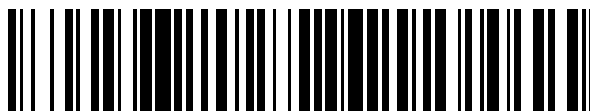


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 610 236**

51 Int. Cl.:

A01N 25/04 (2006.01)
A01N 43/90 (2006.01)
A01P 1/00 (2006.01)
A61K 8/49 (2006.01)
A61Q 19/00 (2006.01)
C11D 1/66 (2006.01)
C11D 3/20 (2006.01)
C11D 3/22 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **31.07.2012 PCT/EP2012/003250**
- 87 Fecha y número de publicación internacional: **07.02.2013 WO13017261**
- 96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **31.07.2012 E 12743891 (9)**
- 97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **19.10.2016 EP 2739150**

54 Título: **Composición que contiene monoésteres de isosorbida y diésteres de isosorbida**

30 Prioridad:

04.08.2011 DE 102011109498

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

26.04.2017

73 Titular/es:

**CLARIANT INTERNATIONAL LTD. (100.0%)
Rothausstrasse 61
4132 Muttenz , CH**

72 Inventor/es:

**PILZ, MAURICE FREDERIC;
KLUG, PETER;
SCHERL, FRANZ-XAVER y
GROHMANN, JOERG**

74 Agente/Representante:

LEHMANN NOVO, María Isabel

ES 2 610 236 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

Composición que contiene monoésteres de isosorbida y diésteres de isosorbida

5 La presente invención se refiere a composiciones que contienen monoésteres de isosorbida y diésteres de isosorbida, así como a su empleo para la obtención de composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, formulaciones fitosanitarias, agentes de lavado o limpieza o colorantes o pinturas.

En la industria existe una gran selección de espesantes que se pueden emplear para ajustar a una medida deseada la viscosidad de productos, como por ejemplo de composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, formulaciones fitosanitarias, agentes de lavado o limpieza o colorantes o pinturas.

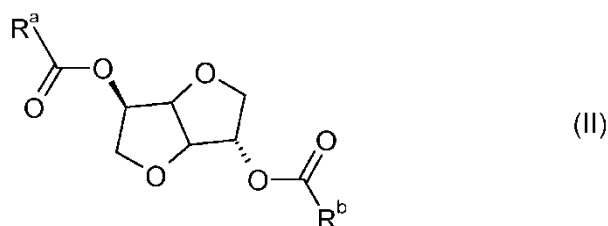
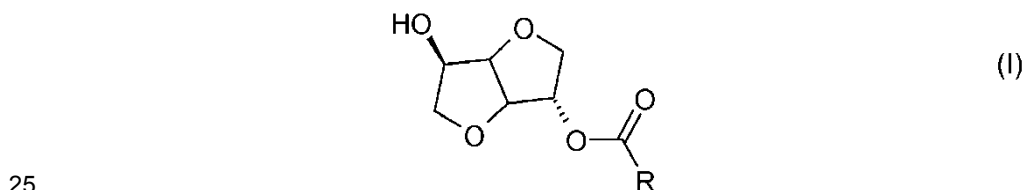
10 Correspondientemente, también son conocidos agentes conservantes o biocidas que se pueden emplear para proteger tales productos contra el ataque microbiano. A modo de ejemplo, a tal efecto se pueden emplear agentes conservantes del anexo X de la norma de cosméticos EU o biocidas de la norma de biocidas EU.

15 No obstante, en el empleo de muchos espesantes y agentes conservantes es desfavorable que su obtención sea frecuentemente costosa y se base en materias primas sintéticas. Además, su acción espesante o conservante requiere frecuentemente mejora, de modo que para un espesamiento y una conservación suficiente son necesarias concentraciones de empleo elevadas.

En la industria existe además un interés acrecentado en sustancias, o bien composiciones, que reúnan en sí las propiedades ya citadas, es decir, que presenten tanto un rendimiento de espesante ventajoso, como también un rendimiento de agente conservante ventajoso.

20 Existía la tarea de poner a disposición sustancias, o bien composiciones, que presentaran un rendimiento espesante ventajoso y se distinguieran además por la ventaja de estar basadas en materias primas regenerativas. Preferentemente, estas sustancias, o bien composiciones, debían presentar también un rendimiento de agente conservante ventajoso.

Sorprendentemente, ahora se descubrió que este problema se soluciona mediante composiciones que contienen uno o varios compuestos de la fórmula (I) y uno o varios compuestos de la fórmula (II)



donde

30 R, R^a y R^b, respectivamente de modo independiente entre sí, grupos alquilo lineales o ramificados, saturados, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono, o grupos alquenilo lineales o ramificados, mono- o poliinsaturados, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono, y ascendiendo la cantidad total de compuestos de las fórmulas (I) y (II) al menos a un 60 % en peso, referido al peso total de la composición, conteniendo la composición, adicionalmente a los compuestos de las fórmulas (I) y (II), una o varias sustancias diferentes seleccionadas a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol, sorbitano, ésteres de sorbitano, isosorbida y ácidos carboxílicos,

y siendo el índice de OH de la mezcla de compuestos de las fórmulas (I) y (II), y adicionalmente el compuesto o los compuestos seleccionados a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol, sorbitano, ésteres de sorbitano, isosorbida y ácidos carboxílicos, menor o igual a 250,

5 conteniendo la composición 0,4 a 0,8 partes en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (II), referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I).

