

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6869190号
(P6869190)

(45) 発行日 令和3年5月12日 (2021.5.12)

(24) 登録日 令和3年4月15日 (2021.4.15)

(51) Int. Cl.	F 1
A 6 1 L 9/01 (2006.01)	A 6 1 L 9/01 Q
A 6 1 L 9/03 (2006.01)	A 6 1 L 9/03
A 6 1 L 9/14 (2006.01)	A 6 1 L 9/14
C 1 1 B 9/00 (2006.01)	C 1 1 B 9/00 Z
F 2 4 F 1/008 (2019.01)	F 2 4 F 1/008

請求項の数 8 (全 13 頁)

(21) 出願番号	特願2017-559304 (P2017-559304)	(73) 特許権者	501105842
(86) (22) 出願日	平成28年5月11日 (2016.5.11)		ジボダン エス エー
(65) 公表番号	特表2018-524037 (P2018-524037A)		スイス国 1 2 1 4 ヴェルニエ、 シュ
(43) 公表日	平成30年8月30日 (2018.8.30)		マン ド ラ パルフュムリー 5 番
(86) 国際出願番号	PCT/EP2016/060585	(74) 代理人	100102842
(87) 国際公開番号	W02016/180893		弁理士 葛和 清司
(87) 国際公開日	平成28年11月17日 (2016.11.17)	(72) 発明者	ブロンドー、フィリップ
審査請求日	平成31年4月9日 (2019.4.9)		フランス国 7 5 0 1 9 パリ、ブラス
(31) 優先権主張番号	62/160,908		デュ コロネル ファビアン、6
(32) 優先日	平成27年5月13日 (2015.5.13)	(72) 発明者	ブレッソン ボイル、アリス
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)		フランス国 9 5 2 2 0 エルブレー、ア
		(72) 発明者	ベニュー デ ラマージュ 5 6
			ボロシー、アンドラス
			スイス国 8 6 0 0 デューベンドルフ、
			ノイヴェーク 2 0

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機化合物における改善または有機化合物に関する改善

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

柔らかさ、温かさ、固さおよび深みの嗅覚印象を供給することができる、長く続くおよびインパクトが強い、エアフレッシュナー用のフレグランス配合物を作り出す方法であって、下記の工程を含む、前記方法。

- フレグランス成分の柔軟性指標 ($F l_i$) を計算する工程、
ここで、各フレグランス成分の構造は M M F F 9 4 力場を用いることにより、Molecular Operating Environment (M O E) におけるエネルギー最小化メニューの L o w M o d e M D サーチのデフォルト設定を適用することにより最小化され、各分子の配座は M O E における L o w M o d e M D サーチのデフォルト設定により生成され、そして、各配座の水が到達できる表面領域値 ($A S A$) は、水分子の半径 1 . 4 を用いることにより M O E で計算される、および、

- 以下の成分を含む液体フレグランス配合物を作り出すために、少なくとも 1 つのフレグランス成分を選択する工程：

総液体組成物の 0 . 1 ~ 1 0 重量% の、標準平衡ヘッドスペース濃度 ($H S_i$) が 1 2 より大きい ~ 5 0 マイクログラム / リットル、柔軟性指標 ($F l_i$) が 4 5 以上であるフレグランス成分；および / または、

総液体組成物の 0 . 1 ~ 7 重量% の、標準平衡ヘッドスペース濃度 ($H S_i$) が 5 ~ 1 2 マイクログラム / リットルの間であり、柔軟性指標が 2 0 以上であるフレグランス成分；および / または、

10

20

総液体組成物の 0 ~ 1 重量 % の、標準平衡ヘッドスペース濃度 (H S_i) が 5 マイクログラム / リットル未満であり、柔軟性指標が 7 以上であるフレグランス成分。

【請求項 2】

少なくとも 1 つのフレグランス成分がムスクである、請求項 1 に記載の方法。

【請求項 3】

少なくとも 1 つのフレグランス成分が、コスモン、チベトリド、ベルビオン、ムセノン、ニルバノリド、ハバノリド、シベトン、C 14 ムスク、エチレンブラシレート、アンブレットリド、セレノリド、シルコリド (Sylkolide) およびシルパノン、ムスク C P D、ヘキサデカノリド、(R , E) - 2 - メチル - 2 - ((3 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) プロピルシクロプロパンカルボキシラート、(R , E) - 2 - ((3 - エチル - 5 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロプロパンカルボキシラート、(R , E) - 2 - ((3 - エチル - 5 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルプロピオナート、(R , E) - 2 - ((3 - エチル - 5 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロブタンカルボキシラート、(R , E) - 2 - ((3 , 6 - ジメチルヘプタ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロプロパンカルボキシラート、(E) - 2 - ((3 , 5 - ジメチルヘプタ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロプロパンカルボキシラート、および 2 - ((4 - シクロヘキサ - 3 - エン - 1 - イル) - 3 - メチルブタ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルイソブチラートからなる群から選択される、請求項 1 または 2 に記載の方法。

【請求項 4】

少なくとも 1 つのフレグランス成分が、0 . 1 ~ 1 0 重量 % のシルコリド (Sylkolide) 、0 . 1 ~ 7 % のコスモン、および / または 0 . 1 ~ 7 重量 % のセレノリドから選択される、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 5】

