

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES  
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum  
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum  
13. November 2008 (13.11.2008)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer  
**WO 2008/135187 A1**

(51) Internationale Patentklassifikation:

A61K 8/02 (2006.01) A61Q 19/00 (2006.01)  
A61K 8/37 (2006.01) C07C 69/24 (2006.01)

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2008/003399

(22) Internationales Anmeldedatum:

26. April 2008 (26.04.2008)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:

07009138.4 7. Mai 2007 (07.05.2007) EP

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von  
US): **COGNIS IP MANAGEMENT GMBH** [DE/DE];  
Henkelstr. 67, 40589 Düsseldorf (DE).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): **DIERKER, Markus**  
[DE/DE]; Benrodestrasse 129, 40597 Düsseldorf (DE).

(74) Gemeinsamer Vertreter: **COGNIS IP MANAGE-  
MENT GMBH**; Postfach 13 01 64, 40551 Düsseldorf  
(DE).

(81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für  
jede verfügbare nationale Schutzrechtsart):

AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SV, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für  
jede verfügbare regionale Schutzrechtsart):

ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MT, NL, NO, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Erklärung gemäß Regel 4.17:

— Erfindererklärung (Regel 4.17 Ziffer iv)

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

(54) Title: COSMETIC COMPOSITIONS COMPRISING ESTERS BASED ON 2-PROPYLHEPTANOIC ACID

(54) Bezeichnung: KOSMETISCHE ZUSAMMENSETZUNGEN ENTHALTEND ESTER AUF BASIS VON 2-PROPYLHEPTANSÄURE

(57) Abstract: The invention relates to esters of 2-propylheptanoic acid and also to the use of esters of 2-propylheptanoic acid in cosmetic and/or pharmaceutical preparations. The compounds are characterized by the particularly lightweight sensation thereof.

(57) Zusammenfassung: Gegenstand der Erfindung sind Ester der 2-Propylheptansäure sowie die Verwendung von Estern der 2-Propylheptansäure in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen. Die Verbindungen zeichnen sich durch ihre besonders leichte Sensorik aus.



WO 2008/135187 A1

## **Kosmetische Zusammensetzungen enthaltend Ester auf Basis von 2-Propylheptansäure**

### **Gebiet der Erfindung**

Die Erfindung betrifft Ester der 2-Propylheptansäure sowie deren Verwendung in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen sowie Verfahren zu deren Herstellung.

### **Stand der Technik**

Im Bereich kosmetischer Emulsionen für die Haut- und Haarpflege werden vom Verbraucher eine Vielzahl von Anforderungen gestellt: Abgesehen von den reinigenden und pflegenden Effekten, die den Anwendungszweck bestimmen, wird Wert auf so unterschiedliche Parameter wie höchstmögliche dermatologische Verträglichkeit, gute rückfettende Eigenschaften, elegantes Erscheinungsbild, optimaler sensorischer Eindruck und Lagerstabilität gelegt.

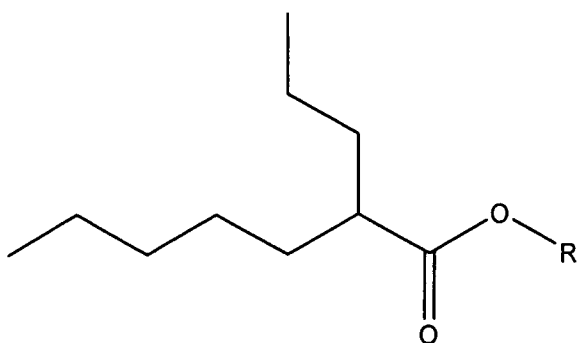
Zubereitungen, die zur Reinigung und Pflege der menschlichen Haut und der Haare eingesetzt werden, enthalten in der Regel neben einer Reihe von oberflächenaktiven Substanzen, vor allem Ölkörper und Wasser. Als Ölkörper/Emollients werden beispielsweise Kohlenwasserstoffe, Esteröle sowie pflanzliche und tierische Öle/Fette/Wachse eingesetzt. Um die hohen Anforderungen des Marktes bezüglich sensorischer Eigenschaften und optimaler dermatologischer Verträglichkeit zu erfüllen, werden kontinuierlich neue Ölkörper und Emulgator-Gemische entwickelt und getestet. Die Verwendung von Esterölen in der Kosmetik ist seit langem bekannt. Wegen ihrer Bedeutung werden auch kontinuierlich neue Verfahren zu deren Herstellung entwickelt. Insbesondere verzweigte Esteröle vermitteln ein „leichteres“ Hautgefühl und werden daher intensiv untersucht. Der Einsatz von 2-Methyl-1,3-propanediolmonoestern ist beispielsweise Gegenstand der **DE 101 60 681**, der Einsatz von 2-Methyl-1,3-propanedioldiestern wird in der **DE 101 60 682** beschrieben.

Aufgabe der vorliegenden Erfindung war es, neue, vorzugsweise bei 20 °C flüssige Esteröle für kosmetische und/oder pharmazeutische Applikationen zur Verfügung zu stellen, die

bezüglich der sensorischen Eigenschaften (Leichtigkeit, „nicht-fettendes Hautgefühl“, Weichheit, Spreitvermögen, Absorption, Verteilbarkeit, Öligkeit) über ein verbessertes Profil verfügen und in eine Vielzahl kosmetischer Formulierungen einarbeitbar sind. Hierbei waren auch die Hydrolysestabilität der Ester sowie die Formulierbarkeit der Ester bei niedrigem pH-Wert von Interesse. Weiterhin sollten die Ester sowohl in W/O als auch in O/W Formulierungen einarbeitbar sein. Weiterhin sollten die Ester insbesondere mit kristallinen UV-Filtern, Pigmenten, Antiperspirantien Salzen sowie Silikonen kompatibel sein. Weiterhin sollten die Ester oxidationsstabil sein. Überraschenderweise wurde gefunden, dass Ester der 2-Propylheptansäure zu sensorisch leichten Produkten führen. **DE 103 05 562** beschreibt Estergemische von linearen Carbonsäuren mit Alkoholen, welche als Polymeradditive eingesetzt werden können. **WO 2006/097235** beschreibt Ester von 2-Propylheptanol mit linearen oder verzweigten Carbonsäuren, so den Ester von 2-Propylheptanol mit 2-Propylheptansäure. **G. Schomberg, Journal of Chromatography, 1964, S. 157-177**, beschreibt auf Seite 165, Tabelle II, Eintrag 6 Methyl-2-Propylheptansäureester, dort als Methylester der Nonancarbonsäure-(4) bezeichnet. **JP 10-289441** (Sony Corp.) beschreibt auf Seite 4, Abschnitt 29, Tabelle 1, Eintrag 2 Nonadecyl-2-Propylheptansäureester. **JP 57 006790** (Canon KK) beschreibt auf Seite 486, Nr. 11 2-Hexyldecyl-2-Propylheptansäureester. Keines der drei letzt genannten Dokumente beschreibt kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitungen oder die Verwendung der genannten Verbindungen in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen. Die Aufgabe der vorliegenden Erfindung bestand darin, gegenüber dem Stand der Technik verbesserte Ester bereit zu stellen.

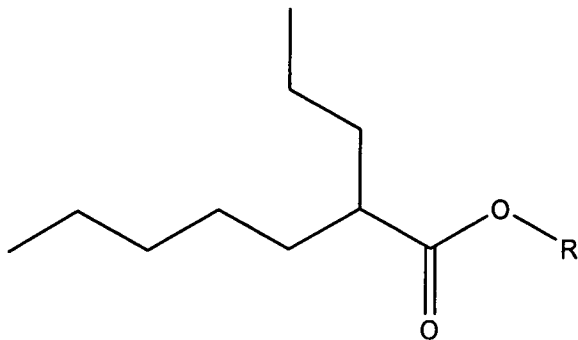
### Beschreibung der Erfindung

Gegenstand der Erfindung sind Ester der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester, Methyl-2-Propylheptansäureester, Nonadecyl-2-Propylheptansäureester und 2-Hexyldecyl-2-Propylheptansäureester.

Besonders bevorzugt sind Ester der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester, 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester, 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester, Methyl-2-Propylheptansäureester, Nonadecyl-2-Propylheptansäureester und 2-Hexyldecyl-2-Propylheptansäureester.

Überraschenderweise sind Ester von 2-Propylheptansäure besonders gut für kosmetische Formulierungen geeignet, insbesondere für Formulierungen, bei denen es auf ein „leichtes“ Hautgefühl ankommt. Die Ester lassen sich sehr gut in verschiedene Formulierungen einarbeiten. Je nach Kettenlänge, Verzweigung und Anzahl der Doppelbindungen erhält man flüssige Substanzgemische, die sich entsprechend als Ölkörper oder Konsistenzgeber, welche Körper in Emulsionen geben, eignen. Die Ester zeigen eine hohe Stabilität gegenüber Oxidation. Erfindungsgemäß kann ein einziger 2-Propylheptansäure-Ester eingesetzt werden oder ein beliebiges Gemisch verschiedener Ester.

Eine bevorzugte Ausführungsform der Erfindung betrifft Ester deren Gesamt C Zahl größer gleich 14, insbesondere größer 14, insbesondere größer gleich 16 beträgt, insbesondere größer 16 beträgt.

Eine bevorzugte Ausführungsform der Erfindung betrifft Ester deren Gesamt C Zahl kleiner gleich 24, insbesondere kleiner 24, insbesondere kleiner gleich 22, insbesondere kleiner 22 beträgt.

Der Alkylest R in Formel (I) kann ein gesättigter oder ungesättigter, linearer oder verzweigter, aliphatischer oder aromatischer Rest sein. In einer Ausführungsform der Erfindung ist er mit bis zu 3 OH-Gruppen substituiert, insbesondere mit bis zu 2-OH Gruppen, vorzugsweise mit einer OH-Gruppe. In einer Ausführungsform steht R für einen Alkylrest mit 1 bis 24, insbesondere 2 bis 20, vorzugsweise 6 bis 18 C Atomen, insbesondere 6 bis 12 C-Atome.

