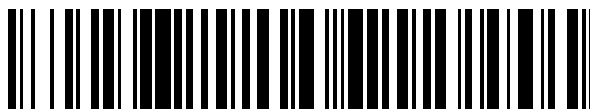


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 459 626**

51 Int. Cl.:

C08G 77/388 (2006.01)

A61K 8/898 (2006.01)

C08G 77/38 (2006.01)

C08L 83/08 (2006.01)

A61Q 5/12 (2006.01)

A61Q 5/02 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **22.01.2009** **E 12194358 (3)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **26.02.2014** **EP 2565218**

54 Título: **Compuestos de alquil-quaternium-silicona**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
12.05.2014

73 Titular/es:

COLGATE-PALMOLIVE COMPANY (50.0%)
300 Park Avenue
New York NY 10022-7499, US y
SILTECH CORPORATION (50.0%)

72 Inventor/es:

O'LENICK, ANTHONY J., JR.;
LU, ZHI;
HOLERCA, MARIAN N.;
RIDDLE, MARK;
SZEWCZYK, GREGORY y
VRCKOVNIK, RICK

74 Agente/Representante:

UNGRÍA LÓPEZ, Javier

ES 2 459 626 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

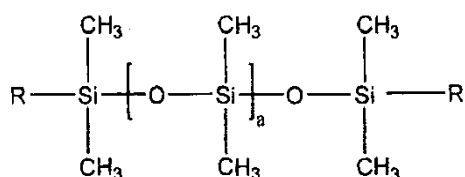
Compuestos de alquil-quaternium-silicona

5 **Campo de la invención**

La presente invención se refiere a una serie de compuestos de alquil-quaternium-silicona. Estos compuestos son útiles para el cuidado personal y otras aplicaciones. Más específicamente, los compuestos de la presente invención son compuestos multifuncionales organo-silicona que, en virtud de su estructura única, proporcionan unas microemulsiones y acondicionamiento del pelo espectaculares.

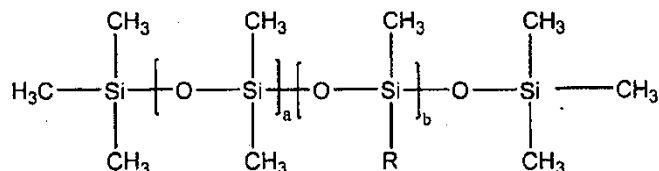
Antecedentes de la invención

Los compuestos organo-silicona son uno de dos tipos, terminal o interno, dependiendo de la localización del grupo organofuncional. Los compuestos terminales organo-silicona tienen los grupos organofuncionales en los extremos alfa y omega de la molécula. La estructura básica es la siguiente:



donde R es un grupo organofuncional, y a es un número entero que representa el grado de polimerización de la molécula.

Los compuestos organo-silicona internos tienen los grupos organofuncionales en los extremos no terminales de la molécula y también se denominan compuestos organo-silicona de tipo "peine" o "multifuncionales" porque la organofuncionalidad se sitúa en la molécula como los dientes de un peine. Estos compuestos poseen la estructura básica:

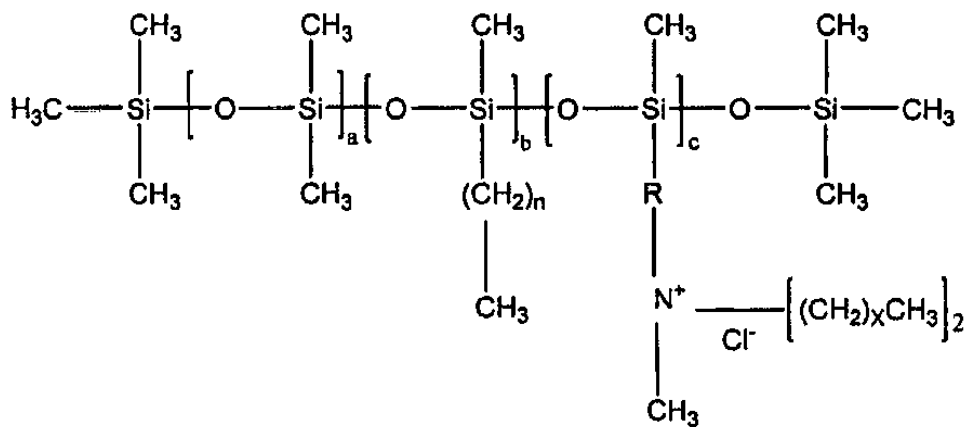


donde R es un grupo organofuncional.

El documento US 4.185.087 divulga composiciones para el cuidado del cabello que contienen uno o más derivados de nitrógeno cuaternario de compuestos orgánicos de silicio trialquilamino hidroxilo.

35 **Breve resumen de la invención**

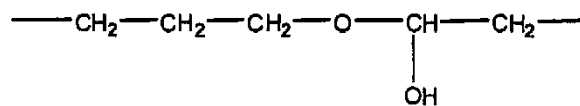
La presente invención se refiere a organo-siliconas multifuncionales en donde dos diferentes clases de grupos organofuncionales están unidos a la silicona. Un sorprendente e inesperado resultado de la presente invención es que cuando los dos grupos organofuncionales apropiados en la relación apropiada se hacen reaccionar para producir los compuestos de la presente invención, se logran mejoras en el comportamiento de estos materiales cuando se aplican a productos para el cuidado personal. En algunas realizaciones, esta invención se refiere a una serie de compuestos de alquil-quaternium-silicona que tienen tanto grupos alquilo como grupos grasos de nitrógeno cuaternario unidos en una molécula y los intermedios formados durante la producción de los mismos, que son adecuados para uso en el cuidado personal y en otras aplicaciones. Los compuestos descritos en la presente memoria se representan por la **Fórmula A**:



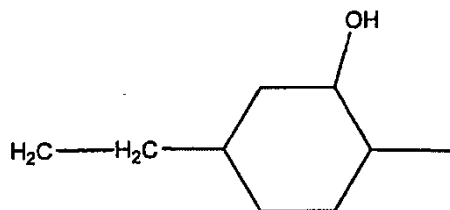
Fórmula A

donde,

- 5 a es un número entero que varía de 0 a 200;
 b es un número entero que varía de 1 a 40;
 c es un número entero que varía de 1 a 40;
 n es un número entero que varía de 1 a 50;
 x es un número entero que varía de 0 a 21; y
 10 R es:

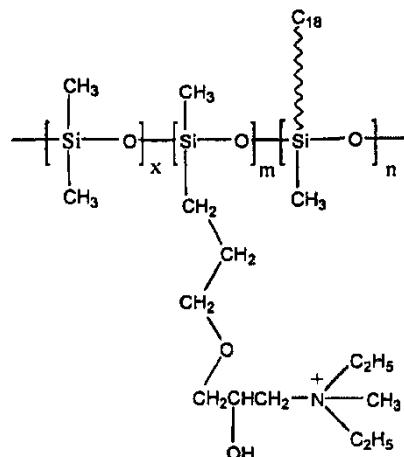


- 15 o
 R es:



20 Descripción detallada de la invención

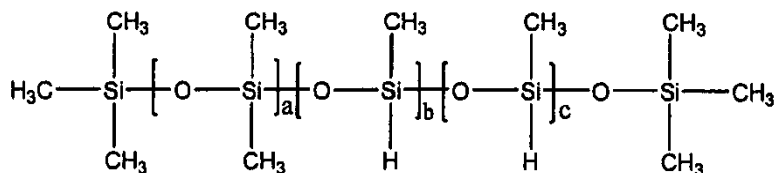
Esta invención se refiere a una serie de compuestos de alquil-quaternium-silicona que tienen tanto grupos alquilo como grupos grasos de nitrógeno cuaternario unidos en una molécula y a los intermediarios formados durante la producción de los mismos, que son adecuados para uso en el cuidado personal y en otras aplicaciones. Los compuestos de la presente invención se representan mediante la **Fórmula 1**:



