

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 617 440**

51 Int. Cl.:

**C07C 309/17** (2006.01)

**C11D 1/12** (2006.01)

**A61K 8/46** (2006.01)

**A61Q 5/02** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **03.11.2010 PCT/US2010/055266**

87 Fecha y número de publicación internacional: **09.09.2011 WO2011109047**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **03.11.2010 E 10847154 (1)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **11.01.2017 EP 2496545**

54 Título: **Sulfometilsuccinatos, procedimiento para preparar los mismos y composiciones que contienen los mismos**

30 Prioridad:

**03.11.2009 US 280439 P**

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

**19.06.2017**

73 Titular/es:

**STEPAN COMPANY (100.0%)  
22 West Frontage Road  
Northfield, Illinois 60093, US**

72 Inventor/es:

**BROWN, AARON, MICHAEL y  
DONG, XUE, MIN**

74 Agente/Representante:

**CURELL AGUILÁ, Mireia**

ES 2 617 440 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

Sulfometilsuccinatos, procedimiento para preparar los mismos y composiciones que contienen los mismos

5 **Campo de la invención**

La presente invención se refiere a compuestos de sulfometilsuccinato, a procedimientos de preparación de los compuestos de sulfometilsuccinato y a composiciones que comprenden los compuestos de sulfometilsuccinato. Más particularmente, la presente invención se refiere a tensioactivos aniónicos de sulfometilsuccinato derivados de carbono 100% renovable y que presentan propiedades de espumación superiores, a procedimientos de preparación de los compuestos de sulfometilsuccinato a partir de ácido itacónico y derivados de ácido itacónico, y a productos formulados que contienen los compuestos de sulfometilsuccinato que se pueden utilizar en una amplia variedad de aplicaciones personales, industriales y domésticas.

15 **Antecedentes**

Una fuerte tendencia en el ámbito de los productos de cuidado personal es la de las formulaciones naturales (de carbono 100% renovable) y suaves. Esta tendencia es especialmente marcada en champús, jabones corporales, jabones líquidos para las manos, productos espumantes de limpieza facial y geles de ducha. Actualmente, los alquilpoliglicósidos y el laurilsulfato de sodio dominan el mercado de los tensioactivos de origen natural. Los alquilpoliglicósidos tienen como desventaja su coste, su falta de constitución de viscosidad, su bajo nivel de espumación y su color oscuro, mientras que el laurilsulfato de sodio tiene connotaciones negativas por su poder irritativo. Los glutamatos de acilo constituyen el campo restante de tensioactivos naturales y a menudo tienen un precio exorbitante que hace que su utilización como tensioactivos primarios o secundarios sea prohibitiva.

En el ámbito del cuidado personal, existe el deseo de disponer de tensioactivos que sean suaves, no contengan sales ni sulfatos y sean 100% activos. Otras características deseables incluyen ser líquidos a temperatura ambiente, presentar una estructura que no contenga nitrógeno, poderse formular en productos por procesos en frío y ser capaces de actuar igual de bien o mejor que los tensioactivos existentes. En los productos de limpieza doméstica, industrial e institucional, los tensioactivos y los disolventes son ingredientes importantes. Entre las características deseables de estos productos se incluyen su capacidad de emulsionar la suciedad grasienta o aceitosa, de formar suspensiones de la misma o penetrar en la misma, y su capacidad de formar suspensiones de las partículas y dispersarlas con el fin de limpiar superficies; y, además, su capacidad de prevención de que la suciedad, la grasa o las partículas se vuelvan a depositar sobre las superficies recién lavadas. Por ejemplo, deseablemente, un detergente para ropa debe eliminar la suciedad de la misma y a continuación mantener dicha suciedad en solución, de tal modo que la misma se elimine con el agua de lavado en lugar de volverse a depositar sobre la ropa lavada.

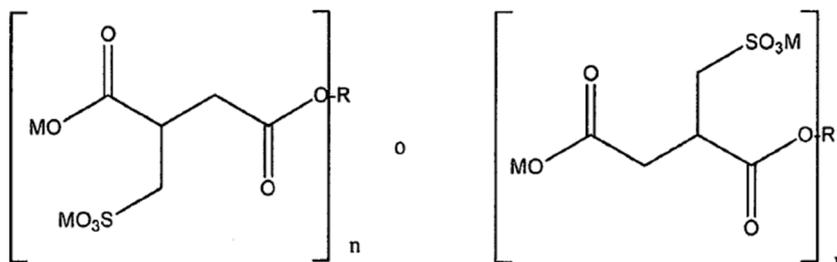
Asimismo, resulta deseable tener la capacidad de controlar la formación de espuma de diferentes productos domésticos, industriales e institucionales en función de las aplicaciones finales. Por ejemplo, un detergente líquido para lavar los platos a mano debe tener, preferentemente, la capacidad de formar espuma en presencia de la suciedad que se está eliminando de la vajilla. En cambio, en un detergente para la ropa o lavavajillas que se pretende utilizar en una máquina de lavado de alta eficiencia, resulta deseable que se forme poca espuma a fin de obtener la máxima limpieza y evitar el exceso de espuma para que la máquina funcione correctamente. Otras propiedades deseables de dichos productos de consumo son la capacidad de aclarar la formulación y de mejorar su estabilidad. Resulta deseable que los productos de lavado de superficies duras tengan capacidad de humedecer diversos tipos de superficie y de capturar o formar suspensiones con la suciedad a fin de no dejar en la superficie residuos en forma de rayas y/o películas.

La utilización de sulfosuccinatos como tensioactivos se describe en Kosswig, Surfactants, Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry 2000.

**Sumario de la invención y divulgación adicional**

En un aspecto, la presente memoria da a conocer sulfometilsuccinatos de fórmula:

55



en la que R es un grupo alquilo, alquenilo, alquinilo, alquilo alcoxlado, cicloalquilo, cicloalquenilo, cicloalquinilo, alquilo ramificado, alquenilo ramificado, alquinilo ramificado, alquilo alcoxlado ramificado, aromático, alquil aromático sustituido, alquenil aromático sustituido o aromático alcoxlado sustituido; M es un catión, hidrógeno, amina o sal de amonio, o combinaciones de los mismos; y n está comprendido entre 1 y aproximadamente 6.

5

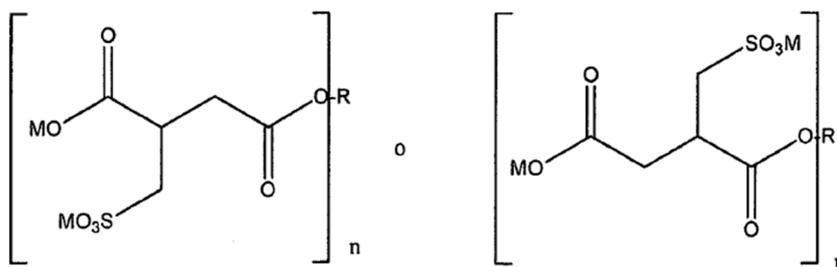
En otro aspecto, la presente memoria da a conocer un procedimiento para preparar un sulfometilsuccinato:

10

(i) haciendo reaccionar anhídrido de itaconato con un alcohol de fórmula general ROH a fin de preparar un éster de itaconato, en el que R es un grupo alquilo, alquenilo, alquinilo, alquilo alcoxlado, cicloalquilo, cicloalquenilo, cicloalquinilo, alquilo ramificado, alquenilo ramificado, alquinilo ramificado, alquilo alcoxlado ramificado, aromático, alquil aromático sustituido, alquenil aromático sustituido o aromático alcoxlado sustituido; y

15

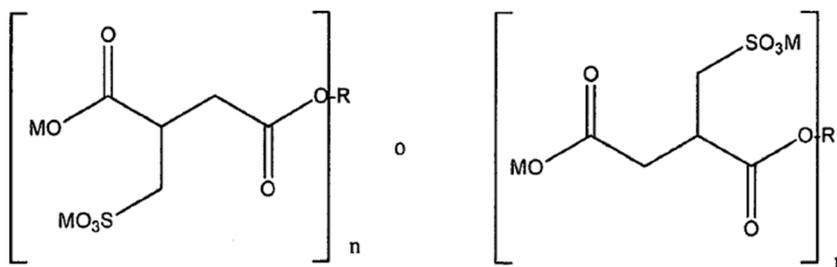
(ii) haciendo reaccionar el éster de itaconato con un agente de sulfonación para producir un sulfometilsuccinato de fórmula general



20

en la que M es un catión, hidrógeno, amina o sal de amonio, o una combinación de los mismos; y n está comprendido entre 1 y aproximadamente 6.

En otro aspecto, la presente memoria da a conocer una composición que contiene un sulfometilsuccinato de fórmula:



25

en la que R es un grupo alquilo, alquenilo, alquinilo, alquilo alcoxlado, cicloalquilo, cicloalquenilo, cicloalquinilo, alquilo ramificado, alquenilo ramificado, alquinilo ramificado, alquilo alcoxlado ramificado, aromático, alquil aromático sustituido, alquenil aromático sustituido o aromático alcoxlado sustituido;

30

M es un catión, hidrógeno, amina o sal de amonio, o combinaciones de los mismos; y

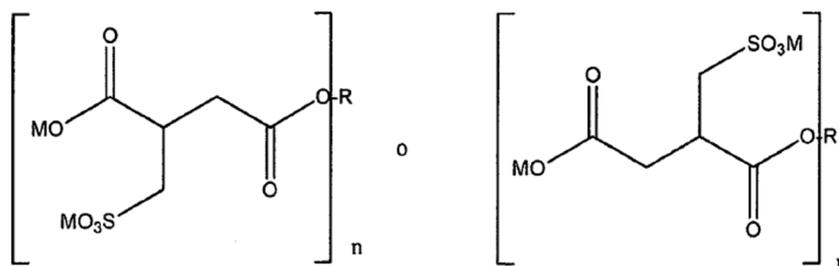
n es menor o igual a 2; y

35

un tensioactivo, colorante, agua, disolvente, fragancia, emoliente, emulsionante, humectante, estructurante, quelante, modificador de la reología, sal, ajustador del pH, vehículo, polímero, vitamina, aminoácido, modificador sensorial, agente antiarrugas, agente absorbente de ultravioletas, agente exfoliante, agente antibacteriano, enzima, agente antifúngico o conservante, o una combinación de los mismos.

40

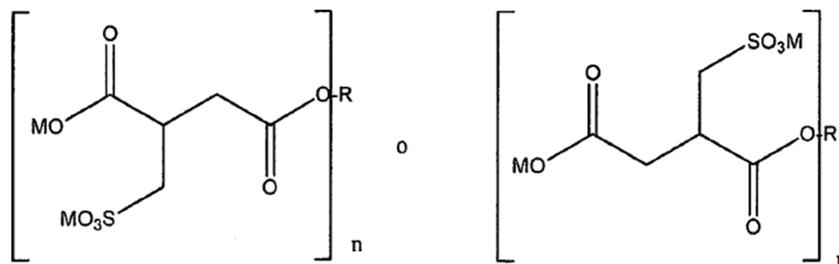
En otro aspecto, la presente memoria da a conocer una composición que contiene un sulfometilsuccinato de fórmula:



5 en la que R es un grupo alquilo, alqueniilo, alquinilo, alquilo alcoxilado, cicloalquilo, cicloalqueniilo, cicloalquiniilo, alquilo ramificado, alqueniilo ramificado, alquinilo ramificado, alquilo alcoxilado ramificado, aromático, alquil aromático sustituido, alqueniil aromático sustituido o aromático alcoxilado sustituido; M es un catión, hidrógeno, amina o sal de amonio, o una combinación de los mismos; y n es igual a 1. La composición también incluye uno o más de entre un tensoactivo, colorante, agua, disolvente, fragancia, emoliente, emulsionante, humectante, estructurante, quelante, modificador de la reología, sal, ajustador del pH, vehículo, polímero, vitamina, aminoácido, modificador sensorial, agente antiarrugas, agente absorbente de ultravioletas, agente exfoliante, agente antibacteriano, enzima, agente antifúngico o conservante, o una combinación de los mismos.