Als Rest R können genannt werden Alkylgruppen mit einer C Zahl von 1 bis 8, wie beispielsweise Methyl, Ethyl, Propyl-, iso-Propyl [= 1-Methylethyl-], Propenyl-, Isobutyl [2-Methylpropyl], sec-Butyl [=1-Methylpropyl], tert-Butyl [1,1-Dimethylethyl], But-2-enyl, But-3-enyl, But-1-enyl, n-Pentyl, 1-Methylbutyl-, 2-Methylbutyl-, 3-Methylbutyl, 1-Ethylpropyl, 1,1-Dimethylpropyl, 1,2-Dimethylpropyl, 2,2-Dimethylpropyl, 1-Pentenyl-, 2-Pentenyl-, 3-Pentenyl-, 4-Pentenyl, Hexyl-, 1-Methylpentyl-, 2-Methylpentyl, 3-Methylpentyl, 4-Methylpentyl, 1-Ethylbutyl-, 2-Ethylbutyl-, 3-Ethylbutyl-, 1-Hexenyl, 2-Hexenyl, 3-Hexenyl, 4-Hexenyl-, 5-Hexenyl, Heptyl, 1-Methylhexyl-, 2-Methylhexyl-, 3-Methylhexyl-, 4-Methylhexyl-, 5-Methylhexyl, 1-Heptenyl, 2-Heptenyl, 3-Heptenyl-, 4-Heptenyl-, 5-Heptenyl, 6-Heptenyl-, n-Octyl, 2-Ethylhexyl-, 1,1,3,3-Tetramethylbutyl-.

Als Rest R können genannt werden Alkylgruppen mit einer C Zahl von 9 bis 22, wie beispielsweise Nonyl-, Isononyl-, Decyl-, Iso-Decyl-, Undecyl-, Undecenyl-, Dodecyl-, Tridecyl-, Isotridecyl-, Tetradecyl-, Pentadecyl-, Hexadecyl-, Octadecyl-, Octadecenyl-, Eicosanoyl-, Behenyl-Rest.

Der Rest R kann aromatische Reste, wie Phenyl-, methylsubstituiertes Phenyl-, wie beispielsweise Toly-, hydroxysubstituiertes Phenyl-, wie beispielsweise 2-Hydroxy-Phenyl-, 3-Hydroxy-Phenyl-, Benzyl-, methylsubstituiertes Benzyl-, hydroxysubstituiertes Benzyl-, wie beispielsweise 2-Hydroxybenzyl- oder 3-Hydroxybenzyl- darstellen.

Der Rest R kann mit bis zu 3-OH Gruppen substituiert sein, in einer bevorzugten Ausführungsform ist der Rest R ein Alkylrest mit einer OH Gruppe, wie beispielsweise

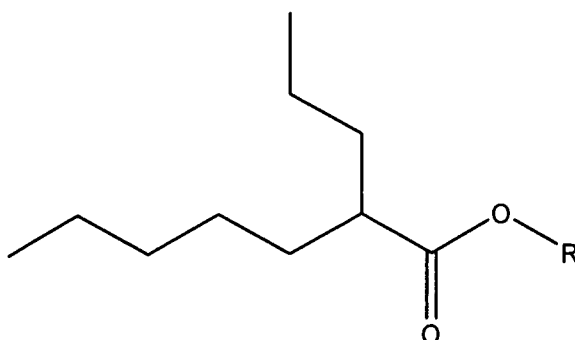
Hydroxy-Hexyl-, Hydroxyl-Octyl-, Hydroxy-Decyl-, Hydroxyl-Dodecyl-, 2,3-Dihydroxy-n-propyl (von Glycerin), 2-Hydroxylethyl- (Ethylenglykol), 3-Hydroxy-propyl-, 2-Hydroxypropyl- (von Propylenglykol), 2-Hydroxy-propyl-, 3-Hydroxy-propyl-, 4-Hydroxy-propyl-, 1-Methyl-2-Hydroxy-propyl-, 6-Hydroxy-hexyl-, 8-Hydroxy-octyl-, 10-Hydroxy-decyl-, 12-Hydroxydodecyl-, 14-Hydroxy-tetradecyl-, 2-Ethyl-2-hydroxymethyl-3-Hydroxy-propyl- (von Trimethylolpropan), 2,2-Bis(hydroxymethyl)-3-Hydroxypropyl- (von Pentaerythrit).

Als Rest R ist ebenfalls geeignet ein Alkylrest mit 36 C Atomen, der durch Umsetzung von 2-Propylheptansäure mit einem C36-Dimerdiol hergestellt werden können. C36-Dimerdiol bezeichnet alpha, omega-C36-Diole, die durch Dimerisierung von Oleylalkohol (=Octadec-9-en-1-ol) oder durch Hydrierung von Dimerfettsäure(estern) hergestellt werden können.

Besonders bevorzugt sind Ester ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus n-Hexyl-2-Propylheptansäureester, n-Heptyl-2-Propylheptansäureester, n-Octyl-2-Propylheptansäureester, n-Nonyl-2-Propylheptansäureester, n-Decyl-2-Propylheptansäureester, n-Undecyl-2-Propylheptansäureester, n-Dodecyl-2-Propylheptansäureester.

Die Erfindung umfasst sowohl einzelne Ester aus auch Mischungen von verschiedenen Estern.

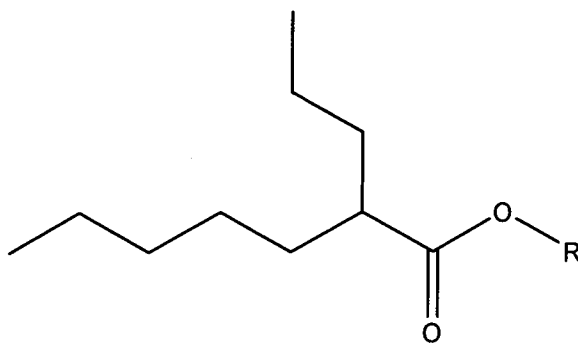
Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist die Verwendung von Estern der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester, in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen. Besonders bevorzugt ist die

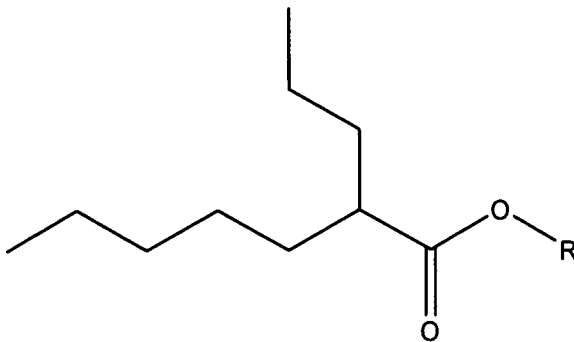
Verwendung dieser Ester, ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen. Besonders bevorzugt ist die Verwendung der Ester gemäß Anspruch 1, insbesondere der Ester gemäß Anspruch 1 ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen. Die Ester eignen sich insbesondere als Ölkörper in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen.

Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist die Verwendung Ester der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester zur Herstellung von kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen. Besonders bevorzugt ist die Verwendung dieser Ester, ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester zur Herstellung von kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen. Besonders bevorzugt ist die Verwendung der Ester gemäß Anspruch 1, insbesondere der Ester gemäß Anspruch 1 ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester zur Herstellung von kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen.

Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist insbesondere die Verwendung Ester der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen zur Benetzung oder Imprägnierung oder Beschichtung von Gebrauchs- und/oder Hygienetüchern, die zur Körperreinigung und/oder zur Körperpflege eingesetzt werden. Besonders bevorzugt ist diese Verwendung dieser Ester, ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester. Besonders bevorzugt ist diese Verwendung der Ester gemäß Anspruch 1, insbesondere der Ester gemäß Anspruch 1 ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester.

Gegenstand ist auch ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen Ester, wobei man eine Mischung enthaltend 2-Propylheptansäure und den entsprechenden Alkohol umsetzt.

Das erfindungsgemäße Verfahren umfasst ebenfalls die Herstellung von Estergemischen, bei dem man 2-Propylheptansäure zusammen mit den entsprechenden Alkoholgemischen umsetzt.

In einer bevorzugten Ausführungsform der Erfindung setzt man die Mischung enthaltend 2-Propylheptansäure und den entsprechenden Alkohol unter Zusatz eines Veresterungskatalysators um.

In einer bevorzugten Ausführungsform wird die Mischung enthaltend 2-Propylheptansäure und den entsprechenden Alkohol erhitzt, das entstehende Wasser kontinuierlich abgeführt und das Rohprodukt danach destilliert. Das Verfahren kann unter Zusatz eines Veresterungskatalysators, z.B. säurekatalytisch oder basenkatalytisch durchgeführt werden. In einer bevorzugten Ausführungsform wird das Verfahren ohne Zusatz von Lösungsmitteln durchgeführt, vorzugsweise mit Edukten, die möglichst wasserfrei sind. In einer bevorzugten



Ausführungsform des Verfahrens wird ein Zinn-Katalysator eingesetzt. Als Zinn-Katalysatoren geeignet sind beispielsweise Zinnoxalat (z. B. Fascat<sup>®</sup> 2001), Zinnoxid (SnO, Fascat<sup>®</sup> 2000) sowie Zinn-IV-Katalysatoren wie Dibutylzinndiacetat Fascat<sup>®</sup> 4200), Dibutylzinnoxid (Fascat<sup>®</sup> 4201), und Dibutylzinnlaurat (Fascat<sup>®</sup> 4202) oder Zinnoxid (SnO), die ehemals von Atofina und gegenwärtig von Arkema vermarktet werden.

Vorzugsweise wird die Veresterung bei Temperaturen zwischen 100 - 300 °C, insbesondere 200 – 250°C durchführt.

In einer weiteren Ausführungsform wird als Katalysator mindestens ein Enzym eingesetzt. Als Enzym eignen sich alle dem Fachmann bekannten Enzyme oder Enzymmischungen, welche in der Lage sind die Veresterung von Alkohol und Säure zu katalysieren, exemplarisch seinen genannt Lipasen, Acyltransferasen und Esterasen. Die enzymatisch katalysierte Veresterung wird üblicherweise bei Temperaturen von 20 bis 100 °C, vorzugsweise 40 bis 80 °C durchgeführt.

Die erfindungsgemäßen Ester können auch hergestellt werden, in dem man einen Alkylester von 2-Propylheptansäure (z.B. Methylester oder Butylester) und den entsprechenden Alkohol unter Zusatz eines Umesterungskatalysators umsetzt. Auch dieses Verfahren ist für die Herstellung von Estergemischen geeignet.

Bei einem solchen Verfahren wird die Mischung enthaltend den Alkylester von 2-Propylheptansäure und den entsprechenden Alkohol unter Zusatz des Veresterungskatalysators erhitzt, das entstehende Wasser kontinuierlich abgeführt und das Rohprodukt danach destilliert. In einer bevorzugten Ausführungsform wird das Verfahren ohne Zusatz von Lösungsmitteln durchgeführt, vorzugsweise mit Edukten, die möglichst wasserfrei sind. Vorzugsweise wird die Veresterung bei Temperaturen zwischen 100 - 300 °C, insbesondere 200 – 250°C durchführt. Als Umesterungskatalysator können alle dem Fachmann bekannten Umesterungskatalysatoren eingesetzt, werden, vorzugsweise wird als Umesterungskatalysator Natriummethylat oder Tetraalkyltitanat eingesetzt.