Por consiguiente, son objeto de la invención composiciones como se describen anteriormente.

10 Las composiciones según la invención presentan tanto un rendimiento de espesante ventajoso, como también un rendimiento de agente conservante ventajoso, preferentemente frente a levaduras y hongos, y de modo especialmente preferente frente a hongos, y se distinguen además por la ventaja de estar basadas en materias primas regenerativas.

15 Los compuestos de las fórmulas (I) y (II) presentan muy buen rendimiento de espesante y se basan en materias primas regenerativas. Además, los compuestos de la fórmula (I) presentan también muy buen rendimiento de agente conservante y actúan preferentemente como fungicidas. En el ámbito de la presente invención, esto significa que los compuestos de la fórmula (I) actúan preferentemente como productos activos antimicrobianos contra levaduras y hongos. En una forma especialmente preferente de realización de la invención, los compuestos de la fórmula (I) actúan como productos activos antimicrobianos contra hongos.

20 En comparación con el empleo de ácidos orgánicos como agentes conservantes, los compuestos de la fórmula (I) presentan además la ventaja de una eficacia a lo largo de un intervalo de pH más amplio. Mientras que los ácidos orgánicos muestran frecuentemente una buena acción sólo en el intervalo de pH de 3,5 a 6, los compuestos (I) se pueden emplear ventajosamente también a valores de pH más elevados.

Son ya conocidas composiciones que se basan al menos parcialmente en materias primas regenerativas, y se pueden emplear, por ejemplo, como agente conservante o espesante.

25 El documento WO 2010/108738 A2 (Evonik) describe formulaciones para la limpieza y cuidado de partes del cuerpo humano o animal, que contienen carboxilatos de sorbitano, derivándose la fracción de ácido carboxílico del carboxilato de sorbitano de un ácido carboxílico que contiene 6 a 10 átomos de carbono, y presentando los carboxilatos un índice de hidroxilo (índice de OH) de más de 350, así como el empleo de los citados carboxilatos de sorbitano como reguladores de la viscosidad, producto activo de tratamiento, agente espumante o solubilizador en formulaciones de limpieza o tratamiento.

30 El documento DE 10 2009 022 444 (Clariant) describe composiciones líquidas que contienen monocaprilato de sorbitano y productos activos antimicrobianos, como por ejemplo ácidos orgánicos especiales y sus sales, donadores de formaldehído especiales y sus sales, isotiazolinonas especiales, ésteres de parabeno especiales y sus sales, y piridonas especiales y sus sales, así como su empleo para la conservación de productos cosméticos, dermatológicos o farmacéuticos.

35 En el documento DE 10 2009 022 445 (Clariant) se dan a conocer composiciones líquidas que contienen monocaprilato de sorbitano y alcohol, como por ejemplo etilhexilglicerina, y su empleo para la conservación de productos cosméticos, dermatológicos o farmacéuticos.

40 En el documento JP 8187070 (A) (Lion) se da a conocer una mezcla de monoésteres de ácido graso de ácidos grasos C₈-C₁₈, y al menos un poliol seleccionado a partir de sorbitol, 1,5-sorbitano, 1,4-sorbitano e isosorbida, y diésteres de ácido graso de éstos ácidos grasos y polioles en una proporción ponderal de monoéster : diéster de 33 : 7 a 9 : 1 como producto activo antimicrobiano contra bacterias para productos alimenticios o bebidas.

45 El documento JP 8173787 (A) (Lion) describe una composición que contiene una sustancia tensioactiva que contiene un éster de ácido graso de sorbitol deshidratado. Las composiciones pueden contener mono- o diésteres de ácido caprílico y/o caprínico con un poliol seleccionado a partir del grupo constituido por 1,5-sorbitano, 1,4-sorbitano e isosorbida. En especial se describe el empleo de las composiciones como emulsionante de aceite en agua y como base de limpieza.

50 Los compuestos de las fórmulas (I) y (II) se pueden obtener, por ejemplo, según métodos de uso común para el especialista. A modo de ejemplo, los compuestos de las fórmulas (I) y (II) se pueden obtener mediante esterificación de isosorbida según métodos habituales y conocidos por el especialista, encontrándose disponibles comercialmente tanto la propia isosorbida, como también los componentes ácidos empleados para la esterificación.

Preferentemente, los restos R, R^a y R^b, respectivamente de modo independiente entre sí, son restos alquilo lineales saturados con 7 a 9 átomos de carbono en los compuestos de las fórmulas (I) y (II).

De modo especialmente preferente, los restos R, R^a y R^b en los compuestos de las fórmulas (I) y (II) son restos alquilo lineales saturados con 7 átomos de carbono.

5 Las composiciones según la invención contienen 0,4 a 0,8 partes en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (II), tratándose en este caso preferentemente de dicaprilato de isosorbida, referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I), y preferentemente referido a 1,0 parte en peso de monocaprilato de isosorbida.