ガラクソリド S、C 14 ムスク、エチレンブラシレート、アンブレットリドおよびベルビオンが全く用いられない、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 6】

液体組成物を含むタンクを含む液体電気空気ケア装置であって、液体組成物が、総液体組成物の 0 . 1 ~ 1 0 重量 % の、標準平衡ヘッドスペース濃度 (H S_i) が 1 2 より大きい ~ 5 0 マイクログラム / リットル、柔軟性指標 (F l_i) が 4 5 以上であるフレグランス成分、および、
総液体組成物の 0 . 1 ~ 7 重量 % の、標準平衡ヘッドスペース濃度 (H S_i) が 5 ~ 1 2 マイクログラム / リットルの間であり、柔軟性指標が 2 0 以上であるフレグランス成分、および、
総液体組成物の 0 ~ 1 重量 % の、標準平衡ヘッドスペース濃度 (H S_i) が 5 マイクログラム / リットル未満であり、柔軟性指標が 7 以上であるフレグランス成分、を含む、前記液体電気空気ケア装置。

【請求項 7】

液体組成物が、0 . 1 ~ 1 0 重量 % のシルコリド (Sylkolide) および / または 3 ~ 5 % のコスモンおよび / または 5 ~ 7 重量 % のセレノリドを含む、請求項 6 に記載の液体電気空気ケア装置。

【請求項 8】

総液体組成物の 0 . 1 ~ 1 0 重量 % の、標準平衡ヘッドスペース濃度 (H S_i) が 1 2 より大きい ~ 5 0 マイクログラム / リットル、柔軟性指標 (F l_i) が 4 5 以上であるフレグランス成分、および、
総液体組成物の 0 . 1 ~ 7 重量 % の、標準平衡ヘッドスペース濃度 (H S_i) が 5 ~ 1 2 マイクログラム / リットルの間であり、柔軟性指標が 2 0 以上であるフレグランス成分、および、
総液体組成物の 0 ~ 1 重量 % の、標準平衡ヘッドスペース濃度 (H S_i) が 5 マイクログ

10

20

30

40

50

ラム/リットル未満であり、柔軟性指標が7以上であるフレグランス成分、を含む液体組成物の、液体電気空気ケア装置における使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は一般に、エアフレッシュナー装置、特に電気エアフレッシュナー装置から分配されるのに適したフレグランス含有液体配合物に関する。

【背景技術】

【0002】

フレグランス材料を周辺空気中に分配し、それにより望ましく心地よいフレグランスを付与するように設計された装置は、技術分野において周知である。エアフレッシュナーまたは部屋の脱臭剤として一般に知られているかかる装置は、多様な形態において市販されている。装置の特有のタイプは、いわゆる「プラグイン」または「液体電気」装置である。それらは典型的に、容器またはタンクに保持されたフレグランス含有液体配合物を含む。ウィッキング手段は加熱要素と隣接した関係にある容器の外に伸びてもよく、それは典型的に電気の幹線によって電力供給されるかまたはバッテリー駆動である。液体配合物は、ウィッキング手段を加熱要素に隣接した位置に引き上げ、加熱要素からの熱はフレグランスの加速する蒸発をもたらし、それにより周辺雰囲気中にフレグランスを分散する。

10

【0003】

これらの装置の特別なデザイン、またはフレグランス流出の特別なメカニズムのいずれも、それらがフレグランス材料を着実に且つ制御された割合で環境に分配し、フレグランスが装置の寿命にわたりその匂いの完全性を維持するような様式で実行することが必須である。さらに、装置の耐用年数の最後には、全てのフレグランス材料が消費され、または実質的に消費されるべきである。

20

【0004】

しかしながら、これらの作用を達成することは難しく、ほとんどの市販の装置は同様の制限、とりわけ、匂いがフレグランス配合物のより揮発性の成分がより低い揮発性の成分よりも早く発散し、タンク中またはウィッキング手段においてより低い揮発性の成分の残りが後に残るということに悩まされる。フレグランス配合物のこれらの組成の変化は、時を経て鮮度の喪失および周囲の雰囲気中に放出するフレグランスの性質における変化を生み出す。これらの問題はよりよいエアフレッシュナー装置を考案しようとする者の注意の多くを占める。

30

【0005】

これらの問題を克服するために様々な努力がなされている。フレグランスデザインの観点から、実質的に全ての成分が同じ割合で蒸発することを確実にするために同様の揮発性を有するフレグランス成分のみを使用することが提案されている。フレグランス成分の均一な蒸発を助けるために、溶媒または担体もまた提案されている。

【0006】

しかしながら、あるフレグランス成分、特に分子量範囲の上限、またはフレグランス成分の蒸気圧範囲の下限となりがちであるフレグランス成分は、技術分野において一般にエアフレッシュナー適用に使用することが難しいとみなされる。なぜならそれらは芯に沿って非常にゆっくり移動するかまたは全く移動せず、任意の相当のレベルでそれらを含むフレグランス配合物は、容認できないほど低い蒸発割合を提示するからである。これは特にムスク成分、およびヘビーオリエンタル、ウッディノートおよびアンバーノートを提示する成分の場合である。