Als Katalysator kann auch mindestens ein Enzym eingesetzt werden. Als Enzym eignen sich alle dem Fachmann bekannten Enzyme oder Enzymmischungen, welche in der Lage sind die

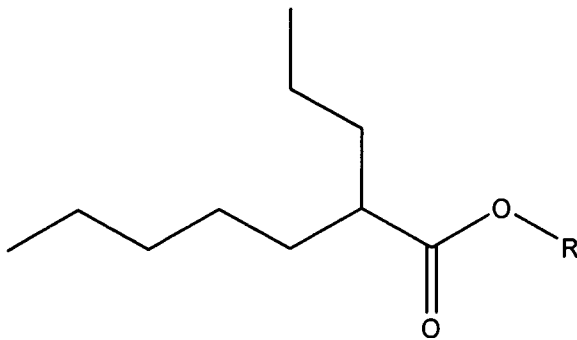
Umesterung von Alkohol und Säuremethylester zu katalysieren, exemplarisch seinen genannt Lipasen, Acyltransferasen und Esterasen. Die enzymatisch katalysierte Veresterung wird üblicherweise bei Temperaturen von 20 bis 100 °C, vorzugsweise 40 bis 80 °C durchgeführt.

### **Kosmetische/pharmazeutische Zubereitungen**

Die erfindungsgemäßen Ester erlauben die Herstellung stabiler kosmetischer und pharmazeutischer Emulsionen mit besonders leichtem Hautgefühl.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind daher kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitungen enthaltend

- (a) wenigstens einen Ester der allgemeinen Formel (I),

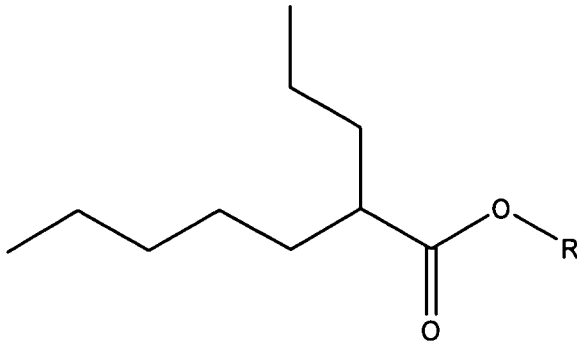


wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester,

- (b) wenigstens einen Emulgator (b-1) und/oder Tensid (b-2) und/oder Wachskomponente (b-3) und/oder Polymer (b-4) und/oder einen weiteren Ölkörper (b-5)

Bevorzugt sind kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitungen enthaltend

- (a) wenigstens einen Ester der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester, 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester,

- (b) wenigstens einen Emulgator (b-1) und/oder Tensid (b-2) und/oder Wachskomponente (b-3) und/oder Polymer (b-4) und/oder einen weiteren Ölkörper (b-5)

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitungen enthaltend

- (a) wenigstens einen Ester gemäß Anspruch 1  
 (b) wenigstens einen Emulgator (b-1) und/oder Tensid (b-2) und/oder Wachskomponente (b-3) und/oder Polymer (b-4) und/oder einen weiteren Ölkörper (b-5)

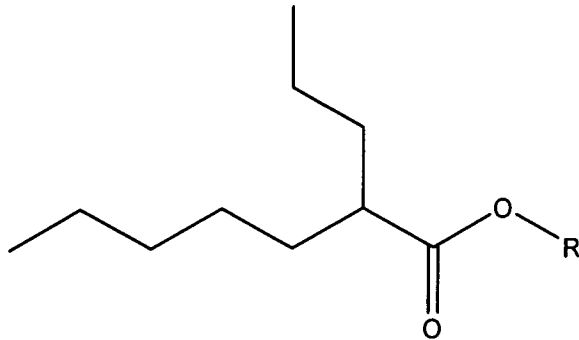
Bevorzugt sind kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitungen enthaltend

- (a) wenigstens einen Ester gemäß Anspruch 1, ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester.  
 (b) wenigstens einen Emulgator (b-1) und/oder Tensid (b-2) und/oder Wachskomponente (b-3) und/oder Polymer (b-4) und/oder einen weiteren Ölkörper (b-5)

Vorzugsweise enthalten die erfindungsgemäßen Zubereitungen 0,1 bis 80, insbesondere 0,5 bis 70, vorzugsweise 0,75 bis 60 Gew.-%, insbesondere 1 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 1 – 40 Gew.-% wenigstens eines Ester (a).

Ein weiterer Gegenstand der Erfindung sind kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitungen enthaltend

- a) 0,1 – 80 Gew.-%, insbesondere 0,1 bis 70, bevorzugt 0,1 bis 60, insbesondere 0,1 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 0,1 – 40 Gew.-% wenigstens eines Ester der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester, vorzugsweise ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester

- b) 0,1 – 20 Gew.-% Emulgator (b-1) und/oder Tensid (b-2) und/oder Wachskomponente (b-3) und/oder Polymer (b-4)  
 b-5) 0,1 – 40 Gew.-% weiterer Ölkörper und  
 c) 0 - 98 Gew.-% Wasser.

Ein weiterer Gegenstand der Erfindung sind kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitungen enthaltend

- a) 0,1 – 80 Gew.-%, insbesondere 0,1 bis 70, bevorzugt 0,1 bis 60, insbesondere 0,1 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 0,1 – 40 Gew.-% wenigstens eines Ester gemäß Anspruch 1, vorzugsweise eines Esters gemäß Anspruch 1, ausgenommen 2-Ethylbutyl-2-Propylheptansäureester und 2-Butyloctyl-2-Propylheptansäureester  
 b) 0,1 – 20 Gew.-% Emulgator (b-1) und/oder Tensid (b-2) und/oder Wachskomponente (b-3) und/oder Polymer (b-4)  
 b-5) 0,1 – 40 Gew.-% weiterer Ölkörper und  
 c) 0 - 98 Gew.-% Wasser.

Die erfindungsgemäßen Zubereitungen enthalten vorzugsweise mindestens 0,1, insbesondere mindestens 0,5, insbesondere mindestens 0,75, bevorzugt mindestens 1, bevorzugt mindestens 5 Gew.-% eines oder mehrerer Ester (a).

Alle Gew.-% Angaben beziehen sich auf Gew.-% bezogen auf die kosmetische und/oder pharmazeutische Zubereitung.

In einer Ausführungsform der Erfindung enthalten die Zubereitungen mindestens einen Ester ausgewählt aus der Gruppe bestehend n-Hexyl-2-Propylheptansäureester n-Heptyl-2-Propylheptansäureester, n-Octyl-2-Propylheptansäureester, n-Nonyl-2-Propylheptansäureester, n-Decyl-2-Propylheptansäureester, n-Undecyl-2-Propylheptansäureester, n-Dodecyl-2-Propylheptansäureester oder beliebige Gemische daraus.

Die erfindungsgemäßen Zubereitungen, die erfindungsgemäßen Zusammensetzungen sowie die Ester gemäß der Erfindung eignen sich als Basis in allen kosmetischen Mittel zur Körperpflege und -reinigung wie z.B. Körperöl, Babyöl, Körpermilch, Cremes, Lotionen, sprühbare Emulsionen, Sonnenschutzmittel, Antitranspirantien, Flüssig- und Stückseifen etc. eingearbeitet werden. Sie lassen sich auch in tensidhaltigen Formulierungen wie z.B. Schaum- und Duschbädern, Haarshampoos und Pflegespülungen einsetzen. Sie lassen sich als Pflegekomponente auf Tissues, Papiere, Wipes, Vlies-Produkte, Schwämme, Puffs, Pflaster und Bandagen applizieren, die ihren Einsatz im Bereich der Hygiene und Pflege finden (Feuchttücher zur Baby-Hygiene und Baby-Pflege, Reinigungstücher, Gesichtreinigungstücher, Hautpflegetücher, Pflegetücher mit Wirkstoffen gegen die Hautalterung, Wipes mit Sonnenschutzformulierungen und Insektenrepellentien sowie Wipes zur dekorativen Kosmetik oder zum After-Sun-Treatment, Toiletten-Feuchttücher, Antitranspirant-Wipes, Windeln, Taschentücher, Wet Wipes, Hygieneprodukte, Selbstbräunungs Wipes). Sie lassen sich u.a. auch in Zubereitungen zur Haarpflege, Haarreinigung oder Haarfärbung einsetzen.

Je nach Applikationszweck enthalten die kosmetischen Formulierungen eine Reihe weiterer Hilfs- und Zusatzstoffe, wie beispielsweise Tenside, weitere Ölkörper, Emulgatoren, Perlglanzwachse, Konsistenzgeber, Verdickungsmittel, Überfettungsmittel, Stabilisatoren, Polymere, Fette, Wachse, Lecithine, Phospholipide, biogene Wirkstoffe, UV-

Lichtschutzfaktoren, Antioxidantien, Deodorantien, Antitranspirantien, Antischuppenmittel, Filmbildner, Quellmittel, Insektenrepellentien, Selbstbräuner, Tyrosinaseinhibitoren (Depigmentierungsmittel), Hydrotrope, Solubilisatoren, Konservierungsmittel, Parfümöle, Farbstoffe etc., die nachstehend exemplarisch aufgelistet sind.

#### Emulgator b-1)

In einer Ausführungsform der Erfindung enthalten die erfindungsgemäßen Zubereitungen mindestens einen Emulgator. Die erfindungsgemäßen Zusammensetzungen enthalten den/die Emulgator(en) in einer Menge von 0 bis 40 Gew.-%, vorzugsweise 0,1 bis 20 Gew.-% vorzugsweise 0,1 bis 15 Gew.-% und insbesondere 0,1 bis 10 Gew.-% bezogen auf das Gesamtgewicht der Zusammensetzung.

In einer Ausführungsform der Erfindung enthält die erfindungsgemäße Zubereitung mehr als einen Emulgator. Der Fachmann setzt in Abhängigkeit der übrigen Komponenten übliche Emulgator Systeme (wie z.B. Emulgator und Co-Emulgator) ein.

#### Nicht-ionische Emulgatoren

Zur Gruppe der nicht-ionischen Emulgatoren gehören beispielsweise:

- (1) Anlagerungsprodukte von 2 bis 50 Mol Ethylenoxid und/oder 1 bis 20 Mol Propylenoxid an lineare Fettalkohole mit 8 bis 40 C-Atomen, an Fettsäuren mit 12 bis 40 C-Atomen und an Alkylphenole mit 8 bis 15 C-Atomen in der Alkylgruppe.
- (2) C<sub>12</sub>-C<sub>18</sub>-Fettsäuremono- und -diester von Anlagerungsprodukten von 1 bis 50 Mol Ethylenoxid an Glycerin.
- (3) Sorbitanmono- und -diester von gesättigten und ungesättigten Fettsäuren mit 6 bis 22 Kohlenstoffatomen und deren Ethylenoxidanlagerungsprodukte.
- (4) Alkylmono- und -oligoglycoside mit 8 bis 22 Kohlenstoffatomen im Alkylrest und deren ethoxylierte Analoga.
- (5) Anlagerungsprodukte von 7 bis 60 Mol Ethylenoxid an Ricinusöl und/oder gehärtetes Ricinusöl.