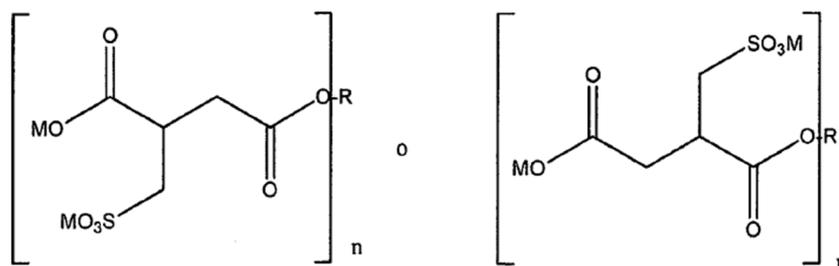
10 Según otro aspecto de la presente memoria, una pastilla de jabón contiene (a) aproximadamente entre el 0,01% y aproximadamente el 60% del sulfometilsuccinato descrito en la presente memoria, (b) aproximadamente entre el 30% y aproximadamente el 95% de un jabón C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>; (c) entre aproximadamente el 0,5% y aproximadamente el 30% de un ácido graso C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>; (d) entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 5% de un electrolito; (e) entre aproximadamente el 0,5% y aproximadamente el 15% de un polialcohol; y (f) entre aproximadamente el 3% y aproximadamente el 22% de agua. Opcionalmente, la pastilla de jabón puede contener hasta aproximadamente el 50% de un tensoactivo sintético; y, opcionalmente, hasta aproximadamente el 30% de, por lo menos, un éster de alquilo alfa sulfonado, por lo menos un ácido graso sulfonado, o una mezcla de los mismos, expresándose todos los porcentajes con respecto al peso total de la pastilla de jabón.

Según la presente invención, se da a conocer un sulfometilsuccinato de alquilo que presenta la siguiente estructura general:



25 en la que R es un grupo alquilo o un grupo alquilo alcoxilado, M es un metal alcalino, hidrógeno, metal alcalinotérreo, amina o sal de amonio, o combinaciones de los mismos, y n está comprendido entre 1 y aproximadamente 6. De acuerdo con ciertas formas de realización, R contiene de 1 a aproximadamente 24, alternativamente de 1 a aproximadamente 18, alternativamente de aproximadamente 6 a aproximadamente 18, alternativamente de aproximadamente 12 a aproximadamente 14, átomos de carbono. R puede derivarse de un compuesto que contiene hidroxilo, que comprende entre 1 y aproximadamente 6 grupos hidroxilo. Un compuesto que contiene hidroxilo preferido es un alcohol graso, tal como los que contienen de aproximadamente 6 a aproximadamente 18 átomos de carbono. Opcionalmente, el grupo alquilo en un sulfometilsuccinato de alquilo comprende de aproximadamente 6 a aproximadamente 18 átomos de carbono, por ejemplo, de aproximadamente 12 a aproximadamente 14 átomos de carbono, tal como un grupo laurilo/miristilo. Opcionalmente, M es hidrógeno, litio, sodio, potasio, berilio, calcio, magnesio, hierro, amonio, monoetanolamina, dietanolamina, trietanolamina o mezclas de los mismos. En algunas formas de realización, M es sodio o hidrógeno. En particular, un sulfometilsuccinato de alquilo puede ser un sulfometilsuccinato de laurilo disódico.

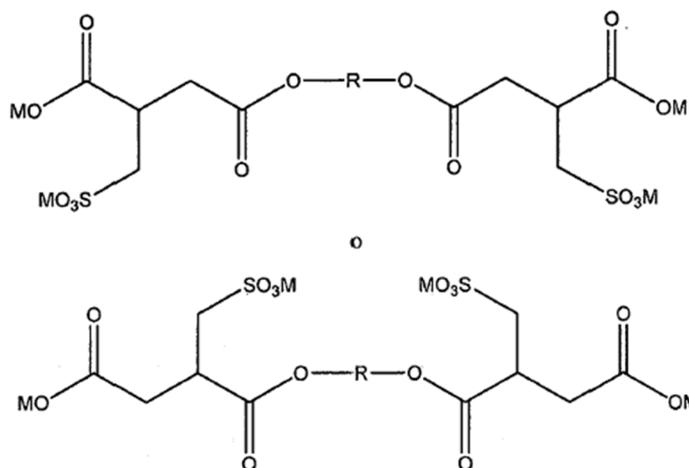
40 Según otra forma de realización de la presente invención, por lo menos un sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención es un sulfometilsuccinato de alquilo disódico o un ácido alquil sulfometilsuccínico con la siguiente estructura general:



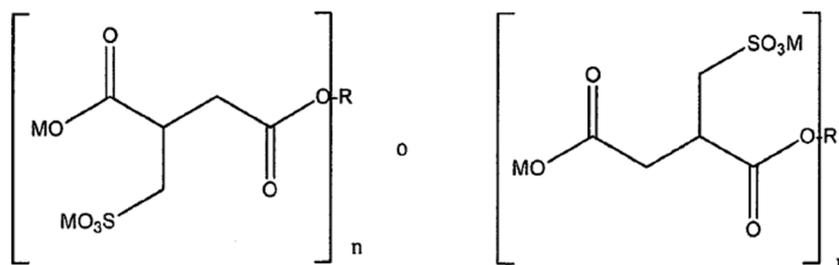
5 donde R es un grupo alquilo o un grupo alquilo alcoxilado y M es sodio o hidrógeno, o una mezcla de los mismos, y n es igual a 1 o 2. Opcionalmente, el compuesto que contiene hidroxilo utilizado para preparar el sulfometilsuccinato de alquilo de la invención descrita en la presente memoria contiene, por lo menos, un grupo hidroxilo primario.

Generalmente, cada M de una estructura determinada puede ser diferente o igual al otro.

10 Cuando el compuesto que contiene hidroxilo contiene dos o más grupos hidroxilo, se puede formar un compuesto que contiene dos o más grupos sulfometilsuccinato en el que el grupo R es un grupo puente entre los grupos sulfometilsuccinato. Por ejemplo, cuando se utiliza un compuesto que contiene dos grupos hidroxilo como molécula puente, el sulfometilsuccinato puede estar representado por la siguiente estructura general:



15 Además, se dan a conocer procedimientos para producir los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente memoria según los contenidos de la presente memoria. Al menos un procedimiento incluye las etapas de (i) proporcionar un itaconato de alquilo o alcoxi de fórmula general



20 en la que R es un alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>24</sub>, y M y n son tal como se ha mencionado anteriormente, y que puede estar opcionalmente alcoxilado, y (ii) hacer reaccionar el itaconato de alquilo con un agente de sulfonación, tal como un sulfito alcalino, en agua para producir los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente memoria.

25 De acuerdo con otra forma de realización de la presente memoria, se da a conocer una composición que comprende por lo menos un sulfometilsuccinato de alquilo. La composición puede ser un sistema acuoso o presentarse con otras formas.

**Breve descripción de los dibujos**

La figura 1 es un gráfico que representa un procedimiento para preparar sulfometilsuccinatos según un aspecto de la presente invención.

La figura 2 es un gráfico de barras que representa los resultados de volumen de espuma de una prueba de inversión de probeta en una concentración de ingredientes activos del 0,2%, con o sin aceite de ricino, en agua corriente de Chicago a 25°C.

**10 Descripción detallada de la invención y divulgación adicional**

Los sulfometilsuccinatos de la presente invención se pueden producir por un procedimiento descrito como se expone a continuación, haciendo referencia a la figura 1. Como indica la parte de etapa 1 de la figura 1, el ácido itacónico se deshidrata en anhídrido itacónico, liberándose 1 equivalente molar de agua en presencia de un catalizador ácido y calor. El catalizador ácido puede ser, por ejemplo,  $H_2SO_4$ , HCl, ácido metanosulfónico, ácido p-toluenosulfónico (pTSA), Amberlyst 15 (resina ácida), zeolita, o un ionómero NAFION® (un copolímero de tetrafluoroetileno sulfonado, CAS No. 31175-20-9, disponible a través de E.I. du Pont de Nemours and Company), o una mezcla de los mismos. La presente invención no está limitada en este aspecto, y se puede utilizar cualquier otro catalizador eficaz a la hora de facilitar la deshidratación del ácido itacónico en anhídrido itacónico. Según, por lo menos, algunas formas de realización, el catalizador es eficaz en cantidades de aproximadamente el 1,0% en peso o menos, con respecto al peso de anhídrido itacónico en la mezcla de reacción, por ejemplo, de entre aproximadamente el 0,01% en peso y aproximadamente el 0,4% en peso.

Opcionalmente, la etapa 1 se puede llevar a cabo al vacío y en un disolvente con eliminación del agua liberada en la deshidratación del ácido itacónico. Entre los disolventes adecuados se incluyen el ácido hexanoico, el ácido octanoico, el hexanoato de metilo, la ciclohexanona y el dipropilenglicol dimetil éter (DPGDME), aunque la presente invención no está limitada en este aspecto y se puede utilizar cualquier otro disolvente adecuado. La reacción de deshidratación puede tener lugar a entre aproximadamente 100°C y aproximadamente 200°C, seleccionándose la temperatura de modo que sea adecuada para el disolvente utilizado. La utilización de un disolvente que se pueda llevar a reflujo facilita la eliminación del agua liberada. Además, se utiliza una trampa (por ejemplo, una trampa de Dean-Stark) para facilitar la eliminación del agua. En la etapa 1 se pueden utilizar ésteres de metilo, ácidos grasos, glicoles, éteres y disolventes orgánicos tradicionales. Se puede seleccionar la configuración del vacío para que sea adecuada para el disolvente utilizado y la temperatura específica deseada.

En algunas formas de realización, la reacción de deshidratación se lleva a cabo a entre aproximadamente 130°C y aproximadamente 170°C. Por ejemplo, cuando se utiliza DPGDME como disolvente con una temperatura objetivo de aproximadamente 130°C, una configuración de vacío adecuada es de 16,0 kPa (120 mmHg). El disolvente se puede eliminar después de la reacción de deshidratación, antes o después de la esterificación con un alcohol, tal como se describe para la etapa 2.

En la etapa 2, el anhídrido itacónico experimenta una reacción de esterificación con un compuesto que contiene hidroxilo, representado como  $R[OH]_x$ . Tal como se utiliza en la presente memoria, la expresión "compuesto que contiene hidroxilo" se refiere de forma general a un compuesto que contiene, por lo menos, un grupo hidroxilo ("OH"), es decir, x es, por lo menos, uno (1). Según la memoria general, el grupo R del compuesto que contiene hidroxilo puede ser un grupo alquilo, alquenilo, alquinilo, alquilo alcoxlado, cicloalquilo, cicloalquenilo, cicloalquinilo, alquilo ramificado, alquenilo ramificado, alquinilo ramificado, alquilo alcoxlado ramificado, aromático, alquil aromático sustituido, alquenil aromático sustituido o aromático alcoxlado sustituido; Según la presente invención, el grupo R del compuesto que contiene hidroxilo es un grupo alquilo o alquilo alcoxlado.

En diversas formas de realización, el compuesto  $R[OH]_x$  puede ser monohídrico (es decir,  $x = 1$ ), pero la invención no está limitada en este sentido y, en otras formas de realización, el compuesto  $R[OH]_x$  puede ser polihídrico (es decir, x puede ser mayor que 1). La reacción de esterificación (etapa 2 de la figura 1) puede dar lugar a que uno o más grupos itaconato reaccionen con el compuesto polihídrico  $R[OH]_x$ , lo que da lugar a una pluralidad de grupos itaconato en el grupo R. De este modo, en la figura 1, cuando  $R[OH]_x$  es monohídrico ( $x = 1$ ),  $n = 1$  en el producto de sulfometilsuccinato. Cuando  $R[OH]_x$  es polihídrico ( $x > 1$ ), la esterificación (etapa 2) se puede producir en todos los grupos hidroxilo o no todos, de modo que, en la figura 1, y es por lo menos igual a uno y puede ser igual o menor que x. Dado que la etapa de sulfonación (etapa 3) se puede producir en todos o no todos los grupos itaconato esterificados, en el producto de sulfometilsuccinato, n es por lo menos igual a uno y puede ser igual o menor que el más pequeño de entre x e y.

En algunas formas de realización, R es un grupo alquilo o alcoxi. En algunas formas de realización en las que R es alquilo, no se utiliza ningún disolvente en las etapas 1 o 2 del procedimiento y el sulfometilsuccinato de alquilo producido es un líquido transparente y homogéneo en agua. El compuesto que contiene hidroxilo utilizado para preparar los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente memoria puede ser lineal, ramificado, saturado o insaturado, y puede derivar de materias primas naturales o sintéticas.

