

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5944100号  
(P5944100)

(45) 発行日 平成28年7月5日 (2016.7.5)

(24) 登録日 平成28年6月3日 (2016.6.3)

(51) Int. Cl. F I

A 6 1 K	8/31	(2006.01)	A 6 1 K	8/31
A 6 1 Q	5/06	(2006.01)	A 6 1 Q	5/06
A 6 1 Q	15/00	(2006.01)	A 6 1 Q	15/00
A 6 1 Q	19/00	(2006.01)	A 6 1 Q	19/00
A 6 1 Q	19/10	(2006.01)	A 6 1 Q	19/10

請求項の数 11 (全 48 頁)

(21) 出願番号	特願2010-512573 (P2010-512573)	(73) 特許権者	505066718
(86) (22) 出願日	平成20年6月12日 (2008.6.12)		コグニス・アイピー・マネージメント・ゲ
(65) 公表番号	特表2010-531809 (P2010-531809A)		ゼルシャフト・ミット・ベシュレンクテル
(43) 公表日	平成22年9月30日 (2010.9.30)		・ハフツング
(86) 国際出願番号	PCT/EP2008/004701		C o g n i s I P M a n a g e m e n t
(87) 国際公開番号	W02008/155059		t G m b H
(87) 国際公開日	平成20年12月24日 (2008.12.24)		ドイツ連邦共和国, 40589デュッセル
審査請求日	平成23年6月13日 (2011.6.13)		ドルフ, ヘンケルストラーセ, 67
審判番号	不服2014-18804 (P2014-18804/J1)	(74) 代理人	100081422
審判請求日	平成26年9月19日 (2014.9.19)		弁理士 田中 光雄
(31) 優先権主張番号	07011967.2	(74) 代理人	100101454
(32) 優先日	平成19年6月19日 (2007.6.19)		弁理士 山田 卓二
(33) 優先権主張国	欧州特許庁 (EP)	(74) 代理人	100104592
(31) 優先権主張番号	07075513.7		弁理士 森住 憲一
(32) 優先日	平成19年6月20日 (2007.6.20)		
(33) 優先権主張国	欧州特許庁 (EP)		最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 炭化水素混合物およびその使用

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

1 4 C 同位体を含有する炭化水素混合物であって、該炭化水素混合物に存在する炭化水素の総量に基づいて、

( a ) 5 5 ~ 8 0 重量 % の直鎖状 C 1 1 炭化水素、および

( b ) 2 0 ~ 4 5 重量 % の直鎖状 C 1 3 炭化水素または直鎖状 C 1 5 炭化水素

を含有し、炭化水素の総量に基づいて 0 ~ 5 重量 % の分枝状炭化水素を含有する、化粧品において使用される炭化水素混合物。

【請求項 2】

炭化水素混合物が、炭化水素混合物に存在する炭化水素の総量に基づいて、1 重量 % 以下の分枝状炭化水素を含有する、請求項 1 に記載の炭化水素混合物。

【請求項 3】

( a ) 直鎖状 C 1 1 炭化水素および ( b ) 直鎖状 C 1 3 炭化水素または直鎖状 C 1 5 炭化水素が、炭化水素混合物に存在する炭化水素の総量に基づいて、少なくとも 8 0 重量 % を構成する、請求項 1 または 2 に記載の炭化水素混合物。

【請求項 4】

さらに、直鎖状 C 1 7、C 1 9、C 2 1 および C 2 3 炭化水素およびそれらの混合物からなる群から選択される少なくとも 1 つの直鎖状炭化水素を含む、請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の炭化水素混合物。

【請求項 5】

10

20

(b)の炭化水素が直鎖状C15炭化水素であり、さらに直鎖状C17炭化水素を含有する、請求項1～4のいずれかに記載の炭化水素混合物。

【請求項6】

さらに、直鎖状C17および直鎖状C19炭化水素を含有する、請求項1～5のいずれかに記載の炭化水素混合物。

【請求項7】

さらに少なくとも1つの直鎖状C21炭化水素を含有する、請求項6に記載の炭化水素混合物。

【請求項8】

化粧品における油体および/または分散剤としての、請求項1～7のいずれかに記載の炭化水素混合物の使用。

【請求項9】

0.1～80重量%の請求項1～7のいずれかに記載の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物を含有する化粧品。

【請求項10】

少なくとも1つの制汗/脱臭活性成分を含有する、請求項9に記載の化粧品。

【請求項11】

少なくとも1つの乳化剤および/または界面活性剤および/またはワックス成分および/またはポリマーおよび/またはさらなる油体を含有する、請求項9または10に記載の化粧品。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、<sup>14</sup>C同位体を含有する炭化水素混合物、化粧品および/または医薬品製剤におけるその使用、ならびに<sup>14</sup>C同位体を含有する炭化水素混合物を含有する化粧品および/または医薬品製剤に関する。

【背景技術】

【0002】

「ライトエモリエント」として知られている感覚的に軽い油体は、化粧品業界によって多くの製剤に使用されている。多数の「ライト」成分として既知の成分が、特に、装飾用化粧品およびケア製剤に使用されている。これらの成分は例えば、揮発性環状シリコン（例えばシクロペンタシロキサンまたはシクロメチコン）あるいは石油化学プロセス由来の炭化水素であり得る。該炭化水素は、その製造方法故に、主に、（例えばイソドデカンの場合のように）引火点が50℃を下回り得る直鎖、環状および分枝炭化水素の混合物である。このような製剤の例および応用に関する記述は、例えば、「Handbook of Cosmetic Science and Technology」、A Barel, M. Paye, H. Maibach, Marcel Dekker Inc. 2001のような一般的な著作物に見られる。しかしながら、毒物学的理由および安全性の理由から、このような製剤のための代替原料に対する要求が将来的には存在するであろう。