- (6) Polyol- und insbesondere Polyglycerinester, wie z. B. Polyolpoly-12-hydroxystearate, Polyglycerinpolyricinoleat, Polyglycerin-diisostearat oder Polyglycerin-dimerat. Ebenfalls geeignet sind Gemische von Verbindungen aus mehreren dieser Substanzklassen.
- (7) Anlagerungsprodukte von 2 bis 15 Mol Ethylenoxid an Ricinusöl und/oder gehärtetes Ricinusöl.
- (8) Partialester auf Basis linearer, verzweigter, ungesättigter bzw. gesättigter C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>-Fettsäuren, Ricinolsäure sowie 12-Hydroxystearinsäure und Polyglycerin, Pentaerythrit, Dipentaerythrit, Zuckeralkohole (z. B. Sorbit), Alkylglucoside (z. B. Methylglucosid, Butylglucosid, Laurylglucosid) sowie Polyglucoside (z. B. Cellulose), oder Mischester wie z. B. Glycerylstearatcitrat und Glycerylstearatlactat.
- (9) Polysiloxan-Polyalkyl-Polyether-Copolymere bzw. entsprechende Derivate.
- (10) Mischester aus Pentaerythrit, Fettsäuren, Citronensäure und Fettalkohol und/oder Mischester von Fettsäuren mit 6 bis 22 Kohlenstoffatomen, Methylglucose und Polyolen, vorzugsweise Glycerin oder Polyglycerin.

Die Anlagerungsprodukte von Ethylenoxid und/oder von Propylenoxid an Fettalkohole, Fettsäuren, Alkylphenole, Glycerinmono- und -diester sowie Sorbitanmono- und -diester von Fettsäuren oder an Ricinusöl stellen bekannte, im Handel erhältliche Produkte dar. Es handelt sich dabei um Homologengemische, deren mittlerer Alkoxyierungsgrad dem Verhältnis der Stoffmengen von Ethylenoxid und/oder Propylenoxid und Substrat, mit denen die Anlagerungsreaktion durchgeführt wird, entspricht. Je nach Ethoxyierungsgrad handelt es sich um W/O- oder O/W-Emulgatoren. C<sub>12/18</sub>-Fettsäuremono- und -diester von Anlagerungsprodukten von Ethylenoxid an Glycerin sind als Rückfettungsmittel für kosmetische Zubereitungen bekannt.

Erfindungsgemäß besonders gut geeignete und milde Emulgatoren sind Polyolpoly-12-hydroxystearate und Abmischungen davon, welche beispielsweise unter den Marken "Dehymuls® PGPH" (W/O-Emulgator) oder "Eumulgin® VL 75" (Abmischung mit Coco Glucosides im Gewichtsverhältnis 1:1, O/W-Emulgator) oder Dehymuls® SBL (W/O-Emulgator) von der Cognis Deutschland GmbH vertrieben werden. In diesem Zusammenhang sei insbesondere auf das Europäische Patent **EP 766 661 B1** verwiesen. Die Polyolkomponente dieser Emulgatoren kann sich von Stoffen ableiten, die über mindestens zwei,

vorzugsweise 3 bis 12 und insbesondere 3 bis 8 Hydroxylgruppen und 2 bis 12 Kohlenstoffatome verfügen.

Als lipophile W/O-Emulgatoren eignen sich prinzipiell Emulgatoren mit einem HLB-Wert von 1 bis 8, die in zahlreichen Tabellenwerken zusammengefaßt und dem Fachmann bekannt sind. Einige dieser Emulgatoren sind beispielsweise in **Kirk-Othmer, "Encyclopedia of Chemical Technology", 3. Aufl., 1979, Band 8, Seite 913**, aufgelistet. Für ethoxylierte Produkte lässt sich der HLB-Wert auch nach folgender Formel berechnen:  $HLB = (100 - L) : 5$ , wobei L der Gewichtsanteil der lipophilen Gruppen, d. h. der Fettalkyl- oder Fettacylgruppen in Gewichtsprozent, in den Ethylenoxidaddukten ist.

Besonders vorteilhaft aus der Gruppe der W/O-Emulgatoren sind Partialester von Polyolen, insbesondere von C<sub>4</sub>-C<sub>6</sub>-Polyolen, wie beispielsweise Partialester des Pentaerythrits oder Zuckerestern, z. B. Saccharosedistearat, Sorbitanmonoistearat, Sorbitansesquiistearat, Sorbitandiistearat, Sorbitantriistearat, Sorbitanmonooleat, Sorbitansesquioleat, Sorbitandioleat, Sorbitantrioleat, Sorbitanmonoerucat, Sorbitansesquierucat, Sorbitandierucat, Sorbitantrierucat, Sorbitanmonoricinoleat, Sorbitansesquiricinoleat, Sorbitandiricinoleat, Sorbitantriricinoleat, Sorbitanmonohydroxystearat, Sorbitansesquihydroxystearat, Sorbitandihydroxystearat, Sorbitantrihydroxystearat, Sorbitanmonotartrat, Sorbitansesquitartrat, Sorbitanditartrat, Sorbitantritartrat, Sorbitanmonocitrat, Sorbitansesquicitrat, Sorbitandicitrat, Sorbitantricitrat, Sorbitanmonomaleat, Sorbitansesquimaleat, Sorbitandimaleat, Sorbitantrimaleat sowie deren technische Gemische. Als Emulgatoren geeignet sind auch Anlagerungsprodukte von 1 bis 30, vorzugsweise 5 bis 10 Mol Ethylenoxid an die genannten Sorbitanester.

Je nach Formulierung kann es vorteilhaft sein, zusätzlich wenigstens einen Emulgator aus der Gruppe nicht-ionischer O/W-Emulgatoren (HLB-Wert: 8 – 18) und/oder Solubilisatoren einzusetzen. Hierbei handelt es sich beispielsweise um die bereits einleitend erwähnten Ethylenoxid-Addukte mit einem entsprechend hohen Ethoxylierungsgrad, z. B. 10 - 20 Ethylenoxid-Einheiten für O/W-Emulgatoren und 20 – 40 Ethylenoxid-Einheiten für sogenannte Solubilisatoren. Erfindungsgemäß besonders vorteilhaft als O/W-Emulgatoren sind Cetareth-12 und PEG-20 Stearat. Als Solubilisatoren bevorzugt geeignet sind Eumulgin® HRE 40 (INCI: PEG-40 Hydrogenated Castor Oil), Eumulgin® HRE 60 (INCI:



PEG-60 Hydrogenated Castor Oil), Eumulgin® L (INCI: PPG-1-PEG-9 Laurylglycolether), sowie Eumulgin® SML 20 (INCI: Polysorbat-20).

Nicht-ionische Emulgatoren aus der Gruppe der Alkyloligoglycoside sind besonders hautfreundlich und daher bevorzugt als O/W-Emulgatoren geeignet. C<sub>8</sub>-C<sub>22</sub>-Alkylmono- und -oligoglycoside, ihre Herstellung und ihre Verwendung sind aus dem Stand der Technik bekannt. Ihre Herstellung erfolgt insbesondere durch Umsetzung von Glucose oder Oligosacchariden mit primären Alkoholen mit 8 bis 22 C-Atomen. Bezüglich des Glycosidrestes gilt, dass sowohl Monoglycoside, bei denen ein zyklischer Zuckerrest glycosidisch an den Fettalkohol gebunden ist, als auch oligomere Glycoside mit einem Oligomerisationsgrad bis vorzugsweise etwa 8 geeignet sind. Der Oligomerisierungsgrad ist dabei ein statistischer Mittelwert, dem eine für solche technischen Produkte übliche Homologenverteilung zugrunde liegt. Produkte, die unter der Bezeichnung Plantacare® zur Verfügung stehen, enthalten eine glucosidisch gebundene C<sub>8</sub>-C<sub>16</sub>-Alkylgruppe an einem Oligoglucosidrest, dessen mittlerer Oligomerisationsgrad bei 1 bis 2 liegt. Auch die vom Glucamin abgeleiteten Acylglucamide sind als nicht-ionische Emulgatoren geeignet. Erfindungsgemäß bevorzugt ist ein Produkt, das unter der Bezeichnung Emulgade® PL 68/50 von der Cognis Deutschland GmbH vertrieben und ein 1:1-Gemisch aus Alkylpolyglucosiden und Fettalkoholen darstellt. Erfindungsgemäß vorteilhaft einsetzbar ist auch ein Gemisch aus Lauryl Glucoside, Polyglyceryl-2-Dipolyhydroxystearate, Glycerin und Wasser, das unter der Bezeichnung Eumulgin® VL 75 im Handel ist.

Als Emulgatoren kommen weiterhin Substanzen, wie Lecithine und Phospholipide in Frage. Als Beispiele für natürliche Lecithine seien die Kepheline genannt, die auch als Phosphatidsäuren bezeichnet werden und Derivate der 1,2-Diacyl-sn-glycerin-3-phosphorsäuren darstellen. Dem gegenüber versteht man unter Phospholipiden gewöhnlich Mono- und vorzugsweise Diester der Phosphorsäure mit Glycerin (Glycerinphosphate), die allgemein zu den Fetten gerechnet werden. Daneben kommen auch Sphingosine bzw. Sphingolipide in Frage.

#### Tenside b-2)

In einer Ausführungsform der Erfindung enthalten die erfindungsgemäßen Zubereitungen mindestens ein Tensid. Als oberflächenaktive Stoffe können anionische, nichtionische,

kationische und/oder amphotere bzw. zwitterionische Tenside enthalten sein. In tensidhaltigen kosmetischen Zubereitungen, wie beispielsweise Duschgelen, Schaumbädern, Shampoos etc. ist vorzugsweise wenigstens ein anionisches Tensid enthalten.

Die erfindungsgemäßen Zusammensetzungen enthalten den/die Tenside in einer Menge von 0 bis 40 Gew.-%, vorzugsweise 0 bis 20 Gew.-%, vorzugsweise 0,1 bis 15 Gew.-% und insbesondere 0,1 bis 10 Gew.-% bezogen auf das Gesamtgewicht der Zusammensetzung.