40

【0007】

このように、市場に出ているプラグイン装置など、無数の型およびデザインのエアフレッシュナー装置があるのに関わらず、かかるムスク成分を用いることは困難な挑戦のままである。

【0008】

50

他方で、ムスクの成分は、香水の香りの温かさや深みを与える、非常に重要な香水成分のクラスを形成する。それらの使用を限定することは、上述の技術的問題のために調香師がアクセス可能な匂いのパレットの望ましくない限定につながる。特に、ある快楽の傾向、例えば微細なフレグランスを連想させるもの、または思いやりや上品な雰囲気を感じさせるものは、ムスク成分の使用なしで容易には成し得ない。これは、エアフレッシュナービジネスの早く動く市場力学における今日の問題である。エアフレッシュナー装置の消費者は匂い除去や消臭効果を備えるだけではもはや満足せず、住居の特徴や自身の表現を備える製品を次第に求めるようになっていく。

【0009】

したがって、これらは、成分のより広いパレットを有する香料配合手段を提供する必要があり、それらは嗅覚印象を差別化する市場を作り出すために使用できる。柔らかさ、温かさ、固さおよび深みの典型的なベースノート嗅覚印象、および特にウッディ、シブルまたはムスクのものを備えることができるフレグランス成分は、競合的な状況において差別化を図るために、エアフレッシュナー装置における使用のためのフレグランス成分の後に次第に採られるようになっていく。

【0010】

フレグランス配合物は、これらの型の成分を含有するエアフレッシュナーへの応用を意図し、そうでありながらも長く続くこと、インパクトが強いことの両方を兼ね備え、および装置の寿命を通して一貫したフレグランス印象を供給するものは、技術的に挑戦的で理解しにくいものである。

【発明の概要】

【0011】

技術分野における欠点に対処する際に、出願人は驚くべきことに、成分の分子量および蒸気圧が、エアフレッシュナー装置において高分子量および/または低蒸気圧フレグランス成分の性能を適切に説明しないことを発見した。より特に、出願人はフレグランス成分の立体配座の可動性（柔軟性）が性能の信頼性のある指標となったことを見出した。この洞察で、出願人は、顧客の好みを喚起するような柔らかさ、温かさ、固さおよび深みの嗅覚印象を供給することができる、長く続くおよびインパクトが強いフレグランス配合物を作り出すことができた。さらに、これらの嗅覚印象の周辺空気への供給は、装置の有用な寿命の間の供給の速度または匂いの特性において、長い時間にわたって目立つ変化もなく達成されることができる。さらに、出願人は、規制、とりわけ米国においてCARB規制によって義務付けられている規制によって課せられた制限にもかかわらず、これらの望ましい特性および性能特性を有するフレグランス配合物を作り出すことができるということを見出した。

【0012】

したがって、本発明は、第1の態様において、以下；
総液体組成物の0.1重量%～10重量%のフレグランス成分であり、それは成分群1の成分である；または
総液体組成物の0.1重量%～7重量%のフレグランス成分であり、それは成分群2の成分である；または
総液体組成物の0重量%～1重量%のフレグランス成分であり、それは成分群3の成分である；

【0013】

ここで、成分群1は、12より大きい～50マイクログラム/リットルの標準平衡ヘッドスペース濃度（ HS_i ）ならびに45以上の公知の柔軟性指標（ Fl_i ）を有するフレグランス成分であり；

成分群2は、5～12マイクログラム/リットルの標準平衡ヘッドスペース濃度（ HS_i ）ならびに20以上、およびより特に20～44の間の公知の柔軟性指標を有するフレグランス成分であり；

成分群3は、5マイクログラム/リットル未満の標準平衡ヘッドスペース濃度（ HS_i ）

10

20

30

40

50

ならびに7以上、およびより特に7～19の間の公知の柔軟性指標を有するフレグランス成分である；

から選択される少なくとも1つのフレグランス成分を含む電気プラグインエアフレッシュナー装置における使用に適した液体組成物を提供する。

【0014】

標準平衡ヘッドスペース濃度 (HS_i) は、マイクログラム/リットルで表され、25の温度で1気圧の圧力下でのこの成分の固体または液体形状における、凝縮された形態と平衡状態にある成分の濃度に関する。それは技術分野において既知の定量的なヘッドスペース分析技術により測定することができる。適切な方法は、Mueller and Lamparsky in *Perfumes: Art, Science and Technology*, Chapter 6 “The Measurement of Odors” at pages 176 - 179 (Elsevier 1991) に記載されている。

10

【0015】

典型的には、平衡ヘッドスペース濃度は、以下の通り測定され得る：試験化合物500mgをヘッドスペース容器に加え、その後密封する。タンクをその後化合物がガスおよび液相間の平衡に達するまで、定温25でインキュベートする。この飽和したヘッドスペースの定義した体積（通常0.5 - 1 L）は、通常吸着剤としてPorapak Qを用いて、マイクロフィルター上に捕捉される。適切な溶媒でのフィルター抽出（通常30～100マイクロリットルのメチルtert-ブチルエーテル）の後、抽出物の一定分量をGCにより分析する。定量化を外部標準キャリブレーション法により行った。最初のヘッドスペースにおける濃度は、マイクロフィルターを通して吸い込んだヘッドスペース体積（マイクログラム/リットルを単位として）およびガスクロマトグラフに注入されたフィルター抽出物の一定分量から計算することができる。与えられた試験化合物の最終のヘッドスペース濃度値は3つの独立した測定それぞれの平均値として得られる。さらに上に記載した技術の情報は、Etzweiler, F.; Senn E. and Neuner-Jehle N., *Ber. Bunsen-Ges. Phys. Chem.* 1984, 88, 578-583の記事に見出され得る。