【0003】

「鉱油」の名称の下、化粧品および医薬品製剤において使用される物質は、鉱物原料（鉱油、褐炭および無鉛炭）から得られる液状蒸留生成物を含み、また原則として、直鎖、環状および/または分枝状構造を有する一般的な炭化水素の混合物からなる。しかしながら、これらの炭化水素混合物は、化粧品原料における需要に応じる前に、複雑な方法で精製し、化学修飾されなければならない。

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0004】

【非特許文献1】A Barel, M. Paye, H. Maibach著、「Handbook of Cosmetic Science and Technology」、Marcel Dekker Inc.、2001年

【発明の概要】

10

20

30

40

50

## 【発明が解決しようとする課題】

## 【0005】

本発明の課題は、生態学および毒物学的に議論を生じない代替原料を見出すことであった。特に、複雑な精製工程なしで化粧品または医薬品製剤に直接使用し得る原料を提供することは興味深いものであった。これらの原料は、好ましくは、再生可能な原料に基づいて得られるべきである。これらの原料は、適用に関する制限なしに、典型的な化粧品および/または医薬品製剤に直接的に使用し得るべきである。さらに、該原料は、先行技術の炭化水素混合物より向上した感覚特性を有しているべきであり、これらの原料がより良好な皮膚親和性を有していることも望ましい。特に、製剤に関する可能な用途または感覚特性が、シリコン油、特に、例えばジメチコンのような低粘度シリコン油に相当する原料を提供することは興味深いものであった。とりわけ、シリコン油の代替として適当な原料を提供することは望ましかった。さらに、先行技術の原料に比べて、改善されたCO<sub>2</sub>バランスを有する原料を提供することは興味深かった。

10

## 【0006】

さらなる課題は、AP/Deo(制汗/脱臭)活性成分を含有する安定な製剤を可能とする原料を提供することであった。制汗剤/脱臭剤カテゴリーの化粧品製剤、特にいわゆる「スティック製剤」は、化粧品基材の不十分な安定性の課題を、今もなお有している。「スティック製剤」の不利な点は、貯蔵中に匂いの変化が生じることである。したがって、本発明のさらなる課題は、制汗または脱臭製剤を可能とする原料を提供すること、特に、「スティック製剤」の制汗または脱臭製剤を安定な状態で提供できる原料を提供することである。これらの製剤は、特に、長期保存の間に、いかなる好ましくない臭気の発達をも示すべきでない。さらなる課題は、感覚的に「軽い」印象を有し、同時に、可能な限り皮膚親和性が改善された、特にUV光防護フィルターとの組み合わせにおける、およびセルフタニング剤との組み合わせにおける皮膚親和性が改善された原料を提供することであった。中でも特に興味深いのは、装飾用化粧品製剤において感覚的に有利な印象を可能にする新しい原料の提供である。適用する箇所(特に顔および手)のために、例えば口紅、アイシャドー、マスカラ、マニキュア液等の装飾用の製剤における感覚特性、特に揮発性に関して、これらの製品が「重い」印象を与えないように、さらなる要求がなされる。さらに、これらの製品においては、顔料の良好な分散性が望まれる。

20

## 【課題を解決するための手段】

30

## 【0007】

本発明は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物を提供する。

## 【発明を実施するための形態】

## 【0008】

用語「2つの異なる炭化水素」とは、異なる炭素数を有する炭化水素をいう。

用語「炭素数」は、炭化水素中に存在する全ての炭素原子を包含する。したがって、例えば、ウンデカンに対しては11、トリデカンに対しては13である。

## 【0009】

これは、炭化水素混合物が炭素数n(n=整数)の炭化水素を含有する場合、該混合物が、n+2以上またはn-2以下の炭素数を有する少なくとも1つのさらなる炭化水素を含有することを意味する。

40

nは、好ましくは、奇数、特に7、9、11、13、15、17、19、21および/または23である。

## 【0010】

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が2異なる少なくとも2つの炭化水素を含有する<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。本発明のこの実施態様において、炭化水素混合物は、炭素数nの炭化水素に加えて、炭素数n+2の少なくとも1つの炭化水素を含有する。

## 【0011】

50

好ましい実施態様において、炭化水素混合物に存在する炭化水素は、10個以下の炭素原子、好ましくは8個以下の炭素原子、特に6個以下の炭素原子、好ましくは4個以下の炭素原子により異なる。

#### 【0012】

さらに、本発明は、炭素数  $n$  の炭化水素、および炭素数  $n + 2$  および / または  $n + 4$  および / または  $n + 6$  および / または  $n + 8$  および / または  $n + 10$  の少なくとも1つの炭化水素を含有する、 $^{14}\text{C}$  同位体含有炭化水素混合物を含んでなる。

#### 【0013】

炭化水素は、7～23個の炭素原子、好ましくは11～21個の炭素原子を有する炭化水素の群から好ましくは選択される。

10

#### 【0014】

炭化水素は、炭素および水素のみから成る有機化合物をいう。炭化水素には、環状および非環状 (= 脂肪族) 化合物のいずれもが含まれる。炭化水素には、飽和および単不飽和または多不飽和化合物のいずれもが含まれる。該炭化水素は、直鎖状または分枝状であってよい。炭化水素中の炭素数により、炭化水素は奇数炭化水素 (例えば、ノナン、ウンデカン、トリデカン) または偶数炭化水素 (例えば、オクタン、ドデカン、テトラデカン) に分類し得る。分枝状により、炭化水素は直鎖状 (= 非分枝状) または分枝状炭化水素に分類し得る。飽和脂肪族炭化水素は、パラフィンとも称される。