10 Entre las composiciones citadas igualmente son preferentes aquellas que contienen 0,05 a 0,7, preferentemente 0,1 a 0,6, y de modo especialmente preferente 0,2 a 0,5 partes en peso de isosorbida, referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I), y preferentemente referido a 1,0 parte en peso de monocaprilato de isosorbida.

15 En otra forma preferente de realización de la invención, las composiciones según la invención contienen 0,001 a 0,2, preferentemente 0,01 a 0,15, y de modo especialmente preferente 0,05 a 0,13 partes en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I), tratándose en este caso preferentemente de dicaprilato de isosorbida, referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (II), y preferentemente referido a 1,0 parte en peso de monocaprilato de isosorbida.

20 Adicionalmente al compuesto o los compuestos de la fórmula (I) y al compuesto o los compuestos de la fórmula (II), las composiciones según la invención contienen uno o varios compuestos seleccionados a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol (en el caso de ésteres de sorbitol se puede tratar de mono-, di-, tri-, tetra-, penta- y/o hexaésteres), sorbitano, ésteres de sorbitano (en el caso de ésteres de sorbitano se puede tratar de mono-, di-, tri- y/o tetraésteres), isosorbida, diésteres de isosorbida y ácidos carboxílicos. En el caso de "sorbitano" se puede tratar, a modo de ejemplo, de 1,4- o 1,5-sorbitano. Tanto los propios ácidos carboxílicos, como también los ácidos carboxílicos que sirven como base para los componentes ácidos de los citados ésteres, corresponden a la fórmula R^cCOOH, donde R^c posee el significado indicado en las fórmulas (I) y (II) para R, R^a y R^b, y es preferentemente un resto alquilo lineal saturado con 7 átomos de carbono, es decir, el ácido carboxílico R^cCOOH es preferentemente ácido caprílico.

30 El índice de OH de la mezcla del compuesto o de los compuestos de las fórmulas (I) y (II), y adicionalmente del compuesto o de los compuestos seleccionados a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol, sorbitano, ésteres de sorbitano, isosorbida y ácidos carboxílicos, es menor o igual a 250, preferentemente menor o igual a 230, de modo especialmente preferente menor o igual a 210, y en especial preferentemente menor o igual a 100 en la composición.

35 En otra forma preferente de realización de la invención, las composiciones según la invención no contienen ningún ácido carboxílico R^cCOOH, o contienen hasta 0,1, preferentemente 0,0001 a 0,05, y de modo especialmente preferente 0,001 a 0,01 partes en peso de ácido carboxílico R^cCOOH, poseyendo R^c el significado indicado anteriormente para R, R^a y R^b en las fórmulas (I) y (II), y siendo el ácido caprílico preferentemente ácido caprílico, referido a 1,0 partes en peso de la cantidad total del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I) y del compuesto o de los compuestos de la fórmula (II), y preferentemente referido a 1,0 partes en peso de la cantidad total de monocaprilato de isosorbida e isosorbida.

40 En otra forma especialmente preferente de realización de la invención, las composiciones según la invención no contienen compuestos seleccionados a partir de sorbitol y ésteres de sorbitol. No obstante, en tanto las composiciones según la invención contengan uno o varios compuestos seleccionados a partir de sorbitol y ésteres de sorbitol (siendo el ácido carboxílico que sirve como base para el componente ácido de estos ésteres preferentemente ácido caprílico), estos compuestos están contenidos conjuntamente, de modo preferente, en una cantidad menor o igual a un 5,0 % en peso, de modo especialmente preferente en una cantidad menor o igual a un 3,0 % en peso, en especial preferentemente en una cantidad menor o igual a un 1,0 % en peso, y de modo extraordinariamente preferente en una cantidad menor o igual a un 0,5 % en peso en las composiciones según la invención, refiriéndose los datos en % en peso respectivamente al peso total de las composiciones acabadas según la invención.

50 En otra forma especialmente preferente de realización de la invención, las composiciones según la invención no contienen compuestos seleccionados a partir de sorbitano y ésteres de sorbitano. No obstante, en tanto las composiciones A contengan uno o varios compuestos seleccionados a partir de sorbitano y ésteres de sorbitano (siendo el ácido carboxílico que sirve como base para el componente ácido de estos ésteres preferentemente

ácido caprílico), estos compuestos están contenidos conjuntamente, de modo preferente, en una cantidad menor o igual a un 20,0 % en peso, de modo especialmente preferente en una cantidad menor o igual a un 10,0 % en peso, en especial preferentemente en una cantidad menor o igual a un 5,0 % en peso, y de modo extraordinariamente preferente en una cantidad menor o igual a un 1,0 % en peso en las composiciones según la invención, refiriéndose los datos en % en peso respectivamente al peso total de las composiciones acabadas según la invención.

