



(10) **DE 10 2010 029 610 A1** 2011.12.08

(12)

Offenlegungsschrift

(21) Aktenzeichen: **10 2010 029 610.4**

(22) Anmeldetag: **02.06.2010**

(43) Offenlegungstag: **08.12.2011**

(51) Int Cl.: **C07C 219/06** (2006.01)

C07C 219/08 (2006.01)

C07C 213/06 (2006.01)

A61K 8/41 (2006.01)

A61Q 19/00 (2006.01)

A61Q 5/00 (2006.01)

(71) Anmelder:

Evonik Goldschmidt GmbH, 45127, Essen, DE

(72) Erfinder:

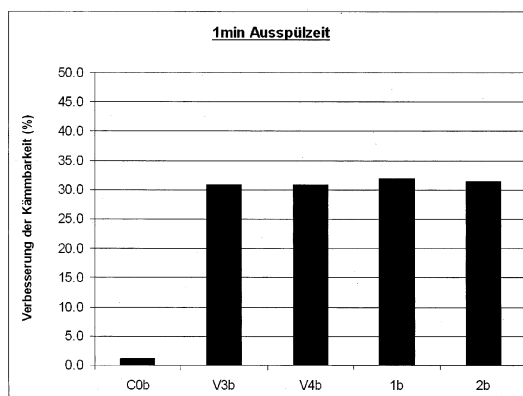
**Herrwerth, Sascha, Dr., 45134, Essen, DE;
Grüning, Burghard, Dr., 45134, Essen, DE; Köhle,
Hans-Jürgen, Dr., 63533, Mainhausen, DE; Ulrich-
Brehm, Isabella, Dr., 40878, Ratingen, DE**

Prüfungsantrag gemäß § 44 PatG ist gestellt.

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen

(54) Bezeichnung: **Quartäre Dialkanolaminester**

(57) Zusammenfassung: Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind neue quartäre Ammoniumverbindungen vom Typ der Esterquats, sowie ein Verfahren zu deren Herstellung, als auch die Verwendung dieser in Formulierungen.



Beschreibung

Gebiet der Erfindung

[0001] Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind neue quartäre Ammoniumverbindungen vom Typ der Esterquats, sowie ein Verfahren zu deren Herstellung, als auch die Verwendung dieser in Formulierungen.

Stand der Technik

[0002] In der Vergangenheit konnten quartäre Ammoniumverbindungen („Quats“) in Form von Mono- und Dialkylquats mit einer bzw. zwei langen Alkylketten im Molekül weitverbreitete Nutzung in verschiedenen Anwendungsgebieten finden. Dazu gehören Weichspüler für Textilien, antistatische Zubereitungen, Reinigungsmittel, Hautpflegemittel, Haarkonditionierer sowie Korrosionsinhibitoren, Druckfarbenentferner für Papier und vieles mehr.

[0003] Im Bereich der Haarpflegemittel werden als Monoalkylquats beispielsweise das (INCI) Cetrimonium Chloride (z. B. kommerziell erhältlich als VARISOFT® 300, Evonik Goldschmidt GmbH) und das (INCI) Behentrimonium Chloride (z. B. kommerziell erhältlich als VARISOFT® BT 85 Pellets, Evonik Goldschmidt GmbH) sowie als Dialkylquat das (INCI) Dicetyldimonium Chloride (z. B. kommerziell erhältlich als VARISOFT® 432 PPG, Evonik Goldschmidt GmbH) in der Industrie im großen Umfang verwendet.

[0004] Neben ihren guten Eigenschaften als Konditionierer weisen diese Alkylammonium-Kationen allerdings auch einige Nachteile auf. Dazu zählen die unzureichende biologische Abbaubarkeit und ungünstige ökotoxikologische Eigenschaften.

[0005] Besonders auf dem Gebiet der Haut- und Haarpflegemittel konnten sich neben den konventionellen Alkylquats im Laufe der Jahre außerdem die sogenannten Esterquats etablieren, beispielsweise (INCI) Distearoylethyl Dimonium Chloride, kommerziell erhältlich als VARISOFT® EQ 65 Pellets (Evonik Goldschmidt GmbH) oder (INCI) Distearoylethyl Hydroxyethylmonium Methosulfate, kommerziell erhältlich als Dehyquart F 75 (Cognis).

[0006] Unter dem Oberbegriff Esterquat versteht man im allgemeinen mit Fettsäuren veresterte Di- oder Trialkanolamine in ihrer Salzform.

[0007] Diese quaternierten Fettsäurealkanolaminester-Salze stellen bekannte Stoffe dar, die nach einschlägigen Methoden der präparativen organischen Chemie erhalten werden können. Üblicherweise beruht die Herstellung der Esterquats auf einem mehrstufigen Prozess, bei dem zunächst durch Umsetzung eines Alkanolamins mit Carbonsäuren oder entsprechenden Derivaten das veresterte tertiäre Alkanolamin hergestellt wird, das dann im Anschluss mit einem geeigneten Reagens quaterniert wird.

[0008] In diesem Zusammenhang sei auf die EP 0483195 verwiesen, nach der man Triethanolamin in Gegenwart von unterphosphoriger Säure mit Fettsäuren partiell verestert, Luft durchleitet und anschließend mit Dimethylsulfat oder Ethylenoxid quaterniert. Die dort aufgeführten Verbindungen dienen als Weichmacher für Textilien.

[0009] In der DE4308794 wird die Herstellung fester Esterquats beschrieben, indem die Quaternisierung der Triethanolaminester in Gegenwart geeigneter Dispergiermittel, bevorzugt Fettalkohole, durchgeführt wird.

[0010] Übersichten zu dieser Thematik lassen sich zum Beispiel unter R. Puchta et al. in Tens. Surf. Det., 30, 186 (1993), M. Brock in Tens. Surf. Det., 30, 394 (1993), R. Lagerman et al. in J. Am. Chem. Soc., 71, 97 (1994) oder unter I. Shapiro in Cosm. Toil., 109, 77 (1994) nachlesen.

[0011] Esterquats weisen verglichen mit Alkylquats ein günstigeres ökotoxikologisches Verhaltensprofil auf und verfügen aufgrund der vorhandenen Esterbindung auch über eine verbesserte biologische Abbaubarkeit als Alkylquats.

[0012] Die Umweltverträglichkeit von Zubereitungen bzw. deren Inhaltsstoffen gewinnt immer mehr an Bedeutung, zum einen aufgrund entsprechender gesetzlicher Regelungen, vor allem aber auch durch ein verändertes Verbraucherbewusstsein. Der Verbraucher legt immer größeren Wert auf Produkte, die sich nicht nachteilig auf die Umwelt auswirken. Dadurch rücken Eigenschaften wie Ökotoxizität oder biologische Abbaubarkeit immer

mehr in den Fokus der Öffentlichkeit. Eine gute biologische Abbaubarkeit gewährleistet die Umwandlung der Stoffe durch biologische Prozesse, die üblicherweise in der Abwasseraufbereitung ablaufen. Die dabei entstehenden Fragmente weisen ein noch geringeres Risiko einer Umweltschädigung als die Ausgangsprodukte auf und sind in den herkömmlichen Verfahren der Aufbereitung von Abwasser und Feststoffabfall sehr einfach zu handhaben. Bei unzureichender biologischer Abbaubarkeit kann im Laufe der Zeit die Funktionsfähigkeit aquatischer Lebensgemeinschaften beeinträchtigt werden.

[0013] Zahlreiche der momentan auf dem Markt verfügbaren Weichmacher oder Konditioniermittel, deren biologische Abbaubarkeit bereits verbessert werden konnte, fallen jedoch in der Wirksamkeit im Vergleich zu den konventionellen Produkten ab.

[0014] Beispielsweise sind die Applikationseigenschaften der zur Zeit erhältlichen Esterquats zwar ebenfalls auf einem hohen Niveau, können bei längeren Ausspülzeiten jedoch nicht mit den Applikationseigenschaften von (INCI) Behentrimonium Chloride mithalten. Die gewünschten konditionierenden Eigenschaften werden bei den Esterquats des Standes der Technik durch den Ausspülprozess schneller reduziert.

[0015] Da man bei herkömmlichen Produkten bisher entweder auf eine effektive Leistung oder auf eine gute Umweltverträglichkeit verzichten muss, besteht nach wie vor ein hoher Bedarf an Verbindungen, die beide Bereiche abdecken, indem sie hervorragende Eigenschaften als Pflegeprodukte und eine hohe Umweltverträglichkeit in sich vereinen.

[0016] Im Bereich der Haarpflege spielen die Konditioniermittel eine wichtige Rolle. Ihre Aufgabe besteht darin, das Haar zu schützen und bereits vorhandene Schäden zu beheben. Viele Haarschädigungen entstehen dadurch, dass das Haar tagtäglich verschiedenen umweltbedingten Stressfaktoren ausgesetzt wird, dazu gehören Temperatur, Feuchtigkeit, Sonnenlicht oder Luftverschmutzung. Zusätzlich führen chemische Haarbehandlungen wie Bleichen, Färben, Tönen, Glätten oder der Einsatz von Dauerwelle zu negativen Auswirkungen auf die Haarstruktur.

[0017] So wird zum Beispiel bei einer Dauerwelle sowohl der Cortex als auch die Cuticula des Haares angegriffen. Die Disulfid-Brücken des Cystins werden durch den Reduktionsschritt aufgebrochen und im anschließenden Oxidationsschritt zum Teil zu Cysteinsäure oxidiert.

[0018] Beim Bleichen wird nicht nur das Melanin zerstört, sondern es werden außerdem ca. 15 bis 25% der Disulfid-Bindungen des Cystins bei einer milden Bleiche oxidiert. Bei einer exzessiven Gleichung können es sogar bis zu 45% sein (K. F. de Polo, A Short Textbook of Cosmetology, 2000, Verlag für chemische Industrie, H. Ziolkowsky GmbH).

[0019] Und selbst das tägliche Waschen, Kämmen und Föhnen der Haare hinterlässt Spuren. Die unerwünschten Konsequenzen zeigen sich zum Beispiel in einer rauen Haaroberfläche, einer reduzierten mechanischen Stabilität und einem Anstieg der elektrostatischen Ladung. Haarbruch, die Bildung von „Spliss“, erschwerte Kämmbarkeit und der Verlust des natürlichen Glanzes sind die Folge.

[0020] Konditioniermittel haben die Aufgabe, das Haar vor diesen negativen Auswirkungen zu schützen, sollten sich dabei jedoch wenn möglich nicht negativ auf die Umwelt auswirken.

