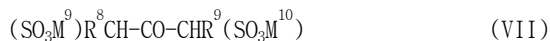
- 화합물 (F) 및 화합물 (G) 로부터 선택되는 하나 이상의 **술폰케톤 (B)**,

{여기서, 화합물 (F) 는 일반식 (VI) 를 갖고,



[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],

화합물 (G) 는 일반식 (VII) 를 가짐:



[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]],

- 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], 및

- **물**

을 포함하고,

하기 조건이 적용되는, 수성 계면활성제 조성물:

- 화합물 (A) 의 양이 화합물 (B) 의 양보다 크고 (둘 모두 전체 수성 계면활성제 조성물을 기준으로 함),

- 화합물 (A) 의 함량은 수성 계면활성제 조성물 내의 화합물 (A), (C) 및 (D) 의 합을 기준으로 60 내지 100 중량% 범위이고,

화합물 (C) 의 함량은 수성 계면활성제 조성물 내의 화합물 (A), (C) 및 (D) 의 합을 기준으로 0 초과

내지 20 중량% 범위이고,

화합물 (D) 의 함량은 수성 계면활성제 조성물 내의 화합물 (A), (C) 및 (D) 의 함을 기준으로 0 초과 내지 20 중량% 범위이고,

· 수성 계면활성제 조성물이 일반식 (V) 의 하나 이상의 **에스테르 술포네이트 (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, 또는 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 하고, 및

화합물 (A) 에 관하여, 라디칼 R^1 이 데실 또는 도데실 라디칼인 화합물 (A) 의 비율이 - 화합물 (A) 의 총량을 기준으로 - 90 중량% 이상임.

청구항 2

제 1 항에 있어서, 라디칼 M^1 및 M^2 , 및 또한 라디칼 M^8 , M^9 및 M^{10} 이 H (수소) 및 Na (소듐) 을 포함하는 군으로부터 선택되는, 수성 계면활성제 조성물.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 알킬 글리코시드 (H1), 아미도알킬베타인 (H2) 및 N-아실글루탐산 화합물 (H3) 을 포함하는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 화합물 (H) 를 추가로 포함하고, 화합물 (H) 는 하기를 특징으로 하는, 수성 계면활성제 조성물:

화합물 (H1) 은 화학식 $R^{10}O-[G]_p$ (IIa) [식 중, R^{10} 는 탄소수 8 내지 18 의 알킬 및/또는 알케닐 라디칼이고, G 는 탄소수 5 또는 6 의 당 잔기이고, p 는 1 내지 10 의 수임] 로 표시되고,

추가로 단, 화합물 (H1) 에 관하여, 라디칼 R^{10} 가 탄소수 15 이상의 알킬 또는 알케닐 라디칼인 화합물 (H1) 의 비율이 - 수성 계면활성제 조성물 중 화합물 (H1) 의 총량을 기준으로 - 5 중량% 이하이며,

화합물 (H2) 는 화학식 $R^{11}-CO-NH-(CH_2)_y-N^+(CH_3)_2-CH_2-COO^-$ (IIb) [식 중, 라디칼 R^{11} 은 탄소수 7 내지 19 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 지수 y 는 2 내지 4 의 정수임] 로 특징지워지고,

단, 라디칼 R^{11} 가 알케닐 라디칼인 화합물 (H2) 의 비율이 - 수성 계면활성제 조성물 중 화합물 (H2) 의 총량을 기준으로 - 3 중량% 이하이며,

화합물 (H3) 은 화학식 $M^3OOC-CH_2-CH_2-CH(NH-CO-R^{12})-COOM^4$ (IIc) [식 중, 라디칼 R^{12} 는 탄소수 7 내지 19 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^3 및 M^4 는 - 서로 독립적으로 - H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨] 로 표시됨.