En otra forma especialmente preferente de ejecución de la invención, las composiciones según la invención contienen respectivamente uno o varios compuestos de las fórmulas (I) y (II), y adicionalmente uno o varios ésteres de sorbitano constituidos por sorbitano y ácidos carboxílicos R^cCOOH, preferentemente seleccionados a partir de ésteres de sorbitano constituidos por 1,4- y/o 1,5-sorbitano y ácidos carboxílicos R^cCOOH, siendo R^c un grupo alquilo lineal o ramificado, saturado, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono, o un grupo alqueno lineal o ramificado, mono- o poliinsaturado, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono, y siendo conjuntamente la proporción ponderal del compuesto o de los compuestos de las fórmulas (I) y (II) respecto al éster de sorbitano o a los ésteres de sorbitano citados igualmente de 70 : 30 a 100 : 0, preferentemente de 80 : 20 a 100 : 0, de modo especialmente preferente de 90 : 10 a 100 : 0, y en especial preferentemente de 95 : 5 a 100 : 0. La proporción ponderal indicada de "100 : 0" significa que las composiciones A, citadas igualmente, no deben contener ningún éster de sorbitano en esta forma especialmente preferente de ejecución de la invención.

Entre las composiciones según la invención citadas igualmente son preferentes aquellas donde el éster o los ésteres de sorbitano constituidos por sorbitano y ácidos carboxílicos R^cCOOH son seleccionados a partir de ésteres de sorbitano constituidos por sorbitano y ácido caprílico, preferentemente son seleccionados a partir de ésteres de sorbitano constituidos por 1,4- y/o 1,5-sorbitano y ácido caprílico, y de modo especialmente preferente son seleccionados a partir del grupo constituido por monocaprilato de sorbitano y dicaprilato de sorbitano.

Se entiende por índice de hidroxilo u OH de una sustancia aquella cantidad de KOH en mg que es equivalente a la cantidad de ácido acético enlazada en la acetilación de 1 g de sustancia.

Métodos de determinación apropiados para el cálculo del índice de OH son, por ejemplo, DGF C-V 17 a (53), Ph. Eur. 2.5.3 Method A y DIN 53240.

En el ámbito de la presente invención, los índices de OH se determinan en ajuste a DIN 53240-2. En este caso se procede como sigue: se pesa 1 g sobre 0,1 mg exactamente de la muestra homogeneizada a medir. Se añaden 20,00 ml de mezcla de acetilación (mezcla de acetilación: en 1 litro de piridina se introducen con agitación 50 ml de anhídrido de ácido acético). La muestra se disuelve completamente en la mezcla de acetilación, en caso dado bajo agitación y calentamiento. Se añaden 5 ml de disolución de catalizador (disolución de catalizador: se disuelven 2 g de 4-dimetilaminopiridina en 100 ml de piridina). Se cierra el recipiente de reacción y se coloca 10 minutos en el baño de agua precalentado a 55°C, y en este caso se entremezcla. La disolución de reacción se mezcla a continuación con 10 ml de agua completamente desalinizada, el recipiente de reacción se cierra de nuevo, y se deja reaccionar de nuevo 10 minutos en baño de agua de agitación. La muestra se enfría a temperatura ambiente (25°C). A continuación se añaden 50 ml de 2-propanol y 2 gotas de fenoltaleína. Esta disolución se titra con hidróxido sódico (hidróxido sódico c = 0,5 mol/l) (Va). Bajo las mismas condiciones, pero sin pesada de muestra, se determina el valor eficaz de la mezcla de acetilación (Vb).

A partir del consumo de la determinación del valor eficaz y de la titración de la muestra se calcula el índice de OH (OHZ) según la siguiente fórmula:

$$OHZ = \frac{(Vb - Va) \cdot c \cdot t \cdot M}{E}$$

OHZ = índice de hidroxilo en mg de KOH/g de sustancia,

Va = consumo de hidróxido sódico en ml en la titración de la muestra,

Vb = consumo de hidróxido sódico en ml en la titración del valor eficaz,

c = concentración de cantidades de sustancia de hidróxido sódico en mol/l,

t = título de hidróxido sódico,

M = masa molar de KOH = 56,11 g/mol,

E = pesada de muestra en g.

5 (Va-Vb) es aquella cantidad de hidróxido sódico empleado en ml, que es equivalente a la cantidad de ácido acético enlazado en la acetilación de la muestra a medir descrita anteriormente.

El método para la determinación del índice de OH, descrito igualmente, se designa a continuación "método OHZ-A".

10 Las composiciones según la invención son apropiadas de modo ventajoso para la obtención de composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, formulaciones fitosanitarias, agentes de lavado o limpieza, o colorantes o pinturas.

Por lo tanto, otro objeto de la invención es el empleo de una composición según la invención para la obtención de composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, formulaciones fitosanitarias, agentes de lavado o limpieza, o colorantes o pinturas.

15 Las composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, las formulaciones fitosanitarias, los agentes de lavado o limpieza y los colorantes o pinturas, contienen de manera conjunta el compuesto o los compuestos de la fórmula (I) y el compuesto o los compuestos de la fórmula (II) preferentemente en cantidades de un 0,01 a un 10,0 % en peso, de modo especialmente preferente en cantidades de un 0,1 a un 5,0 % en peso, y en especial preferentemente en cantidades de un 0,2 a un 3,0 % en peso, referido respectivamente al peso total de las composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas acabadas, formulaciones fitosanitarias, agentes de lavado o limpieza o colorantes o pinturas.