Typische Beispiele für **nichtionische Tenside** sind Fettalkoholpolyglycolether, Alkylphenolpolyglycolether, Fettsäurepolyglycolester, Fettsäureamidpolyglycolether, Fettamin-polyglycolether, alkoxylierte Triglyceride, Mischether bzw. Mischformale, gegebenenfalls partiell oxidierte Alk(en)yloligoglykoside bzw. Glucuronsäurederivate, Fettsäure-N-alkylglucamide, Proteinhydrolysate (insbesondere pflanzliche Produkte auf Weizenbasis), Polyolfettsäureester, Zuckerester, Sorbitanester, Polysorbate und Aminoxide. Sofern die nichtionischen Tenside Polyglycoletherketten enthalten, können diese eine konventionelle, vorzugsweise jedoch eine eingeeengte Homologenverteilung aufweisen.

Als **zwitterionische Tenside** werden solche oberflächenaktiven Verbindungen bezeichnet, die im Molekül mindestens eine quartäre Ammoniumgruppe und mindestens eine  $\text{-COO}^{(-)}$  - oder  $\text{-SO}_3^{(-)}$  -Gruppe tragen. Besonders geeignete zwitterionische Tenside sind die so genannten Betaine wie die N-Alkyl-N,N-dimethylammoniumglycinate, beispielsweise das Kokosalkyldimethylammoniumglycinat, N-Acyl-aminopropyl-N,N-dimethylammoniumglycinate, beispielsweise das Kokosacylaminopropyldimethylammoniumglycinat, und 2-Alkyl-3-carboxymethyl-3-hydroxyethylimidazolin mit jeweils 8 bis 18 C-Atomen in der Alkyl- oder Acylgruppe sowie das Kokosacylaminoethylhydroxyethylcarboxymethylglycinat. Ein bevorzugtes zwitterionisches Tensid ist das unter der INCI-Bezeichnung Cocamidopropyl Betaine bekannte Fettsäureamid-Derivat.

Ebenfalls, insbesondere als Co-Tenside geeignet, sind ampholytische Tenside. Unter ampholytischen Tensiden werden solche oberflächenaktiven Verbindungen verstanden, die außer einer  $\text{C}_8\text{-C}_{18}$ -Alkyl- oder Acylgruppe im Molekül mindestens eine freie Aminogruppe und mindestens eine  $\text{-COOH}$ - oder  $\text{-SO}_3\text{H}$ -Gruppe enthalten und zur Ausbildung innerer Salze

befähigt sind. Beispiele für geeignete ampholytische Tenside sind N-Alkylglycine, N-Alkylpropionsäuren, N-Alkylaminobuttersäuren, N-Alkyliminodipropionsäuren, N-Hydroxyethyl-N-alkylamidopropylglycine, N-Alkyltaurine, N-Alkylsarcosine, 2-Alkylaminopropionsäuren und Alkylaminoessigsäuren mit jeweils etwa 8 bis 18 C-Atomen in der Alkylgruppe. Besonders bevorzugte ampholytische Tenside sind das N-Kokosalkylaminopropionat, das Kokosacylaminoethylaminopropionat und das C<sub>12-18</sub>-Acylsarcosin.

**Anionische Tenside** sind gekennzeichnet durch eine wasserlöslich machende, anionische Gruppe wie z. B. eine Carboxylat-, Sulfat-, Sulfonat- oder Phosphat-Gruppe und einen lipophilen Rest. Hautverträgliche anionische Tenside sind dem Fachmann in großer Zahl aus einschlägigen Handbüchern bekannt und im Handel erhältlich. Es handelt sich dabei insbesondere um Alkylsulfate in Form ihrer Alkali-, Ammonium- oder Alkanolammoniumsalze, Alkylethersulfate, Alkylethercarboxylate, Acylisethionate, Acylsarkosinate, Acyltaurine mit linearen Alkyl- oder Acylgruppen mit 12 bis 18 C-Atomen sowie Sulfosuccinate und Acylglutamate in Form ihrer Alkali- oder Ammoniumsalze.

Als **kationische Tenside** sind insbesondere quartäre Ammoniumverbindungen verwendbar. Bevorzugt sind Ammoniumhalogenide, insbesondere Chloride und Bromide, wie Alkyltrimethylammoniumchloride, Dialkyldimethylammoniumchloride und Trialkylmethylammoniumchloride, z. B. Cetyltrimethylammoniumchlorid, Stearyltrimethylammoniumchlorid, Distearyltrimethylammoniumchlorid, Lauryldimethylammoniumchlorid, Lauryldimethylbenzylammoniumchlorid und Tricetylmethylammoniumchlorid. Weiterhin können die sehr gut biologisch abbaubaren quaternären Esterverbindungen, wie beispielsweise die unter dem Warenzeichen Stepantex<sup>®</sup> vertriebenen Dialkylammoniummethosulfate und Methylhydroxyalkyldialkoyloxyalkylammoniummethosulfate und die entsprechenden Produkte der Dehyquart<sup>®</sup>-Reihe, als kationische Tenside eingesetzt werden. Unter der Bezeichnung "Esterquats" werden im allgemeinen quaternierte Fettsäuretriethanolaminestersalze verstanden. Sie können den erfindungsgemäßen Zusammensetzungen einen besonderen Weichgriff verleihen. Es handelt sich dabei um bekannte Stoffe, die man nach den einschlägigen Methoden der organischen Chemie herstellt. Weitere erfindungsgemäß verwendbare kationische Tenside stellen die quaternisierten Proteinhydrolysate dar.

**Wachskomponente b-3)**

In einer Ausführungsform der Erfindung enthalten die erfindungsgemäßen Zubereitungen mindestens eine Wachskomponente. Die erfindungsgemäßen Zusammensetzungen enthalten den/die Wachskomponente(n) in einer Menge von 0 bis 40 Gew.-%, insbesondere von 0 bis 20 Gew.-%, vorzugsweise 0,1 bis 15 Gew.-% und insbesondere 0,1 bis 10 Gew.-% bezogen auf das Gesamtgewicht der Zusammensetzung.

Unter dem Begriff Wachs werden üblicherweise alle natürlichen oder künstlich gewonnenen Stoffe und Stoffgemische mit folgenden Eigenschaften verstanden: sie sind von fester bis brüchig harter Konsistenz, grob bis feinkristallin, durchscheinend bis trüb und schmelzen oberhalb von 30°C ohne Zersetzung. Sie sind schon wenig oberhalb des Schmelzpunktes niedrigviskos und nicht fadenziehend und zeigen eine stark temperaturabhängige Konsistenz und Löslichkeit. Erfindungsgemäß einsetzbar ist eine Wachskomponente oder ein Gemisch von Wachskomponenten, die bei 30°C oder darüber schmelzen.

Als Wachse können erfindungsgemäß auch Fette und fettähnliche Substanzen mit wachsartiger Konsistenz eingesetzt werden, solange sie den geforderten Schmelzpunkt haben. Hierzu gehören u.a. Fette (Triglyceride), Mono- und Diglyceride, natürliche und synthetische Wachse, Fett- und Wachsalkohole, Fettsäuren, Ester von Fettalkoholen und Fettsäuren sowie Fettsäureamide oder beliebige Gemische dieser Substanzen.

Unter Fetten versteht man Triacylglycerine, also die Dreifachester von Fettsäuren mit Glycerin. Bevorzugt enthalten sie gesättigte, unverzweigte und unsubstituierte Fettsäurereste. Hierbei kann es sich auch um Mischester, also um Dreifachester aus Glycerin mit verschiedenen Fettsäuren handeln. Erfindungsgemäß einsetzbar und als Konsistenzgeber besonders gut geeignet sind so genannte gehärtete Fette und Öle, die durch Partialhydrierung gewonnen werden. Pflanzliche gehärtete Fette und Öle sind bevorzugt, z. B. gehärtetes Rizinusöl, Erdnußöl, Sojaöl, Rapsöl, Rübsamenöl, Baumwollsaatöl, Sojaöl, Sonnenblumenöl, Palmöl, Palmkernöl, Leinöl, Mandelöl, Maisöl, Olivenöl, Sesamöl, Kakaobutter und Kokosfett.

Geeignet sind u.a. die Dreifachester von Glycerin mit C12-C60-Fettsäuren und insbesondere C12-C36-Fettsäuren. Hierzu zählt gehärtetes Rizinusöl, ein Dreifachester aus Glycerin und

einer Hydroxystearinsäure, der beispielsweise unter der Bezeichnung Cutina HR im Handel ist. Ebenso geeignet sind Glycerintristearat, Glycerintribehenat (z. B. Syncrowax HRC), Glycerintripalmitat oder die unter der Bezeichnung Syncrowax HGLC bekannten Triglycerid-Gemische, mit der Vorgabe, dass der Schmelzpunkt der Wachskomponente bzw. des Gemisches bei 30 °C oder darüber liegt.

Als Wachskomponenten sind erfindungsgemäß insbesondere Mono- und Diglyceride bzw. Mischungen dieser Partialglyceride einsetzbar. Zu den erfindungsgemäß einsetzbaren Glyceridgemischen zählen die von der Cognis Deutschland GmbH & Co. KG vermarkteten Produkte Novata AB und Novata B (Gemisch aus C12-C18-Mono-, Di- und Triglyceriden) sowie Cutina MD oder Cutina GMS (Glycerylstearat).

Zu den erfindungsgemäß als Wachskomponente einsetzbaren Fettalkoholen zählen die C12-C50-Fettalkohole. Die Fettalkohole können aus natürlichen Fetten, Ölen und Wachsen gewonnen werden, wie beispielsweise Myristylalkohol, 1-Pentadecanol, Cetylalkohol, 1-Heptadecanol, Stearylalkohol, 1-Nonadecanol, Arachidylalkohol, 1-Heneicosanol, Behenylalkohol, Brassidylalkohol, Lignocerylalkohol, Cerylalkohol oder Myricylalkohol. Erfindungsgemäß bevorzugt sind gesättigte unverzweigte Fettalkohole. Aber auch ungesättigte, verzweigte oder unverzweigte Fettalkohole können erfindungsgemäß als Wachskomponente verwendet werden, solange sie den geforderten Schmelzpunkt aufweisen. Erfindungsgemäß einsetzbar sind auch Fettalkoholschnitte, wie sie bei der Reduktion natürlich vorkommender Fette und Öle wie z. B. Rindertalg, Erdnußöl, Rübol, Baumwollsaatöl, Sojaöl, Sonnenblumenöl, Palmkernöl, Leinöl, Rizinusöl, Maisöl, Rapsöl, Sesamöl, Kakaobutter und Kokosfett anfallen. Es können aber auch synthetische Alkohole, z. B. die linearen, geradzahligen Fettalkohole der Ziegler-Synthese (Alfole) oder die teilweise verzweigten Alkohole aus der Oxosynthese (Dobanole) verwendet werden. Erfindungsgemäß besonders bevorzugt geeignet sind C14-C22-Fettalkohole, die beispielsweise von der Cognis Deutschland GmbH unter der Bezeichnung Lanette 16 (C16-Alkohol), Lanette 14 (C14-Alkohol), Lanette O (C16/C18-Alkohol) und Lanette 22 (C18/C22-Alkohol) vermarktet werden. Fettalkohole verleihen den Zusammensetzungen ein trockeneres Hautgefühl als Triglyceride und sind daher gegenüber letzteren bevorzugt.