#### 【0015】

本発明の「炭化水素混合物」は、炭化水素以外の物質の含有量が10重量%までの炭化水素混合物を意味すると理解される。炭化水素の割合は、それぞれ混合物中に存在する炭化水素の総量に基づく。10重量%まで存在する非炭化水素は、この計算において考慮されない。

20

#### 【0016】

本発明の炭化水素混合物中に、10重量%まで、特に8重量%まで、好ましくは5重量%まで存在してよい炭化水素以外の物質は、例えば、未変性反応物質として炭化水素混合物中に残存する脂肪アルコールである。

#### 【0017】

用語「 $\text{C}_X$ 炭化水素」は、炭素数  $X$  の炭化水素が包含される; 例えば、用語「 $\text{C}_{11}$ 炭化水素」は、炭素数11の全ての炭化水素を包含する。

30

パラメーター「炭化水素の総量」には、炭素数に関係なく、該混合物に存在する全ての炭化水素が含まれる。

#### 【0018】

用語「核種」は、核中の陽子および中性子の数により、すなわち、原子番号および質量数 (中性子の数 = 質量数 - 原子番号) により特徴付けられる原子のタイプ (原子は電子殻を含んでいる) をいう。同位体は、同じ原子番号 (= 核電荷、陽子数) であるが、核中に存在する中性子の数が異なり、このため質量数 (= 核子数、原子核に存在する核 (陽子および中性子) の数) が異なる。質量の他に、同位体は、核運動量 (核スピン)、磁気モーメントおよび電気四重極モーメントも異なる。

#### 【0019】

同位体の指定を明らかにするために、一般的に核に対する表記が使用される:  $^A_Z\text{X}$  ( $\text{X}$  = 元素記号、 $A$  = 質量、 $Z$  = 核電荷); したがって、炭素の安定した同位体に対しては  $^{12}_6\text{C}$  が使用され、または代りに、表記  $^{12}\text{C}$  または  $\text{C}-12$  が使用される。

40

#### 【0020】

元素炭素は、合計2つの安定な同位体 ( $^{12}\text{C}$  および  $^{13}\text{C}$ ) を有する。自然界には、98.9%の  $^{12}\text{C}$  および1.1%の  $^{13}\text{C}$  が存在する。これらの2つの安定な同位体に加えて、多くの不安定な同位体も存在する。最もよく知られている不安定な同位体は、5730年の半減期をもつ  $^{14}\text{C}$  である。  $^{14}\text{C}$  は、大気中の  $^{14}\text{N}$  から自然な核反応により形成される: 地球は、絶えず宇宙線にさらされており; この宇宙線が地球大気圏の最上層にぶつかる時、自由中性子を形成する。これらは、下層大気において空気の約80%を

50

構成する窒素と順に反応する。これは、下記の反応を伴う：



【 0 0 2 1 】

質量数 14 ( 7 個の中性子、7 個の陽子 ) である窒素原子の核は、1 個の中性子を取り込む。1 個の陽子を放出し、窒素原子は放射性炭素同位体  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  ( 8 個の中性子、6 個の陽子 ) を形成する。すなわち質量数は同じままである。これに対して、 ${}^1_6{}^{12}\text{C}$  は 6 個の中性子および 6 個の陽子を有し、すなわち、 ${}^1_6{}^{12}\text{C}$  は  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  より軽い。

【 0 0 2 2 】

大気中で生じた  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  は、存在する酸素と結合し、二酸化炭素を形成する。植物の光合成の結果、その後  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  は生物圏に入る。生物は、代謝する際に大気と炭素を絶えず交換しているため、大気中に存在するのと同様に 3 つの同位体 (  ${}^1_6{}^{12}\text{C}$  - 12、 ${}^1_6{}^{13}\text{C}$  - 13 および  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  ) の分布比が生体において確立される：生体は、 $10^{12}$  個の安定な  ${}^1_6{}^{12}\text{C}$  および  ${}^1_6{}^{13}\text{C}$  あたり約 1 . 2 個の放射性  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を含有する。

炭素がこのサイクルから取り除かれる ( すなわち、化石になる ) 場合、分解する  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体は、新しいものには取り替わらないため、 ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  と  ${}^1_6{}^{12}\text{C}$  との間の比率は変化する。

【 0 0 2 3 】

化石燃料、例えば鉱油、天然ガスまたは石炭は、100 万年以上に形成された。すなわち、もともと存在する  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体は分解され、新しい  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体は吸収されないため、これらの燃料はもはや  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  を含有していない。したがって、化石資源から生じた炭化水素は、いかなる  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体をも含有しない。

【 0 0 2 4 】

本発明は、 ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を含有する炭化水素混合物を提供する。

本発明の炭化水素混合物は、少なくとも 2 つの異なる炭化水素を含有する。本発明は、少なくとも 1 つの炭化水素が  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を含有する；好ましくは 2 つの異なる炭化水素が  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を含有する炭化水素混合物に関する。本発明の好ましい実施態様において、炭化水素混合物中に存在する全ての炭化水素は、 ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を含有する。

【 0 0 2 5 】

説明するために：本発明の炭化水素混合物が、n - ウンデカンおよび n - トリデカンを含む場合、少なくとも 1 つの炭化水素は  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を含有しなければならない。すなわち、n - ウンデカンまたは n - トリデカンのいずれかの炭化水素が、好ましくはいずれの炭化水素も  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を含有する。