Reacción 1

En algunas realizaciones, los compuestos de alquil-quaternium-silicona se pueden preparar mediante la reacción de:

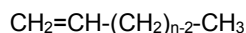
- 5 (a) un polímero de silicona que contiene hidrógeno silánico conforme a la estructura siguiente:



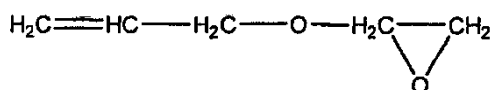
donde:

- 10 a es un número entero que varía de 0 a 200;
b es un número entero que varía de 1 a 40;
c es un número entero que varía de 1 a 40;
con una mezcla de:

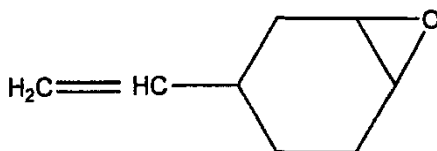
- 15 (b) b moles de una alfa-olefina conforme a la siguiente estructura:



- 20 y
(c) c moles de un compuesto glicidil-epoxi conforme a la siguiente estructura:



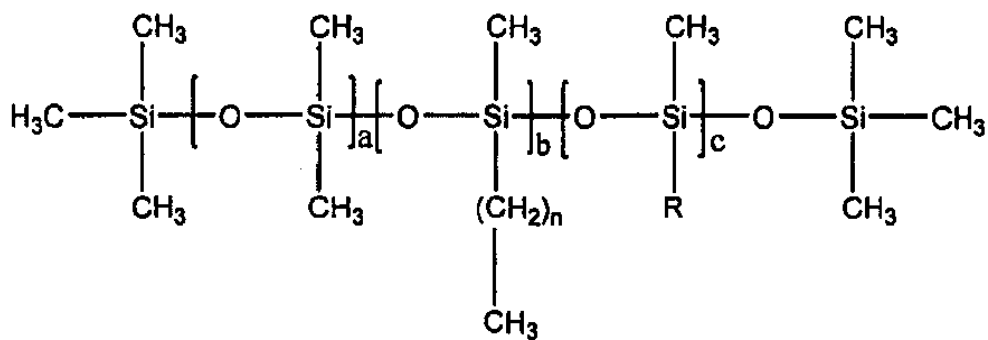
- 25 o



- 30 Los polímeros de silicona que contienen hidrógeno silánico adecuados para su uso en la presente invención incluyen cualquier polímero conforme a la estructura anteriormente identificada, donde a es un número entero que varía de 0 a 200; b es un número entero que varía de 1 a 40; y c es un número entero que varía de 1 a 40. En una realización, en un polímero de silicona que contiene un hidrógeno silánico adecuado para uso en la presente invención, a es 0. En una realización, a es 0 y la suma de b y c es 2. En una realización, a es 3. En una realización, a es 3 y la suma de b y c es 2. En una realización, a es 5. En una realización, a es 5 y la suma de b y c es 3. En una realización, a es 10. En una realización, a es 10, y la suma de b y c es 5. En una realización, a es 12. En una realización, a es 12 y la suma de b y c es 10. En una realización a es 20. En una realización, a es 20 y la suma de b y c es 40. En una realización, la relación entre a y la suma de b y c es 1:2.

- 40 Alfa-olefinas descritas en la presente memoria incluyen cualquier compuesto conforme a la estructura anteriormente identificada, donde n es un número entero que varía de 1 a 50, por ejemplo, n es 11, n es 15, n es 17, n es 19, n es 21 o n es 25.

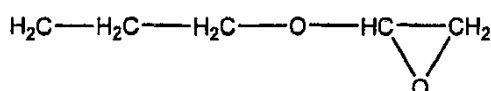
El resultado de la Reacción 1 es un intermedio [**Intermedio 1**], el cual se ajusta a la siguiente estructura:



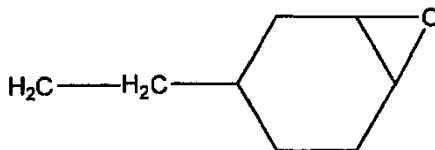
Intermedio 1

donde:

- 5 a es un número entero que varía de 0 a 200;
b es un número entero que varía de 1 a 40;
c es un número entero que varía de 1 a 40;
n es un número entero que varía de 1 a 50; y
R es:

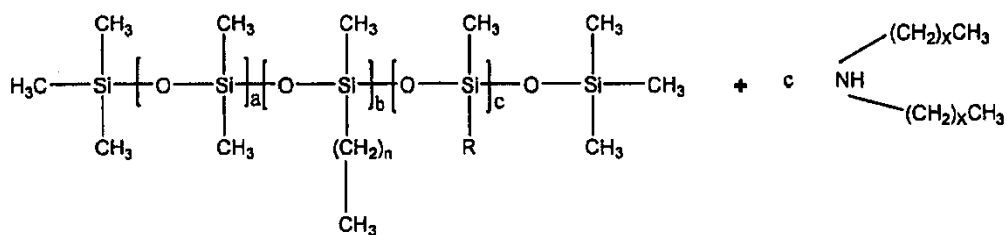


o
R es:



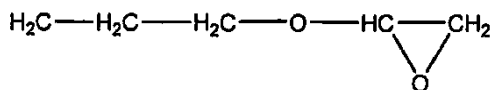
Reacción 2

También se describen en la presente memoria compuestos preparados mediante la reacción del **Intermedio 1** anteriormente descrito con "c" moles de diamina:

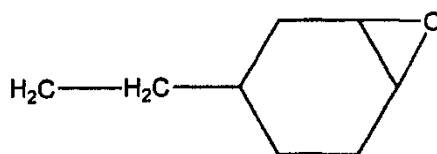


donde:

- 25 a es un número entero que varía de 0 a 200;
b es un número entero que varía de 1 a 40;
c es un número entero que varía de 1 a 40;
n es un número entero que varía de 1 a 50;
30 x es un número entero que varía de 0 a 21; y
R es:

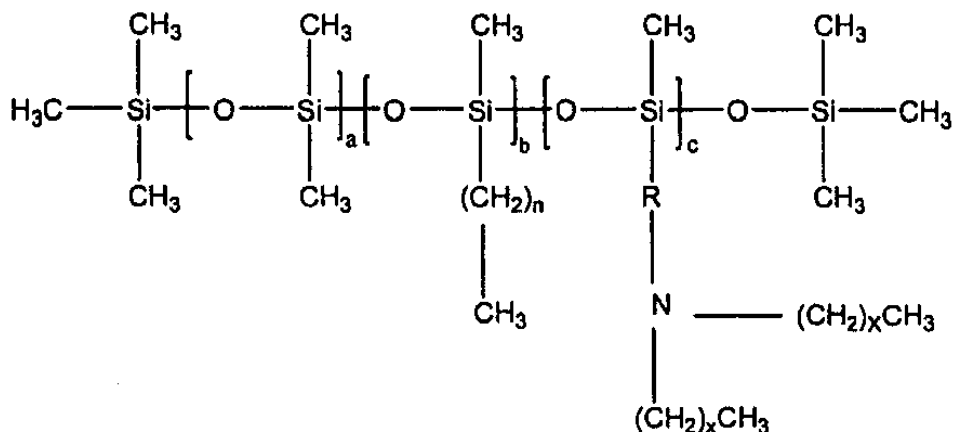


o
R es:



5

El producto de la Reacción 2 es el **Intermedio 2**, el cual se ajusta a la siguiente estructura:



Intermedio 2

10 donde:

a es un número entero que varía de 0 a 200;

b es un número entero que varía de 1 a 40;

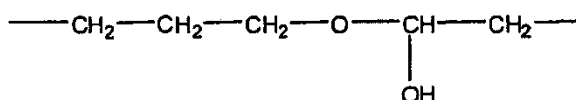
c es un número entero que varía de 1 a 40;

15

n es un número entero que varía de 1 a 50;

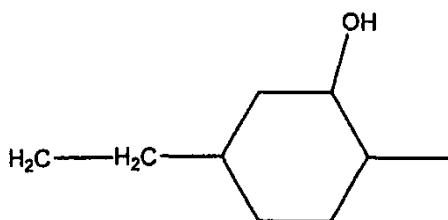
x es un número entero que varía de 0 a 21; y

R es:



20

o
R es:



25

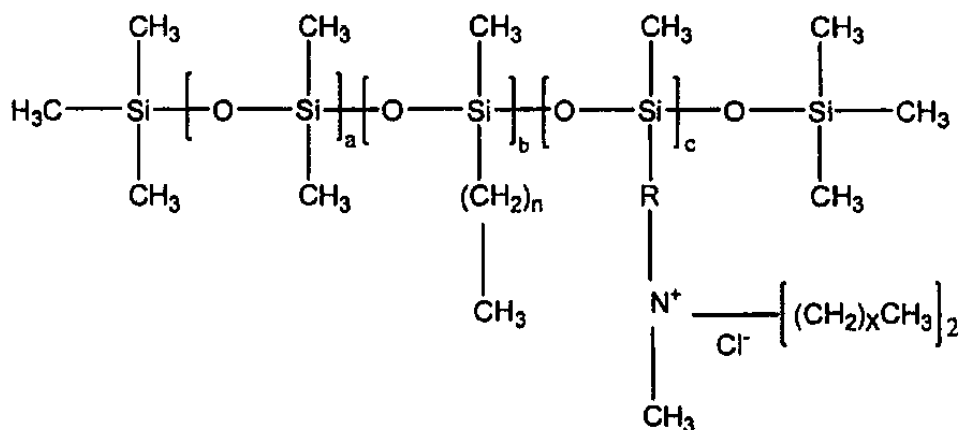
Las diaminas adecuadas descritas en la presente memoria incluyen cualquier compuesto conforme a la estructura anteriormente identificada, donde x es un número entero que varía de 1 a 21. También se describen en la presente memoria diaminas adecuadas incluyendo di-alkil-aminas. En la presente memoria se describen compuestos en los

30

Reacción 3

También se describe en la presente memoria el Intermedio 2 que es posteriormente cuaternizado usando "c" moles de cloruro de metilo para producir un compuesto de Fórmula 1:

35



Fórmula A

Composiciones que incluyen los compuestos de alquil-quaternium-silicona

- 5 Las composiciones que incluyen los compuestos de alquil-quaternium-silicona de la presente invención muestran multifunción tal como emulsificación, distribución activa, suavizado, acondicionamiento y propiedades antiestáticas. Los grupos funcionales grasos de amonio cuaternario que hacen posibles ciertas interacciones iónicas que son la base de muchas propiedades útiles incluyen: carácter hidrófilo aumentado, capacidad para actuar como un espesante y capacidad para facilitar el depósito de otros materiales como agentes de revestimiento y de
- 10 acondicionado. Los grupos alquilo que proporcionan los compuestos con su naturaleza anfifílica permiten a la cadena principal de silicona cambiar su orientación en emulsión y en una superficie positivamente cargada. En emulsión, los compuestos de la presente invención soportarán la estructura micelar para ayudar a emulsionar los aceites hidrófobos. Durante la deposición, las cargas positivas transportadas por los grupos grasos de amonio cuaternario proporcionarán la fuerza de conducción para llevar las gotitas de aceite hasta la superficie. Una vez en la
- 15 superficie, los compuestos de la presente invención proporcionarán ventajas de acondicionado a partir tanto de su cadena principal de silicona como de su funcionalidad hidrófoba. Consecuentemente, debido a la presencia tanto de grupos grasos de amonio cuaternario como de alquilo funcional, los compuestos de la presente invención son útiles en muchas aplicaciones textiles y para el cuidado personal que requieren suavizado, acondicionado o propiedades antiestáticas. También se ha encontrado que los compuestos de la presente invención muestran actividad
- 20 antimicrobiana.

Aplicaciones para el cuidado del cabello

- 25 En algunas realizaciones, los compuestos de alquil-quaternium-silicona de la presente invención pueden dar como resultado propiedades beneficiosas mejoradas de suavizado, acondicionado y/o antiestáticas. En algunas realizaciones, los compuestos de alquil-quaternium-silicona de la presente invención pueden también proporcionar ventajas protectoras. En algunas realizaciones, un producto para el cuidado personal de la presente invención incluye una aplicación para el cuidado del cabello que incluye, pero sin limitarse a: champús, acondicionadores del
- 30 cabello, champús/acondicionadores 2 en 1, formulaciones para el enjuagado del cabello, formulaciones para ayudar a la pasada del peine por el cabello y para facilitar el peinado del cabello. En algunas realizaciones, las aplicaciones para el cuidado del cabello de la presente invención incluyen el compuesto para el cuidado personal de alquil-quaternium-silicona de la **Fórmula 1** y al menos un aditivo.

- 35 En algunas realizaciones, aditivos adecuados para uso en las aplicaciones para el cuidado del cabello de la presente invención incluyen, pero sin limitarse a: tensioactivos, agentes acondicionadores, estabilizantes, conservantes, fragancias y color, agentes antiestáticos y otros principios activos.

Tensioactivos

- 40 En algunas realizaciones, una aplicación para el cuidado del cabello de la presente invención incluye un tensioactivo. En algunas realizaciones, el tensioactivo se selecciona, pero sin limitarse a, el grupo que consiste en: tensioactivos aniónicos, tensioactivos anfóteros, tensioactivos no iónicos, tensioactivos zwitteriónicos, tensioactivos semipolares y mezclas de los mismos.
- 45 Tensioactivos aniónicos adecuados incluyen, pero sin limitarse a: los sulfatos de alquilo, éter sulfatos de alquilo, sulfonatos de alcarilo, sulfosuccinatos de alquilo, sarcosinatos de n-alquilo, fosfatos de alquilo, éter fosfatos de alquilo, éter carboxilatos de alquilo y sulfonatos de alfa-olefinas, especialmente sus sales de amonio, sodio, magnesio y monoetanolamina, dietanolamina y trietanolamina. En algunas realizaciones, los grupos alquilo contienen generalmente de 8 a 18 átomos de carbono y pueden ser saturados o insaturados. En algunas
- 50 realizaciones, los éter sulfatos de alquilo, éter fosfatos de alquilo y éter carboxilatos de alquilo pueden contener de 1 a 10 unidades de óxido de etileno por molécula. En algunas realizaciones, la presente invención incluye al menos un

tensioactivo seleccionado de un grupo particular de tensioactivos aniónicos que consisten en: laurilsulfato sódico, laureth-sulfato sódico, laurilsulfato amónico, laureth-sulfato amónico, laureth-sulfosuccinato disódico; sulfosuccinato disódico de ricinoleamidomonoetanolamida ("MEA") , isetionato sódico de cocoílo, taurato sódico de metil-oleílo, taurato sódico de metilcocoílo, carboxilato sódico de laureth-13, sulfonato sódico de olefina C14-C16, fosfato sódico de laureth-4, fosfato de laureth-3, lauril-sulfato de trietanolamina, lauril-sulfato de magnesio, tridecilsulfato sódico, sulfato de alfa-olefina y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, la presente invención incluye al menos un tensioactivo seleccionado de un grupo particular de tensioactivos aniónicos que consisten en: laureth-sulfato de amonio, laurilsulfosuccinato de amonio, lauril-sulfato de trietanolamina y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, la presente invención incluye un lauril-éter-sulfato sódico. En algunas realizaciones, el lauril-éter-sulfato sódico se selecciona del grupo que consiste en: lauril-éter-sulfato sódico con 1 OE, 2 OE, 3 OE y mezclas de los mismos.