En algunas formas de realización, el compuesto que contiene hidroxilo es un alcohol graso, tal como los que contienen de aproximadamente 6 a aproximadamente 18 átomos de carbono. Opcionalmente, ROH es un alcohol graso alcoxilado. En algunas formas de realización, el compuesto que contiene hidroxilo es un alcohol primario monohídrico. En dichas formas de realización, la reacción de esterificación de la etapa 2 puede ser estequiométrica, es decir, la relación molar de anhídrido itacónico con respecto a alcohol graso puede ser 1:1. Opcionalmente, el alcohol graso es un alcohol graso primario.

El catalizador y los disolventes no son necesarios para la reacción de esterificación. La temperatura de la reacción afecta a la duración de la reacción. Por ejemplo, en algunas formas de realización, la esterificación se lleva a cabo a una temperatura elevada de aproximadamente 90°C, y la reacción de esterificación puede requerir aproximadamente 2 horas hasta su terminación sustancial. En otras formas de realización, una reacción de esterificación puede avanzar rápidamente a 130°C y se puede obtener una conversión sustancialmente completa en aproximadamente 20 minutos. Tal como se describe a continuación, en la etapa 2 se pueden utilizar diversos tipos de alcoholes. En muchas formas de realización, la etapa 2 produce ésteres alfa y beta, con un aumento del éster alfa asociado a las temperaturas de reacción más altas. En algunas formas de realización, se pueden obtener monoésteres beta con aproximadamente el 95% de pureza.

Tras la compleción sustancial de la reacción de esterificación de la etapa 2, se añade al producto de tipo éster un agente de sulfonación, preferentemente un agente de sulfitación, y la solución se agita a una temperatura y durante un tiempo suficientes para obtener el producto sulfometilsuccinato, en la etapa 3. El agente de sulfonación puede ser un sulfito alcalino (MSO<sub>3</sub>), aunque la presente invención no está limitada en este aspecto y se puede utilizar cualquier agente de sulfonación adecuado. El producto puede incluir sulfometilsuccinatos alfa y beta en proporciones que corresponden a las proporciones relativas de ésteres alfa y beta sometidos a sulfonación. Generalmente, cada M de un grupo sulfometilsuccinato n puede ser igual o distinto al otro en función de la naturaleza del agente o agentes de sulfonación o sulfitación utilizados.

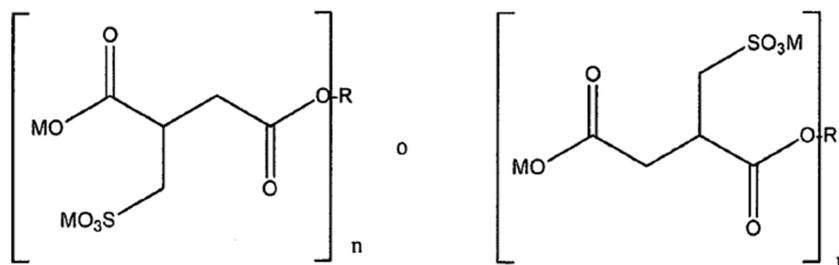
En algunas formas de realización del procedimiento no se utiliza ningún disolvente y el sulfometilsuccinato producido es un líquido transparente y homogéneo en agua.

En una forma de realización ilustrativa, una vez que el agua liberada se ha eliminado sustancialmente en la etapa 2, el anhídrido itacónico se somete a una reacción de esterificación con alcohol láurico, un alcohol graso primario. A una temperatura elevada, por ejemplo, de aproximadamente 90°C, la reacción de esterificación necesita aproximadamente 2 horas para su compleción. La temperatura de la reacción determina la duración necesaria para que la reacción se complete sustancialmente. No se requieren ni catalizador ni disolventes. Por ejemplo, a 130°C, la reacción transcurre rápidamente y se obtiene una conversión sustancialmente completa en aproximadamente 20 minutos. Esta reacción es estequiométrica, es decir, la razón molar de anhídrido itacónico con respecto a alcohol láurico es de 1:1. A temperaturas elevadas se puede observar un aumento del producto de monoéster alfa. En algunas formas de realización, el monoéster beta se forma con una pureza de aproximadamente el 95%.

En la etapa 3, tras la compleción de la reacción de esterificación, se añade 1 equivalente molar de sulfito de sodio en agua (2,2 veces la masa del monoéster) y la solución se agita a 75°C durante 2 horas, obteniéndose el producto, sulfometilsuccinato de laurilo disódico, en forma de pasta blanca y suave con el 40% de ingredientes activos en agua.

El sulfometilsuccinato de laurilo disódico ha demostrado tener una espumación superior a la de otros tensioactivos derivados de carbono 100% renovable, tales como los alquilpoliglicósidos y el laurilsulfato de sodio. El sulfometilsuccinato de laurilo disódico es menos irritante que el laurilsulfato de sodio, no contiene 1,4-dioxanos, sulfatos, nitrosaminas ni sales y se puede formular fácilmente en diferentes composiciones como tensioactivo para mejorar la espumación.

En otro aspecto, la presente memoria da a conocer sulfometilsuccinatos con la siguiente estructura general:



en la que R deriva de un compuesto que contiene hidroxilo. R puede ser un grupo alquilo, alquenilo, alquinilo, alquilo alcoxilado, cicloalquilo, cicloalquenilo, cicloalquinilo, alquilo ramificado, alquenilo ramificado, alquinilo ramificado, alquilo alcoxilado ramificado, aromático, alquil aromático sustituido, alquenil aromático sustituido o aromático

alcoxilado sustituido; cada M es un catión, hidrógeno, amina o sal de amonio, o una combinación de los mismos, y n está comprendido entre 1 y aproximadamente 6.

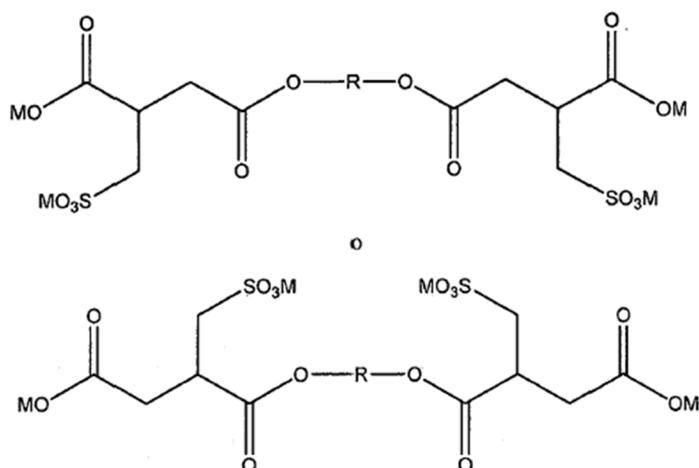
5 En una forma de realización, R comprende un grupo alquilo o un grupo alquilo alcoxilado. R puede derivar, por lo menos, de un compuesto que contiene hidroxilo, tal como un alcohol. Tal como se utiliza en la presente memoria, la expresión "compuesto que contiene hidroxilo" se refiere de forma general a un compuesto que contiene, por lo menos, un grupo hidroxilo ("OH"). El grupo R del compuesto que contiene hidroxilo utilizado para preparar los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente memoria puede ser lineal, ramificado, saturado o insaturado, y puede derivar de materias primas naturales o sintéticas. El grupo alquilo o grupo alquilo alcoxilado puede incluir, 10 opcionalmente, de aproximadamente 1 a aproximadamente 22, alternativamente de aproximadamente 6 a aproximadamente 18, alternativamente de aproximadamente 12 a aproximadamente 18, alternativamente de aproximadamente 12 a aproximadamente 14, átomos de carbono. El compuesto que contiene hidroxilo contiene opcionalmente, por lo menos, un grupo hidroxilo primario. Opcionalmente, los compuestos que contienen hidroxilo no contienen sustancialmente ningún grupo hidroxilo secundario o terciario. Según algunas formas de realización, 15 los compuestos que contienen hidroxilo son alcoholes grasos primarios, por ejemplo, alcoholes grasos C<sub>12</sub>-C<sub>14</sub>, en la preparación de uno o más de entre los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención.

También se ha descubierto que los alcoholes grasos, particularmente los alcoholes C<sub>12</sub> o C<sub>14</sub> o C<sub>12</sub>/C<sub>14</sub>, pueden proporcionar grupos R para los sulfometilsuccinatos de alquilo que muestran una espumación, una detergencia, una sensación en la piel y/o propiedades físicas (por ejemplo, formación de viscosidad, solubilidad y formulabilidad) mejoradas y deseadas para su aplicación, por ejemplo, en productos de cuidado personal, cuidado doméstico y otras aplicaciones de limpieza. Sin pretender limitarse a ninguna teoría en particular, se cree que los sulfometilsuccinatos C<sub>12</sub>/C<sub>14</sub> según la presente invención pueden proporcionar el mejor rendimiento global, por lo menos, para algunas aplicaciones finales (por ejemplo, jabones corporales, champús, etc.). También se cree que un sulfometilsuccinato de alquilo preparado a partir de C<sub>16</sub> o C<sub>16</sub>/C<sub>18</sub> puede dar lugar a una mejor sensación en la piel, pero a menos espuma, por ejemplo. Cuando se utilizan alcoholes inferiores, los sulfometilsuccinatos de alquilo resultantes todavía pueden proporcionar un buen rendimiento de espumación, pero sus propiedades de formación de viscosidad pueden ser peores que las de los sulfometilsuccinatos C<sub>12</sub>/C<sub>14</sub>. Entre los ejemplos de alcoholes grasos adecuados se incluyen el alcohol láurico y el alcohol de estearilo o derivado de coco. 20 25 30

Además, resulta preferido que no se utilice ningún disolvente en los procedimientos de la presente invención para preparar los sulfometilsuccinatos de alquilo deseados. Un objetivo de la presente invención consiste en eliminar la utilización de un disolvente en el procedimiento de reacción para preparar sulfometilsuccinatos de alquilo para, por lo menos, algunas aplicaciones, tales como aplicaciones de cuidado personal. Sin embargo, habitualmente, un procedimiento sin disolventes puede resultar difícil de llevar a cabo debido a la viscosidad o a problemas con la distribución del producto. Los productos de sulfometilsuccinato de alquilo producidos por los procedimientos de la presente invención pueden contener más de aproximadamente el 50%, más de aproximadamente el 60%, más de aproximadamente el 70%, más de aproximadamente el 80% o más de aproximadamente el 90% en peso de, por lo menos, un sulfometilsuccinato de alquilo como se describe en la presente memoria. 35 40

En algunas formas de realización, los grupos alquilos alcoxilados R del compuesto que contiene hidroxilo son alcoholes alcoxilados, por ejemplo, alcoholes etoxilados, propoxilados o ambas cosas. Alternativamente, los compuestos que contienen hidroxilo se pueden alcoxilar *in situ* al sintetizar el itaconato de alquilo. Opcionalmente, se pueden utilizar compuestos que contienen hidroxilo alcoxilado preformados. Por ejemplo, se pueden utilizar alcoholes láuricos etoxilados para producir sulfometilsuccinatos de laurilo etoxilados que contengan una cantidad específica de grupos etoxi (EO) por mol de sulfometilsuccinato (por ejemplo, típicamente de aproximadamente 1 a aproximadamente 12 grupos etoxi por mol de sulfometilsuccinato). La alcoxilación puede modificar, entre otras cosas, la polaridad de una molécula de sulfometilsuccinato de alquilo, lo que puede hacer que la molécula de sulfometilsuccinato resultante sea más soluble en agua y modificar su equilibrio hidrófilo/lipófilo (HLB). También puede afectar al empaquetamiento de un tensioactivo durante la formación de una micela acuosa. Además, la alcoxilación puede afectar a la capacidad de humectación, el punto de turbidez y otras propiedades tensioactivas del sulfometilsuccinato de alquilo. También se cree que la alcoxilación puede afectar a la capacidad de formar una microemulsión con ingredientes activos tensioactivos inferiores y provocar cambios en la nitidez y la estabilidad. El rendimiento de limpieza de un tensioactivo de sulfometilsuccinato también se puede ver afectado, y aumenta la capacidad para modular las propiedades del tensioactivo. 45 50 55

En algunas formas de realización, el grupo R puede derivar de dioles u otros polioles que contienen, por lo menos, un OH primario. Opcionalmente, el grupo R puede derivar de un poliol que contiene dos o más grupos hidroxilo primarios (OH). Por ejemplo, cuando se utiliza un compuesto que contiene dos grupos hidroxilo primarios como molécula puente, según algunas formas de realización de la presente invención, el sulfometilsuccinato puede estar representado por la siguiente estructura general: 60



Según algunas formas de realización, el grupo R de la fórmula anterior puede ser un grupo alquilo o un grupo alquilo alcoxilado lineal, ramificado, saturado o insaturado, y puede contener de 1 a aproximadamente 24 átomos de carbono, opcionalmente de 2 a aproximadamente 22 átomos de carbono, por ejemplo, de aproximadamente 6 a aproximadamente 18 átomos de carbono, y en algunas formas de realización, de aproximadamente 10 a aproximadamente 14 átomos de carbono. M puede ser tal como se describe en cualquier otro punto del presente documento.