Als Wachskomponenten können auch C14-C40-Fettsäuren oder deren Gemische eingesetzt werden. Hierzu gehören beispielsweise Myristin-, Pentadecan-, Palmitin-, Margaritin-, Stearin-, Nonadecan-, Arachin-, Behen-, Lignocerin-, Cerotin-, Melissin-, Eruca- und Elaeostearinsäure sowie substituierte Fettsäuren, wie z. B. 12-Hydroxystearinsäure, und die Amide oder Monoethanolamide der Fettsäuren, wobei diese Aufzählung beispielhaften und keinen beschränkenden Charakter hat.

Erfindungsgemäß verwendbar sind beispielsweise natürliche pflanzliche Wachse, wie Candelillawachs, Carnaubawachs, Japanwachs, Espartograswachs, Korkwachs, Guarumawachs, Reiskeimölwachs, Zuckerrohrwachs, Ouricurywachs, Montanwachs, Sonnenblumenwachs, Fruchtwachse wie Orangenwachse, Zitronenwachse, Grapefruitwachs, Lorbeerwachs (=Bayberrywax) und tierische Wachse, wie z. B. Bienenwachs, Schellackwachs, Walrat, Wollwachs und Bürzelfett. Im Sinne der Erfindung kann es vorteilhaft sein, hydrierte oder gehärtete Wachse einzusetzen. Zu den erfindungsgemäß verwendbaren natürlichen Wachsen zählen auch die Mineralwachse, wie z. B. Ceresin und Ozokerit oder die petrochemischen Wachse, wie z. B. Petrolatum, Paraffinwachse und Mikrowachse. Als Wachskomponente sind auch chemisch modifizierte Wachse, insbesondere die Hartwachse, wie z. B. Montanesterwachse, Sasolwachse und hydrierte Jojobawachse einsetzbar. Zu den synthetischen Wachsen, die erfindungsgemäß einsetzbar sind, zählen beispielsweise wachsartige Polyalkylenwachse und Polyethylenglycolwachse. Pflanzliche Wachse sind erfindungsgemäß bevorzugt.

Die Wachskomponente kann ebenso gewählt werden aus der Gruppe der Wachsester aus gesättigten und/oder ungesättigten, verzweigten und/oder unverzweigten Alkancarbonsäuren und gesättigten und/oder ungesättigten, verzweigten und/oder unverzweigten Alkoholen, aus der Gruppe der Ester aus aromatischen Carbonsäuren, Dicarbonsäuren, Tricarbonsäuren bzw. Hydroxycarbonsäuren (z. B. 12-Hydroxystearinsäure) und gesättigten und/oder ungesättigten, verzweigten und/oder unverzweigten Alkoholen, sowie ferner aus der Gruppe der Lactide langkettiger Hydroxycarbonsäuren. Beispiel solcher Ester sind die C16-C40-Alkylstearate, C20-C40-Alkylstearate (z. B. Kesterwachs K82H), C20-C40-Dialkylester von Dimersäuren, C18-C38-Alkylhydroxystearoylstearate oder C20-C40-Alkylerucate. Ferner sind C30-C50-Alkylbienenwachs, Tristearylcitrat, Triisostearylcitrat, Stearylheptanoat, Stearyl-octanoat, Trilaurylcitrat, Ethylenglycoldipalmitat, Ethylenglycoldistearat, Ethylenglykoldi(12-

hydroxystearat), Stearylstearat, Palmitylstearat, Stearylbehenat, Cetyltester, Cetearylbehenat und Behenylbehenat einsetzbar.

### **Polymere b-4)**

In einer Ausführungsform der Erfindung enthalten die erfindungsgemäßen Zubereitungen mindestens ein Polymer. Die erfindungsgemäßen Zusammensetzungen enthalten das/die Polymere(n) in einer Menge von 0 bis 20 Gew.-%, vorzugsweise 0,1 bis 15 Gew.-% und insbesondere 0,1 bis 10 Gew.-% bezogen auf das Gesamtgewicht der Zusammensetzung.

Geeignete **kationische Polymere** sind beispielsweise kationische Cellulosederivate, wie z. B. eine quaternierte Hydroxyethylcellulose, die unter der Bezeichnung Polymer JR 400<sup>®</sup> von Amerchol erhältlich ist, kationische Stärke, Copolymere von Diallylammoniumsalzen und Acrylamiden, quaternierte Vinylpyrrolidon/Vinylimidazol-Polymere, wie z.B. Luviquat<sup>®</sup> (BASF), Kondensationsprodukte von Polyglycolen und Aminen, quaternierte Kollagenpolypeptide, wie beispielsweise Lauryldimonium hydroxypropyl hydrolyzed collagen (Lamequat<sup>®</sup>L/Grünau), quaternierte Weizenpolypeptide, Polyethylenimin, kationische Siliconpolymere, wie z. B. Amidomethicone, Copolymere der Adipinsäure und Dimethylaminohydroxypropyldiethylentriamin (Cartaretine<sup>®</sup>/Sandoz), Copolymere der Acrylsäure mit Dimethyldiallylammoniumchlorid (Merquat<sup>®</sup> 550/Chemviron), Polyaminopolyamide, kationische Chitinderivate wie beispielsweise quaterniertes Chitosan, gegebenenfalls mikrokristallin verteilt, Kondensationsprodukte aus Dihalogenalkylen, wie z.B. Dibrombutan mit Bisdialkylaminen, wie z. B. Bis-Dimethylamino-1,3-propan, kationischer Guar-Gum, wie z.B. Jaguar<sup>®</sup> CBS, Jaguar<sup>®</sup> C-17, Jaguar<sup>®</sup> C-16 der Firma Celanese, quaternierte Ammoniumsalz-Polymere, wie z. B. Mirapol<sup>®</sup> A-15, Mirapol<sup>®</sup> AD-1, Mirapol<sup>®</sup> AZ-1 der Firma Miranol.

Als **anionische, zwitterionische, amphotere und nichtionische Polymere** kommen beispielsweise Vinylacetat/Crotonsäure-Copolymere, Vinylpyrrolidon/Vinylacrylat-Copolymere, Vinylacetat/Butylmaleat/ Isobornylacrylat-Copolymere, Methylvinylether/Maleinsäureanhydrid-Copolymere und deren Ester, unvernetzte und mit Polyolen vernetzte Polyacrylsäuren, Acrylamidopropyltrimethylammoniumchlorid/ Acrylat-Copolymere, Octylacrylamid/Methylmethacrylat/tert.Butylaminoethylmethacrylat/2-Hydroxypropylmethacrylat-Copolymere, Polyvinylpyrrolidon, Vinylpyrrolidon/Vinylacetat-Copolymere, Vinylpyrrolidon/

Dimethylaminoethylmethacrylat/Vinylcaprolactam-Terpolymere sowie gegebenenfalls derivatisierte Celluloseether und Silicone in Frage.

Als Polymere eignen sich ebenso Polysaccharide, insbesondere Xanthan-Gum, Guar-Guar, Agar-Agar, Alginate und Tylosen.

#### Weitere Ölkörper b-5)

Körperpflegemittel, wie Cremes, Körperöle, Lotionen und Milchen, enthalten üblicherweise eine Reihe weiterer Ölkörper und Emollients, die dazu beitragen, die sensorischen Eigenschaften weiter zu optimieren. Die Ölkörper (erfindungsgemäße Ester plus weitere Ölkörper) sind üblicherweise in einer Gesamtmenge von 0,1 – 80, insbesondere 0,5 bis 70, bevorzugt 1 bis 60, insbesondere 1 bis 50 Gew.-%, insbesondere 1 bis 40 Gew.-%, vorzugsweise 5 – 25 Gew.-% und insbesondere 5 – 15 Gew.-% enthalten. Die weiteren Ölkörper sind üblicherweise in einer Menge von 0,1 bis 40 Gew.-% enthalten

Als weitere Ölkörper kommen beispielsweise Guerbetalkohole auf Basis von Fettalkoholen mit 6 bis 18, vorzugsweise 8 bis 10 Kohlenstoffatomen, in Frage sowie weitere, zusätzliche Ester wie Myristylmyristat, Myristylpalmitat, Myristylstearat, Myristylisostearat, Myristyloleat, Myristylbehenat, Myristylrucat, Cetylmyristat, Cetylpalmitat, Cetylstearat, Cetylisostearat, Cetyloleat, Cetylbehenat, Cetylerucat, Stearylmyristat, Stearylpalmitat, Stearylstearat, Stearylisostearat, Stearyloleat, Stearylbehenat, Steaylerucat, Isostearylmyristat, Isostearylpalmitat, Isostearylstearat, Isostearylisostearat, Isostearyloleat, Isostearylbehenat, Isostearyloleat, Oleylmyristat, Oleylpalmitat, Oleylsteat, Oleylisostearat, Oleyloleat, Oleylbehenat, Oleylerucat, Behenylmyristat, Behenylpalmitat, Behenylstearat, Behenylisostearat, Behenyleat, Behenylbehenat, Behenylrucat, Erucylmyristat, Erucylpalmitat, Erucylstearat, Erucylisostearat, Erucyleat, Erucylbehenat und Erucylrucat. Daneben eignen sich Ester von C<sub>18</sub>-C<sub>38</sub>-Alkylhydroxycarbonsäuren mit linearen oder verzweigten C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>-Fettalkoholen, insbesondere Dioctyl Malate, Ester von linearen und/oder verzweigten Fettsäuren mit mehrwertigen Alkoholen (wie z. B. Propylenglycol, Dimerdiol oder Trimertriol), Triglyceride auf Basis C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>-Fettsäuren, flüssige Mono-/Di-/Triglyceridmischungen auf Basis von C<sub>6</sub>-C<sub>18</sub>-Fettsäuren, Ester von C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>-Fettalkoholen und/oder Guerbetalkoholen mit aromatischen Carbonsäuren, insbesondere Benzoesäure, Ester von C<sub>2</sub>-C<sub>12</sub>-Dicarbonsäuren mit Polyolen mit 2 bis 10 Kohlenstoffatomen und 2 bis 6



Hydroxylgruppen, pflanzliche Öle, verzweigte primäre Alkohole, substituierte Cyclohexane, lineare und verzweigte C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>-Fettalkoholcarbonate, wie z. B. Dicaprylyl Carbonate (Cetiol® CC), Guerbetcarbonate auf Basis von Fettalkoholen mit 6 bis 18, vorzugsweise 8 bis 10 C Atomen, Ester der Benzoesäure mit linearen und/oder verzweigten C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>-Alkoholen (z. B. Finsolv® TN), lineare oder verzweigte, symmetrische oder unsymmetrische Dialkylether mit 6 bis 22 Kohlenstoffatomen pro Alkylgruppe, wie z. B. Dicaprylylether (Cetiol® OE), Ringöffnungsprodukte von epoxidierten Fettsäureestern mit Polyolen und Kohlenwasserstoffen oder deren Gemischen (Cetiol® DD).