청구항 4

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 하나 이상의 아미도알킬베타인 (H2) 를 추가로 포함하고,

화합물 (H2) 는 화학식 $R^{11}-CO-NH-(CH_2)_y-N^+(CH_3)_2-CH_2-COO^-$ (IIb) [식 중, 라디칼 R^{11} 은 탄소수 7 내지 19 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 지수 y 는 2 내지 4 의 정수임] 로 특징지워지고,

단, 라디칼 R^{11} 가 알케닐 라디칼인 화합물 (H2) 의 비율이 - 수성 계면활성제 조성물 중 화합물 (H2) 의 총량을

기준으로 - 3 중량% 이하인, 수성 계면활성제 조성물.

청구항 5

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 미용 제품, 및 또한 세제 및 세정제를 위해 사용되는, 수성 계면활성제 조성물.

청구항 6

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 모발 샴푸, 샤워 젤, 비누, 합성 세제, 세척용 페이스트, 세척용 로션, 스크럽 제제 (scrub preparation), 폼 바스 (foam bath), 오일 바스 (oil bath), 샤워 바스 (shower bath), 면도용 폼, 면도용 로션, 면도용 크림 및 치아 케어 제품 형태의 미용 제품을 위해 사용되는, 수성 계면활성제 조성물.

청구항 7

제 1 항 또는 제 2 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 8

삭제

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 알파-sulfo 지방산 2염 및 특정한 술포케톤을 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 술포레이트 (알킬 폴리에테르 술포레이트, 지방 알코올 폴리글리콜 에테르 술포레이트, 간단하게 또한 에테르 술포레이트) 의 염이다. 이는 강력한 발포력 (foaming ability), 높은 세정력, 경도 (hardness) 및 그리스 (grease) 에 대한 낮은 민감성을 특징으로 하며, 예를 들어 모발 샴푸, 폼 바스 (foam bath) 또는 샤워 바스 (shower bath) 와 같은 미용 제품 뿐 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

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

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

- [0005] · 양호한 발포력
- [0006] · 폼에 대한 쾌적한 감각적 느낌
- [0007] · 양호한 피부 적합성

- [0008] 본 발명은 우선, 수성 계면활성제 조성물로서,
- [0009] · 일반식 (I) 의 하나 이상의 **알파-술폰 지방산 2염 (A)**,
- [0010]
$$R^1CH(SO_3M^1)COOM^2 \quad (I)$$
- [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] · 화합물 (F) 및 화합물 (G) 로부터 선택되는 하나 이상의 **술폰케톤 (B)**,
- [0013] {여기서, 화합물 (F) 는 일반식 (VI) 를 갖고,
- [0014]
$$R^6CH_2-CO-CHR^7(SO_3M^8) \quad (VI)$$
- [0015] [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],
- [0016] 화합물 (G) 는 일반식 (VII) 를 가짐:
- [0017]
$$(SO_3M^9)R^8CH-CO-CHR^9(SO_3M^{10}) \quad (VII)$$
- [0018] [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}}, 및
- [0019] · **물**
- [0020] 을 포함하고,
- [0021] 하기 조건이 적용되는, 수성 계면활성제 조성물을 제공한다:
- [0022] · 화합물 (A) 의 양이 화합물 (B) 의 양보다 크고 (둘 모두 전체 수성 계면활성제 조성물을 기준으로 함),
- [0023] · 수성 계면활성제 조성물이 일반식 (V) 의 하나 이상의 에스테르 술포네이트 (E) 를 포함하는 경우,
- [0024]
$$R^2CH(SO_3M^7)COOR^3 \quad (V)$$
- [0025] [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, 또는 오직 탄소수 3 초과로 분지형일 수 있고, 라디칼 M^7 은 Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨],
- [0026] 화합물 (A) 는 - 화합물 (A) 및 (E) 전체를 기준으로 - 50 중량% 이상의 정도로 및 특히 90 중량% 이상의 정도로 존재해야 함.
- [0027] 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은, 하기 유리한 특성을 특징으로 한다:
- [0028] · 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 체적, 폼 안정성, 폼 탄력성, 폼의 물 함량 뿐 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 체적을 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 평가

는 시험 대상에 의해 이루어질 수 있다. 이러한 목적을 위해, 폼의 크림성 (creminess), 탄력성, 성형성과 같은 측면이 평가될 수 있다.