[0021] Dazu muss das Konditioniermittel in der Lage sein, auf das Haar aufzuziehen. Aufgrund der anionischen Zentren auf der Haaroberfläche, basierend auf Proteinstrukturen, bilden kationische Verbindungen eine bevorzugte Produktklasse unter den konditionierenden Agenzien, da sie die nötige Affinität zum Haar gewährleisten. Im Falle einer bereits vorliegenden Haarschädigung ist die Zahl der anionischen Gruppen sogar noch erhöht, und zwar aufgrund der Gegenwart oxidierten Proteinstrukturen, wie z. B. der oben genannten Cysteinsäure. Gerade in diesen geschädigten Bereichen können kationische Konditioniermittel ihre volle Wirksamkeit entfalten.

[0022] Aufgabe der Erfindung war es, mindestens einem Nachteil des Standes der Technik abzuweichen oder diesen zumindest zu verringern und insbesondere Wirkstoffe bereitzustellen, die auch bei langen Spülzeiten auf der Zieloberfläche verbleiben und ihre Wirkung weiterhin entfalten.

Beschreibung der Erfindung

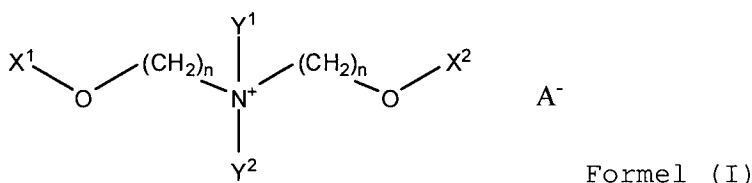
[0023] Überraschenderweise wurde gefunden, dass die im Folgenden beschriebenen Verbindungen der allgemeinen Formel (I) gemäß Anspruch 1, ein Verfahren zu deren Herstellung sowie die beschriebenen Zusammensetzungen und Formulierungen die gestellte Aufgabe zu lösen vermögen.

[0024] Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind daher spezielle quartäre Dialkanolaminester.

[0025] Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist ein Verfahren zu deren Herstellung sowie deren Verwendung in Formulierungen. Ein Vorteil der vorliegenden Erfindung ist, dass die erfindungsgemäßen Verbindungen bereits bei geringen Einsatzmengen eine gute Wirkung entfalten.

[0026] Ein weiterer Vorteil ist, dass die erfindungsgemäßen Verbindungen in ökologischer Hinsicht wenig belastend sind. Noch ein Vorteil ist es, dass die erfindungsgemäßen Verbindungen auf keratinischen Fasern einen verbesserten konditionierenden Effekt bei längeren Abspülzeiten zeigen als bisher bekannte quartäre Esterverbindungen.

[0027] Einen Beitrag zur Lösung der eingangs gestellten Aufgabe leisten somit quartäre Dialkanolaminester der allgemeinen Formel (I)



mit

Y^1 und Y^2 unabhängig voneinander, gleich oder verschieden ein Alkylrest mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, ein Benzylrest oder H,

$n = 1$ bis 4,

A- ein Anion, bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe enthaltend, bevorzugt bestehend aus, Chlorid, Bromid, Iodid, Methylsulfat, Tosylat, Phosphat, Sulfat, Ethylsulfat, Hydrogensulfat, Lactat, Acetat und Citrat, bevorzugt Chlorid und Methylsulfat,

X^1 und X^2 unabhängig voneinander, gleich oder verschieden ausgewählt aus den Gruppen (a), (b) und (c), wobei diese Gruppen bestehen aus

(a) Acylreste enthaltend 6 bis 14 Kohlenstoffatome,

(b) Acylreste enthaltend 20 bis 24 Kohlenstoffatome und

(c) Acylreste enthaltend 3 bis 28 Kohlenstoffatome, welche nicht in den Gruppen (a) oder (b) enthalten sind, oder H, mit den Maßgaben, dass im Zahlenmittel pro Molekül der allgemeinen Formel (I)

0,40 bis 1,20, bevorzugt 0,60 bis 1,10, insbesondere 0,75 bis 1,10 Reste der Gruppe (a),

0,80 bis 1,60, insbesondere 0,90 bis 1,40, insbesondere 0,90 bis 1,25, Reste der Gruppe (b) und

0 bis 0,20, bevorzugt 0,0010 bis 0,10, besonders bevorzugt 0,0050 bis 0,02, Reste der Gruppe (c) enthalten sind und

die Zahlenmittel pro Molekül der Reste der Gruppen (a), (b) und (c) sich zu 2 addieren.

[0028] Es ist dem Fachmann offenbar, dass durch die allgemeine Formel (I) eine Mischung verschiedener quartärer Dialkanolaminester wiedergegeben wird.

[0029] Der Rest bestimmend Y^1 und Y^2 ist bevorzugt ein linearer Alkylrest, welcher bevorzugt unsubstituiert ist, ein Benzylrest oder H; insbesondere ist der Rest ausgewählt aus der Gruppe umfassend, bevorzugt bestehend aus, $-CH_3$, $-C_2H_5$, Benzyl und H.

[0030] n ist insbesondere bevorzugt gleich 2.

[0031] Die Acylreste der Gruppen (a) und (b) sind bevorzugt gesättigt.

[0032] Die Acylreste der Gruppen (a), (b) und (c) sind insbesondere solche der natürlich vorkommenden Fettsäuren mit entsprechenden Kettenlängen.

[0033] Bevorzugt enthalten sie somit geradzahlige Anzahlen an Kohlenstoffatomen.

[0034] Acylreste der Gruppe (a) sind bevorzugt ausgewählt aus $C_5H_{11}CO-$, $C_7H_{15}CO-$, $C_9H_{19}CO-$, $C_{11}H_{23}CO-$ und $C_{13}H_{27}CO-$, bevorzugt aus $C_9H_{19}CO-$ und $C_{11}H_{23}CO-$, insbesondere $C_{11}H_{23}CO-$.

[0035] Da der Einsatz technischer Laurinsäure besonders bevorzugt ist, ist ein besonders bevorzugter Acylrest der Gruppe (a) ein Acylrest mit einer Kettenlänge von 12 Kohlenstoffatomen. In diesem Zusammenhang ist es bevorzugt, dass den Gruppen (b) und (c) entsprechend zugeordnet werden 0 bis 1 Gew.-%, bevorzugt 0,02 bis 0,50 Gew.-% Acylreste einer Fettsäure mit einer Kettenlänge kleiner 11, bevorzugt von 6 bis 10 Kohlenstoffatomen und 0 bis 1 Gew.-%, bevorzugt 0,30 bis 0,70 Gew.-% Acylreste einer Fettsäure mit einer Kettenlänge von größer 13, bevorzugt 14 bis 28 Kohlenstoffatomen, wobei sich die Gew.-% auf die Gesamtmenge aller Acylreste bezieht, die sich aus der technischen Laurinsäure ableiten lassen.

[0036] Da ebenso der Einsatz technischer Caprinsäure besonders bevorzugt ist, ist ein besonders bevorzugter Acylrest der Gruppe (a) ein Acylrest mit einer Kettenlänge von 10 Kohlenstoffatomen. In diesem Zusammenhang ist es bevorzugt, dass den Gruppen (b) und (c) entsprechend zugeordnet werden 0 bis 1 Gew.-%, bevorzugt 0,02 bis 0,50 Gew.-% Acylreste einer Fettsäure mit einer Kettenlänge kleiner 9, bevorzugt von 6 bis 8 Kohlenstoffatomen und 0 bis 1 Gew.-%, bevorzugt 0,30 bis 0,70 Gew.-% Acylreste einer Fettsäure mit einer Kettenlänge von größer 11, bevorzugt 12 bis 28 Kohlenstoffatomen, wobei sich die Gew.-% auf die Gesamtmenge aller Acylreste bezieht, die sich aus der technischen Caprinsäure ableiten lassen.

[0037] Acylreste der Gruppe (b) sind bevorzugt ausgewählt aus $C_{19}H_{39}CO-$, $C_{21}H_{43}CO-$ und $C_{23}H_{47}CO-$.

[0038] Besonders bevorzugte Acylreste der Gruppe (b) bilden die Acylreste einer technischen Behensäure, mit entsprechenden Kettenlängen, insbesondere die Reste $C_{19}H_{39}CO-$, $C_{21}H_{43}CO-$, $C_{23}H_{47}CO-$ in einem Gewichtsverhältnis von 4–8 zu 85–99 zu 0–3. In diesem Zusammenhang ist es bevorzugt, dass den Gruppen (a) und (c) entsprechend zugeordnet werden 0 bis 3 Gew.-%, bevorzugt 0,50 bis 1,50 Gew.-% Acylreste einer Fettsäure mit einer Kettenlänge von kleiner 19, bevorzugt 6 bis 18, insbesondere 15 bis 18 Kohlenstoffatomen, 0 bis 1 Gew.-%, bevorzugt 0,25 bis 0,75 Gew.-% Acylreste einer Fettsäure mit einer Kettenlänge von 26 Kohlenstoffatomen, wobei sich die Gew.-% auf die Gesamtmenge aller Acylreste bezieht, die sich aus der technischen Behensäure ableiten lassen.

[0039] Die Acyleste der Gruppe (c) werden bevorzugt bestimmt über Carbonsäuren, welche zusätzlich in technischen Mischungen der Carbonsäuren enthalten sind, welche den Acylrest der Gruppen (a) und (b) bestimmen, wobei diese technischen Mischungen zur Herstellung der erfindungsgemäßen Esterquats eingesetzt wurden. Beispielsweise enthält technische Laurinsäure (Gruppe (a)) noch einen geringen Anteil gesättigter Fettsäuren mit einer Kettenlänge von größer 15 C-Atomen, deren Acylreste dann den Gruppen (b) und (c) zuzuordnen sind.

[0040] Es ist erfindungsgemäß bevorzugt, dass in den erfindungsgemäßen quartären Dialkanolaminestern der allgemeinen Formel (I) das molare Verhältnis der Acylreste der Gruppe (a) zu Acylresten der Gruppe (b) im Zahlenmittel 1 zu 0,6 bis 4, insbesondere 1 zu 0,8 bis 2,4, ganz besonders 1 zu 0,8 bis 1,7 beträgt.

[0041] Ganz besonders bevorzugt sind Esterquats, bei denen die Acylreste der Gruppen (a) bis (c) bestimmt werden über die Acylreste einer Mischung bestehend aus technischer Laurinsäure, insbesondere EDENOR C1298-100 (Emery Oleochemicals) und technischer Behensäure, insbesondere EDENOR C2285 (Emery Oleochemicals), wobei die technische Laurinsäure mindestens teilweise durch eine technische Caprinsäure, insbesondere EDENOR C1098-100 (Emery Oleochemicals) ersetzt werden kann.