Se ha descubierto que los procedimientos de la presente invención pueden dar lugar a rendimientos de producto en un exceso de aproximadamente el 50% del sulfometilsuccinato de alquilo deseado, y la pureza del sulfometilsuccinato o sulfometilsuccinatos de alquilo en la mezcla de productos sin más purificación puede alcanzar aproximadamente el 90% o más, de forma alternativa aproximadamente el 95% o más, con respecto al peso total de la mezcla de productos. La cantidad de itaconato de alquilo o del alcohol restante puede ser menor de aproximadamente el 30% con respecto al peso total de la mezcla de productos. En algunas formas de realización, la cantidad de itaconato de alquilo o alcohol graso es menor de aproximadamente el 20%. Por ejemplo, la cantidad de itaconato de alquilo o alcohol graso puede ser menor de aproximadamente el 10% y, en algunos casos, la cantidad de itaconato de alquilo o alcohol graso es menor de aproximadamente el 5%. La mezcla se puede utilizar en productos de cuidado personal y otras aplicaciones. Las impurezas residuales se pueden dejar o eliminarse, por ejemplo, mediante lavado con agua, adsorción sobre alúmina básica o medios de sílice, o mediante la neutralización con una base. Según otra forma de realización de la presente invención, el compuesto que contiene hidroxilo puede ser un alcohol graso o un alcohol graso alcoxilado.

Al menos algunos compuestos de sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención son líquidos transparentes e incoloros a temperatura ambiente, y no contienen nitrógeno, sales ni sulfatos. Opcionalmente, los sulfometilsuccinatos de alquilo se pueden formular en productos mediante un procedimiento de mezcla en frío. Al menos algunos sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente invención pueden proporcionar un rendimiento mejorado (por ejemplo, una mejor sensación en la piel, una mejor humectación de la piel, una mejor espumación, propiedades modificadas de formación de viscosidad, una mejor suavidad, una mejor estabilidad de lavado de los tintes para el pelo, etc.), una estructura de costes mejorada (por ejemplo, mediante la reducción de la cantidad total de ingredientes activos en los productos formulados) y/o una mayor estabilidad. Además, por lo menos algunos de los sulfometilsuccinatos de alquilo son tanto o más suaves que los tensioactivos convencionales, tales como sulfatos de alquilo, etersulfatos de alquilo, sarcosinatos de alquilo, sulfonatos de éster de metilo o sulfosuccinatos de alquilo. Los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención también se pueden utilizar como emulsionantes o como agentes de mejora de la sensación en la piel. En los productos de limpieza doméstica, industrial e institucional, por lo menos algunos de los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente invención pueden proporcionar propiedades mejoradas gracias a sus propiedades tensioactivas, tal como se ha descrito anteriormente. Además, también pueden mejorar, por ejemplo, la humectación u otras modificaciones de superficie, y ayudar en la emulsión o dispersión de suciedad/partículas u otros ingredientes de formulación.

Al menos algunos sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente invención se pueden utilizar como modificadores reológicos para aumentar o reducir la viscosidad de una composición, según se desee. Se ha puesto de manifiesto que se pueden alcanzar valores comparables de viscosidad de un sistema tensioactivo con cantidades significativamente menores de electrolitos (por ejemplo, NaCl) mediante la incorporación al sistema tensioactivo de, por lo menos, un sulfometilsuccinato de alquilo según la presente invención. Por otra parte, también se ha puesto de manifiesto que, mediante la incorporación de, por lo menos, un sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención en otra formulación tensioactiva, la viscosidad se puede reducir de manera significativa.

Entre los ejemplos de formulaciones de limpieza y otras aplicaciones que pueden contener los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención se incluyen, aunque sin limitarse a los mismos:

Productos de limpieza personal (por ejemplo, pastillas de jabón, jabones para baño de burbujas, champús, jabones corporales, limpiadores faciales, jabones de manos, geles de ducha, toallitas, productos de limpieza para bebés, etc.);

5 Cremas/lociones (tales como lociones con protección solar, cremas antienvjecimiento (AHA, BHA), lociones aclarantes de la piel, lociones antimanchas, lociones con antioxidantes, lociones de bronceado, etc.);

Productos cosméticos (tales como maquillaje, rímel, pintalabios, etc.);

10 Productos de tratamiento capilar (tales como acondicionadores, lacas, geles, etc.);

Los productos de limpieza doméstica o industrial o institucional (detergentes de gran potencia, detergentes suaves, suavizantes, tratamientos localizados, limpiadores de superficies duras, desengrasantes y/o desinfectantes, tales como los utilizados en la cocina para encimeras, electrodomésticos, suelos y paredes, y limpiadores de baño y desinfectantes, tales como los que se utilizan para inodoros, bañeras, fregaderos de cocina y baño, duchas, suelos y paredes, ceras, etc.);

15 Antitranspirantes/desodorantes (sólidos, tipo roll-on, etc.);

20 Productos de extracción mejorada de petróleo (tales como para alteración de la humectabilidad);

Productos agrícolas (tales como formulaciones pesticidas, herbicidas, por ejemplo, de glifosato, acaricidas);

25 Productos disolventes (tales como solubilizantes activos, inhibidores del punto de fluidez, modificadores del punto de inflamación y la polaridad);

Productos de yeso (tales como espumantes y humectantes);

30 Productos de pintura y revestimiento (tales como pinturas decorativas, barnices, productos de limpieza, formulaciones antigrafiti, etc.); y

Productos emulsionantes (tales como cremas para la piel, geles, semisólidos);

35 Un producto formulado, tal como un champú, contiene opcionalmente entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 95%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 80%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 60%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,5% y aproximadamente el 40%, alternativamente, entre aproximadamente el 1% y aproximadamente el 20%, alternativamente, entre aproximadamente el 3% y aproximadamente el 15%, del sulfometilsuccinato de alquilo según la presente invención, con respecto al peso total del producto.

40 Por ejemplo, una composición de limpieza que comprende el sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención contiene opcionalmente, además, por lo menos, uno o más de entre otros tensioactivos, tales como tensioactivos aniónicos, catiónicos, no iónicos, anfóteros, no iónicos semipolares o zwitteriónicos, derivados de los mismos o mezclas de los mismos. Estos tensioactivos se conocen en la técnica y se describen, por ejemplo, en la patente US nº 3.929.678 (Laughlin y otros). Entre los ejemplos de tensioactivos catiónicos útiles se incluyen también los descritos en la patente US nº 5.929.022 (Murphy) y 4.222.905 (Cockrell). Según algunas formas de realización, el tensioactivo o tensioactivos adicionales presentes en una composición de limpieza pueden representar entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 95%, alternativamente, entre aproximadamente el 2% y aproximadamente el 70%, alternativamente, entre aproximadamente el 2% y aproximadamente el 30%, alternativamente, entre aproximadamente el 3% y aproximadamente el 10% en peso de la composición de limpieza.

Entre los ejemplos de tensioactivos no iónicos para su utilización con la presente invención se incluyen, aunque de manera no limitativa, alquil fenol etoxilatos, alcoxilatos de alcoholes, propil glicoles, lactatos de lauril lactilo, ésteres de alquil poliglicerol, alcoholes alquílicos, monoglicéridos, diglicéridos o triglicéridos de alquilo, óxidos de amina aquil dimetilica o alquil amidopropil dimetilica, alcanolamidas, alquilpoliglicósidos, alcanolamidas etoxiladas y mezclas de los mismos.

Entre los ejemplos de tensioactivos aniónicos se incluyen, aunque de manera no limitativa, sulfatos de alcohol, alcoxisulfatos de alcohol, sulfonatos de alquilbenceno, sulfonatos de alfa olefina, ésteres de alfa-sulfometilo o etilo de ácidos grasos C<sub>8</sub> a C<sub>18</sub> (monosales y/o disales), sulfosuccinatos, glutamatos, sarcosinatos, sulfoacetatos, isetionatos, sulfonatos de parafina, lactilatos de acilo, anfoacetatos de alquilo, carboxilatos de éter de alquilo, carboxilatos de polialquilglicósido, tauratos de alquilo, carboxilatos de lauril glucosa, glutamatos de alquilo, ácidos alquilcarboxílicos, o derivados de los mismos y/o combinaciones de los mismos. Opcionalmente, los grupos alquilo de los tensioactivos aniónicos presentan de aproximadamente 8 a aproximadamente 18 átomos de carbono. Los contraiones de los tensioactivos aniónicos pueden ser, por ejemplo, sodio, potasio, trietanolamina, monoetanolamina, amonio, magnesio, etc. Para detergentes de ropa y detergentes líquidos de platos, entre los

tensioactivos aniónicos preferentes se incluyen, aunque de manera no limitativa, sulfonatos de alquilbenceno, sulfato de alquilo etoxilado y ésteres metílicos alfa-sulfonados C<sub>12-18</sub>. Para composiciones de limpieza de superficies duras, entre los tensioactivos aniónicos preferidos se incluyen, por ejemplo, sulfonatos de alquilbenceno, sulfatos de alcohol y sulfatos de alquilo etoxilados.

Entre los ejemplos de tensioactivos anfóteros se incluyen, aunque de manera no limitativa, sultainas, betaínas, alquildimetilbetaínas o alquilamidopropildimetilbetaínas, óxidos de alquildimetilamina o alquilamidopropildimetilamina, alquil anfo(mono o di)acetatos de monosodio o disodio; propionatos y mezclas de los mismos. Para detergentes líquidos lavaplatos, entre los tensioactivos anfóteros preferidos se incluyen, por ejemplo, betaínas y óxidos de amina. Para detergentes para la ropa y composiciones para la limpieza de superficies duras, entre los tensioactivos anfóteros preferentes se incluyen, por ejemplo, óxidos de amina.

Entre los ejemplos de compuestos de amonio cuaternario (quats) que se pueden utilizar en combinación con los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente invención se incluyen, aunque de manera no limitativa, cloruros de dialquildimetilamonio, cloruros de alquildimetilbencil/etilbencilamonio, cloruros de alquildimetilbencilamonio y mezclas de los mismos. Cuando los productos que contienen los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente invención son desinfectantes o esterilizantes para superficies duras, los compuestos de amonio cuaternario son, opcionalmente, productos antimicrobianos registrados y deben utilizarse en una cantidad eficaz para eliminar los organismos diana.

Los tensioactivos aniónicos, no iónicos, no iónicos semipolares y zwitteriónicos son tensioactivos preferidos para su utilización en combinación con los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención en composiciones de limpieza. Entre los tensioactivos aniónicos útiles se incluyen específicamente los descritos en la patente US nº 3.929.678 (Laughlin y otros) y los descritos en la patente US nº 4.199.483 (Jones).

Cuando se utiliza un sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención en una composición de limpieza líquida de cuidado personal según, por lo menos, una forma de realización de la presente invención, la composición de limpieza líquida de cuidado personal comprende, opcionalmente, de aproximadamente el 0,1% a aproximadamente el 95%, alternativamente, de aproximadamente el 1% a aproximadamente el 70%, alternativamente, de aproximadamente el 1% a aproximadamente el 30%, alternativamente, de aproximadamente el 1% a aproximadamente el 10%, alternativamente, de aproximadamente el 1% a aproximadamente el 5%, de otros tensioactivos; y de aproximadamente el 0,01% a aproximadamente el 95%, alternativamente, de aproximadamente el 0,01% a aproximadamente el 80%, alternativamente, de aproximadamente el 0,1% a aproximadamente el 60%, alternativamente, de aproximadamente el 0,5% a aproximadamente el 40%, alternativamente, de aproximadamente el 1% a aproximadamente el 20%, alternativamente, de aproximadamente el 3% a aproximadamente el 15%, del sulfometilsuccinato de alquilo según la presente invención, con respecto al peso total del producto. Se pueden utilizar las concentraciones más bajas de los intervalos inferiores, por ejemplo, cuando se utilizan frascos con dispensador de espuma de mano como sistema de envasado y suministro. Los expertos en la materia conocen que los frascos con dispensador de espuma de mano son sistemas de envasado muy eficientes que pueden proporcionar una espuma excelente con concentraciones muy bajas de tensioactivo. Con estos sistemas dispensadores, se pueden reducir los costes de producción.