20

【0016】

化合物の分子量を知ると、標準平衡ヘッドスペース濃度は、第1の適切な近似において理想気体の法則により与えられる気体状態方程式により化合物の蒸気圧分圧に関連する。

【0017】

柔軟性指標は以下のように計算され得る：第1に、各成分の構造はMMFF94力場を用いることにより、MOE (Molecular Operating Environment, Chemical Computing Inc.) におけるエネルギー最小化メニューのデフォルト設定を適用することにより最小化される。分子表面が3D構造に大きく依存するので、各分子の配座MOEにおけるLow Mode MDサーチのデフォルト設定により生成される (P. Labute, P. “LowModeMD - Implicit Low Mode Velocity Filtering Applied to Conformational Search of Macrocycles and Protein Loops”. *J. Chem. Inf. Model.* 50 (2010) 792-800参照。)。最後に、各配座の水が到達できる表面領域値 (ASA) は、水分子の半径1.4を用いることによりMOEで計算される。分子のASAの範囲（最大と最小値の差）は、柔軟性の信頼できる評価尺度である。

30

【0018】

フレグランス成分の配座可動性（柔軟性指標により表されるような）は、エアフレッシュナー装置において有用なフレグランス配合物の設計においてこれまで利用されていなかった有用なパラメーターである。しかしながら驚くべきことに、出願人は、例えば、さもないとエアフレッシュナーにおける使用のためのものとしては香料製造者から無視され得る、比較的に低い蒸気圧、例えば50マイクログラム/リットル未満の標準ヘッドスペース平衡濃度に対応する標準平衡ヘッドスペース濃度を有する香料成分は、成分の配座可動性を適切に考慮することにより、慎重にかつ効果的に用いることができることを見出した。例えば、5マイクログラム/リットル未満の標準平衡ヘッドスペース濃度を有する成分は、それらが約45未満の柔軟性指標を有する場合には、仮に用いられるとしても非常に少量でしか用いられることができないが、同様に低い蒸気圧を有する成分は、それらが

40

50

配座的により可動である場合（例えば約70～80の柔軟性指標、またはそれ以上）には、極めて多量（約10%まで）用いることができる。

【0019】

この知見の結果としてエアフレッシュナー香料においてより十分に利用することができるフレグランス成分の特定のクラスは、ムスク成分のクラスである。ムスクは、香料において高度に評価された分子であり、適用の全ての様式においてベースノートとして用いられる。また、それにもかかわらず、それらはエアフレッシュナー適用において十分に活用されていない。本発明により、出願人は、ムスク成分を含有するフレグランス配合物を製造することができ、結果として、消費者試験において好みを喚起するような高度に差別化された嗅覚印象を作ることができる。

10

【0020】

したがって、本発明の特別の態様において、上で言及される成分群1、2および3の成分は、ムスク成分から選択される。

【0021】

本発明によるムスク成分は、カシュメラン ($F_{1,i} \quad 3.2$)、ガラクソリドS ($F_{1,i} \quad 3.9$)、モキサロン ($F_{1,i} \quad 7.8$)、コスモン ($F_{1,i} \quad 23.3$)、チベトリド ($F_{1,i} \quad 29.5$)、ベルピオン ($F_{1,i} \quad 30.3$)、ロサムスク ($F_{1,i} \quad 30.4$)、ムセノン ($F_{1,i} \quad 34.7$)、ニルバノリド ($F_{1,i} \quad 35.1$)、ハバノリド ($F_{1,i} \quad 35.6$)；シベトン ($F_{1,i} \quad 37.2$)；ムスクC14 ($F_{1,i} \quad 39.3$)；エチレンブラシラート ($F_{1,i} \quad 44.7$)；アンブレットリド ($F_{1,i} \quad 44.7$)；Pentambrette ($F_{1,i} \quad 65.1$)、2 - (1 - (3, 3 - ジメチルシクロヘキシル) エトキシ) - 2 - メチルプロピルアクリラート ($F_{1,i} \quad 69.2$)、セレノリド ($F_{1,i} \quad 74.9$)、Applelide ($F_{1,i} \quad 76.2$) およびシルコリド (Sylkolide) ($F_{1,i} \quad 81.6$)；ロマンドリド ($F_{1,i} \quad 82.9$)、シトロネリルエトキサラート ($F_{1,i} \quad 118.5$)、シクロムスク ($F_{1,i} \quad 122.5$) およびシルバノン (イソプロピルミリストート中のムスクCPD ($F_{1,i} \quad 25.4$) およびヘキサデカノリド ($F_{1,i} \quad 36.6$) の混合物)、