[0029] · 양호한 피부 및 점막 적합성. 이는 당업자에게 공지된 시험관내 방법 (예를 들어 RBC 또는 HET-CAM) 에 의해 및 또한 시험 대상 (예를 들어 패치 시험) 에 의해 확인될 수 있다.

[0030] · 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.

[0031] · 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.

[0032] · 양호한 적용성 및 가공성. 조성물은 물의 도입 시 열의 공급 없이 신속하게 용해될 수 있다.

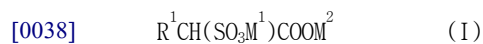
[0033] · 양호한 투명 가용성 (clear solubility) 및 투명성. 수성 계면활성제 조성물은 침전 또는 혼탁되는 경향을 갖지 않는다.

[0034] · 충분히 높은 점도; 이는 본 발명의 맥락에서 1000 mPas 이상의 값을 의미하는 것으로 이해됨 (23℃, 12 rpm 에서, 스펀들 세트 RV 02 내지 07 (점도 범위에 따른 스펀들 선택) 로 Brookfield RV 실험실용 레오미터 (rheometer) 를 이용하여 측정됨). 공지된 바와 같이, "mPas" 는 밀리파스칼 초를 의미한다.

[0035] · 양호한 세정 성능. 수성 계면활성제 조성물은 고체 또는 텍스타일 표면으로부터 오염물, 특히 지방 또는 오일-함유 오염물을 제거 및 유화시키는데 적합하다.

[0036] 화합물 (A)

[0037] 본 발명의 맥락에서 **알파-솔포 지방산 2염**으로서 언급되는 화합물 (A) 는, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물에 필수적이다. 이는 상기 명시된 화학식 (I) 을 갖는다:



[0039] [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.

[0040] 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.

[0041] 바람직한 구현예에서, 화학식 (I) 중 라디칼 R^1 은 탄소수 10 내지 16 의 포화된 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 및 바람직하게는 90 중량% 이상이다.

[0042] 하나의 구현예에서, 화학식 (I) 중 라디칼 M^1 및 M^2 는 H (수소) 및 Na (소듐) 을 포함하는 군으로부터 선택된다.

[0043] 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.

[0044] 특히 바람직한 구현예에서, 화합물 (A) 는 공업용 등급 형태로 사용된다. 이는, 상응하는 카르복실산, 특히 천연 (native) 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 카르복실산과 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.

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

(A)의 함량은 60 내지 100 중량% 범위이고,

(C)의 함량은 0 내지 20 중량% 범위이고,

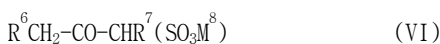
(D)의 함량은 0 내지 20 중량% 범위이며,

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

화합물 (B)

상기 상제화된 바와 같이, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은, 화합물 (A) 및 물 이외에, 화합물 (F) 및 (G)로부터 선택되는 하나 이상의 **술포케톤 (B)**를 포함한다.

화합물 (F)는 일반식 (VI)를 갖는다:

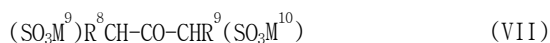


[식 중, 라디칼 R^6 및 R^7 은 - 서로 독립적으로 - 탄소수 6 내지 18의 선형 또는 분지형 알킬 라디칼이고, 라디칼 M^8 은 H, Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨]. 이와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.

본 발명의 맥락에서, 화합물 (F)는 모노술포케톤으로 언급된다.

바람직한 구현예에서, 화학식 (VI) 중 라디칼 R^6 및 R^7 은 - 서로 독립적으로 - 탄소수 10 내지 16의 포화된 선형 라디칼이고, 화합물 (F)에 관하여, 라디칼 R^6 및 R^7 이 데실 및/또는 도데실 라디칼인 화합물 (F)의 비율은 - 화합물 (F)의 총량을 기준으로 - 70 중량% 이상 및 바람직하게는 90 중량% 이상이다. 하나의 구현예에서, 화학식 (VI) 중 라디칼 M^8 은 H 및 Na를 포함하는 군으로부터 선택된다.

화합물 (G)는 일반식 (VII)를 갖는다:



[식 중, 라디칼 R^8 및 R^9 은 - 서로 독립적으로 - 탄소수 6 내지 18의 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.