Los expertos en la materia conocen ejemplos de sistemas de limpieza preferidos para aplicaciones en productos de limpieza para el cuidado personal, entre los que se pueden incluir combinaciones de tensioactivos aniónicos y cotensioactivos zwitteriónicos. La patente US nº 5.705.147 (Shapiro y otros) da a conocer una descripción detallada de dichos tensioactivos, utilizados para preparar productos de limpieza para el cuidado personal. Cuando los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención se incorporan a formulaciones que contienen mezclas de los tensioactivos descritos en la patente US nº 5.705.147 (Shapiro y otros), por ejemplo, pueden proporcionar una mejora en la capacidad de espumación, la fluidez y la modificación de la viscosidad.

Una composición de detergente que comprende el sulfometilsuccinato de alquilo según la presente invención contiene, opcionalmente, entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 95%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 80%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 60%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,5% y aproximadamente el 40%, alternativamente, entre aproximadamente el 1% y aproximadamente el 20%, alternativamente, entre aproximadamente el 3% y aproximadamente el 15%, del sulfometilsuccinato de alquilo según la presente invención, con respecto al peso total del producto.

Por ejemplo, opcionalmente, una formulación de detergente líquido de gran potencia o de poca potencia, según la presente invención, contiene por lo menos un sulfometilsuccinato de alquilo de la invención como cotensioactivo en combinación con otros tensioactivos. En dichas aplicaciones, el sulfometilsuccinato o sulfometilsuccinatos de alquilo pueden estar presentes en una cantidad comprendida, por ejemplo, entre el 0,1% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos para una formulación de lavado de ropa de gran potencia, con o sin enzimas; y en una cantidad, por ejemplo, del 0,1% o del 50% para una formulación de lavado de ropa de potencia ligera o de lavado de platos a mano, con respecto al peso total de la formulación. Los ejemplos de tensioactivos aniónicos adecuados para su utilización en dichas formulaciones pueden ser aniónicos, catiónicos, anfóteros, no iónicos semipolares y no iónicos,

y pueden incluir, aunque de manera no limitativa, alquilbencenosulfonato, lauriléter sulfato de sodio (3 EO), lauriléter sulfato de sodio (2 EO) y metil-2-sulfopalmitato de sodio/2-sulfopalmitato de disodio.

5 Como ejemplo adicional, el sulfometilsuccinato de alquilo según la presente invención se puede utilizar como tensioactivo en formulaciones de detergente ultra para platos en una cantidad menor de aproximadamente el 30% de ingredientes activos con respecto a la formulación total, tal como, por ejemplo, de aproximadamente el 0,1% de ingredientes activos con respecto a la formulación total.

10 Los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente tecnología se pueden utilizar como tensioactivos primarios, secundarios o como cotensioactivos en composiciones que comprenden diferentes tensioactivos, tales como sulfatos de alquilo, alquil éter sulfatos, sulfonatos de olefina, ácidos alquilbencenosulfónicos, sulfonatos de alquilbenceno y sales de metales alcalinos, metales alcalinotérreos, amina y amonio de los mismos. Los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente invención se pueden utilizar como sustitutos de tensioactivos secundarios convencionales o nuevos, tales como amidas, betaínas, sultaínas y alquilpoliglicósidos, o en  
15 combinación con los mismos. Entre los ejemplos de otros tensioactivos se incluyen, aunque de manera no limitativa, laurilsulfato de sodio (SLS), lauriléter sulfato de sodio (SLES), coco sulfato de sodio, lauril glucosa carboxilato de sodio, alquil poliglicósido (APG), alquilbencenosulfonato, lauril glucósido de sodio, lauriléter sulfato de amonio, laurilsulfato de trietanolamina, carboxilato de polidecilglucósido, derivados de los mismos y combinaciones de los mismos. Entre los ejemplos de tensioactivos secundarios que pueden sustituirse o combinarse con los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención se incluyen, aunque de manera no limitativa, cocamidopropil  
20 betaína, lactilatos de acilo, tales como lauroil lactilato de sodio, anfoacetatos, tales como cocoanfoacetato de sodio, sulfosuccinatos, tales como di(2-etilhexil)sulfosuccinato de sodio, lauril glucósido, cocoil glutamato de sodio, amidas a base de monoetanol y dietanol, tales como cocamida monoetanolamida, derivados de los mismos y combinaciones de los mismos.

25 Se ha descubierto que el sulfometilsuccinato de alquilo, o una mezcla de sulfometilsuccinatos de alquilo, de la presente invención (por ejemplo, sulfometilsuccinato de laurilo) presenta una concentración micelar crítica (CMC) comparable a los tensioactivos aniónicos típicos, como por ejemplo, aunque de manera no limitativa, lauril sulfato de sodio, lauriléter sulfato de sodio, sarcosinatos, metil éster sulfonatos y sulfosuccinatos. Por ejemplo, el sulfometilsuccinato de laurilo de la presente invención presenta una concentración micelar crítica (CMC) de  
30 aproximadamente 90 mg/l, mientras que el sulfosuccinato de dodecilo tiene una CMC de aproximadamente 120 mg/l. De este modo, sin limitarse a ninguna teoría en particular, se cree que, por lo menos, algunos de los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención pueden proporcionar una detergencia comparable a los tensioactivos aniónicos convencionales.

35 Según, por lo menos, una forma de realización de la presente invención, un sulfometilsuccinato de alquilo o composición que comprende un sulfometilsuccinato de alquilo en un sistema acuoso puede comprender, además, un tampón para mejorar la estabilidad a altas temperaturas de la composición. Dicho tampón puede comprender, por ejemplo, aunque de manera no limitativa, una cantidad suficiente de ácido cítrico/citrato de sodio, ácido succínico/succinato de sodio, o una mezcla de los mismos. Opcionalmente, el sistema tampón se debe proporcionar en una cantidad suficiente para estabilizar el pH de la formulación resultante durante, por lo menos, cuatro semanas en un ensayo de estabilidad a 50°C. La cantidad adecuada de tampón necesaria se puede determinar mediante  
40 etapas/ensayos de rutina conocidos y apreciados por los expertos en la materia, y depende de la cantidad de sulfometilsuccinato o sulfometilsuccinatos de alquilo y/u otros ingredientes activos utilizados en la formulación de aplicación final. Se pueden utilizar cualquier tensioactivo y cualquier agente de tamponamiento adecuados para productos de cuidado personal o de limpieza doméstica, industrial o institucional. Entre los ejemplos de sistemas tampón se incluyen, aunque de manera no limitativa, un tampón de ácido cítrico/citrato de sodio, un tampón de ácido succínico/succinato de amonio, un tampón de carbonato de sodio o una combinación de los mismos. Sin pretender limitarse a ninguna teoría en particular, en la presente invención se ha observado que la estabilidad a temperaturas  
50 elevadas de la composición se puede aumentar utilizando un tampón. Para aplicaciones de limpieza, cada sistema tensioactivo puede tener un sistema tampón diferente con una concentración diferente. La cantidad adecuada de tampón necesaria se puede determinar mediante pruebas conocidas y apreciadas por el experto en la materia, y depende de la cantidad de sulfometilsuccinato y otros ingredientes activos utilizados en la formulación. En general, la cantidad de tampón puede estar comprendida entre aproximadamente el 0% y aproximadamente el 3%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 2%, alternativamente, entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 0,5%, con respecto al peso de la formulación

60 Además de en sistemas acuosos, los sulfometilsuccinatos de alquilo según la presente invención también se pueden formular como sólido, gel u otras formas de productos para el cuidado personal u otras aplicaciones. Por ejemplo, los sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención se pueden añadir en pastillas de jabón como tensioactivo. En comparación con los tensioactivos convencionales para pastillas de jabón, tales como los jabones de ácidos grasos, por lo menos algunos sulfometilsuccinatos de alquilo de la presente invención pueden mostrar un mejor rendimiento de espumación.

65 Según algunas formas de realización de la presente invención, una barra de jabón comprende, opcionalmente, (1) de aproximadamente el 0,01% a aproximadamente el 60% del sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención, (2) de aproximadamente el 0% a aproximadamente el 50% de un tensioactivo sintético, (3) de

aproximadamente el 0% a aproximadamente el 30% de, por lo menos, un éster de alquilo alfa-sulfonado, por lo menos un ácido graso sulfonado, o una mezcla de los mismos, (4) de aproximadamente el 30% a aproximadamente el 95% de un jabón C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>, (5) de aproximadamente el 0,5% a aproximadamente el 30% de un ácido graso C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>, (6) de aproximadamente el 0,1% a aproximadamente el 5% de un electrolito, (7) de aproximadamente el 0,5% a aproximadamente el 15% de un polialcohol y (8) de aproximadamente el 3% a aproximadamente el 22% de agua, estando expresados todos los porcentajes con respecto al peso total de la pastilla de jabón.

Alternativamente, la pastilla de jabón puede comprender: (1) de aproximadamente el 1% a aproximadamente el 50% del sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención, (2) de aproximadamente el 0% a aproximadamente el 20% de un tensioactivo sintético, (3) de aproximadamente el 0% a aproximadamente el 15% de, por lo menos, un éster de alquilo alfa-sulfonado, por lo menos un ácido graso sulfonado, o una mezcla de los mismos, (4) de aproximadamente el 30% a aproximadamente el 95% de un jabón C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>, (5) de aproximadamente el 0,5% a aproximadamente el 10% de un ácido graso C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>, (6) de aproximadamente el 0,1% a aproximadamente el 3% de un electrolito, (7) de aproximadamente el 0,5% a aproximadamente el 10% de un polialcohol y (8) de aproximadamente el 3% a aproximadamente el 22% de agua, estando expresados todos los porcentajes con respecto al peso total de la pastilla de jabón.

Alternativamente, la pastilla de jabón puede comprender: (1) de aproximadamente el 25% a aproximadamente el 45% del sulfometilsuccinato de alquilo de la presente invención, (2) de aproximadamente el 0% a aproximadamente el 10% de un tensioactivo sintético, (3) de aproximadamente el 0% a aproximadamente el 10% de, por lo menos, un éster de alquilo alfa-sulfonado, por lo menos un ácido graso sulfonado, o una mezcla de los mismos, (4) de aproximadamente el 30% a aproximadamente el 95% de un jabón C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>, (5) de aproximadamente el 0,5% a aproximadamente el 5% de un ácido graso C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub>, (6) de aproximadamente el 0,1% a aproximadamente el 2% de un electrolito, (7) de aproximadamente el 0,5% a aproximadamente el 6% de un polialcohol y (8) de aproximadamente el 3% a aproximadamente el 22% de agua, estando expresados todos los porcentajes con respecto al peso total de la pastilla de jabón.

Según, por lo menos, otra forma de realización, el sulfometilsuccinato o sulfometilsuccinatos según la presente invención se pueden incluir en un concentrado limpiador multiuso en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 50%, alternativamente, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 20% de ingredientes activos con respecto al peso total del concentrado.

Según, por lo menos, otra forma de realización, el sulfometilsuccinato o sulfometilsuccinatos según la presente invención se pueden incluir en un limpiador listo para su uso en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 50%, alternativamente, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 20% de ingredientes activos con respecto al peso total del limpiador.

Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden incluir en un limpiador de cristales en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 30% de ingredientes activos con respecto al peso total de dicho limpiador.

Además, uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención se pueden incluir en un limpiador de baño en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de dicho limpiador.

Además, uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden incluir en un limpiador líquido de fregado en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de dicho limpiador.

Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden incluir en un detergente para lavavajillas en polvo o de tipo gel en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de la formulación.

Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden añadir a un quitamanchas para alfombras en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden añadir a una formulación de recuperación mejorada de petróleo en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,01% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden añadir a una formulación agrícola en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 30% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden utilizar como disolvente en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 99% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

5 Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden añadir a una formulación de yeso en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

10 Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden añadir a una formulación de pintura en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

15 Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden añadir a una formulación de revestimiento en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 50% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

20 Uno o más sulfometilsuccinatos según la presente invención también se pueden añadir a una formulación de emulsión en una cantidad, por ejemplo, comprendida entre aproximadamente el 0,1% y aproximadamente el 90% de ingredientes activos con respecto al peso total de la composición.