#### Weitere Inhaltsstoffe

Als **Verdickungsmittel** eignen sich beispielsweise Aerosil-Typen (hydrophile Kieselsäuren), Carboxymethylcellulose und Hydroxyethyl- und Hydroxypropylcellulose, Polyvinylalkohol, Polyvinylpyrrolidon und Bentonite wie z. B. Bentone® Gel VS-5PC (Rheox).

Unter **UV-Lichtschutzfaktoren** sind beispielsweise bei Raumtemperatur flüssig oder kristallin vorliegende organische Substanzen (Lichtschutzfilter) zu verstehen, die in der Lage sind, ultraviolette Strahlen zu absorbieren und die aufgenommene Energie in Form längerwelliger Strahlung, z. B. Wärme wieder abzugeben. UV-B-Filter können öllöslich oder wasserlöslich sein. Als typische UV-A-Filter kommen insbesondere Derivate des Benzoylmethans in Frage. Die UV-A und UV-B-Filter können selbstverständlich auch in Mischungen eingesetzt werden, z.B. Kombinationen aus den Derivaten des Benzoylmethans, z. B. 4-tert.-Butyl-4'-methoxydibenzoylmethan (Parsol® 1789) und 2-Cyano-3,3-phenylzimsäure-2-ethyl-hexylester (Octocrylene) sowie Estern der Zimtsäure, vorzugsweise 4-Methoxyzimsäure-2-ethylhexylester und/oder 4-Methoxyzimsäurepropylester und/oder 4-Methoxyzimsäureisoamylester. Häufig werden derartige Kombinationen mit wasserlöslichen Filtern wie z.B. 2-Phenylbenzimidazol-5-sulfonsäure und deren Alkali-, Erdalkali-, Ammonium-, Alkylammonium-, Alkanolammonium- und Glucammoniumsalze kombiniert.

Neben den genannten löslichen Stoffen kommen auch unlösliche Lichtschutzpigmente, nämlich feindisperse Metalloxide in Frage. Beispiele für geeignete Metalloxide sind insbesondere Zinkoxid und Titandioxid. Neben den beiden vorgenannten Gruppen primärer Lichtschutzstoffe können auch sekundäre Lichtschutzmittel vom Typ der Antioxidantien

eingesetzt werden, die die photochemische Reaktionskette unterbrechen, welche ausgelöst wird, wenn UV-Strahlung in die Haut eindringt.

Unter **biogenen Wirkstoffen** sind beispielsweise Tocopherol, Tocopherolacetat, Tocopherolpalmitat, Ascorbinsäure, (Desoxy)Ribonucleinsäure und deren Fragmentierungsprodukte,  $\beta$ -Glucane, Retinol, Bisabolol, Allantoin, Phytantriol, Panthenol, AHA-Säuren, Aminosäuren, Ceramide, Pseudoceramide, essentielle Öle, Pflanzenextrakte, wie z. B. Prunusextrakt, Bambaranussextrakt und Vitaminkomplexe zu verstehen.

**Desodorierende Wirkstoffe / Antiperspirantien** wirken Körpergerüchen entgegen, überdecken oder beseitigen sie. Körpergerüche entstehen durch die Einwirkung von Hautbakterien auf apokrinen Schweiß, wobei unangenehm riechende Abbauprodukte gebildet werden. Dementsprechend eignen sich als deosodorierende Wirkstoffe u.a. keimhemmende Mittel, Enzyminhibitoren, Geruchsabsorber oder Geruchsüberdecker.

Als **Insekten-Repellentien** kommen beispielsweise N,N-Diethyl-m-toluamid, 1,2-Pentandiol oder 3-(N-n-Butyl-N-acetyl-amino)-propionsäureethylester), welches unter der Bezeichnung Insect Repellent® 3535 von der Merck KGaA vertrieben wird, sowie Butylacetylaminopropionate in Frage.

Als **Selbstbräuner** eignet sich Dihydroxyaceton. Als Tyrosinhibitoren, die die Bildung von Melanin verhindern und Anwendung in Depigmentierungsmitteln finden, kommen beispielsweise Arbutin, Ferulasäure, Kojisäure, Cumarinsäure und Ascorbinsäure (Vitamin C) in Frage.

Als **Konservierungsmittel** eignen sich beispielsweise Phenoxyethanol, Formaldehydlösung, Parabene, Pentandiol oder Sorbinsäure sowie die unter der Bezeichnung Surfacine® bekannten Silberkomplexe und die in Anlage 6, Teil A und B der Kosmetikverordnung aufgeführten weiteren Stoffklassen.

Als **Parfümöle** seien genannt Gemische aus natürlichen und synthetischen Riechstoffen. Natürliche Riechstoffe sind Extrakte von Blüten, Stengeln und Blättern, Früchten, Fruchtschalen, Wurzeln, Hölzern, Kräutern und Gräsern, Nadeln und Zweigen, Harzen und Bal-

samen. Weiterhin kommen tierische Rohstoffe, wie beispielsweise Zibet und Castoreum sowie synthetische Riechstoffverbindungen vom Typ der Ester, Ether, Aldehyde, Ketone, Alkohole und Kohlenwasserstoffe in Frage.

Als **Perlglanzwachse**, insbesondere für den Einsatz in tensidischen Formulierungen, kommen beispielsweise in Frage: Alkylenglycolester, speziell Ethylenglycoldistearat; Fettsäurealkanamide, speziell Kokosfettsäurediethanolamid; Partialglyceride, speziell Stearinsäuremonoglycerid; Ester von mehrwertigen, gegebenenfalls hydroxy-substituierte Carbonsäuren mit Fettalkoholen mit 6 bis 22 Kohlenstoffatomen, speziell langkettige Ester der Weinsäure; Fettstoffe, wie beispielsweise Fettalkohole, Fettketone, Fettaldehyde, Fettether und Fettcarbonate, die in Summe mindestens 24 Kohlenstoffatome aufweisen, speziell Lauron und Distearylether; Fettsäuren wie Stearinsäure, Hydroxystearinsäure oder Behensäure, Ringöffnungsprodukte von Olefinepoxiden mit 12 bis 22 Kohlenstoffatomen mit Fettalkoholen mit 12 bis 22 Kohlenstoffatomen und/oder Polyolen mit 2 bis 15 Kohlenstoffatomen und 2 bis 10 Hydroxylgruppen sowie deren Mischungen.

Als **Überfettungsmittel** können Substanzen wie beispielsweise Lanolin und Lecithin sowie polyethoxylierte oder acylierte Lanolin- und Lecithinderivate, Polyolfettsäureester, Monoglyceride und Fettsäurealkanamide verwendet werden, wobei die letzteren gleichzeitig als Schaumstabilisatoren dienen.

Als **Stabilisatoren** können Metallsalze von Fettsäuren, wie z. B. Magnesium-, Aluminium- und/oder Zinkstearat bzw. -ricinoleat eingesetzt werden.

Zur Verbesserung des Fließverhaltens können ferner **Hydrotrope**, wie beispielsweise Ethanol, Isopropylalkohol, oder Polyole eingesetzt werden. Polyole, die hier in Betracht kommen, besitzen vorzugsweise 2 bis 15 Kohlenstoffatome und mindestens zwei Hydroxylgruppen. Die Polyole können noch weitere funktionelle Gruppen, insbesondere Aminogruppen, enthalten bzw. mit Stickstoff modifiziert sein.

Die erfindungsgemäßen Zubereitungen, die erfindungsgemäßen Zusammensetzungen sowie die Ester gemäß der Erfindung eignen sich insbesondere in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen zur Benetzung oder Imprägnierung oder Beschichtung von

Gebrauchs- und Hygienetüchern, die zur Körperreinigung und/oder zur Körperpflege eingesetzt werden.

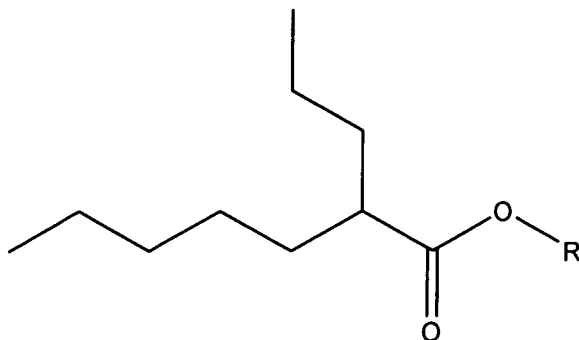
Als Gebrauchs- und Hygienetücher seien exemplarisch genannt: Tissues, Papiere, Wipes, Vlies-Produkte, Schwämme, Puffs, Pflaster und Bandagen, die ihren Einsatz im Bereich der Hygiene und Pflege finden. Dies können sein Feuchttücher zur Baby-Hygiene und Baby-Pflege, Reinigungstücher, Gesichtreinigungstücher, Hautpflegetücher, Pflegetücher mit Wirkstoffen gegen die Hautalterung, Wipes mit Sonnenschutzformulierungen und Insektenrepellentien sowie Wipes zur dekorativen Kosmetik oder zum After-Sun-Treatment, Toiletten-Feuchttücher, Antitranspirant-Wipes, Windeln, Taschentücher, Wet Wipes, Hygieneprodukte sowie Selbstbräunungs-Wipes.

**Beispiel**

64,8g 2-Propylheptansäure (SZ= 111,1), 16,8g Octanol und 0,3g Sn-Oxalat wurden zusammen am Wasserabscheider für 6 h auf 220 °C erhitzt. Das dadurch erhaltene Rohprodukt (SZ= 2,4) wurde mit einer 250mm Vigreuxkolonne im Ölpumpenvakuum destilliert. 42 g gereinigtes n-Octyl-2-propylheptanoat fallen bei 0,04 mbar und 114-117 °C als gelbliches Öl an.