Tensioactivos anfóteros adecuados incluyen, pero sin limitarse a: amidas, sultainas, glicinatos; glicinas; propionatos y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, los tensioactivos pseudoanfóteros (anfólitos) tales como betaínas que son agrupadas comúnmente dentro de la designación de tensioactivos anfóteros pueden también ser usadas en la presente invención. En algunas realizaciones, las betaínas adecuadas para uso en la presente invención incluyen pero sin limitarse a: cocamidopropilo, coco, oleamidopropilo y mezclas de los mismos.

Tensioactivos no iónicos adecuados incluyen, pero sin limitarse a: productos de condensación de alcoholes de cadena alifática (C8-C18), ramificada o lineal, primaria o secundaria, con óxidos de alquileo o fenoles con óxidos de alquileo, normalmente óxido de etileno y generalmente con desde 6 a 30 grupos de óxido de etileno. En algunas realizaciones, los tensioactivos no iónicos adecuados para uso en las composiciones de la presente invención pueden incluir alcanolamidas de ácido graso. En algunas realizaciones, las alcanolamidas de ácido graso incluyen aquellas que tienen C10-C18 carbonos tales como: dietanolamidas de ácido graso que incluyen dietanolamida de ácido isoesteárico y dietanolamida de ácido graso de coco. En algunas realizaciones, las monoetanolamidas de ácido graso adecuadas que pueden ser usadas incluyen monoetanolamina de ácido graso de coco y mono-isopropanolamida de coco.

Tensioactivos semipolares adecuados tal como óxidos de amina son también adecuados para uso en la presente invención. En algunas realizaciones, los tensioactivos semi-polares adecuados incluyen, pero sin limitarse a: óxido de N-alquil-amina; óxido de N-estearil-dimetilamina; óxido de N-acil-amida; óxido de N-cocamidopropildimetilamina y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, la parte hidrófoba del tensioactivo de óxido de amina puede ser proporcionada por una cadena de hidrocarburo graso que tiene 10-21 átomos de carbono.

Agentes acondicionadores

En algunas realizaciones, pueden añadirse acondicionadores adicionales a la composición de aplicación al cabello en la forma de agentes acondicionadores catiónicos orgánicos con el propósito de proporcionar más acicalamiento del cabello si se considerara necesario. En algunas realizaciones, los acondicionadores adicionales son agentes acondicionadores catiónicos que pueden incluir, pero sin limitarse a: homopolímeros de cloruro de dimetildialilamonio; copolímeros de acrilamida y cloruro de dimetildialilamonio; homopolímeros o copolímeros derivados de ácido acrílico o ácido metacrílico que contienen grupos funcionales catiónicos de nitrógeno unidos al polímero mediante uniones éster o amida; copolímeros de vinilpirrolidona: ésteres de ácido acrílico con funcionalidad de nitrógeno cuaternario y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, los agentes de acondicionamiento catiónicos específicos incluyen, pero sin limitarse a: Polyquaternium 7, 8, 11, 23 y mezclas de los mismos.

Espesantes

En algunas realizaciones, una aplicación para el cuidado del cabello de la presente invención incluye un espesante. En algunas realizaciones, pueden usarse espesantes para facilitar la aplicación de la composición de champú al cabello, y son preferiblemente añadidos en cantidades suficientes que proporcionen un efecto más esplendoroso. Agentes espesantes adecuados incluyen, pero sin limitarse a: derivados de celulosa; copolímeros de acrilato, y mezclas de los mismos. En algunas realizaciones, una aplicación para el cuidado del cabello de la presente invención incluye un espesante no iónico. En algunas realizaciones, espesantes no iónicos adecuados incluyen, pero sin limitarse a: los productos de condensación de alcoholes o fenoles de cadena alifática (C8-C18), lineal o ramificada, primaria o secundaria, con óxidos de alquileo, oxietylcelulosa, hidroxipropilcelulosa; almidón y derivados de almidón tal como hidroxietilamilosa y amilasa de almidón; goma de algarrobo; cloruro de sodio y amonio; sacáridos tal como fructosa y glucosa y derivados de polisacáridos tal como dioleato de PET-120-metil-glucosa; y mezclas de los mismos.

Agentes catiónicos antiestáticos

En algunas realizaciones, una aplicación para el cuidado del cabello de la presente invención incluye un agente catiónico anti-estático. Los agentes catiónicos anti-estáticos adecuados incluyen, pero sin limitarse a: cloruro de cetil-trimetilamonio; bromuro de cetil-trimetilamonio; cloruro de esteariltrimetilamonio; aminas grasas primarias; sales amina y mezclas de las mismas. En algunas realizaciones, los grupos de alquilo de aminas grasas primarias

adecuadas tienen preferiblemente de 12 a 22 átomos de carbono y pueden estar sustituidos o no sustituidos. En algunas realizaciones, incluyen sales de amina adecuadas, pero sin limitarse a: fosfato; citrato de lactato; sales alquilsulfato y mezclas de los mismos.

5 Otros aditivos

En algunas realizaciones, las aplicaciones para el cuidado del cabello de la presente invención pueden contener otros componentes en cantidades menores (por ejemplo menos que 1%) que normalmente se encuentran en formulaciones de champú estándar, que incluyen, pero sin limitarse a: agentes antibacterianos, agentes anticaspa tal como piridinetona de cinc; agentes perlantes; perfumes; tintes y agentes colorantes; conservantes; modificadores de la viscosidad; proteínas; polímeros; agentes tampón; polioles; agentes humectantes; extractos de plantas; extractos de hierbas; extractos marinos.

Los compuestos de alquil-quaternium-silicona pueden ser usados en una variedad de productos para el cuidado personal que incluyen productos para el cuidado del cabello tal como champús, acondicionadores de cabello, productos champú/acondicionadores 2-en-1, y ayudantes del peinado del cabello. A continuación se ilustran ejemplos de composiciones de aplicación para el cuidado del cabello.

Champú:

Tensioactivo aniónico tal como 10-40% en peso de lauril éter sulfato de sodio;
Un agente acondicionador catiónico tal como 0,5 a 5% en peso de Polyquaternium-7;
Un estabilizador tal como 1-10% en peso de dispersión de alcohol behenílico;
Conservante tal como 0,05-0,8% en peso de EDTA tetrasódico o 0,05-0,4% en peso de conservante tal como DMDM hidantoína;
0-2% en peso de una fragancia;
0,1 a 5% en peso de un alquil-quaternium-silicona de **Fórmula 1** y
Agua (especialmente desionizada) c.s.

Las formulaciones de champú pueden ser preparadas usando los compuestos alquil-quaternium-silicona del Ejemplo 1 (**Fórmula 1**). Formulaciones de champú de ejemplo se muestran en la **Tabla A**.