25 Diversas formas de realización de los sulfometilsuccinatos de la presente invención pueden presentar uno o más de los atributos deseados anteriores, entre otros. Es decir, algunos sulfometilsuccinatos dados a conocer son útiles en productos de cuidado personal, ya que son suaves, no contienen sales ni sulfatos y están constituidos por fuentes de carbono 100% biorrenovables. Algunos sulfometilsuccinatos dados a conocer se encuentran en forma líquida a temperatura ambiente, tienen una estructura que no contiene nitrógeno, se pueden utilizar para formular productos por un procedimiento en frío y pueden ser tan o más eficaces que los tensioactivos existentes. Los productos de limpieza doméstica, industrial e institucional que contienen los sulfometilsuccinatos dados a conocer en la presente memoria tienen la capacidad de emulsionar, de integrar en suspensiones la suciedad grasienta u oleosa o penetrar en ella y de integrar en suspensiones o dispersar las partículas con el fin de limpiar las superficies; y además prevenir que la suciedad, la grasa o las partículas se vuelvan a depositar sobre las superficies recién lavadas.

30 Por ejemplo, un detergente para ropa eficaz debe eliminar la suciedad de la misma y a continuación mantener dicha suciedad en solución, de tal modo que se elimine con el agua de lavado en lugar de volverse a depositar sobre la ropa lavada. Los sulfometilsuccinatos descritos en la presente memoria también son útiles para controlar la espumación de diferentes productos domésticos, industriales e institucionales en función de las aplicaciones finales deseadas. Por ejemplo, un detergente líquido para lavar los platos a mano tiene, opcionalmente, la capacidad de formar espuma en presencia de la suciedad que se está eliminando de la vajilla. En cambio, en un detergente para la ropa o lavavajillas que se pretende utilizar en una máquina de lavado de alta eficiencia, resulta deseable que se forme poca espuma a fin de obtener la máxima limpieza y evitar el exceso de espuma para que la máquina funcione correctamente.

35 Otras propiedades deseables de dichos productos de consumo son la capacidad de aclarar la formulación y de mejorar la estabilidad. En el caso de productos de lavado de superficies duras, resulta deseable que presenten la capacidad de humedecer diversos tipos de superficie y de capturar o formar suspensiones con la suciedad, a fin de no dejar en la superficie residuos en forma de rayas y/o películas. Los sulfometilsuccinatos dados a conocer se pueden incorporar, por ejemplo, en diversas composiciones y utilizarse como tensioactivos, emulsionantes, agentes de mejora de la sensación en la piel, formadores de película, modificadores reológicos, disolventes, agentes de desmoldeo, agentes de lubricación, acondicionadores y agentes dispersantes, etc. Dichas composiciones se pueden utilizar en aplicaciones finales, entre las que se incluyen, aunque de manera no limitativa, productos de cuidado personal, así como productos de limpieza doméstica, industrial e institucional. También se pueden utilizar en aplicaciones de campo petrolífero, espumantes de yeso, pinturas y revestimientos, adhesivos u otras aplicaciones que requieran tolerancia al frío o a condiciones de acondicionamiento para el invierno (por ejemplo, aplicaciones que requieran rendimiento en clima frío sin la inclusión de componentes volátiles adicionales).

40 Los sulfometilsuccinatos dados a conocer en la presente memoria son ventajosos con respecto a otros tensioactivos debido a que evitan la formación de nitrosaminas; son menos irritantes para la piel que el SLS y no son corrosivos para los tanques metálicos.

45 A continuación, se describen con mayor detalle la presente invención y sus ventajas haciendo referencia a los siguientes ejemplos. Dichos ejemplos se ilustran con el fin de describir formas de realización específicas de la presente invención. Con estos ejemplos específicos, los presentes inventores no pretenden limitar el alcance de la presente invención. Los expertos en la materia apreciarán que el alcance de la presente invención comprende la materia definida por las reivindicaciones adjuntas a la presente memoria.

60

## Ejemplos

### Métodos generales/Detalles de la instrumentación

5 Todas las reacciones se llevaron a cabo en una atmósfera inerte de nitrógeno utilizando técnicas estándar de Schlenk, a menos que se indique lo contrario. Se adquirieron disolventes deuterados a través de los laboratorios Cambridge Isotope Laboratories Inc., que se utilizaron tal como se recibieron. El ácido itacónico se obtuvo a través de Cargill Inc. y se utilizó sin ninguna purificación adicional. Se adquirió alcohol láurico (C1214N) a través de Kao Chemicals y se utilizó tal como se recibió. Todos los demás productos químicos se utilizaron tal como se recibieron y se adquirieron a través de Fisher Scientific. Los espectros de  $^1\text{H}$ -RMN y  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -RMN se registraron en un espectrómetro de FT-RMN Jeol Eclipse de 500 MHz y se referenciaron con respecto a las resonancias de TMS en cloroformo deuterado ( $\text{CDCl}_3$ ) y a las resonancias de protones residuales en dimetilsulfóxido (DMSO). Todos los desplazamientos químicos se expresan en partes por millón (ppm).

#### 15 **Ejemplo 1: Preparación de sulfometilsuccinato de alquilo**

Se añadió ácido metanosulfónico (0,135 mililitros (ml), 2,1 micromoles ( $\mu\text{mol}$ )) mediante micropipeta a dipropilenglicol dimetil éter (DPGDME) (40,00 gramos (g), 247 milimoles (mmol)) y se agitó la solución resultante. Se añadió ácido itacónico (20 g, 151 mmol) y la reacción se calentó a  $150^\circ\text{C}$  a un vacío de 33,3 kPa (250 mmHg).

20 Una trampa Dean-Stark y un condensador permitieron eliminar el agua (2,7 g, 151 mmol). Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del ácido itacónico. Tras la compleción, el disolvente DPGDME se eliminó al vacío y se obtuvo el producto, anhídrido itacónico.

25 Se combinaron anhídrido itacónico (17,27 g, 151 mmol) y alcohol graso primario (Kao C1214N, 29,50 g, 151 mmol) y la mezcla se calentó a  $110^\circ\text{C}$  durante 120 min, con lo que se obtuvo el producto, itaconato de  $\beta$ -monolaurilo. Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del anhídrido itacónico.

30 Se combinaron itaconato de  $\beta$ -monolaurilo (43,46 g, 151 mmol), agua desionizada (98,36 ml) y sulfito de sodio (19,27 g, 152 mmol) y la mezcla se calentó a  $70^\circ\text{C}$  durante 180 min, con lo que se obtuvo el producto activo, sulfometilsuccinato de monolaurilo disódico, en aproximadamente el 39% p/p en agua. Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del itaconato.

35 **Ejemplo 2: Preparación de sulfometilsuccinato de alquilo por esterificación directa de ácido itacónico.** Se combinaron ácido itacónico (100 g, 757 mmol), alcohol graso primario (Kao C1214N, 147 g, 757 mmol) y ácido paratoluenosulfónico (0,14 g, 0,8 mmol) y la mezcla se calentó a  $150^\circ\text{C}$  durante 6 h. Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del ácido itacónico. El producto resultante fue itaconato de alquilo.

40 Se combinaron itaconato de alquilo (43,46 g, 151 mmol), agua desionizada (98,36 ml) y sulfito de sodio (19,27 g, 152 mmol) y la mezcla se calentó a  $70^\circ\text{C}$  durante 180 min, con lo que se obtuvo el producto activo, itaconato de laurilo disódico, en aproximadamente el 39% p/p en agua. Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del itaconato.

#### 45 **Ejemplo 3: Preparación de sulfometilsuccinato de alcoxi**

Se combinaron anhídrido itacónico (0,5 g, 4 mmol) y 3 moles de etoxilato de alcohol (1,45 g, 4 mmol) y la mezcla se calentó a  $100^\circ\text{C}$  durante 90 min, con lo que se obtuvo el producto, itaconato de alcoxi. Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del anhídrido itacónico.

50 Se combinaron itaconato de alcoxi (1,95 g, 4 mmol), agua desionizada (3,90 ml) y sulfito de sodio (0,73 g, 5 mmol) y la mezcla se calentó a  $70^\circ\text{C}$  durante 18 h, con lo que se obtuvo el producto activo, monoalcoxi sulfometilsuccinato disódico, en aproximadamente el 39% p/p en agua. Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del itaconato.

#### 55 **Ejemplo 4: Preparación de sal tetrasódica del ácido 2-sulfometilsuccínico (éster etílico del 4-[2-(ácido 2-sulfometilsuccínico)])**

Se combinaron anhídrido itacónico (100 g, 892 mmol) y etilenglicol (27,69 g, 448 mmol) y se calentó a  $100^\circ\text{C}$  durante 90 min, dando como resultado el producto, éster etílico diitacónico. Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del anhídrido itacónico.

60 Se combinaron éster etílico diitacónico (155 g, 892 mmol) y sulfito de sodio (236 g, 1,87 mol) y la mezcla se calentó a  $70^\circ\text{C}$  durante 18 horas, obteniéndose sal tetrasódica del ácido 2-sulfometilsuccínico (éster etílico del 4-[2-(ácido 2-sulfometilsuccínico)]). Los ensayos de RMN indicaron una conversión sustancialmente completa del éster etílico de diitaconato.

65

La tabla A indica los nombres comerciales y la descripción de diversos componentes utilizados en composiciones ilustrativas de la presente tecnología.

Tabla A

5

Nombres comerciales y abreviaturas	
STEOL® CS-230 (SLES-2)	Sal sódica de sulfato de alquilo etoxilado C <sub>12</sub> -C <sub>14</sub> con 2 moles de óxido de etileno por mol de alcohol, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
AMPHOSOL® CDB	Cetil betaína especial, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
AMPHOSOL® HCG	Cocoamidopropil betaína, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
AMPHOSOL® HCA	Cocoamidopropil betaína, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
AMPHOSOL® CS-50	Cocamidopropil hidroxisultaína, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
AMPHOSOL® 1C	Cocoanfoacetato de sodio, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
STEPAN-MILD® L3	Lactilactato de laurilo, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
STEPAN-MILD® GCC	Caprilato/caprato de glicerilo, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
DREWPOL® 10-1-CC	Mono(caprilato/caprato) de decaglicerilo, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
STEPANOL® WA-EXTRA (SLS)	Laurilsulfato de sodio, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
Plantacare 818 UP	Alquilpoliglicósidos, disponibles de Cognis Corp., Cincinnati, Ohio
STEPAN® SLL-FB	Lauroilactilato de sodio, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
Hostapon CT	Cocoilmetilaurato de sodio, disponible a través de Clariant, Charlotte, Carolina del Norte.
Hostapon SCI-85C	Cocoilsetionato de sodio, disponible a través de Clariant, Charlotte, Carolina del Norte.
NINOL® COMF	Cocamida monoetanolamina (MEA), disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
LANTHANOL® LAL	Laurilsulfoacetato de sodio, disponible a través de Stepan Company, Northfield, Illinois.
KELTROL RD	Goma de xantano, disponible a través de CP Kelco US, Inc., Atlanta, GA

Ensayo de solubilidad y actividad superficial:

10 El ensayo de solubilidad para el sulfometilsuccinato de alquilo disódico se llevó a cabo en agua DI y se observó visualmente a temperatura ambiente. El ensayo se llevó a cabo en dos condiciones, con y sin ajuste del pH. El pH se ajustó con ácido cítrico para alcanzar el intervalo de pH deseado.

15 La actividad superficial se midió con un tensiómetro K12 Krüss a 25°C en agua desionizada. Se utilizó una valoración automática para determinar la concentración micelar crítica (CMC). No se llevó a cabo ningún ajuste del pH para la medición.

20 La viscosidad se midió con un viscosímetro Brookfield LVT con un husillo del número 3 o el número 4 a una velocidad de 12 rpm a temperatura ambiente. La viscosidad de algunas formulaciones también se determinó con un reómetro Rheologist AR2000 (de TA instruments) utilizando una geometría de placa cónica de 4 cm a 25°C y una velocidad de cizallamiento de 1 1/s (segundos recíprocos).

Método de ensayo de espuma por inversión de probeta:

- 25 1. Preparar una solución al 0,2% de la muestra activa en agua corriente a 25°C.
2. Añadir 100,0 g de la solución de muestra al 0,2% a una probeta graduada de 500 ml. Mantener la espuma al mínimo.
- 30 3. Añadir 2,0 g de aceite de ricino a la probeta graduada y taponarla con un tapón.
4. Colocar la probeta graduada en la máquina de espuma de agitador mecánico. Invertir la probeta 10 veces.
5. Dejar reposar la espuma durante 15 segundos. Registrar una lectura inicial de altura total de la espuma. Volver a registrar la altura de la espuma al cabo de 5 minutos.

35

Método de ensayo de lavado de manos con evaluadores humanos:

El método se describe en el documento WO2006/084190A1 (Dong y otros).