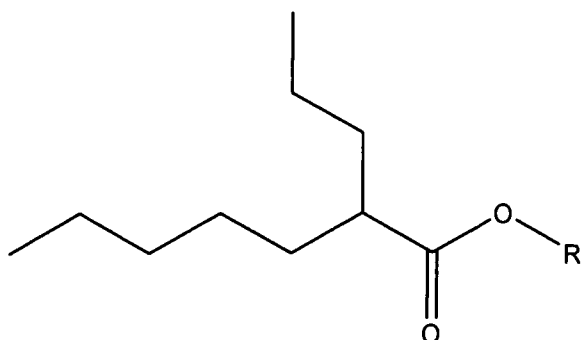
**Patentansprüche**

1. Ester der allgemeinen Formel (I),



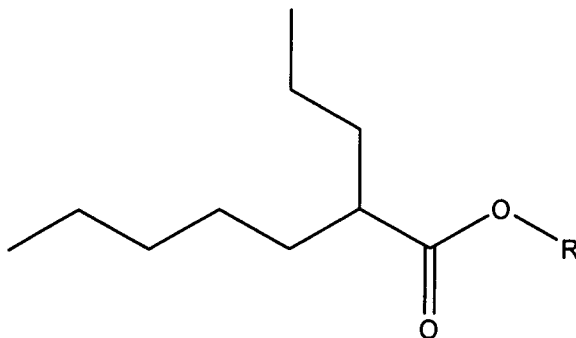
wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester, Methyl-2-Propylheptansäureester, Nonadecyl-2-Propylheptansäureester und 2-Hexyldecyl-2-Propylheptansäureester.

2. Ester nach Anspruch 1, wobei R für einen Alkylrest mit 6 bis 12 C Atomen steht.
3. Ester nach Anspruch 1 oder 2, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus n-Hexyl-2-Propylheptansäureester, n-Heptyl-2-Propylheptansäureester, n-Octyl-2-Propylheptansäureester, n-Nonyl-2-Propylheptansäureester, n-Decyl-2-Propylheptansäureester, n-Undecyl-2-Propylheptansäureester, n-Dodecyl-2-Propylheptansäureester.
4. Verwendung von Estern der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester, in kosmetischen und/oder pharmazeutischen Zubereitungen.

5. Verwendung nach Anspruch 4 zur Benetzung oder Imprägnierung oder Beschichtung von Gebrauchs- und/oder Hygienetüchern, die zur Körperreinigung und/oder zur Körperpflege eingesetzt werden.
6. Verfahren zur Herstellung der Ester gemäß einem der vorgenannten Ansprüche, wobei man eine Mischung enthaltend 2-Propylheptansäure und den entsprechenden Alkohol umsetzt.
7. Kosmetische und/oder pharmazeutische Zusammensetzungen enthaltend
  - (a) wenigstens einen Ester der allgemeinen Formel (I),



wobei R für einen Alkylrest mit 1 bis 36 C Atomen steht, wobei R mit bis zu 3 OH Gruppen substituiert sein kann, ausgenommen 2-Propylheptyl-2-Propylheptansäureester,

- (b) wenigstens einen Emulgator (b-1) und/oder Tensid (b-2) und/oder Wachskomponente (b-3) und/oder Polymer (b-4) und/oder einen weiteren Ölkörper (b-5)
8. Zusammensetzung gemäß Anspruch 7, enthaltend 0,1 – 80 Gew.-%, insbesondere 0,1 bis 70, bevorzugt 0,1 bis 60, insbesondere 0,1 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 0,1 – 40 Gew.-% wenigstens eines Ester gemäß (a).

9. Zusammensetzungen gemäß einem der Ansprüche 7 bis 8, enthaltend als Ester (a) n-Hexyl-2-Propylheptansäureester, n-Heptyl-2-Propylheptansäureester, n-Octyl-2-Propylheptansäureester, n-Nonyl-2-Propylheptansäureester, n-Decyl-2-Propylheptansäureester, n-Undecyl-2-Propylheptansäureester, n-Dodecyl-2-Propylheptansäureester oder beliebige Gemische daraus.



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/EP2008/003399

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

INV. A61K8/02 A61K8/37 A61Q19/00 C07C69/24

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

A61K A61Q C07C

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal, WPI Data

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages  | Relevant to claim No. |
|-----------|---|-----------------------|
| X         | RENZO ROSSI, ADRIANO CARPITA, CLARA BIGELLI: "A Palladium-promoted route to 3-alkyl-4-(1-alkynyl)-hexa-1,5-dyn-3-enes and/or 1,3-diynes" TETRAHEDRON LETTERS, vol. 26, no. 4, 1985, pages 523-526, XP002449996 page 526, paragraph 6                    | 1,6                   |
| A         | GERHARD SCHOMBURG: "Gaschromatographische Retentionsdaten und Struktur chemischer Verbindungen I. alpha-Verzweigte aliphatische und alicyclische Carbonsäuremethylester" JOURNAL OF CHROMATOGRAPHY, 1964, pages 157-177, XP002449995 page 165; table II | 1                     |
|           | -----<br>-/--<br>-----  |                       |

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.☒ See patent family annex.

## \* Special categories of cited documents:

\*A\* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

\*E\* earlier document but published on or after the international filing date

\*L\* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

\*O\* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

\*P\* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

\*T\* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

\*X\* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

\*Y\* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.

\*&amp;\* document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

9 Juni 2008

Date of mailing of the international search report

16/06/2008

Name and mailing address of the ISA/

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2  
NL - 2280 HV Rijswijk  
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,  
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

van Bergen, Marc

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/EP2008/003399

| C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |   |                       |
|--|---|-----------------------|
| Category*  | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages  | Relevant to claim No. |
| A  | JP 10 289441 A (SONY CORP)<br>27 October 1998 (1998-10-27)<br>page 4, paragraph 29; table 1<br>-----  | 1                     |
| A  | JP 57 006790 A (CANON KK)<br>13 January 1982 (1982-01-13)<br>page 486; compound 11<br>-----   | 1                     |
| A  | WO 2006/097235 A (COGNIS IP MAN GMBH [DE];<br>DIERKER MARKUS [DE]; WEICHOLD CATHERINE<br>[DE]) 21 September 2006 (2006-09-21)<br>cited in the application<br>page 2, paragraph 2 - paragraph 3<br>page 6 - page 7<br>page 61; example 4a<br>page 65; table 3<br>----- | 1-5,7-9               |
| A  | WO 2005/023750 A (SHELL OIL CO [US]; DE<br>BOER-WILDSCHUT MARIJKE [NL]; RANEY KIRK<br>HERBERT) 17 March 2005 (2005-03-17)<br>the whole document<br>-----  | 1-5,7-9               |

# INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/EP2008/003399

| Patent document<br>cited in search report |   | Publication<br>date | Patent family<br>member(s) | Publication<br>date |
|---|---|---------------------|----------------------------|---------------------|
| JP 10289441                               | A | 27-10-1998          | NONE                       |                     |
| JP 57006790                               | A | 13-01-1982          | NONE                       |                     |
| WO 2006097235                             | A | 21-09-2006          | KR 20070115963 A           | 06-12-2007          |
| WO 2005023750                             | A | 17-03-2005          | BR PI0413970 A             | 31-10-2006          |
|   |   |                     | CN 1852888 A               | 25-10-2006          |
|   |   |                     | EP 1708985 A2              | 11-10-2006          |
|   |   |                     | JP 2007504147 T            | 01-03-2007          |

## INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2008/003399

## A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

INV. A61K8/02 A61K8/37 A61Q19/00 C07C69/24

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPC) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPC

## B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

A61K A61Q C07C

Recherchierte, aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal, WPI Data

## C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

| Kategorie* | Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile  | Betr. Anspruch Nr. |
|------------|---|--------------------|
| X          | RENZO ROSSI, ADRIANO CARPITA, CLARA BIGELLI: "A Palladium-promoted route to 3-alkyl-4-(I-alkynyl)-hexa-I,5-dyn-3-enes and/or I,3-diynes"<br>TETRAHEDRON LETTERS,<br>Bd. 26, Nr. 4, 1985, Seiten 523-526,<br>XP002449996<br>Seite 526, Absatz 6                    | 1,6                |
| A          | GERHARD SCHOMBURG: "Gaschromatographische Retentionsdaten und Struktur chemischer Verbindungen I. alpha-Verzweigte aliphatische und alicyclische Carbonsäuremethylester"<br>JOURNAL OF CHROMATOGRAPHY, 1964, Seiten 157-177, XP002449995<br>Seite 165; Tabelle II | 1                  |
|            | -----<br>-/--<br>-----  |                    |



Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen



Siehe Anhang Patentfamilie

\* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

\*A\* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist

\*E\* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist

\*L\* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)

\*O\* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht

\*P\* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

\*T\* Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

\*X\* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden

\*Y\* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

\*Z\* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

9. Juni 2008

Absendedatum des internationalen Recherchenberichts

16/06/2008

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde

Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2  
NL - 2280 HV Rijswijk  
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,  
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

van Bergen, Marc

## C. (Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

| Kategorie* | Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile   | Betr. Anspruch Nr. |
|------------|--|--------------------|
| A          | JP 10 289441 A (SONY CORP)<br>27. Oktober 1998 (1998-10-27)<br>Seite 4, Absatz 29; Tabelle 1<br>-----  | 1                  |
| A          | JP 57 006790 A (CANON KK)<br>13. Januar 1982 (1982-01-13)<br>Seite 486; Verbindung 11<br>-----   | 1                  |
| A          | WO 2006/097235 A (COGNIS IP MAN GMBH [DE];<br>DIERKER MARKUS [DE]; WEICHOLD CATHERINE<br>[DE]) 21. September 2006 (2006-09-21)<br>in der Anmeldung erwähnt<br>Seite 2, Absatz 2 - Absatz 3<br>Seite 6 - Seite 7<br>Seite 61; Beispiel 4a<br>Seite 65; Tabelle 3<br>----- | 1-5, 7-9           |
| A          | WO 2005/023750 A (SHELL OIL CO [US]; DE<br>BOER-WILDSCHUT MARIJKE [NL]; RANEY KIRK<br>HERBERT) 17. März 2005 (2005-03-17)<br>das ganze Dokument<br>-----   | 1-5, 7-9           |

# INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2008/003399

| Im Recherchenbericht<br>angeführtes Patentdokument |   | Datum der<br>Veröffentlichung | Mitglied(er) der<br>Patentfamilie |               | Datum der<br>Veröffentlichung |
|--|---|-------------------------------|-----------------------------------|---------------|-------------------------------|
| JP 10289441  | A | 27-10-1998                    | KEINE                             |               |                               |
| JP 57006790  | A | 13-01-1982                    | KEINE                             |               |                               |
| WO 2006097235                                      | A | 21-09-2006                    | KR                                | 20070115963 A | 06-12-2007                    |
| WO 2005023750                                      | A | 17-03-2005                    | BR                                | PI0413970 A   | 31-10-2006                    |
|  |   |                               | CN                                | 1852888 A     | 25-10-2006                    |
|  |   |                               | EP                                | 1708985 A2    | 11-10-2006                    |
|  |   |                               | JP                                | 2007504147 T  | 01-03-2007                    |