Tabla A. Fórmula de champú usando composiciones catiónicas alifáticas de silicona

Componente	%		
	A	B	C
Agua desionizada y componentes minoritarios	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100
Lauril éter sulfato de sodio (70%)	10	10	10
Polyquat-7	3,5	3,5	3,5
Alcohol behenílico	8	8	8
Diestearato de etilenglicol	0,2	0,2	0,2
Dietanolamida de coco	2	2	2
Silicona de Fórmula 1	0,5	1	2

Champú anticaspa:

Tensioactivo aniónico tal como 10-40% en peso de lauril éter sulfato de sodio;
Un agente acondicionador catiónico tal como 0,5 a 5% en peso de Polyquaternium-7;
Un estabilizador tal como 1-10% en peso de dispersión de alcohol behenílico;
Conservante tal como 0,05-0,8% en peso de EDTA tetrasódico o 0,05-0,4% en peso de conservante tal como DMDM hidantoína;
Fungicida tal como 0,1 a 0,8% en peso de climbazol;
0-2% en peso de una fragancia;
0,1 a 5% en peso de un alquil-quaternium-silicona de **Fórmula 1** y
Agua (especialmente desionizada) c.s.

Las formulaciones de champú anti-caspa pueden ser preparadas usando los compuestos alquil-quaternium-silicona del Ejemplo 1 (**Fórmula 1**). Formulaciones de champú anticaspa de ejemplo se muestran en la **Tabla B**.

Tabla B. Fórmula de champú anti-caspa usando composiciones catiónicas alifáticas de silicona

Componente	%		
	A	B	C
Agua desionizada y componentes minoritarios	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100
Lauril éter sulfato de sodio (70%)	10	10	10
Polyquat-7	3,5	3,5	3,5
Alcohol behenílico	8	8	8
Diestearato de etilenglicol	0,2	0,2	0,2
Dietanolamida de coco	2	2	2
Climbazol	0,4	0,4	0,4
Silicona de Fórmula 1	0,5	1	2

Acondicionador de enjuague para el cabello

- 5 Una sal de amonio cuaternario soluble en agua, tal como 0,20-2% en peso de cloruro de cetil-trimetil-amonio; Espesante, tal como 0,5 a 5% en peso de alcohol cetearílico, una mezcla de alcohol estearílico y alcohol cetílico; Conservantes, tal como Germall 115, metilparabeno y propilparabeno; Espesante, tal como 0,1 a 1% en peso de monoestearato de glicerilo; 0,25 a 2% en peso de aceite mineral;
- 10 0 a 1% en peso de una fragancia; 0,1 a 5% en peso de un alquil-quaternium-silicona de **Fórmula 1** y Agua (especialmente desionizada) c.s.

- 15 Los acondicionadores de enjuague para el cabello pueden ser preparados usando los compuestos de alquil quaternium-silicona del Ejemplo 1 (**Fórmula 1**). Formulaciones para acondicionadores de enjuague de ejemplo se muestran en la **Tabla C**.

Tabla C. Fórmula de acondicionador de enjuague para el cabello usando composiciones catiónicas alifáticas de silicona

Componente	%		
	A	B	C
Agua desionizada y componentes minoritarios	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100
Cloruro de cetrimonio (CTAC)	0,5	0,5	0,5
Monoestearato de glicerilo	0,25	0,25	0,25
Alcohol cetearílico	5	5	5
Silicona de Fórmula 1	0,5	1	2

- 20 Acondicionador del cabello de aplicación prolongada:
- Una sal de amonio cuaternario soluble en agua, tal como 0,20-2% en peso de cloruro de cetil trimetil amonio; Espesante, tal como 0,5 a 5% en peso de alcohol cetearílico una mezcla de alcohol estearílico y alcohol cetílico;
- 25 Conservantes, tal como Germall 115, metil-parabeno y propil-parabeno; Espesante, tal como 0,1 a 1% en peso de monoestearato de glicerilo; Benzoato de alquilo, tal como 0,5 a 5% en peso de benzoato de alquilo (C₁₂ a C₁₅) 0,25 a 2% en peso de aceite mineral;
- 30 0 a 1% en peso de una fragancia; hasta 5% en peso de un alquil-quaternium-silicona de **Fórmula 1**; Agua (especialmente desionizada), c.s.

- 35 Las formulaciones de acondicionadores del cabello de aplicación prolongada pueden ser preparadas usando los compuestos de alquil-quaternium-silicona del Ejemplo 1 (**Fórmula 1**). Las formulaciones para acondicionadores del cabello de aplicación prolongada de ejemplo se muestran en la **Tabla D**.

Tabla D. Fórmulas de acondicionadores del cabello de aplicación prolongada usando composiciones catiónicas alifáticas de silicona

Componente	%		
	A	B	C
Agua desionizada y componentes minoritarios	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100
Cloruro de cetrimonio	0,25	0,25	0,25
Monoestearato de glicerilo	0,125	0,125	0,125
Alcohol cetearílico	1,5	1,5	1,5
Benzoato de alquilo C12-15	2	2	2
Silicona de Fórmula 1	0,5	1	2

Lavado corporal:

- 5 Tensioactivo aniónico, tal como 25 a 40% en peso de pareth-sulfato sódico;
- Tensioactivo no iónico, tal como 5 a 15% en peso de cocoamidopropil-betaína;
- 10 Polímero catiónico, que incluye 0,3 a 3% en peso de Polyquaternium-7;
- Tensioactivos de alquil-polisacáridos, tal como 0,3 a 3% en peso de decil-glucosa;
- 15 Conservantes, tal como 0,05-0,8% en peso de EDTA tetrasódico o 0,05-0,5% en peso de conservante tal como DMDM hidantoína;
- hasta 0,15 por ciento en peso de ácido cítrico;
- 0 a 1% en peso de una fragancia;
- 20 hasta 5% en peso de un alquil-quaternium-silicona de **Fórmula 1** y
- Agua (especialmente desionizada), c.s.
- 25 Las formulaciones de lavado corporal pueden ser preparadas usando los compuestos alquil-quaternium-silicona del Ejemplo 1 (**Fórmula 1**). Formulaciones para el lavado corporal de ejemplo se muestran en la **Tabla E**.

Tabla E. Fórmula de lavado corporal usando composiciones catiónicas alifáticas de silicona

Componente	%		
	A	B	C
Agua desionizada y componentes minoritarios	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100
SO ₃ Na de Pareth sulfato base – 25,5%	32,2	32,2	32,2
Cocoamidopropil-betaína	10	10	10
Polyquaternium-7	2,5	2,5	2,5
Decil-glucósido	2,25	2,25	2,25
Cloruro sódico	1	1	1
Silicona de Fórmula 1	0,5	1	2

30 Jabón de manos líquido:

- 30 a 45% en peso de sal sódica de un tensioactivo de pareth-sulfato etoxilado con 1 a 3 moles de óxido de etileno;
- 0,7 a 7% en peso de tensioactivo no iónico, tal como cocoamidopropil-betaína;
- 35 Conservantes, tal como 0,05-0,8% en peso de EDTA tetrasódico o 0,05-0,5% en peso de conservante tal como DMDM hidantoína;
- hasta 2% en peso de una fragancia y
- hasta 3% en peso de un alquil-quaternium-silicona de **Fórmula 1**.
- 40 Las formulaciones de jabón de manos líquido pueden ser preparadas usando los compuestos alquil-quaternium-silicona del Ejemplo 1 (**Fórmula 1**). Las formulaciones para el jabón de manos líquido de ejemplo se muestran en la **Tabla F**.