[0042] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen quartären Dialkanolaminester.

[0043] Die erfindungsgemäßen quartären Dialkanolaminester sind vorteilhaft durch das im Folgenden beschriebene Verfahren erhältlich.

[0044] Das erfindungsgemäße Verfahren zur Herstellung quartärer Dialkanolaminester umfasst die Verfahrensschritte

A) Umsetzung, bevorzugt Veresterung, eines Alkyldialkanolamins, bei dem die beiden Alkanolgruppen ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus, $-\text{CH}_2\text{OH}$, $-\text{C}_2\text{H}_4\text{OH}$, $-\text{C}_3\text{H}_6\text{OH}$ und $-\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}$, insbesondere $-\text{C}_2\text{H}_4\text{OH}$, und die Alkylgruppe ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus Alkylresten mit 1–6 Kohlenstoffatomen, insbesondere linearen Alkylresten, welche bevorzugt unsubstituiert sind, mit einem Gemisch aus Carbonsäuren bestehend aus den Gruppen,

(d) Carbonsäure enthaltend 6 bis 14 Kohlenstoffatome,

(e) Carbonsäure enthaltend 20 bis 24 Kohlenstoffatome und gegebenenfalls

(f) Carbonsäure enthaltend 3 bis 28 Kohlenstoffatome, welche nicht in den Gruppen (d) und (e) enthalten sind,

B) Umsetzung, bevorzugt Quaternisierung, des Produktes aus Verfahrensschritt A) mit einem Quaternierungsmittel ausgewählt aus der Gruppe umfassend, bevorzugt bestehend aus, Dialkylsulfate, Alkylhalogenide und Benzylhalogenide und/oder

C) Neutralisierung des Reaktionsansatzes mit einer Säure, bevorzugt einer organischen Säure, mit der Maßgabe, dass bezogen auf alle Carbonsäuren der Gruppen (d), (e) und (f) 0 bis 10 Mol%, bevorzugt 0,5 bis 5 Mol% bevorzugt 0,25 bis 1,0 Mol% Carbonsäuren der Gruppe (f) eingesetzt werden.

[0045] Besonders bevorzugt in Verfahrensschritt A) eingesetztes Alkyldialkanolamin ist das Methyl-diethanolamin.

[0046] Die Carbonsäuren der Gruppe (f) werden bevorzugt bestimmt über die Carbonsäuren, welche zusätzlich in technischen Mischungen der Carbonsäuren der Gruppen (d) und (e) enthalten sind, die in dem erfindungsgemäßen Verfahren eingesetzt werden.

[0047] Bevorzugte in Verfahrensschritt B) eingesetzte Alkylhalogenide weisen 1 bis 6 Kohlenstoffatome auf, insbesondere bevorzugt ist hier Methylchlorid; in diesem Zusammenhang bevorzugtes Dialkylsulfat ist Dimethylsulfat.

[0048] Die Verfahrensschritte A) und B) können unter den dem Fachmann bekannten und üblichen Verfahrensbedingungen zur Veresterung bzw. Quaternisierung durchgeführt werden.

[0049] In Verfahrensschritt A) wird hier somit bevorzugt das Alkyldialkanolamin mit einer Mischung der beanspruchten Fettsäuren bei 140–200°C, ggf. unter Mitverwendung eines Veresterungskatalysators, erhitzt und entstehendes Kondensationswasser kontinuierlich abdestilliert. Zur Vervollständigung der Reaktion wird ggf. Vakuum angelegt und der Verlauf der Reaktion über die Abnahme der Säurezahl verfolgt. Eine detaillierte Anleitung hierzu findet sich unter anderem in der DE4111966.

[0050] In Verfahrensschritt B) wird der Alkyldialkanolaminester bevorzugt gegebenenfalls in Lösungsmittel bei 60–120°C mit dem Quaternierungsreagenz, besonders bevorzugt mit Methylchlorid, zur Reaktion gebracht. Das Quaternierungsreagenz wird in diesem Fall im Überschuss eingesetzt, der Druck wird zwischen 1–8 bar einreguliert. Nachdem das tertiäre Amin bis zum gewünschten Umsetzungsgrad abreagiert ist, wird der Überschuss an Quaternierungsreagenz destillativ entfernt. Eine detaillierte Anleitung hierzu findet sich unter anderem in EP0643128.

[0051] Die in dem erfindungsgemäßen Verfahren bevorzugt eingesetzten Carbonsäuren der Gruppen (d), (e) und (f) entsprechen den die bevorzugten Acylreste der Gruppen (a), (b) und (c) liefernden Carbonsäuren der erfindungsgemäßen Verbindung.

[0052] Insbesondere bevorzugt ist hier der Einsatz einer Mischung von Carbonsäuren bestehend aus technischer Laurinsäure, insbesondere EDENOR C1298-100 (Emery Oleochemicals) und technischer Behensäure, insbesondere EDENOR 02285 (Emery Oleochemicals).

[0053] Bevorzugt in Verfahrensschritt C) eingesetzte organische Säuren sind ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Zitronensäure, Weinsäure, Milchsäure, Essigsäure, Ameisensäure und Glykolsäure.

[0054] Der pH-Wert wird in Verfahrensschritt C) bevorzugt auf einen pH-Wert von 3,5 bis 5,5 eingestellt, bevorzugt unter Rühren. Dieser Schritt erfolgt bevorzugt bei einer Temperatur von insbesondere 40–60°C.

[0055] Es ist erfindungsgemäß bevorzugt, dass in dem erfindungsgemäßen Verfahren pro mol Alkyldialkanolamin 0,40 bis 1,20 mol, bevorzugt 0,60 bis 1,10 mol, insbesondere 0,75 bis 1,10 mol, Carbonsäure der Gruppe (d), 0,80 bis 1,60 mol, bevorzugt 0,90 bis 1,40 mol,

insbesondere 0,90 bis 1,25 mol, Carbonsäure der Gruppe (e) eingesetzt werden.

[0056] Erfindungsgemäß bevorzugt in diesem Zusammenhang ist es, dass das molare Verhältnis der eingesetzten Carbonsäuren der Gruppe (d) zu der Gruppe (e) 1 zu 0,6 bis 4, insbesondere 1 zu 0,8 bis 2,4, ganz besonders 1 zu 0,8 bis 1,7 beträgt.

[0057] Ein bevorzugtes erfindungsgemäßes Verfahren ist dadurch gekennzeichnet, dass pro mol Alkyldialkanolamin insgesamt Carbonsäuren der Gruppen (d) und (e) und gegebenenfalls (f) in einer Menge von 1,80 bis 2,5 mol, besonders bevorzugt 1,85 bis 2,2 mol eingesetzt werden.

[0058] Ein erfindungsgemäß bevorzugtes Verfahren ist dadurch gekennzeichnet, dass in Verfahrensschritt B) mindestens ein Lösungsmittel ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus kurzkettigen Alkoholen, Fettalkoholen, Polyolen und Carbonaten eingesetzt wird.

[0059] Kurzkettige Alkohole sind in diesem Zusammenhang solche mit einer Kettenlänge von 2 bis 6 Kohlenstoffatomen, wie beispielsweise Ethanol, Butanol, Isopropanol, Hexanol, Als Fettalkohol wird in diesem Zusammenhang ein unverzweigter oder verzweigter Monoalkohol mit einer Alkylgruppe von 8 bis 30 C-Atomen verstanden. Bevorzugte Fettalkohole sind Laurylalkohol, Myristylalkohol, Cetylalkohol, Palmoleylalkohol, Stearylalkohol, Isostearylalkohol, Oleylalkohol, Elaidylalkohol, Petroselinylalkohol, Guerbetalalkohol, Arachylalkohol, Gadoleylalkohol, Behenylalkohol und Erucylalkohol sowie deren technische Gemische, vorzugsweise technische Kokos- oder Talgfettalkohole mit 12 bis 18, vorzugsweise mit 16 bis 18 Kohlenstoffatomen.

[0060] Bevorzugt eingesetzte Alkohole sind kurzkettige, insbesondere Isopropanol.

[0061] In Verfahrensschritt B) eingesetzte Polyole sind insbesondere Ethylenglykol, Propylenglykol, Dipropylenglykol und Butylenglykol, eingesetztes Carbonat ist insbesondere Propylen- und Ethylencarbonat.

[0062] Es ist bevorzugt, dass das Lösungsmittel in einer Menge von 0,5 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 1 bis 40 Gew.-% eingesetzt wird, bezogen auf die Summe der Gewichtsmengen von theoretisch zu erwartender quartärer Esterverbindung und Lösungsmittel.

[0063] Eine detaillierte Anleitung hierzu ist in der DE4308794 zu finden.

[0064] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist eine Zusammensetzung enthaltend erfindungsgemäße quartäre Dialkanolaminester und/oder quartäre Dialkanolaminester erhältlich nach dem vorstehend beschriebenen erfindungsgemäßen Verfahren, mindestens ein Lösungsmittel, insbesondere ausgewählt aus kurzkettigen Alkoholen, Fettalkoholen, Polyolen und Carbonaten und optional mindestens eine Carbonsäure ausgewählt aus mindestens einer der Gruppen (d), (e) und (f).

[0065] Bevorzugt besteht die erfindungsgemäße Zusammensetzung aus den vorgenannten Komponenten.

[0066] Vorzugsweise macht das Lösungsmittel 0,5 bis 50 Gew.-%, bevorzugt 1–40 Gew.-%, bezogen auf das Gesamtgewicht der Zusammensetzung aus.

[0067] Die in der erfindungsgemäßen Zusammensetzung enthaltenen Lösungsmittel stammen in der Regel aus dem Zusetzen von Lösungsmittel in Verfahrensschritt B) des erfindungsgemäßen Verfahrens, so dass die in diesem Zusammenhang genannten bevorzugten Lösungsmittel bevorzugt in den erfindungsgemäßen Zusammensetzungen enthalten sind.

[0068] Somit enthalten erfindungsgemäße Zusammensetzungen bevorzugt Fettalkohole, die eine Mischung aus verschiedenen Fettalkoholen ausgewählt aus Alkoholen mit einer Kettenlänge von C12 bis C24, besonders bevorzugt eine Mischung aus Cetyl- (C16) und Stearylalkohol (C18), ist. Insbesondere bevorzugt enthaltener kurzkettiger Alkohol ist Isopropanol. Bevorzugt enthaltene Polyole sind insbesondere Ethylenglykol, Propylenglykol, Dipropylenglykol und Butylenglykol, bevorzugt enthaltenes Carbonat ist insbesondere Propylencarbonat.