Método de ensayo de peluquería de media cabeza:

- 5 Peinar el pelo seco y dividirlo en 2 secciones (media cabeza). Humedecer completamente el pelo.
- Con una jeringa desechable, aplicar 4 ml de cada champú, champú de control en un lado y champú experimental en el otro.
- 10 Lavar cada lado utilizando ocho movimientos circulares para generar espuma.
- Evaluar el volumen, la densidad, la estabilidad y la capacidad de aclarado de la espuma en el champú de control y el champú experimental.
- 15 Enjuagar el cabello con agua corriente durante 10 segundos. Repetir los procedimientos 1 a 4 utilizando 2 ml de cada champú. A continuación, enjuagar durante 10 segundos.
- 20 Evaluar el volumen, la densidad, la estabilidad y la capacidad de aclarado de la espuma en el champú de control y el champú experimental.
- Utilizando un peine de plástico, evaluar la capacidad de desenredado del pelo y su facilidad de peinado en húmedo tras el segundo lavado con champú.
- 25 Secar el pelo con secador y evaluar su facilidad de peinado en seco, la electricidad estática, el cuerpo y el brillo.
- El rendimiento de cada composición se ensayó en una escala de 0 a 3 en comparación con el control, siendo 0 un rendimiento idéntico, 1 ligeramente mejor, 2 significativamente mejor y 3 manifiestamente mejor. Las evaluaciones individuales de cada evaluador se promediaron y se registraron para cada composición ensayada.

Evaluación del rendimiento

35 Cada una de las composiciones de ejemplo, así como las composiciones marcadas como "composición de control", se prepararon en agua desionizada. Los materiales utilizados en todos los ejemplos se expresan en porcentaje en peso de una materia activa. El pH final de cada composición se ajustó a un valor comprendido entre aproximadamente 2 y aproximadamente 13, opcionalmente entre aproximadamente 3 y aproximadamente 11 para limpiadores líquidos generales. El pH puede estar comprendido entre aproximadamente 4 y aproximadamente 9 para composiciones de cuidado personal, y opcionalmente entre aproximadamente 4,5 y aproximadamente 7, por ejemplo, entre aproximadamente 5 y aproximadamente 6, utilizando una solución de hidróxido de sodio o de ácido cítrico.

45 Los ejemplos 5 a 9 de la tabla 1 demostraron las propiedades típicas de los sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos (DSS) en solución. En general, los sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos no etoxilados tienen una solubilidad limitada en agua a pH neutro. La solubilidad disminuye a medida que aumenta la longitud de la cadena alquílica. Sin embargo, se descubrió inesperadamente que el pH tenía una influencia significativa en la solubilidad del DSS. Al aumentar el pH, la solubilidad del DSS aumentaba significativamente. El ejemplo 6 demostró la influencia del pH en la solubilidad.

50 En otro aspecto de la presente invención, se descubrió que el sulfometilsuccinato de alquilo disódico etoxilado (ejemplo 9) tenía una solubilidad mucho mejor en agua que su análogo de material no etoxilado (ejemplo 6).

Tabla 1. Propiedades de ejemplos de sulfometilsuccinato de alquilo disódico (DSS)					
Agentes	Ejemplo 5	Ejemplo 6	Ejemplo 7	Ejemplo 8	Ejemplo 9
Longitud de la cadena alquílica	10	12	14	16	12
Número de EO	0	0	0	0	3
Solubilidad a pH > 6,5	3%	< 1%	< 1%	< 1%	> 12%
Solubilidad a pH < 5,5	na	> 15%	na	na	na
CMC (mg/l)	100	90	51	184	na
Tensión superficial mínima (mN/m)	29,6	30,1	28,3	41,5	na
Volumen de espuma, sin aceite a pH neutro (ml)	270	220	228	158	na

Los sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos tienen una solubilidad limitada en agua a pH neutro, pero han demostrado ser agentes tensioactivos eficaces. Los ejemplos 5 a 8 demuestran la formación de micelas a muy baja concentración de ingredientes activos y presentan una reducción de la tensión superficial suficiente.

La tabla 1 muestra que todos los sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos presentan cierta capacidad de espumación, aunque el volumen de la espuma no es muy elevado en condiciones de pH neutro. Sorprendentemente, se descubrió que la capacidad de espumación de los sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos mejora significativamente al disminuir el pH de la solución acuosa de sulfometilsuccinato de alquilo. Por ejemplo, el sulfometilsuccinato disódico C<sub>12</sub> (C<sub>12</sub> DSS) se sometió al ensayo de inversión de probeta y los resultados se indican en la figura 2. El volumen de espuma del material a un pH de 4,72 fue más del doble que a pH neutro. El volumen de espuma también es mayor el tensioactivo aniónico más usado SLES-2 en las mismas condiciones de ensayo. La elevada capacidad de espumación y la solubilidad en agua razonable a un pH más bajo hace de los sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos unos buenos candidatos para su utilización en productos de limpieza de alta espumación.

Se evaluó el potencial de los sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos como tensioactivos de espumación en formulaciones con SLES-2 en una relación de 4/1 o de 14/1 de SLES-2/sulfometilsuccinatos de alquilo disódicos. En la tabla 2 se indican ejemplos de formulación. La mayoría de las formulaciones son transparentes. Todas las muestras de DSS en combinación con CS-230 (SLES-2) generaron un volumen de espuma muy bueno. Especialmente, el C12 DSS y el C14 DSS demostraron una mejora significativa con respecto a la formulación de control de CS-230/HCG en una relación de 4/1. La sinergia entre DSS y CS-230 en cuanto a la espumación es inesperado y muy sorprendente.

Tabla 2. Formulación de limpieza que utiliza DSS como tensioactivos secundarios en combinación con STEOL® CS-230

	Ejemplo 10 % de ingredientes activos	Ejemplo 11 % de ingredientes activos	Ejemplo 12 % de ingredientes activos	Ejemplo 13 % de ingredientes activos	Ejemplo 14 % de ingredientes activos	Control
STEO L® CS-230	12	14	12	12	12	12
C16 DSS	3	1				
C14 DSS			3			
C12 DSS				3		
C10 DSS					3	
AMPHOSOL® HCG						3
Agua	c.s. hasta 100	c.s. hasta 100				
Ingredientes activos totales	15	15	15	15	15	15
pH	5,57	5,57	5,52	5,49	5,57	5,5
Aspecto	Turbio	Transparente	Transparente	Transparente	Transparente	Transparente
Volumen de espuma, sin aceite (ml)	415	465	493	518	480	408
Volumen de espuma, 2% de aceite de ricino (ml)	330	350	400	413	380	275
Viscosidad a 25°C, sin sales (cps)	1	1	1	1	1	1
Viscosidad a 25°C, con un 3% de NaCl (cps)	21.800	8.600	17.000	550	1	33.850

Las propiedades de espumación superiores del sulfometilsuccinato de alquilo disódico también indican que se puede utilizar como tensioactivo primario potencial en productos de limpieza de alta espumación. Los ejemplos 15 a 22 de la tabla 3 demuestran dicha aplicación. Se utilizaron diferentes tensioactivos o aditivos en combinación con DSS. El pH de estas formulaciones se ajustó con ácido cítrico o con ácido clorhídrico a un pH comprendido entre 4,5 y 6,5, que es el pH deseado para los productos de cuidado personal. La propiedad de espumación se evaluó con el método de inversión de probeta.

Tabla 3. Formulaciones de limpieza utilizando C12 DSS y C14 DSS como tensioactivos primarios										
	Ejemplo 15	Ejemplo 16	Ejemplo 17	Ejemplo 18	Ejemplo 19	Ejemplo 20	Ejemplo 21	Ejemplo 22		
	% de ingredientes activos									
C12 DSS	10	12	12	12	12	12	12	12	12	10
C12-14 DSS										
AMPHOSOL® HCG			3	2						
NINOL® COMF				1						
AMPHOSOL® CDB Special	5	3								
Stepan-Mild® L3					1	1,5				
Stepan-Mild® SLL-FB										5
Stepan-Mild® GCC					2	1,5				
LATHANOL® LAL									3	
NaCl	0	0	2	2	2	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5
Acido cítrico (25%)	c.s.									
HCl (35,5%)										q.s.
Keltrol RD					0,2	0,2				
Agua	c.s. 100 g									
Ingredientes activos totales	15	15	15	15	15	15	15	15	15	15
pH	4,98	4,96	5,00	5,03	5,38	5,34	5,19	5,44	5,19	5,44
Aspecto	Transparente	Transparente	Transparente	Transparente	Transparente	Turbio	Transparente	Transparente	Transparente	Transparente
Viscosidad (cps)	56.800	1.400	400	3.350	13.800	13.900	8.050	1.300	8.050	1.300
Volumen de espuma, sin aceite (ml)	400	390	430	405	380	375	420	375	420	375
Volumen de espuma, 2% de aceite de ricino (ml)	295	323	390	400	375	325	375	360	375	360

- 5 El rendimiento de espumación también se evaluó mediante un ensayo *in vivo* de lavado de manos con evaluadores, siguiendo los procedimientos descritos anteriormente. En el ensayo *in vivo*, se evaluaron además otras propiedades, tales como la sensación en la piel y la morfología de la espuma. Los resultados se indican en la tabla 4. Las formulaciones 19 y 20 tenían un volumen de espuma significativamente más alto que la formulación de control (CS-230/HCG). También se observó que es más fácil generar espuma con las formulaciones de ejemplo que contienen DSS. La espuma de las formulaciones de ejemplo de la presente invención exhibió una sensación de lubricación superior y un mayor tamaño de las burbujas.

Formulación	Volumen de espuma (ml)	Generación instantánea de espuma	Tacto de la espuma:	Tamaño de las burbujas:
Control (CS-230/HCG)	107	0	0	0
Ejemplo 19	255	1,3	0,3	0,3
Ejemplo 20	193	1,0	0,3	0,3

- 10 Los ejemplos de formulación 19 y 20 también se evaluaron como champú mediante el ensayo de peluquería de media cabeza con 3 evaluadores. Estas dos formulaciones se compararon en la tabla 2 con la formulación de control. Los resultados demostraron que estas dos formulaciones sin sulfatos completamente naturales tenían el mismo rendimiento que el sistema tensioactivo más utilizado en la aplicación de champús.

	Control	Ejemplo 19	Control	Ejemplo 20
Primera aplicación	0	0	0	0
Espuma instantánea	0	0	0	0
Volumen	0	0	0	0
Estabilidad	0	0	0	0
Densidad	0	0	0	0
Facilidad de aclarado:	0	0	0	0
Segunda aplicación	0	0	0	0
Espuma instantánea	0	0	0	0
Volumen	0,3	0	0	0,3
Estabilidad	0	0	0	0
Densidad	0	0	0	0
Facilidad de aclarado:	0	0	0	0
Estado después del champú	0	0	0	0
Desenredado	0	0	0	0
Facilidad de peinado en húmedo	0	0	0	0
Facilidad de peinado en seco	0	0	0	0
Ausencia de electricidad estática	0	0	0	0
Cuerpo y brillo	0	0	0	0

- 15 Sin embargo, en otro aspecto de la presente invención, los sulfometilsuccinatos de alquilo se pueden utilizar como cotensioactivo o aditivo en una composición de limpieza líquida. En estos casos, los sulfometilsuccinatos de alquilo ayudan a mejorar la espumación, la suavidad, la sensación en la piel, la reología, el cuidado del cabello teñido, el acondicionamiento u otros aspectos de la formulación. Los ejemplos 23 a 32 de la tabla 6 demostraron
- 20 especialmente la mejora de la espumación para formulaciones con sulfometilsuccinatos de alquilo.