20

【0022】

(R, E) - 2 - メチル - 2 - ((3 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) プロピルシクロプロパンカルボキシラート ($F_{1,i} \quad 82.4$)、(R, E) - 2 - ((3 - エチル - 5 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロプロパンカルボキシラート ($F_{1,i} \quad 86.3$)、(R, E) - 2 - ((3 - エチル - 5 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルプロピオナート ($F_{1,i} \quad 84.3$)、(R, E) - 2 - ((3 - エチル - 5 - メチルヘキサ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロブタンカルボキシラート ($F_{1,i} \quad 109.4$)、(R, E) - 2 - ((3, 6 - ジメチルヘプタ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロプロパンカルボキシラート ($F_{1,i} \quad 104.1$)、(E) - 2 - ((3, 5 - ジメチルヘプタ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルシクロプロパンカルボキシラート ($F_{1,i} \quad 99.1$)、2 - ((4 - (シクロヘキサ - 3 - エン - 1 - イル) - 3 - メチルブタ - 3 - エン - 2 - イル) オキシ) - 2 - メチルプロピルイソブチラート ($F_{1,i} \quad 101.9$) からなる群から選択される成分を含む。

30

40

【0023】

本発明の1つの態様において、液体組成物は、シルコリド、ヘルベトリド、およびセレノリドの1種以上を0.1～10重量%含有する。

本発明の1つの態様において、液体組成物は、0.1～7%の、およびより特に0.1～3%のムセノンを含有する。

50

【 0 0 2 4 】

本発明の 1 つの態様において、液体組成物は、0 . 1 ~ 7 % の、およびより特に 3 ~ 5 % の、シルバノンスupra (Silvanone supra) (イソプロピルミリストート中のヘキサデカノリドおよびシクロペンタデカノリドの 6 0 % 混合物)、ニルバノリドおよびコスモンの 1 種以上を含有する。

【 0 0 2 5 】

本発明のある態様において、液体組成物は 1 % までのハバノリドを含有する。

本発明のある態様において、液体組成物は本明細書の上記に記載される 1 種以上のムスク化合物を含有するが、ただし、これはガラクソリド S、ムスク C 1 4、エチレンブラシレート、アンブレットリドおよびベルピオンではない。

10

【 0 0 2 6 】

本明細書の上記に言及したフレグランス成分の総量は液体組成物において 1 0 0 % まで、より特に 9 0 % まで、さらにより特に 8 0 % までの量において存在してもよい。

【 0 0 2 7 】

上で言及されるフレグランス成分に加えて、本発明による液体組成物は、リットルあたり 1 0 ⁻⁴ マイクログラム (μ g / l) 未満である 2 5 での標準平衡ヘッドスペース濃度を有する 1 種以上の他のフレグランス成分を含有してもよい。適切なフレグランス成分は S. Arctander "Perfume and Flavor Chemicals: Volume 1, Allured Publishing Corporation 1969 またはその任意の後の版ならびに IFRA (International Fragrance Research Association) データベース、および RIFM (Research Institute of Fragrance Materials) データベースに記載されており、これらの各々は参照によりそれらの全体が本明細書に組み込まれる。

20

【 0 0 2 8 】

本発明による液体組成物は、1 種以上の溶媒または上で述べたフレグランス成分の蒸発を助ける担体を含んでもよく、特に 0 . 6 m m H g 未満の、およびなおより特に 0 . 1 m m H g 未満の蒸気圧を有する溶媒、およびより特に、いわゆる L V P V O C 「低蒸気圧の揮発性有機化合物」としてカリフォルニア大気資源局 (C A R B) により使用が認可されているものに含まれる溶媒である。かかる溶媒の例は、参照により本明細書に組み込まれる米国特許第 8 6 0 3 9 6 3 号に記載されている。

【 0 0 2 9 】

30

適切な溶媒の例は、ジプロピレングリコール、プロピレングリコール、グリコールエステル、および Dowanol (登録商標) DPMA (ジプロピレングリコールメチルエーテルアセタート)、Dowanol (登録商標) DPM (ジプロピレングリコールメチルエーテル)、Dowanol TPM (トリプロピレングリコールメチルエーテル)、Dowanol DPNB (プロピレングリコール n - ブチルエーテル、Dowanol DPNP (プロピレングリコール n - プロピルエーテル)、および他の適切な Dow Chemical Dow P-series グリコールエーテルなどの Dowanol (登録商標) の名の下に Dow Chemicals から市販されているグリコールエーテル、二塩基性エステル DBE (グルタル酸ジイソブチル、コハク酸ジイソブチル、およびアジピン酸ジイソブチルから構成され、Solvay から市販されているブレンド、またはグルタル酸ジイソブチル、およびアジピン酸ジイソブチルから構成され、Invista から市販されているブレンド)、Augeo Clean Multi の名の下に Solvay から市販されているメチルメトキシブタノール (+ / -) - 2 , 2 - ジメチル - 4 - ヒドロキシメチル - 1 , 3 - ジオキシラン、ジメチルイソソルビド、およびそれらの混合物を含む。

40

【 0 0 3 0 】

溶媒は液体配合物の総重量に基づいて 1 0 % 以上、より特に 2 0 % 以上、なおより特に 3 0 % 以上の量において存在してもよい。低蒸気圧溶媒の上限は本発明の液体配合物の総重量に基づいて、6 0 % まで、より特に 7 0 % まで、およびなおより特に 8 0 % までであってよい。