[0069] Vorzugsweise machen die Carbonsäuren 0 Gew.-% bis 10 Gew.-%, bevorzugt 0,01 Gew.-% – 3 Gew.-%, bezogen auf das Gesamtgewicht der Zusammensetzung aus.

[0070] Die in der erfindungsgemäßen Zusammensetzung enthaltenen Carbonsäuren stammen in der Regel aus den überschüssig zugesetzten Carbonsäuren in Verfahrensschritt A) des erfindungsgemäßen Verfahrens, so dass die in diesem Zusammenhang genannten bevorzugten Carbonsäuren bevorzugt in den erfindungsgemäßen Zusammensetzungen enthalten sind.

[0071] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist die Verwendung der erfindungsgemäßen quartären Dialkanolaminester und/oder der quartären Dialkanolaminester erhältlich nach dem erfindungsgemäßen Verfahren und/oder mindestens einer erfindungsgemäßen Zusammensetzung zur Herstellung von Formulierungen, insbesondere von kosmetischen oder pharmazeutischen Formulierungen und Pflege- und Reinigungsformulierungen für die Anwendung im häuslichen und industriellen Umfeld. In diesem Zusammenhang sind bevorzugte kosmetische oder pharmazeutische Formulierungen insbesondere Haut- und Haarbehandlungsformulierungen, insbesondere Haarkonditionierungsformulierungen. Bevorzugte Pflege- und Reinigungsformulierungen für die Anwendung im häuslichen und industriellen Umfeld sind in diesem Zusammenhang Textilpflegemittel, wie beispielsweise Weichspüler, und Pflegemittel für harte Oberflächen, insbesondere für Fahrzeuge, Wasserfahrzeuge, Flugzeuge, Fensterscheiben und -bänke, Duschtrennungen, Fußböden wie Teppiche, Fliesen, Laminat, Parkett, Korkfußböden, Marmor-, Stein- und Feinsteinzeuggböden, Haushaltskeramiken wie WCs, Waschbecken, Bidets, Duschtassen, Badewannen, Türklinken, Armaturen, Haushaltswerkzeuge wie Waschmaschinen, Trockner, Spülmaschinen, Spülen aus Keramik oder Edelstahl, Möbel wie Tische, Stühle, Regale, Ablageflächen, Fenster, Kochgeschirr, Geschirr und Besteck, Werkzeuge wie chirurgische Instrumente, Staubsauger, Maschinen, Rohrleitungen, Tanks und Geräte für Transport, Verarbeitung und Aufbewahrung in der Lebensmittelverarbeitung, wie beispielsweise Rinse aids, Klarspüler.

[0072] Somit sind Formulierungen, insbesondere kosmetische oder pharmazeutische Formulierungen und Pflege- und Reinigungsformulierungen für die Anwendung im häuslichen und industriellen Umfeld enthaltend erfindungsgemäße quartäre Dialkanolaminester und/oder quartäre Dialkanolaminester erhältlich nach dem erfindungsgemäßen Verfahren und/oder mindestens eine erfindungsgemäße Zusammensetzung, insbesondere in einer Menge von 0,1 bis 7 Gew.-%, bevorzugt 0,5 bis 4 Gew.-%, besonders bevorzugt 1 bis 3 Gew.-% bezogen auf die Gesamtformulierung, insbesondere wässrige Formulierungen, welche vorzugsweise einen pH-Wert von 3,5 bis 5,5 aufweisen, ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung.

[0073] Die angegebenen, in der Formulierung enthaltenen 0,1 bis 7 Gew.-%, bevorzugt 0,5 bis 4 Gew.-%, besonders bevorzugt 1 bis 3 Gew.-% werden durch Aufsummierung aller tatsächlich in der erfindungsgemäßen Formulierung enthaltenen Komponenten (erfindungsgemäße quartäre Dialkanolaminester, quartäre Dialkanolaminester erhältlich nach dem erfindungsgemäßen Verfahren und erfindungsgemäße Zusammensetzung) ermittelt.

[0074] Bevorzugte erfindungsgemäße Formulierungen enthalten keine weiteren Alkyldialkanolaminester.

[0075] Unter dem Begriff „wässrig“ wird in diesem Zusammenhang ein Wassergehalt von größer 50 Gew.-%, bevorzugt größer 75 Gew.-%, bezogen auf die Gesamtformulierung verstanden.

[0076] Bevorzugte erfindungsgemäße Formulierungen sind kosmetische Haar- und Hautpflegeformulierungen, insbesondere Haarpflegeformulierungen. Erfindungsgemäß besonders bevorzugte Formulierungen sind daher Haarshampoos, Haarspülungen, Haarfestiger, Fönfestiger, Haarpflegeemulsionen, Haarkuren, Aerosolschäume, Haarfärbemittel und Fönlotionen.

[0077] Die erfindungsgemäßen Formulierungen können z. B. mindestens eine zusätzliche Komponente enthalten, ausgewählt aus der Gruppe der
 Emollients,
 Co-Emulgatoren,
 Verdicker/Viskositätsregler/Stabilisatoren,
 Antioxidantien,
 Hydrotrope (oder Polyole),
 Fest- und Füllstoffe,
 Perlglanzadditive,
 Deodorant- und Antitranspirantwirkstoffe,
 Insektrepellentien,
 Selbstbräuner,
 Konservierungsstoffe,
 Konditioniermittel,

Parfüme,
 Farbstoffe,
 kosmetische Wirkstoffe,
 Pflegeadditive,
 Überfettungsmittel,
 Lösungsmittel.

[0078] Substanzen, die als beispielhafte Vertreter der einzelnen Gruppen eingesetzt werden können, sind dem Fachmann bekannt und können beispielsweise der deutschen Anmeldung DE 10 2008 001 788.4 entnommen werden. Diese Patentanmeldung wird hiermit als Referenz eingeführt und gilt somit als Teil der Offenbarung.

[0079] Bezüglich weiterer fakultativer Komponenten sowie der eingesetzten Mengen dieser Komponenten wird ausdrücklich auf die dem Fachmann bekannten einschlägigen Handbücher, z. B. K. Schrader, "Grundlagen und Rezepturen der Kosmetika", 2. Auflage, Seite 329 bis 341, Hüthig Buch Verlag Heidelberg, verwiesen.

[0080] Die Mengen der jeweiligen Zusätze richten sich nach der beabsichtigten Verwendung.

[0081] Typische Rahmenrezepturen für die jeweiligen Anwendungen sind bekannter Stand der Technik und sind beispielsweise in den Broschüren der Hersteller der jeweiligen Grund- und Wirkstoffe enthalten. Diese bestehenden Formulierungen können in der Regel unverändert übernommen werden. Im Bedarfsfall können zur Anpassung und Optimierung die gewünschten Modifizierungen aber durch einfache Versuche komplikationslos vorgenommen werden.

[0082] Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung ist die Verwendung der quartären Dialkanolaminester und/oder der quartären Dialkanolaminester erhältlich nach dem erfindungsgemäßen Verfahren und/oder mindestens einer erfindungsgemäßen Zusammensetzung und/oder mindestens einer erfindungsgemäßen Formulierung als Pflegemittel, insbesondere als Haut- und Haarpflegemittel, und/oder zur Konditionierung von Haaren, und/oder als Weichspüler.

[0083] Unter dem Begriff „Pflegemittel“ wird hier eine Substanz verstanden, die den Zweck erfüllt, einen Gegenstand in seiner ursprünglichen Form zu erhalten, die Auswirkungen äußerer Einflüsse (z. B. Zeit, Licht, Temperatur, Druck, Verschmutzung, chemische Reaktion mit anderen, mit dem Gegenstand in Kontakt tretenden reaktiven Verbindungen) wie beispielsweise Altern, Verschmutzen, Materialermüdung, Ausbleichen, zu mindern oder zu vermeiden oder sogar gewünschte positive Eigenschaften des Gegenstandes zu verbessern. Für letzten Punkt sei etwa ein verbesserter Haarglanz oder eine größere Elastizität des betrachteten Gegenstandes genannt.

[0084] In den nachfolgend aufgeführten Beispielen wird die vorliegende Erfindung beispielhaft beschrieben, ohne dass die Erfindung, deren Anwendungsbreite sich aus der gesamten Beschreibung und den Ansprüchen ergibt, auf die in den Beispielen genannten Ausführungsformen beschränkt sein soll.

[0085] Alle Konzentrationen in den Anwendungsbeispielen sind in Gewichtsprozent angegeben. Zur Herstellung der Formulierungen wurden dem Fachmann bekannte übliche Formulierungsverfahren eingesetzt.

[0086] Folgende Figuren sind Bestandteil der Beispiele:

[0087] [Fig. 1](#): Ergebnisse der Kämmkraftmessungen bei 1 min Ausspülzeit

[0088] [Fig. 2](#): Ergebnisse der Kämmkraftmessungen bei 3 min Ausspülzeit

Beispiele:

Beispiel 1: Herstellung der erfindungsgemäßen Verbindung 1

[0089] 452 g (1,33 mol) technische Behensäure (Edenor C 22 85 GS) werden mit 265 g (1,33 mol) Laurinsäure (Edenor C 12 98–100) gemischt und bei 80°C aufgeschmolzen. Zur dieser Mischung dosiert man 159 g (1,33 mol) Methyldiethanolamin und unter Rühren wird die Temperatur langsam auf 200°C erhöht. Reaktionswasser wird kontinuierlich abdestilliert. Nach 3 h wird zur Vervollständigung der Veresterung Vakuum von ca. 10 mbar angelegt, bis die Säurezahl (SZ) auf < 7 mgKOH/g gefallen ist.

[0090] Die Reaktionsmischung wird auf 80°C abgekühlt und in einen Druckreaktor überführt. Zu 828 g (1,33 mol) des Diesters gibt man 466 g Fettalkohol C 16–18 (TEGO Alkanol C 16 18) und homogenisiert die Mischung. Anschließend werden 73 g (1,44 mol) MeCl so zudosiert, dass die Reaktionstemperatur im Bereich von 80–100°C gehalten wird und der Druck max. 5 bar nicht übersteigt. Nach ca. 4 h Reaktionszeit ist die Gesamt Amin Zahl (GAZ) auf < 3 mg KOH/g gefallen. Überschüssiges Methylchlorid wird im Vakuum abdestilliert und das Fertigprodukt abgefüllt.