Tabla F. Fórmula de jabón de manos líquido usando composiciones catiónicas alifáticas de silicona

Componente	%		
	A	B	C
Agua desionizada y componentes minoritarios	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100
SO ₃ Na de Pareth 145-20E sulfato base – 25,5%	37,1	37,1	37,1
Carbopol™ Aqua S-1 Polymer (BF GOODRICH)	8,95	8,95	8,95
Cocoamidopropil-betaína	5,64	5,64	5,64
Silicona de Fórmula 1	0,5	1	2

Los compuestos de alquil-quaternium-silicona de la presente invención pueden usarse también en composiciones para el cuidado personal tal como desodorantes y/ antitranspirantes. Ingredientes representativos de desodorantes y/o antitranspirantes se encuentran en la publicación de la solicitud de patente de EE.UU. n° 2004/0062738; patente de EE.UU. n° 7.105.691 y la patente de EE.UU. n° 6.969.510, todas ellas concedidas a Colgate-Palmolive Co.

Aplicaciones para el cuidado del hogar

Los compuestos de alquil-quaternium-silicona pueden usarse también en composiciones para el cuidado del hogar como lavavajillas, suavizante de los tejidos, detergentes líquidos para tareas livianas limpiadores de superficie dura y detergente. En los líquidos lavavajillas, las composiciones de alquil-quaternium-silicona pueden permitir el uso de tensioactivos fuertes que normalmente irritan la piel. Un ejemplo de un jabón líquido para tareas livianas se da a continuación. Para las composiciones líquidas de tareas livianas, los ingredientes representativos se describen en la

Jabón líquido para tareas livianas

15 a 30% en peso de una sal sódica de un tensioactivo de alquilo lineal C₈-C₁₆-bencensulfonato;
5 a 15% en peso de una sal amónica o sódica de un tensioactivo alquilo C₈-C₁₈ éter-sulfato etoxilado que tiene 1 a 3 moles de óxido de etileno;
5 a 15% en peso de una sal amónica o sódica de un tensioactivo alquilo C₈-C₁₈-sulfato;
0,6 a 6% en peso de un tensioactivo no iónico que incluye betaína C₁₂-C₁₄ u óxido de amina C₁₂-C₁₄;
Conservantes, tales como conservante de 0,05 - 0,5% en peso tal como DMDM hidantoína;
0 a 1% en peso de una fragancia;
hasta 3% en peso de un alquil-quaternium-silicona de **Fórmula 1** y
Agentes solubilizantes, tales como 0,3 a 3% en peso de xilen-sulfonato sódico.

Formulaciones líquidas de tareas livianas de ejemplo se muestran en la **Tabla G**.

Tabla G. Fórmula de líquido para tareas livianas usando composiciones de silicona alifática catiónica

Componente	%		
	A	B	C
Alquilo lineal C8-C16-benceno sulfonato, sal Mg	22	22	22
Alquil C8-C18-éter-sulfato etoxilado - 1,3 OE (sal NN ₄ o sal Na)	9	9	-----
Alquilo (C8-C18) -sulfato (sal de NH ₄ o de Na)	-----	10	9
Betaína C12/C14	-----	5	-----
Oxido de amina C12/C14	5	-----	4
Cloruro sódico	0,4	0,4	0,4
Pentetato pentasódico	0,125	0,125	0,125
Xilensulfonato sódico	2	2	2
Silicona de Fórmula 1	1	1	2

Ejemplos

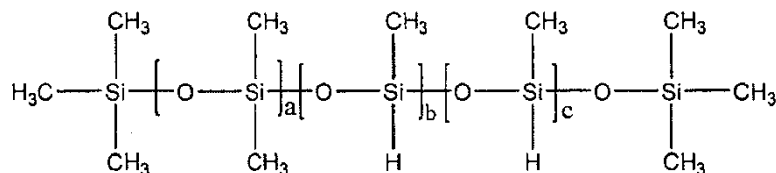
La invención se describe además en los siguientes ejemplos. Los ejemplos son meramente ilustrativos y no limitan de ninguna forma el alcance de la invención como se describe y se reivindica.

Preparación de productos de la presente invención

Los siguientes ejemplos ilustran un ejemplo de método para preparar los productos de la presente invención usando los siguientes reactantes: compuestos de hidrógeno silánico; alfa-olefinas, epóxidos de glicidilo; compuesto de cuaternización tal como cloruro de metilo y diaminas.

Compuestos de hidrógeno silánico

Los compuestos de hidrógeno silánico conforme a la siguiente estructura están comercializados por Siltech Corporation:



donde

a es un número entero que varía de 0 a 200;

b es un número entero que varía de 1 a 40;

c es un número entero que varía de 1 a 40;

Los valores específicos presentados a continuación para la molécula se determinaron mediante RMN-Si29:

Tabla 1: Compuestos de hidrógeno silánico

Ejemplo	a	b+c
1	0	2
2	3	2
3	5	3
4	10	5
5	12	10
6	20	40

Compuestos olefínicos

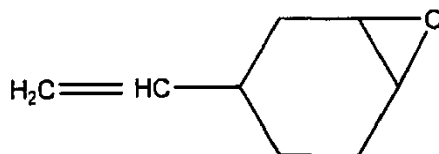
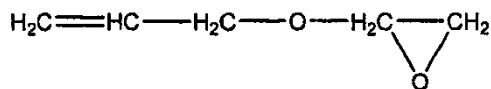
Alfa-olefinas conforme a la siguiente estructura que se muestra a continuación están comercializadas por diversos proveedores como Chevron: $\text{CH}_2=\text{CH}-(\text{CH}_2)_{n-2}-\text{CH}_3$.

Tabla 2: Compuestos de alfa-olefina

Ejemplo	n
7	11
8	15
9	17
10	19
11	21
12	25

Ejemplo 13: Epóxido de glicidilo

El epóxido de glicidilo es un artículo comercial conforme a la siguiente estructura que se muestra a continuación que está comercializado por Ciba:



Ejemplo 14: Cloruro de metilo

El cloruro de metilo conforme a la siguiente estructura que se muestra a continuación está comercializado por Air Gas: CH_3Cl .

Diaminas

Las diaminas conforme a la siguiente estructura que se muestra a continuación está comercializado por Akzo Nobel: $\text{H}-\text{N}-[(\text{CH}_2)_x\text{CH}_3]_2$

donde x es un número entero que varía de 1 a 21.

Tabla 3: Diaminas

Ejemplo	x
15	11
16	15
17	17
18	19
20	21

Productos**Intermedio 1**

Procedimiento general: El número especificado de gramos de alfa-olefina (**Ejemplos 7-12**) y el número especificado de gramos de epóxido de glicidilo (**Ejemplo 13**) se añaden a un recipiente con agitación y enfriamiento. A continuación se añade el número especificado de gramos de hidrógeno silánico (**Ejemplos 1-6**). El lote se calienta a continuación a 80 °C. Seguidamente se añaden 10 ppm de catalizador de platino (basado en el peso de todos los materiales que son añadidos). Se realiza un enfriamiento para controlar el carácter exotérmico. No es anormal que la temperatura aumente desde 80 °C hasta 120 °C. Se mantiene a 120 °C durante 4 horas, comprobando el contenido de hidrógeno silánico hasta que llegue a desaparecer.

Tabla 4: Compuestos del intermedio 1

Ejemplo	Hidrógeno silánico (gramos)	Alfa-olefina (gramos)	Epóxido de glicidilo (gramos)
21	1322,7	1542,9	134,1
22	1443,6	1263,0	293,1
23	1653,9	741,9	604,2
24	1826,6	409,6	963,8
25	1684,2	783,9	691,6
26	1197,3	567,9	500,9
27	1826,6	409,6	968,8 (epóxido cíclico)
28	1443,6	1263,0	293,1 (epóxido cíclico)

Intermedio 2

Reacción de aminación: El número especificado de gramos de **Intermedio 1** (**Ejemplos 21-26**) se añaden a un recipiente con agitación y enfriamiento. A continuación, se añade el número especificado de gramos de etanol anhidro, seguido por el número especificado de gramos de diamina (**Ejemplos 15-20**). El lote se calienta a continuación a 80 °C hasta que toda la amina se ha transformado de amina secundaria a amina terciaria.