【 0 0 3 1 】

該溶媒に加え、またはこれに代えて、本発明の液体配合物は、1 種以上の担体香料成分

50

を含有してもよく、それは上述した溶媒と同様の蒸発特性を有する。適切な担体香料成分は、ジペンテン(138-86-3)、テルピノレン(586-62-9)、エチルアセトアセター(141-97-9)、ヘキシルアセター(142-92-7)、Florosa HC(63500-71)、エチルヘプタノアート(106-30-9)、エチルカプロナート(123-66-0)、フレスコメンテ(Freskomenthe)(14765-30-1)、ボルニルアセター液(Bornyl acetate liquid)(125-12-2)、ベンジルアセター(140-11-4)、ジエチルマロナート(105-53-3)、リナロール(78-70-6)、ジヒドロミルセノール(18479-58-8)、リナリルアセター(115-95-7)、リモネン(5989-54-8)、アグルメックス(Agrumex)(88-41-5)、エチルリナロール(10339-55-5)、ジャスマシクレン(Jasmacyclene)(5413-60-5)、パラtert-ブチルシクロヘキシルアセター(32210-23-4)、およびノナニルアセター(58430-94-7)を含む。

10

【0032】

これらの担体香料成分のいずれかが本発明による液体配合物中に存在する場合、それらは、液体配合物の総重量に基づき10%以上、より特に20%以上、なおより特に30%以上の量において存在してもよい。該成分の上限は、本発明の液体配合物の総重量に基づき60%まで、より特に70%まで、およびなおより特に80%までであってよい。

【0033】

本発明による液体配合物は、付加的に1つ以上の高揮発性、例えば、25で0.1 mmHg以上、より特に少なくとも約0.2 mmHg、または少なくとも約0.5 mmHg、または少なくとも1 mmHgの蒸気圧を有する揮発性アロマ化学物質を含んでもよい。例示的な揮発性アロマ化学物質には、ヘキシルアセター、3,3,5-トリメチルヘキシルアセター、ボルニルホルマート、3-ヘキセニルブチラート、フェニルエチルアセター、ブチルヘキサノアート、イソノナノール、アセトンアルコール、イソプレニルアセター、イソブチル2-ペンタノアート、アミルプロピオナート、ハーバルジオキサン(herbal dioxane)、フルフリルホルマート、メチルアセチルアセトン、およびブチルアセトアセターが含まれる。

20

【0034】

他の揮発性アロマ化学物質は、参照により本明細書に組み込まれる米国特許第8603963号、特にこの特許文献の表1に記載されている、LVPOC強化化学物質として知られるあらゆる化合物から選択することができる。

30

【0035】

揮発性アロマ化学物質は液体配合物の総重量に基づき10%以上、より特に20%以上、なおより特に30%以上の量で存在してもよい。該成分の上限は、本発明の液体配合物の総重量に基づき、60%まで、より特に70%まで、なおより特に80%までであってよい。

【0036】

本発明のある態様において、液体組成物は群1および/または群2および/または群3の成分から選択される1種以上のフレグランス成分; $10^4 \mu\text{g/l}$ である25での標準平衡ヘッドスペース濃度を有する少なくとも1つの他のフレグランス成分; 低蒸気圧溶媒、および任意に少なくとも1つの該揮発性アロマ化学物質を含む。

40

【0037】

本発明のある態様において、液体組成物は群1および/または群2および/または群3の成分から選択される1種以上のフレグランス成分; $10^4 \mu\text{g/l}$ である25での標準平衡ヘッドスペース濃度を有する少なくとも1つの他のフレグランス成分; および担体香水成分として本明細書に言及される少なくとも1つの香水成分、を含む。

【0038】

前述の材料に加えて、本発明の液体配合物は、生地コンディショニングまたは軟化、生地の清涼、エアフレッシュまたは脱臭、悪臭除去を提供する剤からなる群から選択され

50

る１種以上の活性剤を含有してもよい。活性剤はまた、界面活性剤乳化剤、溶解剤、ポリマー、悪臭反作用剤、バッファー、亜鉛イオンなどが含まれてもよい。

【００３９】

本発明による液体組成物との使用に適する空気ケア装置は電気エアフレッシュ装置を含み、それはエネルギーの電氣的なまたはバッテリー源を含む。用語「電氣的エアフレッシュ装置」は、加熱された液体ウィックシステム、圧電スプレーシステム、エレクトロスプレー装置およびベンチュリ装置、ならびに太陽または他のエネルギーの代替形態により電力供給される装置を含む。

【００４０】

あらゆる適切な大きさ、形状、形態、または構成の装置を使用することができる。適切な装置を、天然材料、人工材料、繊維材料、非繊維材料、多孔質材料、非多孔質材料、およびそれらの組み合わせを含むがこれらに限定されない、あらゆる適切な材料から作ることができる。

ある態様において、典型的な装置は、ウィックおよび液体組成物を液体組成物タンクに分配するためにウィックおよび放出面の組み合わせを利用する。

【００４１】

装置（「ウィッキング装置」など）は、大気中に揮発性液体、例えば、フレグランス、消臭剤、殺菌剤、殺虫活性剤などを分配することで知られている。典型的な空気ケア装置は、液体流体タンクからの揮発性の液体を分配するためにウィックおよび放出面の組み合わせを利用する。装置は、液体組成物が、装置の寿命にわたって一貫した嗅覚プロファイルを維持する間、周辺雰囲気に着実に制御された割合で分配されるような様式で実行すべきである。