Beispiel 2:

[0091] 524 g (1,54 mol) technische Behensäure (Edenor C 22 85 GS) werden mit 265 g (1,54 mol) Caprinsäure (Edenor C 10 98–100) gemischt und bei 80°C aufgeschmolzen. Zu dieser Mischung dosiert man 184 g (1,54 mol) Methyl-diethanolamin und führt die Veresterung wie oben beschrieben durch. Die SZ des Diesters beträgt 5,0 mgKOH/g.

[0092] 762 g (1,28 mol) des Diesters werden mit 92 g Isopropanol gemischt und in einem Druckreaktor mit 77,5 g (1,54 mol) Methylchlorid alkyliert. Die Reaktionsbedingungen werden wie oben beschrieben angewendet.

[0093] Nachdem die GAZ auf 1,9 mg KOH/g gefallen ist, wird überschüssiges Methylchlorid im Vakuum abdestilliert und das Fertigprodukt abgefüllt.

Beispiel 3: Überprüfung von Haarbehandlungsmitteln unter Verwendung der erfindungsgemäßen Verbindungen: Beispiel 1 und Beispiel 2.

[0094] Für die anwendungstechnische Beurteilung wurden Haartressen verwendet, die durch eine Bleichbehandlung standardisiert vorgeschädigt wurden. Dazu werden friseurübliche Produkte eingesetzt. Die Schädigung der Haartressen wird im Detail in der DE10327871 beschrieben.

[0095] Für die anwendungstechnische Beurteilung wurden die erfindungsgemäßen Verbindungen Beispiel 1 und Beispiel 2 in einer einfachen kosmetischen Formulierung eingesetzt.

[0096] Als Referenzverbindungen wurden das kommerziell erhältliche Alkylquat (INCI) Behentrimonium Chloride (VARISOFT® BT 85 Pellets, Evonik Goldschmidt GmbH) und das kommerziell erhältliche Esterquat (INCI) Distearoylethyl Dimonium Chloride (VARISOFT® EQ 65 Pellets, Evonik Goldschmidt GmbH) verwendet.

[0097] Die Anwendungseigenschaften beim Einsatz in Haarspülungen wurden in den folgenden Rezepturen überprüft (Tab. 1):

Formulierungs-Beispiele	C0a	1a	2a	V3a	V4a
TEGINACID® C, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetareth-25)	0,5%	0,5%	0,5%	0,5%	0,5%
TEGO® Alkanol 16, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetyl Alcohol))	4%	4%	4%	4%	4%
Beispiel 1 (65%-ig in C 16 Fettalkohol)	-	2,3%	-	-	-
Beispiel 2 (90%-ig in Isopropanol)	-	-	1,66%	-	-
VARISOFT® EQ 65 Pellets, 65%-ig in C 16 Fettalkohol, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Distearoylethyl Dimonium Chloride, Cetearyl Alcohol)	-	-	-	2,3%	-
VARISOFT® BT 85, 85%-ig in Isopropanol, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Behentrimonium Chloride)	-	-	-	-	1,76%
Wasser, demineralisiert	ad 100,0				
Zitronensäure	ad pH 4,0				

Tab. 1: Haarspülung-Formulierungen zur Austestung der haarkonditionierenden Eigenschaften.

[0098] Die Zusammensetzung der Testformulierungen ist zur Vermeidung der Beeinflussung der Testergebnisse durch (normalerweise vorhandene) Formulierungsbestandteile bewusst einfach gewählt. Erfindungsgemäße Formulierungen können neben den genannten Inhaltsstoffen und/oder anstatt der genannten Inhaltsstoffe noch weitere Inhaltsstoffe enthalten. Insbesondere die Kombination mit weiteren Inhaltsstoffen kann bei den beschriebenen Effekten zu einer synergistischen Verbesserung führen.

[0099] Die Vorbehandlung der Haare erfolgt durch eine Shampooformulierung (Tab. 2), welche keine Konditioniermittel enthält.

Texapon NSO®, 28%-ig, Cognis (INCI: Sodium Laureth Sulfate)	42,9%
NaCl	3%
Wasser, demineralisiert	ad 100,0

Tab. 2: Shampooformulierung für die Vorbehandlung der Haartressen.

[0100] Standardisierte Behandlung von vorgeschädigten Haarsträhnen mit konditionierenden Proben: Die wie oben beschrieben vorgeschädigten Haarsträhnen werden mit der Shampooformulierung aus Tab. 2 gewaschen.

[0101] Hierbei werden die Haarsträhnen unter fließendem, warmem Wasser benetzt. Das überschüssige Wasser wird leicht von Hand ausgedrückt, dann wird das Shampoo aufgebracht und 1 min lang sanft ins Haar eingearbeitet (0.5 ml/2 g Haarsträhne). Die Haartresse wird für 30 s unter fließend warmem Wasser ausgespült. Diese Prozedur wird ein weiteres mal wiederholt, nur dass abschließend 1 min lang ausgespült wird.

[0102] Anschließend werden direkt nach dem Waschen die Haarsträhnen mit den Haarspülungs-Formulierungen aus Tab. 1 konditioniert.

[0103] Hierbei wird die Spülung aufgebracht und sanft ins Haar eingearbeitet (0.5 ml/2 g Haarsträhne). Nach einer Verweilzeit von 1 min wird das Haar für a) 1 min oder für b) 3 min gespült.

[0104] Vor der sensorischen Beurteilung wird das Haar an der Luft bei 50% Luftfeuchtigkeit und 25°C für mindestens 12 h getrocknet.

Beurteilungskriterien:

[0105] Die sensorischen Bewertungen erfolgen nach Noten, die auf einer Skala von 1 bis 5 vergeben werden, wobei 1 die schlechteste und 5 die beste Bewertung ist. Die einzelnen Testkriterien erhalten jeweils eine eigene Bewertung.

[0106] Die Testkriterien sind:
Nasskämmbarkeit, Nassgriff, Trockenkämmbarkeit, Trockengriff, Aussehen/Glanz.

[0107] In den folgenden Tabellen werden die Ergebnisse der sensorischen Beurteilung der wie oben beschrieben durchgeführten Behandlung der Haarsträhnen bei a) 1 min Ausspülzeit und bei b) 3 min Ausspülzeit mit den erfindungsgemäßen Formulierungen 1a und 2a, den Vergleichsformulierungen V3a und V4a und der Kontrollformulierung C0a (Control ohne Testsubstanz) verglichen.

a) 1 min Ausspülzeit

	Nasskäm- barkeit	Nassgriff	Trocken- käm- barkeit	Trockengriff
Erfindungsgemäße Formulierung 1a	4.7	4.8	4.6	4.7
Erfindungsgemäße Formulierung 2a	4.6	4.8	4.7	4.7
Vergleichsformulierung V3a (nicht erfindungsgemäß)	4.5	4.5	4.6	4.6

Vergleichsformulierung V4a (nicht erfindungsgemäß)	4.6	4.5	4.5	4.5
Kontrollformulierung C0a (Placebo)	2.0	1.5	2.8	3.3

Tab. 3: Ergebnisse der Konditionierung von Haar bei 1 min Ausspülzeit

b) 3 min Ausspülzeit

	Nasskämmbarkeit	Nassgriff	Trockenkämmbarkeit	Trockengriff
Erfindungsgemäße Formulierung 1a	4.3	4.1	4.4	4.2
Erfindungsgemäße Formulierung 2a	4.3	4.3	4.3	4.1
Vergleichsformulierung V3a (nicht erfindungsgemäß)	3.5	3.4	3.4	3.6
Vergleichsformulierung V4a (nicht erfindungsgemäß)	3.9	4.0	4.0	4.2
Kontrollformulierung C0a (Placebo)	1.6	1.4	2.9	3.2

Tab. 4: Ergebnisse der Konditionierung von Haar bei 3 min Ausspülzeit

[0108] Die Ergebnisse in Tabelle 3 zeigen, dass die erfindungsgemäßen Formulierungen 1a und 2a bei 1 min Ausspülzeit sehr gute konditionierende Eigenschaften wie die Vergleichsformulierungen V3a und V4a aufweisen. Die Vergleichsformulierungen V3a und V4a haben bei 1 min Ausspülzeit erwartungsgemäß ähnlich konditionierende Eigenschaften.

[0109] Die Ergebnisse in Tabelle 4 zeigen, dass die erfindungsgemäßen Formulierungen 1a und 2a bei 3 min Ausspülzeit bessere konditionierende Eigenschaften als die Vergleichsformulierung V4a aufweisen. Die Vergleichsformulierung V4a enthält als konditionierende Verbindung VARISOFT® BT 85 (85%ig in Isopropanol, Evonik Goldschmidt GmbH, INCI: Behenrimonium Chloride), ein Alkylquat, das für seine sehr guten konditionierenden Eigenschaften auch bei langen Ausspülzeiten bekannt ist. Die Vergleichsformulierung V3a enthält als konditionierende Verbindung VARISOFT® EQ 65 Pellets (65%ig in C 16 Fettalkohol, Evonik Goldschmidt GmbH, INCI: Distearoylethyl Dimonium Chloride, Cetearyl Alcohol), ein Esterquat, das sehr gute konditionierenden Eigenschaften bei 1 min Ausspülzeit aufweist (siehe Tab. 3), bei 3 min Ausspülzeit jedoch eine deutlich schlechtere Konditionierung als die erfindungsgemäßen Esterquats Beispiel 1 und 2 hat.

Beispiel 4: Einfluss der erfindungsgemäßen Verbindungen auf Kämmkräfte von Haaren

Versuchsbedingungen:

Messgerät: Diastron MTT 175

Messstrecke: 20 cm

Kämmgeschwindigkeit: 2000 mm/min

Verwendete Haarsträhnen: Länge = 23 cm; Breite = 1,5 cm; Gewicht = 2 g

Messbedingungen: T = 22°C. Die Haarsträhnen werden mit einer Restfeuchte von 60%, bestimmt durch Gewichtsbestimmung, gemessen.

[0110] Für die Versuche wird europäisches, ungeschädigtes, dunkelbraunes Haar eingesetzt. Zur Durchführung der Kämmkraftmessungen wird dieses Haar im Labor nach Standardbedingungen durch Dauerwelle geschädigt:

1.) 4 g Dauerwell-Lsg./g Haar, 15 min. einwirken lassen, 2 min. ausspülen unter fließendem Leitungswasser (T = 35°C). (Dauerwell-Lsg: Universal-Dauerwelle, Basler)

2.) 4 g Fixierer (1 Teil Fixierlsg. + 3 Teile Wasser)/g Haar, 10 min. einwirken lassen, 2 min. ausspülen. (Fixier-Lsg: Schaumfixierung Konzentrat, Basler)

[0111] Durchführung der Kämmkraftmessung vor der Behandlung mit der Testformulierung:
Die vorgeschädigten Haarsträhnen werden über Nacht klimatisiert.