20 Las composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, las formulaciones fitosanitarias, los agentes de lavado o limpieza o los colorantes o las pinturas tienen viscosidades preferentemente en el intervalo de 50 a 200 000 mPa.s, de modo especialmente preferente en el intervalo de 500 a 100 000 mPa.s, en especial preferentemente en el intervalo de 2 000 a 50 000 mPa.s, y de modo extraordinariamente preferente en el intervalo de 5 000 a 30 000 mPa.s (20°C, Brookfield RVT, set de husillos RV a 20 revoluciones por minuto).

25 Las composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas se presentan preferentemente en forma de fluidos, geles, espumas, sprays, lociones o cremas.

30 Las composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, las formulaciones fitosanitarias, los agentes de lavado o limpieza o los colorantes o las pinturas están constituidos preferentemente sobre base acuosa o acuoso-alcohólica, o se presentan como emulsiones o dispersiones. De modo especialmente preferente, éstas se presentan como emulsiones, y en especial se presentan como emulsiones de aceite en agua.

35 Las composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, las formulaciones fitosanitarias, los agentes de lavado o limpieza, o los colorantes o las pinturas, pueden contener como agentes auxiliares y aditivos adicionales todas las sustancias empleadas habitualmente para la respectiva aplicación, a modo de ejemplo aceites, ceras, emulsionantes, co-emulsionantes, dispersantes, agentes tensioactivos, antiespumantes, solubilizadores, electrólitos, hidroxiacidos, estabilizadores, polímeros, filmógenos, otros espesantes, agentes gelificantes, agentes sobreengrasantes, reengrasantes, otros productos activos antimicrobianos, productos activos biógenos, astringentes, sustancias activas, sustancias desodorantes, agentes antisolares, antioxidantes, oxidantes, agentes humectantes, disolventes, colorantes, pigmentos, agentes de brillo nacarado, sustancias perfumantes, agentes de opacidad y/o siliconas.

40 Las composiciones cosméticas, dermatológicas o farmacéuticas, las formulaciones fitosanitarias, los agentes de lavado o limpieza, o los colorantes o las pinturas, poseen valores de pH preferentemente de 2 a 11, de modo especialmente preferente de 4,5 a 8,5, y en especial preferentemente de 5,5 a 6,5.

45 Los siguientes ejemplos y aplicaciones deben explicar la invención más detalladamente, pero sin limitarla a los mismos. En el caso de todos los datos porcentuales se trata de % en peso (% en peso), en tanto no se indique explícitamente lo contrario.

Ejemplos de ensayo

A) Obtención de caprilato de isosorbida 1

5 En un aparato de agitación con pieza superpuesta de destilación se disponen 190,0 g (1,3 moles) de isosorbida ("Sorbon" de Ecogreen Oleochemicals) y 187,5 g (1,3 moles) de ácido octanoico (ácido caprílico) a 80°C junto con 0,38 g de hidróxido sódico (al 18 % en peso, acuoso), como catalizador. Bajo agitación y paso de nitrógeno (10-12 litros por hora) se calentó la mezcla de reacción en primer lugar a 180°C, comenzando a destilar el agua de reacción. La carga se calienta entonces 1 hora a 190°C y en 2 horas más a 210°C. Una vez alcanzados 210°C se esterifica hasta que se ha alcanzado un índice de ácido de < 1 mg de KOH/g. Se obtiene 345,7 g de caprilato de isosorbida de color ámbar (97 % de la teoría). El valor de pH (5 % en peso en etanol/agua 1 : 1) asciende a 5,9. El valor de pH se midió según DIN EN 1262.

10 Otros datos característicos analíticos de caprilato de isosorbida:

índice de ácido: 0,9 mg de KOH/g, medido según DIN EN ISO 2114,

índice de hidroxilo: 206 mg de KOH/g, medido en ajuste a DIN 53240-2 según método OHZ-A,

índice de saponificación: 204 mg de KOH/g, medido según DIN EN ISO 3681.

El caprilato de isosorbida 1 posee la siguiente composición:

Substancia	% en peso
Ácido caprílico	0,4
Isosorbida	18,1
Monocaprilato de isosorbida	50,9
Dicaprilato de isosorbida	30,6

15

B) Obtención de dicaprilato de isosorbida

20 En un aparato de agitación de 1 litro con entrada de nitrógeno se calientan a 180°C 219,0 g (1,5 mol) de isosorbida y 461,4 g (3,2 mol) de ácido caprílico bajo agitación y paso de nitrógeno. La carga de reacción se calienta a 180°C hasta que no destila más agua de reacción (aproximadamente 28 horas). A continuación se aumenta la temperatura gradualmente a 210°C (en total durante aproximadamente 30 h). La reacción ha concluido cuando se ha alcanzado un índice de ácido residual de < 2 mg de KOH/g. se obtiene un líquido claro, parduzco.

Otros datos característicos analíticos del producto de reacción:

índice de ácido: 0,8 mg de KOH/g, medido según DIN EN ISO 2114,

25 índice de hidroxilo: 25,2 mg de KOH/g, medido en ajuste a DIN 53240-2 según método OHZ-A,

índice de saponificación: 54,6 mg de KOH/g, medido según DIN EN ISO 3681.

Para la purificación adicional se destiló el producto a una presión de ≤ 1 mbar y una temperatura de cola de 210°C a 240°C. Se obtienen 251,6 g de un líquido amarillo claro.