Tabla 5: Compuestos del intermedio 2

Ejemplo	Intermedio 1 (gramos)	Diamina (gramos)	Etanol (gramos)
29	3186,6	89,8	655,3
30	3100,0	166,9	653,4
31	2705,2	325,8	606,2
32	2702,7	458,0	632,1
33	2900,0	370,4	654,0
34	2100,0	261,0	472,2
35	2702,7	458,0	632,1

Ejemplo	Intermedio 1 (gramos)	Diamina (gramos)	Etanol (gramos)
36	3100,0	166,9	653,4

Compuestos de alquil-quaternium-silicona

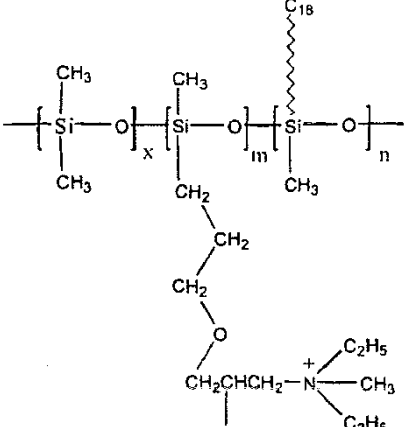
- 5 Cuaternización: El número especificado de gramos de **Intermedio 2 (Ejemplos 27-32)** se añade a un recipiente con mezclado. El número especificado de gramos de cloruro de metilo (**Ejemplo 14**) se añade a continuación para producir la **Fórmula A**.

Tabla 6: Compuestos de organo-silicona multifuncionales

Ejemplo	Intermedio 2 (gramos)	Cloruro de metilo (gramos)
33	3088,3	43,1
34	3083,2	99,9
35	2788,1	192,5
36	2884,4	272,4
37	3058,0	219,5
38	2143,0	161,3
39	2884,4	272,4
40	3083,2	99,9

10 Ejemplo 41

Las siguientes moléculas se usaron en la composición acondicionadora descrita más adelante para ensayos comparativos. Los métodos de ensayo usados se presentan a continuación.

	Muestra	x	m	n
	Control 1 (dimeticona 2000 cSt)	-	0	0
	J2-818A de la invención	20	2	8
	J2-618A de la invención	20	4	6
	J2-418-A de la invención	20	6	4
	J2-218A de la invención	20	8	2
	T2-818A de la invención	40	12	8
	2N-1618A de la invención	80	24	16
	Control de 2 (J2)	20	10	0

15

Componente	% en peso
Agua	c.s. hasta 100
Cloruro de cetrimonio (CTAC)	0,5
Alcohol cetílico	2
Alcohol estearílico	3
Monoestearato de glicerilo	0,25
Conservantes y fragancia	0,52
Polímero de alquil-quaternium-silicona	0,5

20

Los lotes se ponen en un hervidor de agua de 1 kg de tamaño en un mezclador IKA (Eurostar Power Control-Vis) mientras se agita a 150 rpm usando una cuchilla de acero inoxidable. En primer lugar, se calienta la fase acuosa a 85 °C. Mientras tanto, se pesa la fase aceite, se deja fundir hasta que esta fase también alcanza 85 °C. Cuando la fase acuosa está a 85 °C, se deposita la fase fundida en la misma y se deja que se emulsione a una velocidad mayor (250 rpm) durante 20 minutos. A continuación, el lote se enfría con aire a temperatura ambiente con una velocidad media de enfriamiento de aproximadamente 1 °C/min. A 65 °C, se añade la silicona. Después, el lote se enfría adicionalmente hasta que su temperatura es de 38 °C, después se añaden la fragancia y los conservantes. A temperatura ambiente (25 °C) se ajusta el pH usando ácido cítrico que reduce el pH hasta el intervalo ácido de 3,6-

4.4.

Un conjunto de panelistas evaluaron el peinado en húmedo y en seco de J2-818A, J2-218A y Control 1. Las valoraciones de los panelistas se promediaron y se presentan a continuación.

5

Muestra	Peinado en húmedo	Peinado en seco
J2-818A	7,604	7,667
J2-218A	7,042	7,69
Control 1	6,563	7,262

Un conjunto de panelistas evaluaron el peinado en húmedo y en seco de J2-818A, J2-618A y Control 2. Las valoraciones de los panelistas se promediaron y se presentan a continuación.

Muestra	Peinado en húmedo	Peinado en seco
J2-818A	7,57	8,286
J2-618A	7,167	8,38
Control 2	6,381	7,69

10

Un tercer conjunto de panelistas evaluaron la suavidad del cabello junto con análisis instrumental usando un ensayo de flexión con un Analizador de Textura de 3 puntos comparando el Control 2 con el J2-818A. Los resultados se muestran a continuación. El alquil-quaternium-silicona proporcionó un cabello más suave de acuerdo con los ensayos.

15

	Evaluación del panel	Fuerza de flexión en un Analizador de Textura de 3 puntos (kg)
J2-818A	56	0,1605
Control 2	91	0,211

Se ensayó la capacidad del alquil-quaternium-silicona para incrementar la deposición de materiales desde la composición acondicionadora. El material ensayado era maleato de aceite de ricino RMT Ceraphyl™ de ISP Corp. Las composiciones comparativas se prepararon como se muestra a continuación.

20

Componente	% en peso	% en peso	% en peso
Agua	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100
Cloruro de cetrimonio (CTAC)	0,5	0,5	0,5
Alcohol cetílico	2	2	2
Alcohol estearílico	3	3	3
Monoestearato de glicerilo	0,25	0,25	0,25
Conservantes y fragancia	0,52	0,52	0,52
Maleato de aceite de ricino RMT Ceraphyl™	0,5	0,5	0,5
J2-818A	0,5	---	---
Dimeticona (2000 cSt.)	---	0,5	---

Las composiciones se ensayaron en cuanto a la deposición. Los resultados se muestran a continuación. Como puede verse, el polímero de alquil-quaternium-silicona de la invención incrementa la deposición del maleato de aceite de ricino.

25

Muestra	Deposición de Ceraphyl™ RMT (ppm)
J2-818A	4,421
Control de 1 con dimeticona	1,308
Muestra sin J2-218A ni dimeticona	1,467

Un conjunto de panelistas evaluaron el peinado en húmedo y en seco de T2-818A y J2-818A en el cabello después del lavado usando la anterior composición acondicionadora. Las valoraciones de los panelistas se promediaron y se presentan a continuación.

30

Muestra	Peinado en húmedo	Peinado en seco
T2-818A	7,5	7,6
J2-818A	6,8	7,5

Un conjunto de panelistas evaluaron el peinado en húmedo y en seco de 2N-1618A y T2-818A en el cabello después del lavado usando la anterior composición acondicionadora. Las valoraciones de los panelistas se promediaron y se presentan a continuación.

5

Muestra	Peinado en húmedo	Peinado en seco
2N-1618A	8,262	8,119
T2-818A	6,429	7,024

Métodos de Ensayo

Preparación de los mechones de pelo

10

Se usaron 2,5 g de cabello caucásico mínimamente dañado para hacer un mechón de pelo. El mechón es prelavado dos veces con solución de lauril-sulfato sódico (SLS) para retirar los residuos y se deja secar al aire durante la noche. Durante la aplicación, los mechones de pelo se mojan previamente y se les aplican uniformemente 0,5 g de producto de ensayo usando una jeringa. El producto se masajea durante 1 minuto y después se enjuaga con agua durante 30 segundos. El mechón se usa bien húmedo o bien se deja secar.