【００４２】

本発明の態様において、装置は、加熱された液体ウィック供給システム、圧電スプレーシステム、エレクトロスプレー装置およびベンチュリ装置を含む、電気またはバッテリー駆動のエネルギー源を含む。電気の液体エアフレッシュナー装置の商業的な例は、限定されないが、SC Johnson & Sonsによって売られているGlade（登録商標）PlugIns（登録商標）香油；Reckitt Benckiserによって売られているAir Wick香油、およびAir Wick X-Press（登録商標）香油；Proctor & Gamble Co.によって売られているFebreze Noticeables、Yankee Candle Co.によって売られているElectric Home Air Fresheners；およびHenkel AGによって売られているRenuzit Scented Oilsを含む。

【００４３】

本発明による液体組成物には、本明細書に言及されるフレグランスの分配装置の全ての様式から分配されることができる香料としての有用性が見出される。液体組成物は、長く続き、所望の強度レベルに合致するが低い不快な／化学的な関連性を有する柔らかい、深いおよび温かい特性を有する周辺雰囲気におけるヘッドスペースを提供する。通常、得られた香料強度は、香料の不快な化学的性質と相殺されなければならないので、空気ケア装置に用いられる香料は、市場において苦しむ。逆に、本発明の液体組成物は強く、長く続く嗅覚プロファイルを提供し、それは同時に柔らかく、望まない化学的性質を欠如している。

【００４４】

本発明による液体組成物は制御された方法において蒸発する。特に、単位時間あたりのフレグランスの損失分の重量として測定される蒸発速度は、与えられた時間、例えば３０、４０または６０日にわたり０．２～０．６ｇ／日の範囲にあり、与えられた時間にわたり比較的一定である。蒸発速度は実質的に一定であり、例えば単位時間あたりのフレグランスの損失分の重量は与えられた時間にわたって±５％、または±１０％または±２０％未満異なる。

【００４５】

さらに、蒸発速度は、０．２ｇ／日より下のレベルに低下する前には、本発明による液体組成物を含むタンクが空であるか、または実質的にそうであるというものである。

ここで、本発明をさらに説明する一連の例を以下に示す：

【発明を実施するための形態】

【0046】

例 1

蒸発プロファイル：

蒸発試験は、25 ml の香料を含む器であって、この器の上部が電気加熱要素およびウィックのための流路を含むキャップにより閉じられるものからなる、市販品の加熱ユニットを用いて行われた。ユニットはさらにポリエステルファイバーウィック（例えばESSENT RA）を含み、ウィックの一端を香料に浸け、他端を空気に接触させるように配置され、一方で空気に接触するウィックの端はまた、電気加熱ユニットにも囲まれているか、または電気加熱ユニットの近くにある。

10

ウィックの上部での加熱温度は、80 に設定された。全ての成分を、溶媒（Dow Chemicalsから市販されているDowanol TPM（トリプロピレングリコールメチルエーテル））中10%に相当するのと等しい用量で試験した。3回の実験が成分ごとに行われ、報告された値は平均値を表す。

【0047】

重量損失は時間の関数として計算された（重量損失/日）。蒸発速度が0.02 g/日に到達した時点で、蒸発が終了したものとみなした。蒸発速度が0.02 g/日に到達した時点でのそのタンクに残っている成分の割合が記録された。この基準値に到達するまでの時間（日）を同様に記録した。

20

【0048】

2つの直線のムスク分子（シルコリドおよびヘルベトリド）および2環性ムスク分子（モキサロン）はそれらの各々のタンクにおいて全く残渣を残さなかった。基準値に到達する時間（日）は各々23、28および26であった。結果は、これらの分子がエアフレッシュナー装置における使用に相当に適しており、フレグランス配合物の嗅覚プロファイルの快楽性、長続きの度合い、およびインパクトに有意に影響を及ぼすことができるレベルで自由に使用することができることを示している。

【0049】

5つのマクロ環ムスク（Sガラクソリド、ムスクC14、エチレンブラシラート、アンブレットリドおよびベルピオン）はそれぞれ14.5、9.5、10.0、9.5および11.0の残渣（重量%）を残した。基準値に到達する時間（日）は、それぞれ30、36、37、43および55であった。結果は、それらの使用は非効率的であり（タンク中に相当の残渣がある）、ウィックの相当のつまりをもたらすので、これらの分子を慎重に（1%以下）用い、または好ましくは全く用いないべきであることを示す。

30

【0050】

マクロ環ムスク分子のさらなる群（ムセノン、シルバノンスupra（silvanone supra）、ニルパノリドおよびコスモン）は、45、50、38および35の基準値までの時間（日）でそれぞれ6.0、2.0、3.5および4.5の残渣（重量%）を残した。結果は、これらの分子がいくらか中間的な方法において挙動すること、および、それらがウィックの詰まりを示さないけれども蒸発の遅延をもたらす得るので、例えば約3~5%までで慎重に用いられるべきであることを示した。