El dicaprilato de isosorbida posee la siguiente composición:

30

Substancia	% en peso
Monocaprilato de isosorbida	9,4
Dicaprilato de isosorbida	89,6
Resto	1

C) Determinación del rendimiento de espesamiento

- 5 Bajo empleo de Genapol[®] LRO (lauriléter-2 sulfato sódico, 27 % en agua) y Genagen[®] KB (betaína de coco, 30 % en peso en agua), y adicionalmente agua, se obtuvo una mezcla que contenía ambos agentes tensioactivos en proporción ponderal 8 : 2 respecto a un 15 % en peso en agua (a continuación llamada "mezcla A"). Se determinó el rendimiento de espesamiento de caprilato de isosorbida 1, dicaprilato de isosorbida e isosorbida en la mezcla A. Los resultados se representan en la tabla 1.

Tabla 1: viscosidades medidas

Substancia añadida a la mezcla A; cantidad [% en peso]	Viscosidad [mPa · s]
Ninguna	135
Caprilato de isosorbida 1 [1 % en peso]	2510
Dicaprilato de isosorbida [1 % en peso]	2390
Isosorbida [1 % en peso]	160

10

Como se puede extraer de los resultados de la tabla 1, la isosorbida no posee un rendimiento de espesamiento digno de mención, mientras que el caprilato de isosorbida 1 y el dicaprilato de isosorbida provocan un espesamiento significativo.

D) Determinación de la eficacia antimicrobiana de caprilato de isosorbida 1

- 15 A continuación se investiga la eficacia antimicrobiana de caprilato de isosorbida 1 en butilpoliglicol frente a bacterias, hongos y levaduras. Para el examen con bacterias se diluyó caprilato de isosorbida 1 con butilpoliglicol, y a continuación se añadió a caso-agar líquido, tamponado a pH 7 (+/- 0,2) (agar caseína-peptona) a 50°C en diversas concentraciones (a continuación las llamadas composiciones B1, B2, etc). Para el examen con hongos y levaduras se diluyó caprilato de isosorbida 1 con butilpoliglicol, y a continuación se añadió a sabouraud-4 %-agar dextrosa
- 20 líquido, tamponado a pH 5,6 (+/- 0,2), en diversas concentraciones (a continuación las llamadas composiciones PH1, PH2, etc.). Cada una de las composiciones B1, B2, etc, o bien PH1, PH2, etc, se vertió en cápsulas de Petri y se inoculó respectivamente con la misma cantidad de bacterias, hongos y levaduras. La concentración mínima (MHK) es la concentración a la que se produce una inhibición del crecimiento de bacterias, hongos y levaduras en las composiciones B1, B2, o bien PH1, PH2, etc.

- 25 Los valores determinados e indicados a continuación en la tabla 2 para las concentraciones de inhibición mínimas de caprilato de isosorbida 1 ya están corregidos en el efecto de dilución de butilpoliglicol.

Tabla 2: concentraciones de inhibición mínimas (MHK) de caprilato de isosorbida 1

Bacterias (B), hongos (P) o levaduras (H) investigadas	MHK de caprilato de isosorbida 1 [ppm]
<i>Staphylococcus aureus</i> (B)	2500
<i>Pseudomonas aeruginosa</i> (B)	10000
<i>Escherichia coli</i> (B)	7500
<i>Enterobacter aerogenes</i> (B)	10000
<i>Klebsiella pneumoniae</i> (B)	10000
<i>Proteus vulgaris</i> (B)	5000
<i>Pseudomonas oleovorans</i> (B)	10000
<i>Citrobacter freundii</i> (B)	10000
<i>Candida albicans</i> (H)	600
<i>Aspergillus brasiliensis</i> (P)	800
<i>Penicillium minioluteum</i> (P)	600
<i>Aspergillus terreus</i> (P)	600
<i>Fusarium solani</i> (P)	600
<i>Penicillium funiculosium</i> (P)	400

En los resultados indicados en la tabla 2 se identifica que el caprilato de isosorbida 1 no posee ninguna eficacia antimicrobiana, en especial contra la levadura *Candida albicans* ni los hongos sometidos a ensayo.

E) Ejemplos de aplicación

- 5 Se obtienen las siguientes formulaciones bajo empleo de la composición de caprilato de isosorbida 1 según la invención.

Ejemplo de formulación 1: crema hidratante revitalizante

ES 2 610 236 T3

Fase	Substancia de contenido	% en peso
	Hostacerin [®] SFO	2,0
	Éster de sorbitol de aceite de semillas de girasol	
	Velsan [®] CCT	4,5
	Triglicérido caprílico/cáprico	
	Cetiol [®] OE	4,5
A	Dicaprililéter	
	Lanette [®] 22	4,0
	Alcohol behénico	
	Lanette [®] 18	4,0
	Alcohol esteárico	
	Fucogel [®] 1000	1,0
	Goma de biosacárido 1	
B	Coenzyme [®] Q 10	0,1
	Ubiquinonas	
	Agua	ad 100
C	Glicerina	10,0
	Hostaphat [®] CK 100	0,6
	Cetilfosfato potásico	
D	Fenoxietanol	1,0
	Caprilato de isosorbida 1	1,0
E	NaOH (al 10 % en peso en agua)	q.s.