본 발명의 맥락에서, 화합물 (G)는 디술포케톤으로 언급된다.

바람직한 구현예에서, 화학식 (VII) 중 라디칼 R^8 및 R^9 은 - 서로 독립적으로 - 탄소수 10 내지 16의 포화된 선형 라디칼이고, 화합물 (G)에 관하여, 라디칼 R^8 및 R^9 가 데실 및/또는 도데실 라디칼인 화합물 (G)의 비율은 - 화합물 (G)의 총량을 기준으로 - 70 중량% 이상 및 바람직하게는 90 중량% 이상이다. 하나의 구현예에서, 화학식 (VII) 중 라디칼 M^9 및 M^{10} 은 H 및 Na를 포함하는 군으로부터 선택된다.

화합물 (F) 및 (G)의 제조는 임의의 특별한 제한이 없으며, 당업자에게 공지된 모든 방법에 의해 제조될 수 있다.

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.

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 반응후 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.

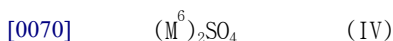
[0065] **바람직한 구현예**

[0066] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은, 화합물 (A), (B) 및 물 이외에, 일반식 (III) 의 하나 이상의 **화합물 (C)** 를 추가로 포함한다:



[0068] 화학식 (III) 에서, 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 선택된다. 이와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.

[0069] 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:

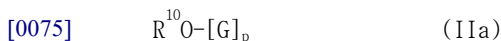


[0071] [식 중, M^6 은 Li, Na, K, Ca/2, Mg/2, 암모늄 및 알칸올아민을 포함하는 군으로부터 선택됨]. 이와 관련하여, 특히 바람직한 알칸올아민은 모노에탄올아민, 디에탄올아민, 트리에탄올아민 및 모노이소프로판올아민이다.

[0072] 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 수성 계면활성제 조성물은 화합물 (A), (B), (C), (D) 및 물을 포함한다. 화합물 (A), (C), (D), (F) 및 (G) 를 포함하는 수성 계면활성제 조성물이 특히 바람직하다. 이러한 경우, 화합물 (A) 의 라디칼 M^1 및 M^2 , 화합물 (C) 의 라디칼 M^5 , 화합물 (D) 의 라디칼 M^6 , 화합물 (F) 의 라디칼 R^8 , 및 화합물 (G) 의 라디칼 M^9 및 M^{10} 이, H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택되는 경우가 특히 바람직하다.

[0073] 하나의 구현예에서, 본 발명에 따른 조성물은, 화합물 (A), (B), (C), (D) 및 물 이외에, 알킬 글리코시드 (H1), 아미도알킬베타인 (H2) 및 N-아실글루탐산 화합물 (H3) 을 포함하는 군으로부터 선택되는 하나 이상의 화합물 (H) 를 추가로 포함한다.

[0074] 본 발명의 맥락에서 **알킬 글리코시드**로 언급되는 **화합물 (H1)** 은, 화학식 (IIa) 를 갖는다:



[0076] [식 중, R^2 는 탄소수 8 내지 18 의 알킬 및/또는 알케닐 라디칼이고, G 는 탄소수 5 또는 6 의 당 잔기이고, p 는 1 내지 10 의 수임]. 화합물 (H1) 에 관하여, 라디칼 R^2 가 탄소수 15 이상의 알킬 또는 알케닐 라디칼인 화합물 (H1) 의 비율이 - 수성 계면활성제 조성물 중 화합물 (H1) 의 총량을 기준으로 - 5 중량% 이하라는 조건이 또한 적용된다.

[0077] 알킬 글리코시드 - 이하 또한 APGs (단수형: APG) 로서 언급됨 - 로서의 화합물 (H1) 의 명명은 단지 화합물 (H1) 의 언어학적으로 간단한 명명으로서 제공되는 것으로, 구조적으로 제한하는 것으로서 이해되어서는 안된다고 분명하게 명시될 수 있으며; 따라서 화합물 (H1) 의 화학식에 따른 정의에서, 라디칼 R^{10} 은 알킬 또는 알케닐 라디칼을 의미할 수 있고, 또한 - 지수 p 가 나타내는 바와 같이 - 이들은 알킬 또는 알케닐 올리고글리코시드일 수 있음이 명백해진다.