- 3.) Die Haarsträhne wird 1, min in einer Pufferlösung (Na-Citrat, pH = 6) eingetaucht.
 4.) Die Haarsträhne wird so lange von Hand vorgekämmt, bis keine Änderung des Kämmwiderstandes festzustellen ist.
 5.) Die Haarsträhne wird am Messgerät befestigt und die erste Kämmkraftmessung wird durchgeführt. Die Messung wird insgesamt 10 mal wiederholt.

Behandlung der Strähnen:

[0112] Pro Haarsträhne werden 0,5 g der jeweiligen Testformulierung verwendet (2 g Haar/0,5 g Lösung). Die Formulierung wird 30 sec. in das Haar einmassiert und dann für 5 min. liegen gelassen, anschließend 1 min. bzw. 3 min. unter fließendem Leitungswasser abgespült.

[0113] Durchführung der Kämmkraftmessung nach der Behandlung mit der Testformulierung:
 Die Punkte 3–5 werden wiederholt.

[0114] Anschließend wird die Kämmarbeit (%) vor und nach der Behandlung mit der Testformulierung berechnet.

Verwendete Testformulierungen:

[0115] Die Kämmkräfte beim Einsatz in Haarspülungen wurden in den folgenden Rezepturen überprüft (Tab. 5):

Formulierungs-Beispiele	C0b	1b	2b	V3b	V4b
TEGINACID® C, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetareth-25)	0,5%	0,5%	0,5%	0,5%	0,5%
TEGO® Alkanol 16, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetyl Alcohol))	4%	4%	4%	4%	4%
Beispiel 1 (65%-ig in C 16 Fettalkohol)	-	1,53%	-	-	-
Beispiel 2 (90%-ig in Isopropanol)	-	-	1,11%	-	-
VARISOFT® EQ 65 Pellets, 65%-ig in C 16 Fettalkohol, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Distearoylethyl Dimonium Chloride, Cetearyl Alcohol)	-	-	-	1,53	-
VARISOFT® BT 85, 85%-ig in Isopropanol, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Behentrimonium Chloride)	-	-	-	-	1,18%
Wasser, demineralisiert	ad 100,0				
Zitronensäure	ad pH 4,0				

Tab. 5: Haarspülung-Formulierungen zur Austestung der haarkonditionierenden Eigenschaften.

[0116] In der folgenden Abbildung werden die Ergebnisse der Kämmkraftmessungen der wie oben beschriebenen durchgeführten Experimente bei a) 1 min Ausspülzeit und bei b) 3 min Ausspülzeit mit den erfindungsgemäßen Formulierungen 1b und 2b, den Vergleichsformulierungen V3b und V4b und der Kontrollformulierung C0b (Control ohne Testsubstanz) verglichen.

[0117] Die Ergebnisse in [Fig. 1](#) zeigen, dass die erfindungsgemäßen Formulierungen 1b und 2b bei 1 min Ausspülzeit eine ausgeprägte Reduktion der Kämmkräfte wie die Vergleichsformulierungen V3b und V4b aufweisen. Die Vergleichsformulierungen V3b und V4b generieren bei 1 min Ausspülzeit erwartungsgemäß eine ähnlich ausgeprägte Reduktion der Kämmkräfte.

[0118] Die Ergebnisse in [Fig. 2](#) zeigen, dass die erfindungsgemäßen Formulierungen 1b und 2b bei 3 min Ausspülzeit zu einer geringfügig stärkeren Reduktion der Kämmkräfte als die Vergleichsformulierung V4b aufweisen. Die Vergleichsformulierung V4b enthält als konditionierende Verbindung VARISOFT® BT 85 (85%ig in

Isopropanol, Evonik Goldschmidt GmbH, INCI: Behentrimonium Chloride), ein Alkylquat, das für seine starke Reduktion der Kämmkräfte auch bei langen Ausspülzeiten bekannt ist.

[0119] Die Vergleichsformulierung V3a enthält als konditionierende Verbindung VARISOFT® EQ 65 Pellets (65%ig in C 16 Fettalkohol, Evonik Goldschmidt GmbH, INCI: Distearoylethyl Dimonium Chloride, Cetearyl Alcohol), ein Esterquat, das eine gute Reduktion der Kämmkräfte bei 1 min Ausspülzeit aufweist (siehe Abb. 2), bei 3 min Ausspülzeit jedoch eine deutlich schlechtere Reduktion der Kämmkräfte als die erfindungsgemäßen Esterquats Beispiel 1 und 2 hat.

Formulierungsbeispiele:

[0120] Diese Formulierungsbeispiele zeigen, dass die erfindungsgemäßen quaternären Verbindungen in einer Vielzahl kosmetischer Formulierungen eingesetzt werden können.

Formulierungsbeispiel 1) Pearlized Shampoo

TEXAPON® NSO, Cognis, 28%-ig (INCI: Sodium Laureth Sulfate)	32,25%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	0,25%
Perfume	0,25%
Water	55,25%
TEGO® Betain F 50, Evonik Goldschmidt GmbH, 38%-ig (INCI: Cocamidopropyl Betaine)	8,00%
TEGO® Pearl N 300 Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Glycol Distearate; Laureth-4; Cocamidopropyl Betaine)	2,00%
ANTIL® 171 Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: PEG-18 Glyceryl Oleate/Cococate)	1,50%
NaCl	0,50%
Preservative	q. s.

Formulierungsbeispiel 2) Rinse-Off Conditioner

Water	92,0%
TEGINACID® C, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetareth-25)	0,5%
Erfindungsgemäßes Beispiel 1	2,50%
TEGO® Alkanol 1618, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearyl Alcohol)	5,00%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 3) Rinse-Off Conditioner

Water	91,0%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	2,00%
VARISOFT® BT 85, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Behentrimonium Chloride)	2,00%
TEGO® Alkanol 1618, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearyl Alcohol)	5,00%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 4) Rinse-Off Conditioner

Water	90,20%
Erfindungsgemäßes Beispiel 1	2,00%
VARISOFT® EQ 65, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Distearoyl Dimonium Chloride, Cetearyl Alcohol)	2,00%
TEGO® Alkanol 1618, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearyl Alcohol)	5,80%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 5) Rinse-Off Conditioner

Water	89,20%
TEGINACID® C, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearth-25)	0,5%
VARISOFT® EQ 65, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Distearoyl Dimonium Chloride, Cetearyl Alcohol)	2,00%
Erfindungsgemäßes Beispiel 1	2,00%
ABIL® Quat 3272, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Quaternium-80)	1,30%
TEGO® Alkanol 1618, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearyl Alcohol)	5,00%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 6) Rinse-Off Conditioner

TEGINACID® C, Evonik. Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearth-25)	0,50%
TEGO® Alkanol 16, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetyl Alcohol)	2,00%
TEGO® Amid S 18, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Stearamidopropyl Dimethylamine)	1,00%
Erfindungsgemäßes Beispiel 1	1,50%
Propylene Glycol	2,00%
Citric Acid Monohydrate	0,30%
Water	92,70%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 7) Rinse-Off Conditioner

TEGINACID® C, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearth-25)	0,50%
TEGO® Alkanol 16, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetyl Alcohol)	5,00%
TEGOSOFT® DEC, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Diethylhexyl Carbonate)	1,00%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	1,50%
Water	89,20%
TEGO® Cosmo C 100 Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Creatine)	0,50%
Propylene Glycol	2,00%
Citric Acid Monohydrate	0,30%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 8) Leave-In Conditioner Spray

Lactic Acid, 80%	0,40%
Water	95,30%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	1,20%
TEGIN® G 1100 Pellets, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Glycol Distearate)	0,60%
TEGO® Care PS, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Methyl Glucose Sesquistearate)	1,20%
TEGOSOFT® DEC, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Diethylhexyl Carbonate)	1,30%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 9) Leave-In Conditioner Spray

Lactic Acid, 80%	0,40%
Water	95,30%
TEGO® Amid S 18, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Stearamidopropyl Dimethylamine)	1,20%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	0,30%
TEGIN® G 1100 Pellets, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Glycol Distearate)	0,90%
TEGO® Care PS, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Methyl Glucose Sesquistearate)	1,60%
TEGOSOFT® DEC, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Diethylhexyl Carbonate)	0,30%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 10) Leave-In Conditioner Spray

TAGAT® CH-40, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: PEG-40 Hydrogenated Castor Oil)	2,20%
Ceramide VI, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Ceramide 6 II)	0,05%
Perfume	0,20%
Water	90,95%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	0,30%
LACTIL® Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Sodium Lactate; Sodium PCA; Glycine; Fructose; Urea; Niacinamide; Inositol; Sodium benzoate; Lactic Acid)	2,00%
TEGO® Betain F 50 Evonik Goldschmidt GmbH 38% (INCI: Cocamidopropyl Betaine)	2,30%
Citric Acid (10% in water)	2,00%

Formulierungsbeispiel 11) Leave-In Conditioner Foam

Erfindungsgemäßes Beispiel 2	0,30%
TAGAT® CH-40, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: PEG-40 Hydrogenated Castor Oil)	1,0%
Perfume	0,30%
TEGO® Betain 810, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Capryl/Capramidopropyl Betaine)	2,00%
Water	94,00%
TEGO® Cosmo C 100, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Creatine)	0,50%

TEGOCEL® HPM 50, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Hydroxypropyl Methylcellulose)	0,30%
VARISOFT® 300, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetrimonium Chloride)	1,0%
LACTIL® Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Sodium Lactate; Sodium PCA; Glycine; Fructose; Urea; Niacinamide; Inositol; Sodium benzoate; Lactic Acid)	0,50%
Citric Acid, 30%	0,10%
Preservative	q. s.

Formulierungsbeispiel 12) Strong Hold Styling Gel

TEGO® Carbomer 141, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Carbomer)	1,20%
Water	66,70%
NaOH, 25%	2,70%
PVP/VA W-735, ISP (INCI: PVP/VA Copolymer)	16,00%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	0,30%
Alcohol Denat.	10,50%
TAGAT® O 2 V, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: PEG-20 Glyceryl Oleate)	2,00%
Perfume	0,30%
ABIL® B 88183, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: PEG/PPG-20/6 Dimethicone)	0,30%
Preservative	q. s.