【 0 0 2 6 】

本発明の好ましい実施態様において、 ${}^1_6{}^{12}\text{C}$  同位体に対する  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体の割合は、 $1 \times 10^{-16}$  以上、特に  $1 \times 10^{-15}$  以上、好ましくは  $7.5 \times 10^{-14}$  以上、好ましくは  $1.5 \times 10^{-13}$  以上、特に  $3 \times 10^{-13}$  以上、好ましくは  $6 \times 10^{-13} \sim 1.2 \times 10^{-12}$  の範囲内である。この参照パラメーターは、炭化水素混合物に存在する全ての炭化水素である。

【 0 0 2 7 】

試料の  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  含量は、液体シンチレーションスペクトロメータにおいて、計数管中の分解する  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を集計する ( リビー計数管法 ) ことにより、または加速器質量分析により測定することができる。加速器質量分析 ( 略 : AMS ) は、核物理分析法を用いて、非常に少量の試料中 ( ミリグラム範囲 ) の  ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体を、ppt ~ ppq の範囲 (  $10^{-12} \sim 10^{-16}$  ) で検出できる。

【 0 0 2 8 】

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が 1 を超えて異なる少なくとも 2 つの異なる炭化水素を含有し、かつ炭化水素の総量に基づいて、50 重量 % 以下、特に 20 重量 % 以下、特に 10 重量 % 以下、好ましくは 8 重量 % 以下、好ましくは 5 重量 % 以下、好ましくは 3 重量 % 以下、好ましくは 2 重量 % 以下、特に 1 重量 % 以下の分枝状炭化水素を含有する、 ${}^1_6{}^{14}\text{C}$  同位体含有炭化水素混合物に関する。

## 【0029】

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ炭化水素の総量に基づいて、20重量%以下、特に10重量%以下、好ましくは8重量%以下、好ましくは5重量%以下、好ましくは3重量%以下、好ましくは2重量%以下、特に1重量%以下の芳香族炭化水素を含有する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。本発明の好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、0.1重量%以下、特に0.01重量%以下、特に0.001重量%以下の芳香族炭化水素を含有する。

## 【0030】

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ炭化水素の総量に基づいて、50重量%以下、特に20重量%以下、特に10重量%以下、好ましくは8重量%以下、好ましくは5重量%以下、好ましくは3重量%以下、好ましくは2重量%以下、特に1重量%以下の不飽和炭化水素を含有する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。本発明の好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、0.1重量%以下、特に0.01重量%以下、特に0.001重量%以下の不飽和炭化水素を含有する。

## 【0031】

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ炭化水素の総量に基づいて、20重量%以下、特に15重量%以下、特に10重量%以下、好ましくは9重量%以下、好ましくは8重量%以下、好ましくは5重量%以下の偶数炭化水素を含有する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。

## 【0032】

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、2つの異なる炭化水素が、炭化水素の総量に基づいて、少なくとも50重量%、好ましくは少なくとも60重量%、好ましくは少なくとも70重量%、好ましくは少なくとも80重量%、好ましくは少なくとも90重量%を構成する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。

## 【0033】

これらの2つの異なる炭化水素が、炭素数が2異なる炭化水素である場合が好ましい。言い換えると、本発明の炭化水素混合物の好ましい実施態様において、炭化水素の総量に基づいて、少なくとも50重量%、好ましくは少なくとも60重量%、好ましくは少なくとも70重量%、好ましくは少なくとも80重量%、好ましくは少なくとも90重量%が、炭素数 $n$ の炭化水素および炭素数 $n+2$ の炭化水素からなる。

## 【0034】

〔直鎖状 $\text{C}_{11}$ および直鎖状 $\text{C}_{13}$ 炭化水素を含有する炭化水素混合物〕

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ直鎖状 $\text{C}_{11}$ および直鎖状 $\text{C}_{13}$ 炭化水素を含有する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。直鎖状 $\text{C}_{11}$ 炭化水素は、好ましくは $n$ -ウンデカンである。直鎖状 $\text{C}_{13}$ 炭化水素は、好ましくは $n$ -トリデカンである。本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状 $\text{C}_{11}$ および直鎖状 $\text{C}_{13}$ 炭化水素、および、 $\text{C}_{12}$ 、 $\text{C}_{15}$ 、 $\text{C}_{16}$ 、 $\text{C}_{17}$ 、 $\text{C}_{18}$ 、 $\text{C}_{19}$ 、 $\text{C}_{20}$ 、 $\text{C}_{21}$ および $\text{C}_{23}$ 炭化水素からなる群から選択される、好ましくは $\text{C}_{15}$ 、 $\text{C}_{17}$ 、 $\text{C}_{19}$ 、 $\text{C}_{21}$ および $\text{C}_{23}$ 炭化水素からなる群から選択される少なくとも1つのさらなる直鎖状炭化水素を含有する。直鎖状飽和炭化水素が好ましい。好適な直鎖状 $\text{C}_{15}$ 炭化水素は、 $n$ -ペンタデカンである；好適な直鎖状 $\text{C}_{17}$ 炭化水素は、 $n$ -ヘプタデカンである；好適な直鎖状 $\text{C}_{19}$ 炭化水素は、 $n$ -ノナデカンである。

## 【0035】

本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状 $\text{C}_{11}$ および直鎖状 $\text{C}_{13}$ 炭化水素、および少なくとも1つの直鎖状 $\text{C}_{15}$ 炭化水素および/または直鎖状 $\text{C}_{17}$ 炭化水素を含有する。好適な直鎖状 $\text{C}_{15}$ 炭化水素は $n$ -ペンタデカンである