[0078] 본원에 청구된 형태의 APG 는 제조용 유기 화학의 관련 방법에 따라 수득될 수 있다. APG 는 탄소수 5 또는 6 의 알도오스 또는 케토오스에서 유래될 수 있다. 바람직하게는, APG 는 글루코오스에서 유래된다.

- [0079] 일반식 (IIa) 중 지수 숫자 p 는 올리고머화도 (degree of oligomerization) ($DP =$ 중합도 (degree of polymerization)) 를 명시한다. APG 의 올리고머화도는 1 내지 10 및 바람직하게는 1 내지 6 이다. 각각의 APG 분자에서 p 는 항상 정수여야 하며, 본원에서 특히 1 내지 6 범위의 값으로 가정되지만, 각각의 p 값이 다른 상이한 APG 분자의 혼합물인 APG 의 경우 p 값은, 대부분의 경우 분수인, 분석적으로 결정된 계산된 파라미터이다. 바람직하게는, 평균 올리고머화도 p 가 1.1 내지 3.0 범위인 APG 가 사용된다. 이와 관련하여, 평균 올리고머화도가 2 미만이고, 바람직하게는 1.1 내지 1.8 범위 및 특히 1.2 내지 1.7 범위인 APG 가 특히 바람직하다.
- [0080] 본원에서 평균 올리고머화도는, 단행본 [K. Hill, W. von Rybinski, G. Stoll "알킬 폴리글리코사이드: 기술, 특성 및 적용 (Alkyl Polyglycosides: Technology, Properties and Applications)" (VCH-Verlagsgesellschaft, 1996)] 의 섹션 "중합도 (Degree of polymerization)" (책의 11-12 페이지 참조) 에 정의된 의미에서 이해되어야 한다: 거기에, "알코올기에 연결된 글리코오스 단위의 평균 수는 (평균) 중합도 (DP) 로서 기재된다" 라고 쓰여있다. 설명을 위한 도 2 에, DP 가 1.3 인 AOPG 의 도데실 글리코사이드 올리고머의 전형적인 분포가 기재되어 있고, 평균 DP 는 또한 상응하는 수학 공식으로 기재되어 있다.
- [0081] 라디칼 R^{10} 은 바람직하게는 탄소수 4 내지 11 및 바람직하게는 탄소수 8 내지 10 의 1차 알코올에서 유래된다. 적합한 라디칼 R^{10} 의 전형적인 예는, 부틸, 헥실, 옥틸, 데실, 운데실, 도데실 및 미리스틸이다. 이는, 예를 들어 공업용 등급 지방산 메틸 에스테르의 수소첨가에서 또는 로엘렌 (Roelen) 옥소 합성 동안 알데히드의 수소첨가 과정에서 획득되는 바와 같은, 포화된 지방 알코올인 부탄올-1, 카프로 알코올 (헥산올-1), 카프릴 알코올 (옥탄올-1), 카프르 알코올 (데칸올-1), 운데칸올-1, 라우릴 알코올 (도데칸올-1) 및 미리스틸 알코올 (테트라데칸올-1) 에서 유래된다.
- [0082] 글루코오스에서 유래되고, 라디칼 R^{10} 이 탄소수 8 내지 12 의 포화된 알킬 라디칼이며, 평균 올리고머화도가 1.1 내지 3 범위 및 특히 1.2 내지 1.8 범위 및 특히 바람직하게는 1.2 내지 1.7 범위인 APG 가 특히 바람직하다. 이러한 APG 는, 예를 들어 당, 특히 글루코오스를, 산 촉매반응 하에서, 지방 알코올 혼합물과 반응시킴으로써 제조될 수 있으며, 사용되는 지방산 혼합물은 바람직하게는 공업용 등급 C_{8-18} -코코넛 지방 알코올의 증류 분리 동안 생성되는 전증류분 (forerunning) 으로, 이는 주로 옥탄올-1 및 데칸올-1, 및 또한 소량의 도데칸올-1 을 포함한다.
- [0083] 본 발명의 맥락에서 **아미도알킬베타인**으로 언급되는 **화합물 (H2)** 는, 화학식 (IIb) 를 갖는다:
- [0084]
$$R^{11}-CO-NH-(CH_2)_y-N^+(CH_3)_2-CH_2-COO^- \quad (IIb)$$
- [0085] [식 중, 라디칼 R^{11} 은 탄소수 7 내지 19 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 지수 y 는 2 내지 4 범위의 정수임]. 또한 - 상기 제시된 바와 마찬가지로 - 라디칼 R^2 가 알케닐 라디칼인 화합물 (H2) 의 비율이 - 수성 계면활성제 조성물 중 화합물 (H2) 의 총량을 기준으로 - 3 중량% 이하라는 조건이 적용될 수 있다.
- [0086] 화합물 (H2) 는 당업자에게 적절하게 공지된 모든 방법에 의해 제조될 수 있다.
- [0087] 하나의 구현예에서, 화학식 (IIb) 중 지수 y 는 숫자 3 이다.
- [0088] 하나의 구현예에서, 화학식 (IIb) 중 R^{11} 은 탄소수 11 내지 17 의 포화된 선형 라디칼이고, 화합물 (H2) 에 관하여, 라디칼 R^{11} 이 운데실 또는 트리데실 라디칼인 화합물 (H2) 의 비율은 - 화합물 (H2) 의 총량을 기준으로 - 60 중량% 이상이다.
- [0089] 바람직한 조성물에서, 화합물 (H2) 는 코카미도프로필베타인이다. 이는, 전형적으로 2 단계로 제조되는 산업적으로 이용 가능한 생성물이다:
- [0090] 먼저, 코코넛 지방산을 디메틸아미노프로필아민 (DMAPA, 화학식 $NH_2-(CH_2)_3-N(CH_3)_2$) 과 반응시킨다. 여기서 획득되는 아미드를, 제 2 단계에서, NaOH 존재 하에서 소듐 클로로아세테이트 (화학식 $Cl-CH_2-COONa$) 와 반응시키면, NaCl 의 제거와 함께 4차화가 일어난다. 이와 같이 획득 가능한 공업용 등급의 생성물은, 코카미도프로필베타인 및 NaCl 이외에, 제조의 결과, 부산물로서, 글리세롤, 부분 글리세리드, 글리콜산, 디글리콜산 및