Formulierungsbeispiel 13) Körperpflegemittel

TEXAPON® NSO, Cognis, 28%-ig (INCI: Sodium Laureth Sulfate)	30,00%
TEGOSOFT® PC 31, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Polyglyceryl-3 Caprate)	0,70%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	0,30%
Perfume	0,30%
Water	53,90%
TEGOCEL® HPM 4000, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Hydroxypropyl Methylcellulose)	0,30%
REWOTERIC® AM C, Evonik Goldschmidt GmbH, 32%-ig (INCI: Sodium Cocamphoacetate)	10,00%
Citric Acid Monohydrate	0,50%
REWODERM® LI S 80, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: PEG-200 Hydrogenated Glyceryl Palmate; PEG-7 Glyceryl Cocoate)	2,00%
TEGO® Pearl N 300, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Glycol Distearate; Laureth-4; Cocamidopropyl Betaine)	2,00%

Formulierungsbeispiel 14) Mild Foam Bath

TEXAPON® NSO, Cognis, 28%-ig (INCI: Sodium Laureth Sulfate)	27,00%
REWOPOL® SB FA 30, Evonik Goldschmidt GmbH, 40%-ig (INCI: Disodium Laureth Sulfosuccinate)	12,00%
TEGOSOFT® LSE 65 K SOFT, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Sucrose Co-coate)	2,00%
Water	39,00%

REWOTERIC® AM C, Evonik Goldschmidt GmbH, 32%-ig (INCI: Sodium Cocoamphoacetate)	13,00%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	0,40%
Citric Acid (30% in water)	3,00%
ANTIL® 171 Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: PEG-18 Glyceryl Oleate/Cocoa-te)	1,60%
TEGO® Pearl N 300 Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Glycol Distearate; Lau-reth-4; Cocamidopropyl Betaine)	2,00%

Formulierungsbeispiel 15) Rinse-Off Conditioner

Water	89,20%
Erfindungsgemäßes Beispiel 1	3,00%
ABIL® OSW 5, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cyclopentasiloxane; Dimethi-conol)	1,80%
TEGO® Alkanol 1618, Evonik Goldschmidt GmbH. (INCI: Cetearyl Alcohol)	6,00%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 16) Rinse-Off Conditioner

Water	89,20%
TEGINACID® C, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Ceteareth-25)	0,5
VARISOFT® EQ 65, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Distearyl Dimonium Chloride, Cetearyl Alcohol)	1,50%
Erfindungsgemäßes Beispiel 1	2,00%
ABIL® Soft AF 100, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Methoxy PEG/PPG-7/3 Aminopropyl Dimethicone)	1,00%
TEGO® Alkanol 1618, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearyl Alcohol)	5,80%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 17) Rinse-Off Conditioner

Water	91,50%
TEGINACID® C, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Ceteareth-25)	0,5%
Erfindungsgemäßes Beispiel 2	2,00%
SF 1708, Momentive (INCI: Amodimethicone)	1,00%
TEGO® Alkanol 1618, Evonik Goldschmidt GmbH (INCI: Cetearyl Alcohol)	5,00%
Preservative, Perfume	q. s.

Formulierungsbeispiel 18) Weichspüler 1

Erfindungsgemäßes Beispiel 1	4,00%
Dyestuff, 1%	0,15%
Perfume	0,20%
Water, demin.	94%

Formulierungsbeispiel 19) Weichspüler 2

Erfindungsgemäßes Beispiel 2	4,00%
Plantatex HCC	5,00%
Glycerin (99,5 Gew.-%)	17,00%
Phenonip	0,70%
Water, demin.	Ad 100%

ZITATE ENHALTEN IN DER BESCHREIBUNG

Diese Liste der vom Anmelder aufgeführten Dokumente wurde automatisiert erzeugt und ist ausschließlich zur besseren Information des Lesers aufgenommen. Die Liste ist nicht Bestandteil der deutschen Patent- bzw. Gebrauchsmusteranmeldung. Das DPMA übernimmt keinerlei Haftung für etwaige Fehler oder Auslassungen.

Zitierte Patentliteratur

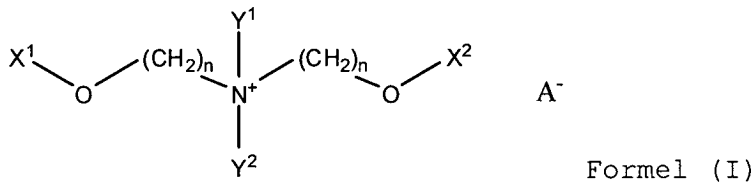
- EP 0483195 [0008]
- DE 4308794 [0009, 0063]
- DE 4111966 [0049]
- EP 0643128 [0050]
- DE 102008001788 [0078]
- DE 10327871 [0094]

Zitierte Nicht-Patentliteratur

- R. Puchta et al. in Tens. Surf. Det., 30, 186 (1993) [0010]
- M. Brock in Tens. Surf. Det., 30, 394 (1993) [0010]
- R. Lagerman et al. in J. Am. Chem. Soc., 71, 97 (1994) [0010]
- I. Shapiro in Cosm. Toil., 109, 77 (1994) [0010]
- K. F. de Polo, A Short Textbook of Cosmetology, 2000, Verlag für chemische Industrie, H. Ziolkowsky GmbH [0018]
- K. Schrader, "Grundlagen und Rezepturen der Kosmetika", 2. Auflage, Seite 329 bis 341 [0079]

Patentansprüche

1. Quartäre Dialkanolaminester der allgemeinen Formel (I)



mit

Y¹ und Y² unabhängig voneinander, gleich oder verschieden ein Alkylrest mit 1 bis 6 Kohlenstoffatomen, ein Benzylrest oder H,

n = 1 bis 4

A⁻ ein Anion, bevorzugt ausgewählt aus der Gruppe enthaltend Chlorid, Bromid, Methylsulfat, Tosylat, Phosphat, Sulfat, Hydrogensulfat, Lactat, Acetat und Citrat,

X¹ und X² unabhängig voneinander, gleich oder verschieden ausgewählt aus den Gruppen (a), (b) und (c), wobei diese Gruppen bestehen aus

(a) Acylreste enthaltend 6 bis 14 Kohlenstoffatome,

(b) Acylreste enthaltend 20 bis 24 Kohlenstoffatome und

(c) Acylreste enthaltend 3 bis 28 Kohlenstoffatome, welche nicht in den Gruppen (a) oder (b) enthalten sind, oder H,

mit der Maßgabe, dass im Zahlenmittel pro Molekül der allgemeinen Formel (I)

0,40 bis 1,20 Reste der Gruppe (a),

0,60 bis 1,60 Reste der Gruppe (b),

0 bis 0,20 Reste der Gruppe (c)

enthalten sind und

die Zahlenmittel pro Molekül der Reste der Gruppen (a), (b) und (c) sich zu 2 addieren.

2. Quartäre Dialkanolaminester gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass

Acylreste der Gruppe (a) ausgewählt sind aus C₅H₁₁CO⁻, C₇H₁₅CO⁻, C₉H₁₉CO⁻, C₁₁H₂₃CO⁻ und C₁₃H₂₇CO⁻,

Acylreste der Gruppe (b) ausgewählt sind aus C₁₉H₃₉CO⁻, C₂₁H₄₃CO⁻ und C₂₃H₄₇CO⁻ und

Acylreste der Gruppe (c) ausgewählt sind aus Acylresten der Carbonsäuren, welche zusätzlich in technischen Mischungen der Carbonsäuren enthalten sind, welche den Acylrest der Gruppen (a) und (b) bestimmen.

3. Quartäre Dialkanolaminester gemäß Anspruch 1 oder Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass

Acylreste der Gruppe (a) ausgewählt sind aus C₁₁H₂₃CO⁻,

Acylreste der Gruppe (b) ausgewählt sind aus C₁₉H₃₉CO⁻, C₂₁H₄₃CO⁻, C₂₃H₄₇CO⁻ in einem Gewichtsverhältnis von 4–8 zu 85–99 zu 0–3.

4. Quartäre Dialkanolaminester gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass

die Acylreste der Gruppe (a) bis (c) bestimmt werden über die Acylreste einer Mischung bestehend aus technischer Laurinsäure und technischer Behensäure.

5. Quartäre Dialkanolaminester gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet,

dass das molare Verhältnis der Acylreste der Gruppe (a) zu Acylresten der Gruppe (b) im Zahlenmittel 1 zu 0,5 bis 4 beträgt.

6. Verfahren zur Herstellung quartärer Dialkanolaminester umfassend die Verfahrensschritte

A) Umsetzung eines Alkyldialkanolamins, bei dem die beiden Alkanolgruppen ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus, -CH₂OH, -C₂H₄OH, -C₃H₆OH und -C₄H₈OH und die Alkylgruppe ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus Alkylresten mit 1–6 Kohlenstoffatomen

mit einem Gemisch aus Carbonsäuren bestehend aus den Gruppen

(d) Carbonsäure enthaltend 6 bis 14 Kohlenstoffatome,

(e) Carbonsäure enthaltend 20 bis 24 Kohlenstoffatome und gegebenenfalls

(f) Carbonsäure enthaltend 3 bis 28 Kohlenstoffatome, welche nicht in den Gruppen (d) und (e) enthalten sind,

B) Umsetzung des Produktes aus Verfahrensschritt A) mit einem Quaternierungsmittel ausgewählt aus der Gruppe umfassend Dialkylsulfate, Alkylhalogenide und Benzylhalogenide und/oder
C) Neutralisierung des Reaktionsansatzes mit einer Säure,
mit der Maßgabe, dass bezogen auf alle Carbonsäuren der Gruppen (d), (e) und (f) 0 bis 10 Mol% Carbonsäuren der Gruppe (f) eingesetzt werden.

7. Verfahren gemäß Anspruch 6, dadurch gekennzeichnet, dass in Verfahrensschritt A) pro mol eingesetztem Alkyldialkanolamin
0,40 bis 1,20 mol Carbonsäure der Gruppe (d) und
0,60 bis 1,60 mol Carbonsäure der Gruppe (e) eingesetzt werden.

8. Verfahren gemäß Anspruch 6 oder 7, dadurch gekennzeichnet, dass pro mol Alkyldialkanolamin insgesamt Carbonsäuren der Gruppen (d) und (e) und gegebenenfalls (f) in einer Menge von 1,80 bis 2,5 mol eingesetzt werden.