40

【0051】

最後のムスクの群（二環性、直線およびマクロ環（フィキソリド、セレノリドおよびチベトリド））は、52、42および42の基準値までの時間（日）でそれぞれ2.5、2.0および1.0の残渣（重量%）を残した。これらの分子もまた、いくらか中間的な方法において挙動し、蒸発を遅延することを減らす傾向を示し、前出の段落において報告された分子の群よりも多い量、例えば約5~7%までであるけれども、慎重に用いられるべきである。

【0052】

例 2

50

消費者テスト

2つのフレグランスが快楽の快適さを評価する50人のパネリストにより比較された。これらの2つの香料の特性は表Iに記載される。

表I 快楽の快適さについて評価された香料の特性

【表1】

成分グループ	香料 A	香料 B
グループ1の柔軟性のムスク(柔軟性指標>45)	0.2	1.2
グループ2の柔軟性のムスク(19<柔軟性指標≤45)	0.14	0.3
ケトエステル類	2	1.7
テルペンアルコール類	2.2	2
芳香族アルデヒド類	1.6	1.4
アルキルアルデヒド類	0.6	0.5
ラクトン類	0.7	0.6
ポリ環状ケトン類	0.4	0.4
ヘテロ環状化合物	0.6	0.6
エステル類	0.22	0.18
環状アルコール類	0.12	0.11
他の少量の香料成分	1.02	0.91
溶媒	90.2	90.1
総量	100	100

【0053】

2つの香料は、本発明により香料Bが過剰量の柔軟なムスク成分を含んだことを除き、同様の組成を有した。

被験者は、好みのフレグランスを選ぶように求められた。28%の被験者が市販のフレグランスである香料Aを選び、一方、68%が、より高いレベルのムスク分子を含有するという点で本発明に一致するものであるフレグランスBを選んだ。

【0054】

被験者は、以下の特性について2つのフレグランスを評価することを求められた：

優しさ；誘惑；柔らかさ／穏やかさ；元気づけ；新鮮さ；温かさ；不快／刺激；粗野／鋭さ。

香料Aに対して、回答(%)はそれぞれ：32、32、32、36、32、36、28および28。

香料Bに対して、回答(%)はそれぞれ：60、52、52、52、48、52、12および12。

【0055】

結果は、ムスク含有フレグランスが正の特性において顕著に良くなること、ならびにまた厳しさ／刺激性および粗さ／鋭さが少なくなることが認められるということを明白に実証した。

【0056】

試験方法

ブラインドスニッフ試験 - 各フレグランスには固有の数値コードが割り当てられた。

各試料は体積765立方フィートの空気ケアブースに封入された。

試験は、Sequential Monadic Paired Comparison Randomized Block Designであった。フレグランスを、予め確立された無作為順序で連続して評価した。

被験者は、現在液体エアフレッシュナー装置のユーザーである女性であった(サンプル人数：n=50)

試験ごとに2つのフレグランスを評価した。

【0057】

10

20

30

40

50

プロトコール

1. 2つの空気ケアブースを1時間完全に空にした。
2. 液体電気装置をブースのソケットに差し込み、レベル「4」に設定し、1時間動作させ、所望のフレグランスレベルまで空気ケア評価ブースを十分に充填する。
3. 無作為化されたブロックデザイン (Randomized block design) に基づき、回答者にブースに入るように指示する。
4. 回答者が、1～2分フレグランスに慣れるようにする。
5. 空気ケアブースの中で記入するように回答者に調査票を手渡す。
6. 記入が完了したら、回答者にブースを出るように指示する。

【0058】

10

7. 回答者が、4～5分評価ブースの外でバランスを取り戻すようにする。
8. ここで回答者に残りのブースに入るように指示し、上記ステップ4 - 7からのプロトコールに従う。
9. 一度回答者は両方の評価を完了した。対の比較試験調査票を配布する。

【0059】

10. ここで回答者は2つのフレグランスの間で、直接的な比較判断をすることになるので、彼らが再び各フレグランスを把握するように、彼らが各ブースを自由に入ったり出たりしてもよいことを回答者に指示する。

11. 評価はここで完了する。

12. 評価の1時間後、ステップ1ごとにブースを空にし、事前工程を繰り返す。

20

データを集め、分析して、2つの試験したフレグランスの間に統計的な有意差が存在するかどうか決定した。

フロントページの続き

(72)発明者 ローパーツ - レーベル、セリーヌ

フランス国 9 5 1 5 0 タベルニー、ル カルノ 1 1

(72)発明者 ブルーベーカー、ミシェル

アメリカ合衆国 0 7 4 0 1 ニュー ジャージー州、アレンデール、イースト オーチャード
ストリート 5 0

審査官 小川 慶子

(56)参考文献 特表 2 0 0 5 - 5 1 8 8 4 0 (J P , A)

特表 2 0 1 3 - 5 0 4 5 4 1 (J P , A)

特開平 8 - 8 4 9 4 9 (J P , A)

特開 2 0 0 1 - 1 7 8 8 0 8 (J P , A)

国際公開第 2 0 1 4 / 1 9 8 7 0 9 (W O , A 1)

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)

A 6 1 L 9 / 0 0 - 9 / 2 2

C 1 1 B 9 / 0 0

F 2 4 F 1 / 0 0 8