ES 2 610 236 T3

Obtención:

I Se mezclan los componentes de A y se calienta a 80 °C

II Se mezclan los componentes de C y se calienta a 80 °C

III Se añade B a I

5 IV Se añade II a III y se agita hasta que la mezcla se ha enfriado a temperatura ambiente

V Se añade D a IV

VI Se ajusta el valor de pH con E a pH 5,5

Ejemplo de formulación 2:

Fase	Substancia de contenido	% en peso
	Hostacerin [®] EWO	16,0
A	2-sesquiisosteato de poliglicerilo (y) cera Alba (y) cera Carnauba (y) estearato de etilhexilo (y) estearato de magnesio (y) estearato de aluminio	
	Palmitato de isopropilo	10,0
	Aceite de aguacate	2,0
	Velsan [®] CCT	2,5
	Triglicérido caprílico/cáprico	
	Octopirox [®]	0,05
B	Piroctona olamina	
	Propilenglicol	1,0
	Agua	ad 100
C	Glicerina	4,0
	Sulfato de magnesio * 7 H ₂ O	0,7
	Alantoína	0,5
	Acetato de tocoferilo	0,5
	Aceite de hojas de Rosmarinus Officinalis (romero)	0,1

ES 2 610 236 T3

Fase	Substancia de contenido	% en peso
D	Urea	10,0
	Caprilato de isosorbida 1	1,0
	Fenoxietanol	0,8

Obtención:

I Se mezclan los componentes de A y se calienta a 80 °C

5 II Se mezclan los componentes de B hasta que se han disuelto todas las substancias (eventualmente bajo ligero calentamiento)

III Se añade II a I

IV Se mezclan los componentes de C y se calienta a 50 °C

V Se agita IV en I con velocidad elevada hasta enfriamiento a 35 °C

VI Se añade D a 35 °C a V

10 Ejemplos de formulación 3 y 4: formulaciones fitosanitarias

Formulación N°	3	4
Substancia de contenido	Cantidad de la respectiva substancia de contenido [% en peso]	
Atrazina	43,6	43,6
Dispersogen® PSL 100	-	1,7
Genapol® LSS	-	1,6
Dispersogen® LFS	2,1	-
Propilenglicol	4,3	4,3
Defoamer® SE 57	0,6	0,6
Kelzan® S (2 % en peso en agua)	7,3	7,3
Caprilato de isosorbida 1	0,3	0,2
Fenoxietanol	1,0	1,0

ES 2 610 236 T3

Formulación N°	3	4
Agua	hasta 100	hasta 100

Obtención:

5 El producto activo se dispersa previamente con las demás sustancias de contenido (aparte de la disolución de Kelzan® S), y a continuación se somete a una molidura fina, hasta que el tamaño medio de partícula asciende a < 2 micrómetros. A continuación se introduce con agitación la disolución de Kelzan® S.

Ejemplo de formulación 5: agente para el lavado de la vajilla a mano

Substancia de contenido	% en peso
Hostapur® SAS 60	40,0
(sulfonato de alcano, 60 % en peso en agua)	
Hostapur® OS liquid (C14-16 alquilsulfonato sódico, 40 % en peso in agua)	11,0
Genaminox® LA (óxido de dimetillauramina, 30 % en peso en agua)	3,0
Genagen® CAB (cocoamidopropilbetaína, 30 % en peso en agua)	3,0
Caprilato de isosorbida 1	0,8
Alcohol bencílico	0,8
Agua	ad 100

Ejemplo de formulación 6: limpiador de superficies (limpiador universal)

Substancia de contenido	% en peso
Hostapur® SAS 60 (sulfonato de alcano, 60 % en peso en agua)	5,0
Genapol® UD 080 (undecanol + 8 EO)	2,0
Genaminox® LA (óxido de dimetillauramina, 30 % en peso en agua)	2,0
Metilisotiazolinona	0,01
Caprilato de isosorbida 1	1,0
Agua	ad 100

ES 2 610 236 T3

Obtención de los ejemplos de formulación 5 y 6:

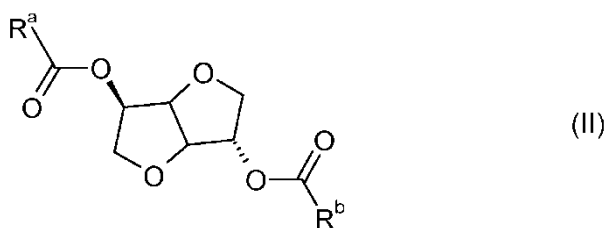
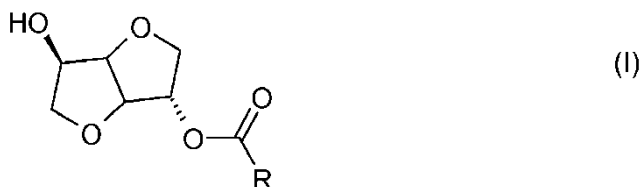
Se dispone la mitad de la cantidad de agua, y se introducen con agitación los componentes en el orden que se describe en las tablas indicadas en los ejemplos de formulación 5 y 6. La cantidad restante de agua se añade posteriormente. Resultan composiciones claras, acuosas.