10

20

30

40

50

；好適な直鎖状C 1 7炭化水素は、n - ヘプタデカンである。

【0036】

本発明の1つの実施態様は、炭化水素の総量に基づいて、

(a) 50 ~ 90重量%の直鎖状C - 11炭化水素、好ましくはn - ウンデカン

(b) 10 ~ 50重量%の直鎖状C - 13炭化水素、好ましくはn - トリデカン

を含有する、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

【0037】

炭化水素の総量に基づいて、

(a) 55 ~ 80重量%、特に60 ~ 75重量%、特に65 ~ 70重量%の直鎖状C 1 1炭化水素、好ましくはn - ウンデカン

(b) 20 ~ 45重量%、特に24 ~ 40重量%、特に24 ~ 30重量%の直鎖状C 1 3炭化水素、好ましくはn - トリデカン

を含有する、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物が特に好ましい。

【0038】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 3炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて、70重量%以上、特に80重量%以上、好ましくは90重量%以上、より好ましくは95重量%以上、特に99重量%以上であることを特徴とする<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C 1 3炭化水素に対する直鎖状C 1 1炭化水素の重量比は、1 . 5 ~ 3 . 5である。

【0039】

直鎖状C 1 1および/または直鎖状C 1 3炭化水素が飽和炭化水素である；好ましくは直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 3炭化水素のいずれもが飽和炭化水素(n - ウンデカンおよびn - トリデカン)である、本発明の炭化水素混合物が特に好ましい。

【0040】

好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に5重量%以下、好ましくは3重量%以下のC - 12炭化水素を含有する。

【0041】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 3炭化水素を含有し、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 3炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%以上であり、14以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて15重量%以下である、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。14以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、それぞれ炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に8重量%以下、好ましくは4重量%以下、特に2重量%以下である炭化水素混合物が特に好ましい。

【0042】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 3炭化水素を含有し、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 3炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%以上であり、10以下の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて3重量%以下、特に2重量%以下、好ましくは1 . 5重量%以下、特に1重量%以下である、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

【0043】

本発明の1つの実施態様において、本発明の炭化水素混合物はC 1 2およびC 1 4炭化水素を含有し、好ましくは、直鎖状C 1 1炭化水素と直鎖状C 1 3炭化水素と、互いに同じ重量比でC 1 2およびC 1 4炭化水素を含有する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C 1 1炭化水素の直鎖状C 1 3炭化水素に対する重量比、およびC 1 2炭化水素のC 1 4炭化水素に対する重量比は、いずれも1 . 5 ~ 3 . 5である。

【0044】

[直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素含有炭化水素混合物]

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素を含有する、<sup>14</sup>C同位体

10

20

30

40

50

含有炭化水素混合物に関する。直鎖状C 1 1炭化水素は、好ましくはn - ウンデカンである。直鎖状C 1 5炭化水素は、好ましくはn - ペンタデカンである。本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素、および、C 1 2、C 1 3、C 1 4、C 1 6、C 1 7、C 1 8、C 1 9、C 2 0、C 2 1およびC 2 3炭化水素からなる群から選択される、好ましくはC 1 3、C 1 7、C 1 9、C 2 1およびC 2 3炭化水素からなる群から選択される少なくとも1つのさらなる直鎖状炭化水素を含有する。直鎖状飽和炭化水素が好ましい。好適な直鎖状C 1 3炭化水素は、n - トリデカンである；好適な直鎖状C 1 7炭化水素は、n - ヘプタデカンである；好適な直鎖状C 1 9炭化水素は、n - ノナデカンである。

【0045】

10

本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素、および少なくとも1つの直鎖状C 1 3炭化水素および/または直鎖状C 1 7炭化水素を含有する。好適な直鎖状C 1 3炭化水素はn - トリデカンである；好適な直鎖状C 1 7炭化水素は、n - ヘプタデカンである。

【0046】

本発明の1つの実施態様は、炭化水素の総量に基づいて、  
(a) 50 ~ 90重量%の直鎖状C - 1 1炭化水素、好ましくはn - ウンデカン  
(b) 10 ~ 50重量%の直鎖状C - 1 5炭化水素、好ましくはn - ペンタデカン  
を含有する、<sup>1 4</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

【0047】

20

炭化水素の総量に基づいて、  
(a) 55 ~ 80重量%、特に60 ~ 75重量%、特に65 ~ 70重量%の直鎖状C 1 1炭化水素、好ましくはn - ウンデカン  
(b) 20 ~ 45重量%、特に24 ~ 40重量%、特に24 ~ 30重量%の直鎖状C 1 5炭化水素、好ましくはn - ペンタデカン  
を含有する、<sup>1 4</sup>C同位体含有炭化水素混合物が特に好ましい。

【0048】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて、70重量%以上、特に80重量%以上、好ましくは90重量%以上、より好ましくは95重量%以上、特に99重量%以上であることを特徴とする<sup>1 4</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C 1 5炭化水素に対する直鎖状C 1 1炭化水素の重量比は、1 . 5 ~ 3 . 5である。

30

【0049】

直鎖状C 1 1および/または直鎖状C 1 5炭化水素が飽和炭化水素である；好ましくは直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 3炭化水素のいずれもが飽和炭化水素(n - ウンデカンおよびn - ペンタデカン)である、本発明の炭化水素混合物が特に好ましい。

【0050】

好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に5重量%以下、好ましくは3重量%以下のC 1 2炭化水素を含有する。

【0051】

40

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素を含有し、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%以上であり、16以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて15重量%以下である、<sup>1 4</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。14以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、それぞれ炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に8重量%以下、好ましくは4重量%以下、特に2重量%以下である炭化水素混合物が特に好ましい。

【0052】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素を含有し、直鎖状C 1 1および直鎖状C 1 5炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%