Tabla 6. Formulaciones que comprenden DSS comparadas con las que no tienen DSS										
	Ejemplo 23	Ejemplo 24	Ejemplo 25	Ejemplo 26	Ejemplo 27	Ejemplo 28	Ejemplo 29	Ejemplo 30	Ejemplo 31	Ejemplo 32
	% de ingredientes activos									
C12 DSS	6		6		6		1		6	
STEPANOL® WAEEXTRA					3	9	9	9		
DREWPOL® 10-1 CC			6	12						
Plantacare 818UP	6	12								
NINOL® COMF	3	3								
Hostapon CT										6
AMPHOSOL® CS- 50									4	4
AMPHOSOL® 1C									3	3
AMPHOSOL® HCA			3	3	6	6				
AMPHOSOL® HCG							2,5	2,5		
Hostapon SCI-85C								1		
Glicerina					2	2	1	1	2	2
Polyquaterium-10					0,25	0,25				
NaCl									1,5	1,5
Acido cítrico (25%)	c.s. hasta 100									
Agua	5,69	5,7	5,71	5,65	5,44	5,17	5,37	5,23	5,35	5,31
pH										
Ingrediente activo tensioactivo total	15	15	15	15	15	15	12,5	12,5	13	13
Viscosidad a 25°C, cps	1	170	1	1	17.850	27.650	14.150	6.690	8.040	870
Volumen de espuma, sin aceite (ml)	325	205	375	300	450	320	435	300	440	300

Los ejemplos de la tabla 6 deben compararse por pares. Por ejemplo, el ejemplo 23 debe compararse con el ejemplo 24, y el ejemplo 25 debe compararse con el ejemplo 26, y así sucesivamente. Cada par de formulaciones tenía la misma concentración de ingredientes activos totales y se evaluaron en las mismas condiciones. Una de las formulaciones contenía sulfometilsuccinato C12 disódico y la otra no. Las formulaciones que comprendían DSS tenían un volumen de espuma significativamente mayor que las que no comprendían DSS. En general, el volumen de espuma aumentó desde aproximadamente el 20% a aproximadamente el 60%. La cantidad de DSS varía en estas formulaciones. El ejemplo 29 contiene sólo el 1% de DSS. Sin embargo, esta formulación presentó 435 ml de espuma frente a los 300 ml de espuma del ejemplo 30. La eficacia del DSS en la mejora de la espumación resulta evidente en estos ejemplos.

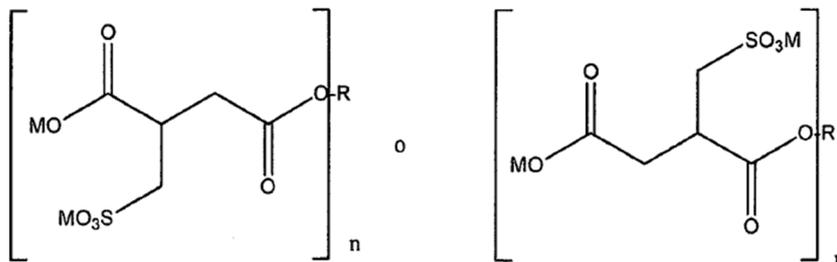
Los ejemplos de la tabla 6 también demostraron que el DSS era eficaz con una variedad de ingredientes, entre ellos materiales aniónicos, no iónicos y catiónicos, materiales funcionales y aditivos.

Se ha observado que la viscosidad de algunas de las formulaciones depende de la composición y el pH de la formulación. Un pH más bajo favorece una mayor viscosidad. Sin embargo, en algunos casos es difícil constituir una viscosidad mayor de 3.000 cps en un intervalo de pH deseado únicamente utilizando una sal, tal como cloruro de sodio. Se puede utilizar un agente espesante polimérico, tal como goma de xantano o hidroximetilcelulosa, para aumentar la viscosidad de dichas composiciones. Los modificadores reológicos poliméricos adecuados para su utilización con la presente tecnología pueden ser polímeros o copolímeros y pueden presentarse en forma aniónica, no iónica, anfótera o catiónica. Algunos ejemplos de los aditivos poliméricos de la presente tecnología son, aunque sin limitarse a los mismos, ácidos poliacrílicos y sus sales, poliacrilatos, poliacrilamidas, copolímeros de acrilato y acrilamida, copolímeros de acrilato y acrilato de hidroxíster, alcoholes polivinílicos, polietilenglicoles, acetatos de polivinilo, polivinil pirrolidonas, hidroxietilcelulosa, hidroximetilcelulosa, almidones modificados, pirrogoma de xantano modificada, celulosa catiónica, almidones catiónicos, goma guar modificada, copolímeros de vinil lidona y metacrilato de dimetilaminoetilo, copolímeros de vinilpirrolidona y acetato de vinilo, copolímeros de acetato de vinilo carboxilado, polietilenglicol, ésteres de polietilenglicol, derivados de los mismos y combinaciones de los mismos.

La presente invención se ha descrito en términos completos, claros, concisos y precisos para permitir que cualquier experto en la materia a la que pertenece pueda ponerla en práctica. Debe apreciarse que lo expuesto anteriormente describe unas formas de realización preferidas de la presente invención y que se pueden introducir modificaciones en la misma sin apartarse del alcance de la presente invención, tal como se establece en las reivindicaciones adjuntas.

REIVINDICACIONES

1. Sulfometilsuccinato de alquilo de la fórmula:



en el que R es un grupo alquilo o alquilo alcoxilado;

M es un metal alcalino, hidrógeno, metal alcalinotérreo, amonio o combinaciones de los mismos; y

n es de 1 a 6.

2. Sulfometilsuccinato de alquilo según la reivindicación 1, en el que R es un grupo alquilo o alquilo alcoxilado de C<sub>1</sub> a C<sub>24</sub>.

3. Sulfometilsuccinato de alquilo según la reivindicación 1, en el que R es un grupo alquilo o alquilo alcoxilado de C<sub>6</sub> a C<sub>18</sub>, preferentemente un grupo alquilo o alquilo alcoxilado de C<sub>12</sub> a C<sub>14</sub>.

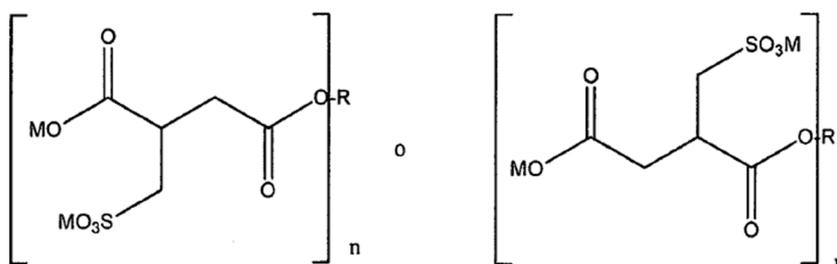
4. Sulfometilsuccinato de alquilo según la reivindicación 1, en el que M es sodio, hidrógeno o una mezcla de los mismos.

5. Sulfometilsuccinato de alquilo según la reivindicación 4, en el que n es 1 o 2.

6. Procedimiento para preparar un sulfometilsuccinato de alquilo que comprende las etapas de:

(i) hacer reaccionar anhídrido itacónico con un alcohol de la fórmula general ROH para producir un éster de itaconato, en el que R es un grupo alquilo o alquilo alcoxilado; y

(ii) hacer reaccionar el éster de itaconato con un agente sulfonante para producir un sulfometilsuccinato de la fórmula general

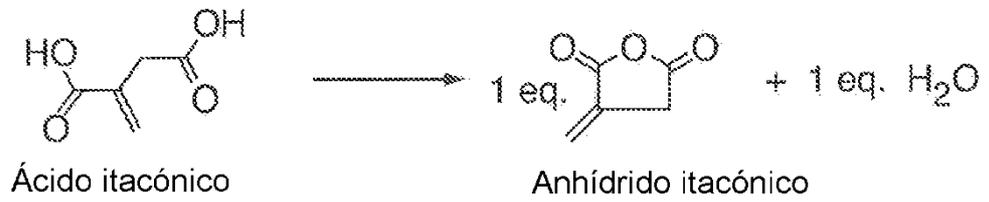


en el que M es un metal alcalino, hidrógeno, metal alcalinotérreo, amonio o una combinación de los mismos;

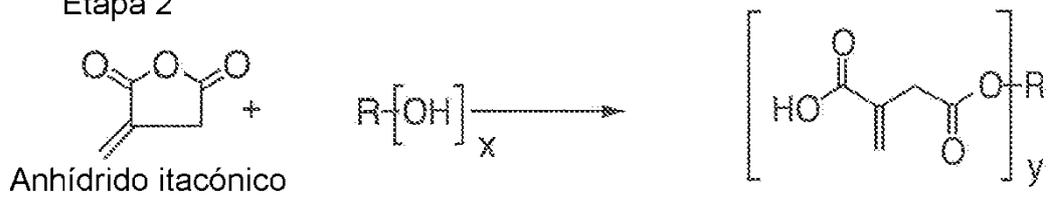
y n es de 1 a 6.

7. Producto de limpieza personal, crema o loción, producto cosmético, producto para el tratamiento del cabello, producto de cuidado doméstico o industrial o institucional, antitranspirante o desodorante, producto de extracción de petróleo mejorada, producto agrícola, producto disolvente, producto de yeso, producto de pintura y revestimiento o producto de emulsión que comprende el sulfometilsuccinato de alquilo según la reivindicación 1.

Etapa 1



Etapa 2



Etapa 3

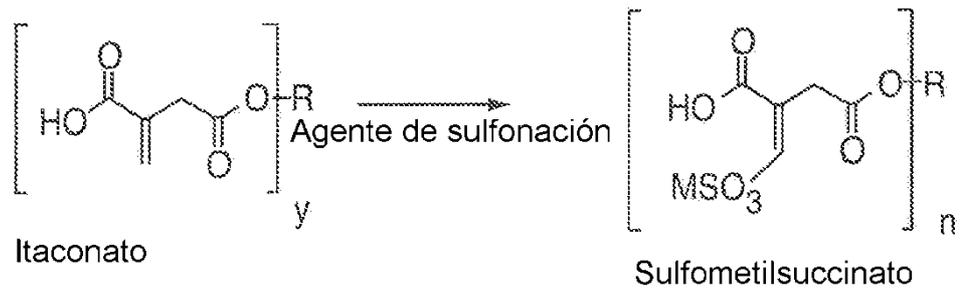


FIG. 1

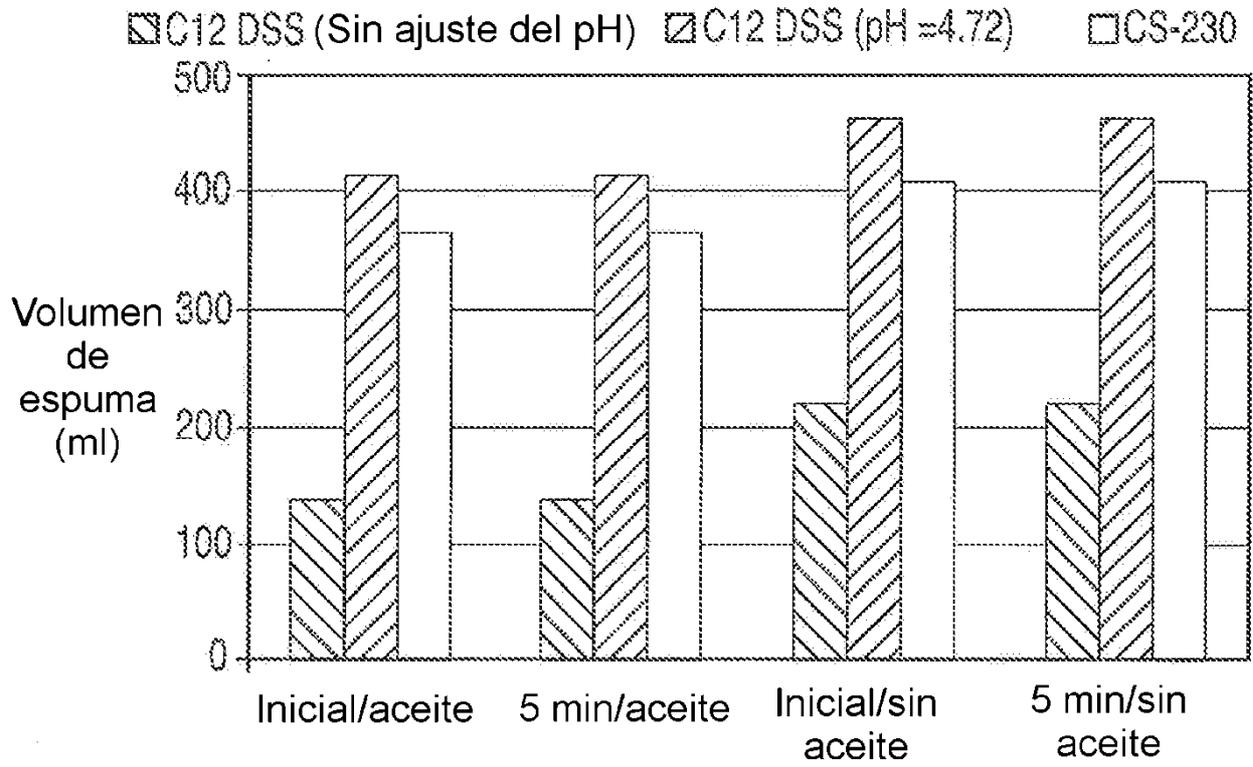


FIG. 2