5

REIVINDICACIONES

1.- Composición que contiene

uno o varios compuestos de la fórmula (I) y uno o varios compuestos de la fórmula (II)



5

donde

R, R^a y R^b, respectivamente de modo independiente entre sí, grupos alquilo lineales o ramificados, saturados, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono, o grupos alquenilo lineales o ramificados, mono- o poliinsaturados, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono,

10

caracterizada por que la cantidad total de compuestos de las fórmulas (I) y (II) asciende al menos a un 60 % en peso, referido al peso total de la composición,

15

conteniendo la composición, adicionalmente a los compuestos de las fórmulas (I) y (II), una o varias sustancias diferentes seleccionadas a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol, sorbitano, ésteres de sorbitano, isosorbida y ácidos carboxílicos,

y siendo el índice de OH de la mezcla de compuestos de las fórmulas (I) y (II), y adicionalmente el compuesto o los compuestos seleccionados a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol, sorbitano, ésteres de sorbitano, isosorbida y ácidos carboxílicos, menor o igual a 250,

20

conteniendo la composición 0,4 a 0,8 partes en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (II), referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I).

2.- Composición según la reivindicación 1 para el combate de hongos.

3.- Composición según la reivindicación 1 o 2, caracterizada por que los restos R, R^a y R^b en las fórmulas (I) y (II), respectivamente de modo independiente entre sí, son restos alquilo saturados con 7 a 9 átomos de carbono.

25

4.- Composición según la reivindicación 3, caracterizada por que los restos R, R^a y R^b en las fórmulas (I) y (II) son restos alquilo lineales saturados con 7 átomos de carbono.

5.- Composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 4, caracterizada por que contiene 0,4 a 0,8 partes en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (II), tratándose en este caso de dicaprilato de isosorbida, referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I), y preferentemente referido a 1,0 parte en peso de monocaprilato de isosorbida.

30

6.- Composición según la reivindicación 5, caracterizada por que contiene 0,05 a 0,7, preferentemente 0,1 a 0,6, y de modo especialmente preferente 0,2 a 0,5 partes en peso de isosorbida, referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I), y preferentemente referido a 1,0 parte en peso de monocaprilato de isosorbida.

- 5 7.- Composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 4, caracterizada por que contiene 0,001 a 0,2, preferentemente 0,01 a 0,15, y de modo especialmente preferente 0,05 a 0,13 partes en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (I), tratándose en este caso preferentemente de monocaprilato de isosorbida, referido a 1,0 parte en peso del compuesto o de los compuestos de la fórmula (II), y preferentemente referido a 1,0 parte en peso de dicaprilato de isosorbida.
- 8.- Composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 7, caracterizada por que contiene una o varias substancias diferentes seleccionadas a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol, isosorbida y ácidos carboxílicos.
- 10 9.- Composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 8, caracterizada por que el índice de OH de la mezcla de compuestos de las fórmulas (I) y (II), y adicionalmente del compuesto o de los compuestos seleccionados a partir del grupo constituido por sorbitol, ésteres de sorbitol, sorbitano, ésteres de sorbitano, isosorbida y ácidos carboxílicos, es menor o igual a 230, preferentemente menor o igual a 210, y en especial preferentemente menor o igual a 100.
- 15 10.- Composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 9, caracterizada por que contiene respectivamente uno o varios compuestos de las fórmulas (I) y (II), y adicionalmente uno o varios ésteres de sorbitano constituidos por sorbitano y ácidos carboxílicos R^cCOOH , preferentemente seleccionados a partir de ésteres de sorbitano constituidos por 1,4- y/o 1,5-sorbitano y ácidos carboxílicos R^cCOOH , siendo R^c un grupo alquilo lineal o ramificado, saturado, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono, o un grupo alqueno lineal o ramificado, mono- o poliinsaturado, con 5 a 11, preferentemente 7 a 9, y de modo especialmente preferente 7 átomos de carbono, y siendo conjuntamente la proporción ponderal del compuesto o de los compuestos de las fórmulas (I) y (II) respecto al éster de sorbitano o a los ésteres de sorbitano citados igualmente de 70 : 30 a 100 : 0, preferentemente de 80 : 20 a 100 : 0, de modo especialmente preferente de 90 : 10 a 100 : 0, y en especial preferentemente de 95 : 5 a 100 : 0.
- 20 11.- Composición según la reivindicación 10, caracterizada por que el éster de sorbitano o los ésteres de sorbitano constituidos por ácidos carboxílicos y R^cCOOH son seleccionados a partir de ésteres de sorbitano constituidos por sorbitano y ácido caprílico, preferentemente son seleccionados a partir de ésteres de sorbitano constituidos por 1,4- y/o 1,5-sorbitano y ácido caprílico, y de modo especialmente preferente son seleccionados a partir del grupo constituido por monocaprilato de sorbitano y dicaprilato de sorbitano.
- 25 12.- Empleo de una composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 11 para la obtención de una composición cosmética, dermatológica o farmacéutica, una formulación fitosanitaria, un agente de lavado o limpieza, o un colorante o una pintura.
- 30 13.- Empleo de una composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 11 como producto antimicrobiano contra hongos.
- 35 14.- Empleo de una composición según una o varias de las reivindicaciones 1 a 11 como producto antimicrobiano contra levaduras.