50



以上であり、10以下の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて3重量%以下、特に2重量%以下、好ましくは1.5重量%以下、特に1重量%以下である、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。

【0053】

本発明の1つの実施態様において、本発明の炭化水素混合物はC12およびC16炭化水素を含有し、好ましくは、直鎖状C11炭化水素と直鎖状C15炭化水素と、互いに同じ重量比でC12およびC16炭化水素を含有する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C11炭化水素の直鎖状C15炭化水素に対する重量比、およびC12炭化水素のC16炭化水素に対する重量比は、いずれも1.5～3.5である。

【0054】

10

〔直鎖状C13および直鎖状C15炭化水素含有炭化水素混合物〕

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ直鎖状C13および直鎖状C15炭化水素を含有する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。直鎖状C13炭化水素は、好ましくはn-トリデカンである。直鎖状C15炭化水素は、好ましくはn-ペンタデカンである。本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状C13および直鎖状C15炭化水素、および、C11、C12、C14、C16、C17、C18、C19、C20、C21およびC23炭化水素からなる群から選択される、好ましくはC11、C17、C19、C21およびC23炭化水素からなる群から選択される少なくとも1つのさらなる直鎖状炭化水素を含有する。直鎖状飽和炭化水素が好ましい。好適な直鎖状C11炭化水素は、n-ウンデカンである；好適な直鎖状C17炭化水素は、n-ヘプタデカンである；好適な直鎖状C19炭化水素は、n-ノナデカンである。

20

【0055】

本発明の好ましい実施態様は、炭化水素の総量に基づいて、

(a) 50～90重量%の直鎖状C-13炭化水素、好ましくはn-トリデカン

(b) 10～50重量%の直鎖状C-15炭化水素、好ましくはn-ペンタデカン  
を含有する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。

【0056】

炭化水素の総量に基づいて、

(a) 55～80重量%、特に60～75重量%、特に65～70重量%の直鎖状C13炭化水素、好ましくはn-トリデカン

30

(b) 20～45重量%、特に24～40重量%、特に24～30重量%の直鎖状C15炭化水素、好ましくはn-ペンタデカン

を含有する、 $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物が特に好ましい。

【0057】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C13および直鎖状C15炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて、70重量%以上、特に80重量%以上、好ましくは90重量%以上、より好ましくは95重量%以上、特に99重量%以上であることを特徴とする $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物に関する。

本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C15炭化水素に対する直鎖状C13炭化水素の重量比は、1.5～3.5である。

40

【0058】

直鎖状C13および/または直鎖状C15炭化水素が飽和炭化水素である；好ましくは直鎖状C13および直鎖状C15炭化水素のいずれもが飽和炭化水素(n-トリデカンおよびn-ペンタデカン)である、本発明の炭化水素混合物が特に好ましい。

【0059】

好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に5重量%以下、好ましくは3重量%以下のC14炭化水素を含有する。

【0060】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C13および直鎖状C15炭化水素を含有し、直

50

鎖状C 1 3および直鎖状C 1 5炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%以上であり、16以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて15重量%以下である、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。16以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、それぞれ炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に8重量%以下、好ましくは4重量%以下、特に2重量%以下である炭化水素混合物が特に好ましい。

【0061】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 3および直鎖状C 1 5炭化水素を含有し、直鎖状C 1 3および直鎖状C 1 5炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%以上であり、12以下の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて3重量%以下、特に2重量%以下、好ましくは1.5重量%以下、特に1重量%以下である、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

10

【0062】

本発明の1つの実施態様において、本発明の炭化水素混合物はC 1 4およびC 1 6炭化水素を含有し、好ましくは、直鎖状C 1 3炭化水素と直鎖状C 1 5炭化水素と、互いに同じ重量比でC 1 4およびC 1 6炭化水素を含有する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C 1 3炭化水素の直鎖状C 1 5炭化水素に対する重量比、およびC 1 4炭化水素のC 1 6炭化水素に対する重量比は、いずれも1.5~3.5である。

【0063】

〔直鎖状C 1 5および直鎖状C 1 7炭化水素含有炭化水素混合物〕

20

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ直鎖状C 1 5および直鎖状C 1 7炭化水素を含有する、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。直鎖状C 1 5炭化水素は、好ましくはn-ペンタデカンである。直鎖状C 1 7炭化水素は、好ましくはn-ヘプタデカンである。本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状C 1 5および直鎖状C 1 7炭化水素、および、C 1 1、C 1 2、C 1 3、C 1 4、C 1 6、C 1 8、C 1 9、C 2 0、C 2 1およびC 2 3炭化水素からなる群から選択される、好ましくはC 1 1、C 1 3、C 1 9、C 2 1およびC 2 3炭化水素からなる群から選択される少なくとも1つのさらなる直鎖状炭化水素を含有する。直鎖状飽和炭化水素が好ましい。好適な直鎖状C 1 1炭化水素は、n-ウンデカンである；好適な直鎖状C 1 3炭化水素は、n-トリデカンである；好適な直鎖状C 1 9炭化水素は、n-ノナデカンである。

30

【0064】

本発明の好ましい実施態様は、炭化水素の総量に基づいて、

(a) 50~90重量%の直鎖状C 1 5炭化水素、好ましくはn-ペンタデカン

(b) 10~50重量%の直鎖状C 1 7炭化水素、好ましくはn-ヘプタデカン

を含有する、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

【0065】

炭化水素の総量に基づいて、

(a) 55~80重量%、特に60~75重量%、特に65~70重量%の直鎖状C 1 5炭化水素、好ましくはn-ペンタデカン

40

(b) 20~45重量%、特に24~40重量%、特に24~30重量%の直鎖状C 1 7炭化水素、好ましくはn-ヘプタデカン

を含有する、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物が特に好ましい。

【0066】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C 1 5および直鎖状C 1 7炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて、70重量%以上、特に80重量%以上、好ましくは90重量%以上、より好ましくは95重量%以上、特に99重量%以上であることを特徴とする<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C 1 7炭化水素に対する直鎖状C 1 5炭化水素の重量比は、1.5~3.5である。