유리 지방산을 포함할 수 있는데, 적합한 제조 조건의 선택을 통해 이러한 부산물의 함량을 감소시킬 수 있다.

목적하는 경우, 이러한 부산물은 또한 부가적인 정제 단계에 의해, 이의 함량이 추가로 감소되거나 또는 완전히 제거될 수 있다.

[0091] 본 발명의 맥락에서 **N-아실글루탐산 화합물**로 언급되는 화합물 (H3) 은, 화학식 (IIc) 를 갖는다:

[0092]
$$M^3OOC-CH_2-CH_2-CH(NH-CO-R^{12})-COOM^4 \quad (IIc)$$

[0093] [식 중, 라디칼 R^{12} 는 탄소수 7 내지 19 의 선형 또는 분지형 알킬 또는 알케닐 라디칼이고, 라디칼 M^3 및 M^4 는 - 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. 하나의 구현예에서, 라디칼 M^3 및 M^4 는 H 및 Na 를 포함하는 군으로부터 선택된다.

[0094] 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.

[0095] **조성물의 용도**

[0096] 본 발명의 추가의 주제는, 미용 제품, 및 또한 세제 및 세정제를 위한 상기 언급된 조성물의 용도이다.

[0097] 미용 제품에 관하여, 특히 모발 샴푸, 샤워 젤, 비누, 합성 세제, 세척용 페이스트, 세척용 로션, 스크럽 제제 (scrub preparation), 폼 바쓰, 오일 바쓰, 샤워 바쓰, 면도용 폼, 면도용 로션, 면도용 크림 및 치아 케어 제 품 (예를 들어 치약, 구강세정제 등) 의 형태로 존재하는 것들이 특히 바람직하다.

[0098] 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.