9. Verfahren gemäß mindestens einem der Ansprüche 6 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass in Verfahrensschritt B) mindestens ein Lösungsmittel ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus kurzkettigen Alkoholen, Fettalkoholen, Polyolen und Carbonaten eingesetzt wird.

10. Zusammensetzung enthaltend
quartäre Dialkanolaminester gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 5 und/oder
quartäre Dialkanolaminester erhältlich nach einem Verfahren gemäß mindestens einem der Ansprüche 6 bis 9,
mindestens ein Lösungsmittel und optional
mindestens eine Carbonsäure ausgewählt aus mindestens einer der Gruppen (d), (e) und (f),
wobei vorzugsweise das mindestens eine Lösungsmittel 0,5 Gew.-% bis 50 Gew.-%, bezogen auf das Gesamtgewicht der Zusammensetzung ausmacht.

11. Zusammensetzung gemäß Anspruch 10, dadurch gekennzeichnet, dass das Lösungsmittel Isopropanol oder Propylencarbonat ist.

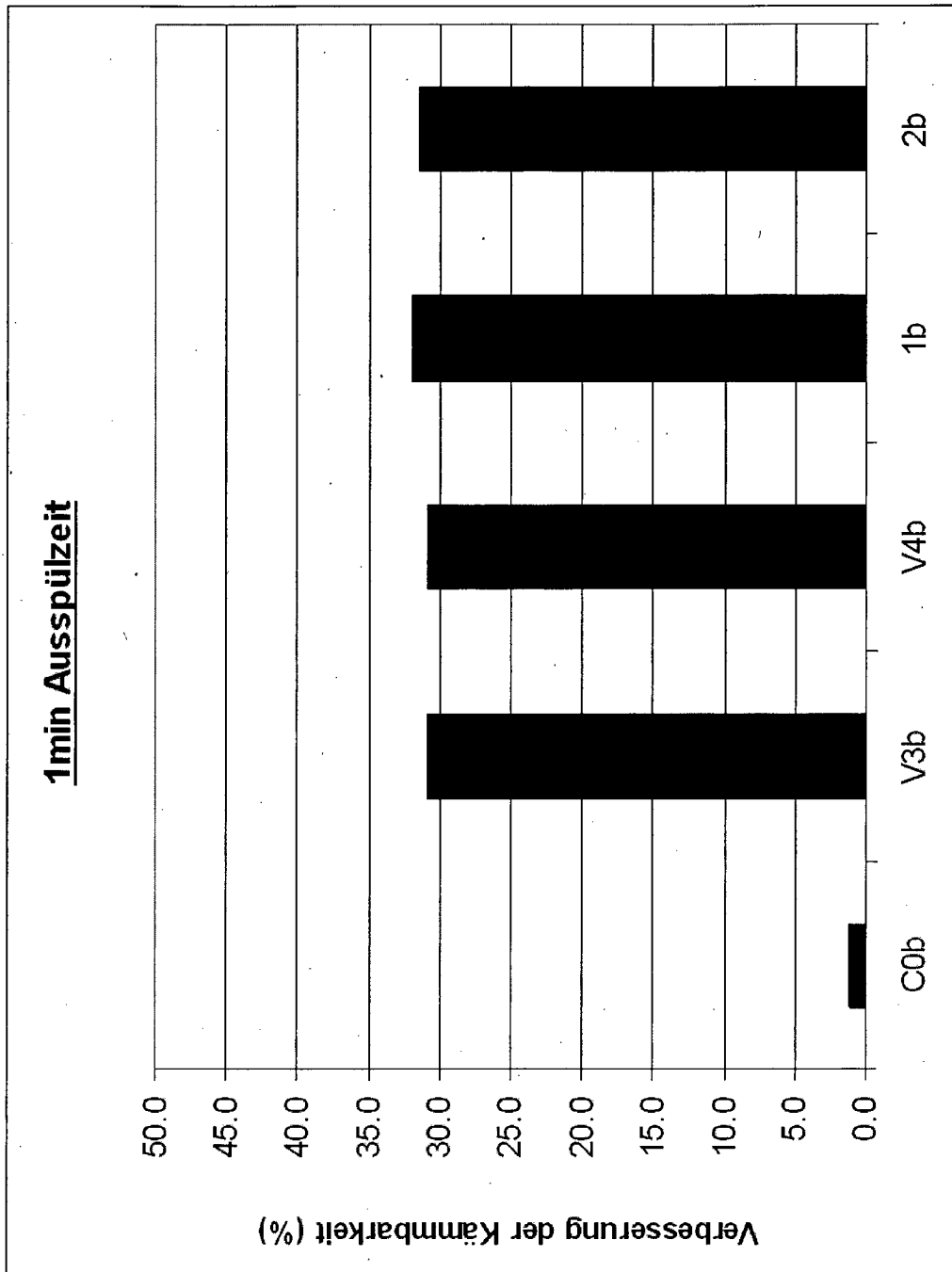
12. Verwendung quartärer Dialkanolaminester gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 5 und/oder quartärer Dialkanolaminester erhältlich nach einem Verfahren gemäß mindestens einem der Ansprüche 6 bis 9 und/oder mindestens einer Zusammensetzung gemäß Anspruch 10 oder 11 zur Herstellung von Formulierungen, insbesondere von kosmetischen oder pharmazeutischen Formulierungen und Pflege- und Reinigungsformulierungen für die Anwendung im häuslichen und industriellen Umfeld.

13. Formulierung, insbesondere kosmetische oder pharmazeutische Formulierung und Pflege- und Reinigungsformulierung für die Anwendung im häuslichen und industriellen Umfeld, enthaltend quartäre Dialkanolaminester gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 5 und/oder quartärer Dialkanolaminester erhältlich nach einem Verfahren gemäß mindestens einem der Ansprüche 6 bis 9 und/oder mindestens einer Zusammensetzung gemäß Anspruch 10 oder 11, insbesondere in einer Menge von 0,1 bis 5 Gew.-%, bevorzugt 0,5 bis 4 Gew.-% besonders bevorzugt 1 bis 3 Gew.-% bezogen auf die Gesamtformulierung, insbesondere wässrige Formulierung, welche vorzugsweise einen pH-Wert von 3,5 bis 5 aufweist.

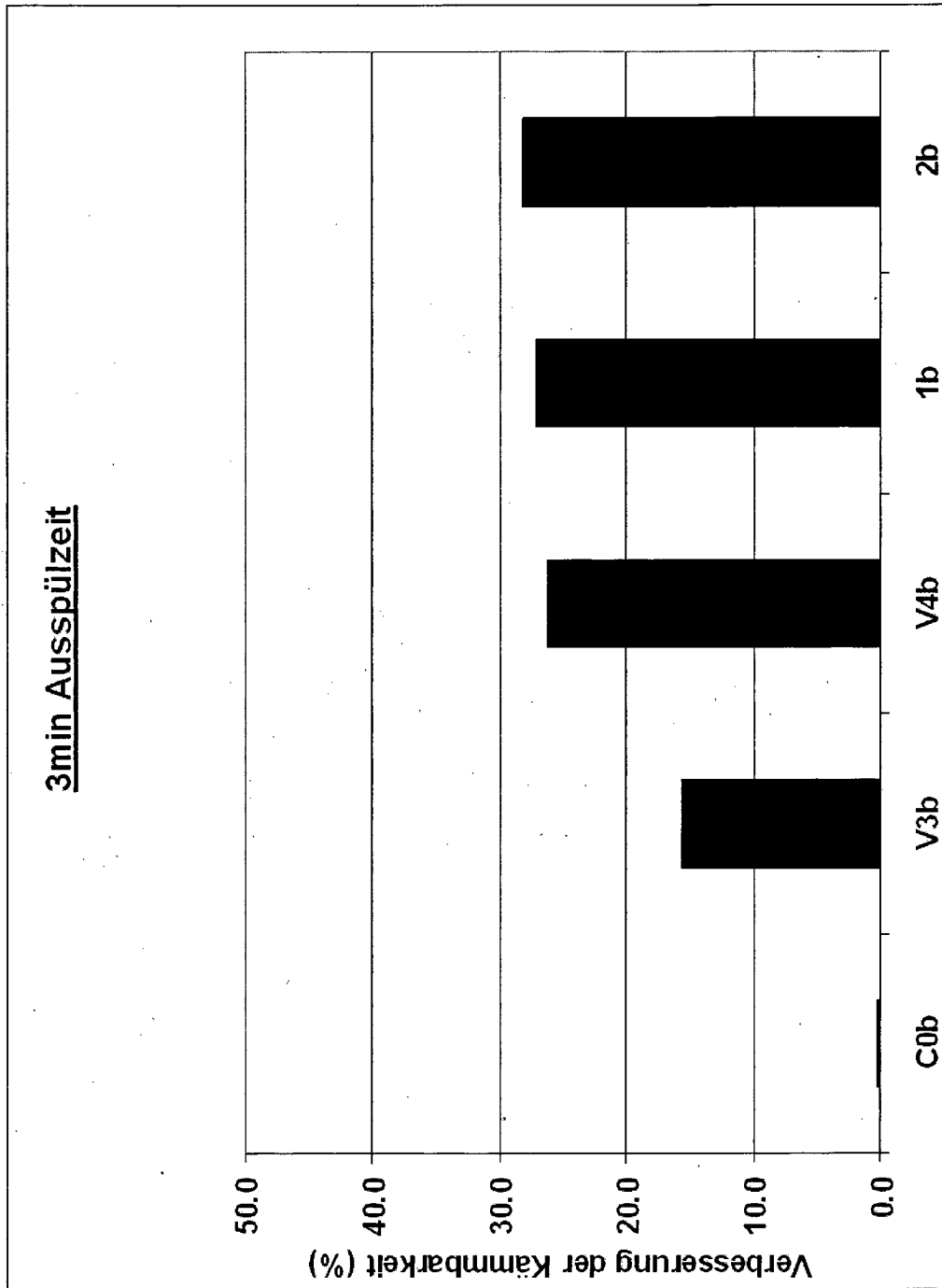
14. Verwendung quartärer Dialkanolaminester gemäß mindestens einem der Ansprüche 1 bis 5 und/oder quartärer Dialkanolaminester erhältlich nach einem Verfahren gemäß mindestens einem der Ansprüche 6 bis 9 und/oder mindestens einer Zusammensetzung gemäß Anspruch 10 oder 11 und/oder mindestens einer Formulierung gemäß Anspruch 13 als Pflegemittel, insbesondere als Haut- und Haarpflegemittel, und/oder zur Konditionierung von Haaren, und/oder als Weichspüler.

Es folgen 2 Blatt Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen



Figur 1



Figur 2