50

## 【0067】

直鎖状C15および/または直鎖状C17炭化水素が飽和炭化水素である；好ましくは直鎖状C15および直鎖状C17炭化水素のいずれもが飽和炭化水素（n-ペンタデカンおよびn-ヘプタデカン）である、本発明の炭化水素混合物が特に好ましい。

## 【0068】

好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に5重量%以下、好ましくは3重量%以下のC16炭化水素を含有する。

## 【0069】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C15および直鎖状C17炭化水素を含有し、直鎖状C15および直鎖状C17炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%以上であり、18以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて15重量%以下である、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。18以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、それぞれ炭化水素の総量に基づいて、10重量%以下、特に8重量%以下、好ましくは4重量%以下、特に2重量%以下である炭化水素混合物が特に好ましい。

10

## 【0070】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状C15および直鎖状C17炭化水素を含有し、直鎖状C15および直鎖状C17炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて60重量%以上であり、14以下の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて3重量%以下、特に2重量%以下、好ましくは1.5重量%以下、特に1重量%以下である、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

20

## 【0071】

本発明の1つの実施態様において、本発明の炭化水素混合物はC16およびC18炭化水素を含有し、好ましくは、直鎖状C15炭化水素と直鎖状C17炭化水素と、互いに同じ重量比でC16およびC18炭化水素を含有する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状C15炭化水素の直鎖状C17炭化水素に対する重量比、およびC16炭化水素のC18炭化水素に対する重量比は、いずれも1.5~3.5である。

## 【0072】

〔直鎖状C17および直鎖状C19炭化水素含有炭化水素混合物〕

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が1を超えて異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有し、かつ直鎖状C17および直鎖状C19炭化水素を含有する、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。直鎖状C17炭化水素は、好ましくはn-ヘプタデカンである。直鎖状C19炭化水素は、好ましくはn-ノナデカンである。本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状C17および直鎖状C19炭化水素、および、C11、C12、C13、C14、C15、C16、C18、C20、C21およびC23炭化水素からなる群から選択される、好ましくはC11、C13、C15、C21およびC23炭化水素からなる群から選択される少なくとも1つのさらなる直鎖状炭化水素を含有する。直鎖状飽和炭化水素が好ましい。好適な直鎖状C11炭化水素は、n-ウンデカンである；好適な直鎖状C13炭化水素は、n-トリデカンである；好適な直鎖状C15炭化水素は、n-ペンタデカンである。特に好ましいさらなる直鎖状炭化水素は、n-ヘネイコサン（C21直鎖状、飽和）である。

30

40

## 【0073】

本発明の好ましい実施態様は、炭化水素の総量に基づいて、

(a) 50~90重量%の直鎖状C17炭化水素、好ましくはn-ヘプタデカン

(b) 10~50重量%の直鎖状C19炭化水素、好ましくはn-ノナデカン

を含有する、<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物に関する。

## 【0074】

炭化水素の総量に基づいて、

(a) 55~80重量%、特に60~75重量%、特に65~70重量%の直鎖状C17炭化水素、好ましくはn-ヘプタデカン

50

(b) 20 ~ 45 重量%、特に 24 ~ 40 重量%、特に 24 ~ 30 重量%の直鎖状 C 19 炭化水素、好ましくは n - ノナデカン  
を含有する、<sup>14</sup>C 同位体含有炭化水素混合物が特に好ましい。

【0075】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状 C 17 および直鎖状 C 19 炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて、70 重量%以上、特に 80 重量%以上、好ましくは 90 重量%以上、より好ましくは 95 重量%以上、特に 99 重量%以上であることを特徴とする<sup>14</sup>C 同位体含有炭化水素混合物に関する。

本発明の好ましい実施態様において、直鎖状 C 19 炭化水素に対する直鎖状 C 17 炭化水素の重量比は、1.5 ~ 3.5 である。

【0076】

直鎖状 C 17 および / または直鎖状 C 19 炭化水素が飽和炭化水素である；好ましくは直鎖状 C 17 および直鎖状 C 19 炭化水素のいずれもが飽和炭化水素 (n - ヘプタデカン および n - ノナデカン) である、本発明の炭化水素混合物が特に好ましい。

【0077】

好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、10 重量%以下、特に 5 重量%以下、好ましくは 3 重量%以下の C 18 炭化水素を含有する。

【0078】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状 C 17 および直鎖状 C 19 炭化水素を含有し、直鎖状 C 17 および直鎖状 C 19 炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 60 重量%以上であり、20 以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 15 重量%以下である、<sup>14</sup>C 同位体含有炭化水素混合物に関する。18 以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、それぞれ炭化水素の総量に基づいて、10 重量%以下、特に 8 重量%以下、好ましくは 4 重量%以下、特に 2 重量%以下である炭化水素混合物が特に好ましい。

【0079】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状 C 17 および直鎖状 C 19 炭化水素を含有し、直鎖状 C 17 および直鎖状 C 19 炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 60 重量%以上であり、16 以下の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 3 重量%以下、特に 2 重量%以下、好ましくは 1.5 重量%以下、特に 1 重量%以下である、<sup>14</sup>C 同位体含有炭化水素混合物に関する。