15

Peinado en húmedo y en seco

20

Se utilizaron ocho panelistas entrenados para peinar los mechones y dar una valoración tanto de calidad como de clasificación en condiciones en húmedo y en seco. Para un ensayo de peinado se usaron tres repeticiones. Todos los mechones se evaluaron en una escala de 1 a 9, siendo el 9 el peinado más fácil.

Suavidad del cabello

25

Seis mechones de pelo se prepararon para evaluar dos prototipos de acondicionadores, con tres para la silicona de la invención y tres para el control. A los panelistas se les exigió, en primer lugar, que se lavaran las manos con jabón antibacteriano y después secarlas usando paños con alcohol. Después, las manos limpias se dejarían secar al aire durante unos pocos minutos hasta que estuvieran completamente secas. Los panelistas después evaluaron la suavidad del pelo por la sensación en las puntas de los dedos de la suavidad en el tercio medio del cabello. Se les pidió valorar los 6 mechones en una escala de 1 a 6, donde 1 es lo más suave y 6 lo más áspero. Se utilizaron ocho panelistas entrenados. Los números dados para cada composición son la suma de las valoraciones para cada uno de los tres mechones de los ocho panelistas. Para obtener la valoración media, la suma puede dividirse por 24.

30

Analizador de la textura

35

Como paso inicial, se realiza la calibración de la fuerza usando el peso de 2.000 g proporcionado, que es seguido del ajuste de los parámetros. Los parámetros principales usados son: Modo de ensayo, Compresión; Velocidad de ensayo, 1,00 mm/s; Velocidad post-ensayo: 10 mm/s; Modo objetivo: Distancia; Distancia: 13,000 mm y Fuerza de activación: 5,0 g. Se usó un macroprograma para registrar los datos y medir los parámetros clave, en este caso, la fuerza máxima y el trabajo total requerido para someter a flexión el pelo. Se utilizó un sistema de flexión de tres puntos para medir la suavidad del pelo. La configuración está comprendida por una plataforma de flexión de tres puntos que tiene una base, dos soportes ajustables y un brazo con la hoja unida en el tercio que llega hasta entre los dos soportes ajustables. El mechón de pelo se pone a lo largo de los soportes de tal forma que el extremo superior del mechón se sitúe en el borde de la plataforma del A. de T. Cuando empieza el ensayo, el brazo del A. de T. se mueve hacia abajo la distancia especificada de 13,000 mm, el mechón de pelo se dobla y después retorna a su posición. Mientras se lleva a cabo el ensayo, los datos se registran en forma de gráfico (perfil de la fuerza) y los datos deseados especificados en el macro, área bajo el gráfico y la fuerza máxima (pico) requerida para someter a flexión el pelo, se registran en una hoja de cálculo. La fuerza máxima es una medida de la suavidad del cabello. Cuanto más suave es el cabello, menor fuerza se requiere para doblarlo. Para una mayor precisión, en el ensayo se midieron mechones por triplicado (tres mechones tratados de la misma forma usando el mismo producto de ensayo) y cada muestra de cabello se prueba cinco veces para conseguir la lectura media. El peso de los mechones se mide también y se usa para normalizar los valores del A. de T. para eliminar cualquier error de la diferencia de peso entre mechones de pelo. Después, se realiza un análisis ANOVA para obtener la información estadística.

40

45

50

55

Deposición

Los mechones de pelo se tratan primero con el producto de ensayo de acondicionador usando el procedimiento de ensayo de peinado estándar para tratar los mechones (descrito anteriormente), después se moja en una jarra de 0,5

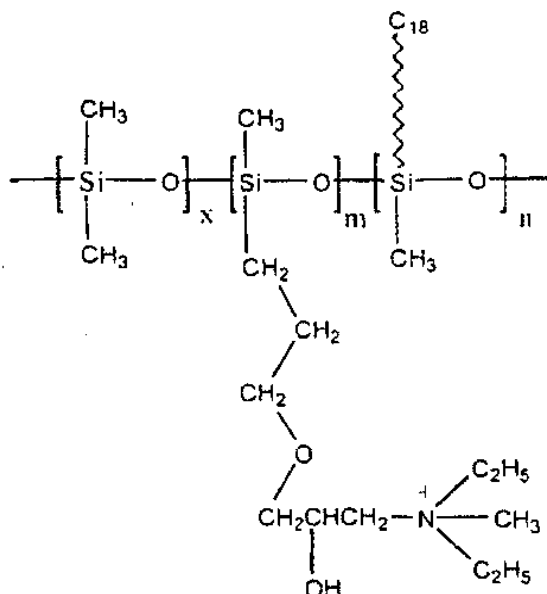
I (16 oz.) con 100 ml de hexano durante 30 minutos. Después de mojar durante media hora, los recipientes se agitaron durante tres minutos antes de que la solución de hexano se recogiera y se condensara para su evaluación por HPLC-MS. Se realizaron seis repeticiones para cada una y se promediaron. Se realizó un análisis ANOVA para determinar la significancia estadística.

5

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto alquil-quaternium-silicona conforme a la Fórmula 1:

Fórmula 1



donde, x, m y n son números enteros y donde:

- (i) x es 20; m es 2 y n es 8;
- (ii) x es 20; m es 4 y n es 6;
- (iii) x es 20; m es 6 y n es 4;
- (iv) x es 20; m es 8 y n es 2;
- (v) x es 40; m es 12 y n es 8 o
- (vi) x es 80; m es 24 y n es 16.

2. Una composición de acondicionador que comprende, basado en el peso de la composición: 0,5% en peso del compuesto alquil-quaternium-silicona de la reivindicación 1, 0,5% en peso de cloruro de cetrimonio (CTAC), 2% en peso de alcohol cetílico, 3% en peso de alcohol estearílico, 0,25% en peso de monoestearato de glicerilo, 0,52% en peso de conservantes y fragancia y c.s. hasta 100% en peso de agua.

3. Una composición de acondicionador que comprende, basado en el peso de la composición: 0,5% en peso del compuesto alquil-quaternium-silicona de la reivindicación 1, donde x es 20, m es 2 y n es 8; 0,5% en peso de maleato de aceite de ricino 0,5% en peso de cloruro de cetrimonio (CTAC), 2% en peso de alcohol cetílico, 3% en peso de alcohol estearílico, 0,25% en peso de monoestearato de glicerilo, 0,52% en peso de conservantes y fragancia y c.s. hasta 100% en peso de agua.

4. Una composición de acondicionador que comprende, basado en el peso de la composición: 0,5% en peso del compuesto alquil-quaternium-silicona de la reivindicación 1, donde x es 40, m es 12 y n es 8; 0,5% en peso de maleato de aceite de ricino 0,5% en peso de cloruro de cetrimonio (CTAC), 2% en peso de alcohol cetílico, 3% en peso de alcohol estearílico, 0,25% en peso de monoestearato de glicerilo, 0,52% en peso de conservantes y fragancia y c.s. hasta 100% en peso de agua.

5. Una composición de acondicionador que comprende, basado en el peso de la composición: 0,5% en peso del compuesto alquil-quaternium-silicona de la reivindicación 1, donde x es 80, m es 24 y n es 16; 0,5% en peso de maleato de aceite de ricino 0,5% en peso de cloruro de cetrimonio (CTAC), 2% en peso de alcohol cetílico, 3% en peso de alcohol estearílico, 0,25% en peso de monoestearato de glicerilo, 0,52% en peso de conservantes y fragancia y c.s. hasta 100% en peso de agua.

6. Una composición acondicionadora de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 2 a 5, que es una composición de acondicionador para el cabello.

7. Un método de acondicionamiento del cabello usando la composición de acondicionador de la reivindicación 6.