【0080】

本発明の 1 つの実施態様において、本発明の炭化水素混合物は C 18 および C 20 炭化水素を含有し、好ましくは、直鎖状 C 17 炭化水素と直鎖状 C 19 炭化水素と、互いに同じ重量比で C 18 および C 20 炭化水素を含有する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状 C 17 炭化水素の直鎖状 C 19 炭化水素に対する重量比、および C 18 炭化水素の C 20 炭化水素に対する重量比は、いずれも 1.5 ~ 3.5 である。

【0081】

〔直鎖状 C 19 および直鎖状 C 21 炭化水素含有炭化水素混合物〕

本発明の好ましい実施態様は、炭素数が 1 を超えて異なる少なくとも 2 つの異なる炭化水素を含有し、かつ直鎖状 C 19 および直鎖状 C 21 炭化水素を含有する、<sup>14</sup>C 同位体含有炭化水素混合物に関する。直鎖状 C 19 炭化水素は、好ましくは n - ノナデカンである。直鎖状 C 21 炭化水素は、好ましくは n - ヘネイコサンである。本発明の好ましい実施態様において、本発明の炭化水素混合物は、直鎖状 C 19 および直鎖状 C 21 炭化水素、および、C 11、C 12、C 13、C 14、C 15、C 16、C 17、C 18、C 20 および C 23 炭化水素からなる群から選択される、好ましくは C 11、C 13、C 15、C 17 および C 23 炭化水素からなる群から選択される少なくとも 1 つのさらなる直鎖状炭化水素を含有する。直鎖状飽和炭化水素が好ましい。好適な直鎖状 C 11 炭化水素は、n - ウンデカンである；好適な直鎖状 C 13 炭化水素は、n - トリデカンである；好適な直鎖状 C 17 炭化水素は、n - ヘプタデカンである。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 8 2 】

本発明の好ましい実施態様は、炭化水素の総量に基づいて、

( a ) 5 0 ~ 9 0 重量 % の直鎖状 C 1 9 炭化水素、好ましくは n - ノナデカン

( b ) 1 0 ~ 5 0 重量 % の直鎖状 C 2 1 炭化水素、好ましくは n - ヘネイコサン

を含有する、<sup>1</sup> <sup>4</sup> C 同位体含有炭化水素混合物に関する。

## 【 0 0 8 3 】

炭化水素の総量に基づいて、

( a ) 5 5 ~ 8 0 重量 %、特に 6 0 ~ 7 5 重量 %、特に 6 5 ~ 7 0 重量 % の直鎖状 C 1 9 炭化水素、好ましくは n - ノナデカン

( b ) 2 0 ~ 4 5 重量 %、特に 2 4 ~ 4 0 重量 %、特に 2 4 ~ 3 0 重量 % の直鎖状 C 2 1 炭化水素、好ましくは n - ヘネイコサン

を含有する、<sup>1</sup> <sup>4</sup> C 同位体含有炭化水素混合物が特に好ましい。

## 【 0 0 8 4 】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状 C 1 9 および直鎖状 C 2 1 炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて、7 0 重量 % 以上、特に 8 0 重量 % 以上、好ましくは 9 0 重量 % 以上、より好ましくは 9 5 重量 % 以上、特に 9 9 重量 % 以上であることを特徴とする<sup>1</sup> <sup>4</sup> C 同位体含有炭化水素混合物に関する。

本発明の好ましい実施態様において、直鎖状 C 2 1 炭化水素に対する直鎖状 C 1 9 炭化水素の重量比は、1 . 5 ~ 3 . 5 である。

## 【 0 0 8 5 】

直鎖状 C 1 9 および / または直鎖状 C 2 1 炭化水素が飽和炭化水素である ; 好ましくは直鎖状 C 1 9 および直鎖状 C 2 1 炭化水素のいずれもが飽和炭化水素 ( n - ノナデカンおよび n - ヘネイコサン ) である、本発明の炭化水素混合物が特に好ましい。

## 【 0 0 8 6 】

好ましい実施態様において、炭化水素混合物は、炭化水素の総量に基づいて、1 0 重量 % 以下、特に 5 重量 % 以下、好ましくは 3 重量 % 以下の C 2 0 炭化水素を含有する。

## 【 0 0 8 7 】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状 C 1 9 および直鎖状 C 2 1 炭化水素を含有し、直鎖状 C 1 9 および直鎖状 C 2 1 炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 6 0 重量 % 以上であり、2 2 以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 1 5 重量 % 以下である、<sup>1</sup> <sup>4</sup> C 同位体含有炭化水素混合物に関する。2 2 以上の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、それぞれ炭化水素の総量に基づいて、1 0 重量 % 以下、特に 8 重量 % 以下、好ましくは 4 重量 % 以下、特に 2 重量 % 以下である炭化水素混合物が特に好ましい。

## 【 0 0 8 8 】

本発明の好ましい実施態様は、直鎖状 C 1 9 および直鎖状 C 2 1 炭化水素を含有し、直鎖状 C 1 9 および直鎖状 C 2 1 炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 6 0 重量 % 以上であり、1 8 以下の炭素鎖長を有する炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて 3 重量 % 以下、特に 2 重量 % 以下、好ましくは 1 . 5 重量 % 以下、特に 1 重量 % 以下である、<sup>1</sup> <sup>4</sup> C 同位体含有炭化水素混合物に関する。

## 【 0 0 8 9 】

本発明の 1 つの実施態様において、本発明の炭化水素混合物は C 2 0 および C 2 2 炭化水素を含有し、好ましくは、直鎖状 C 1 9 炭化水素と直鎖状 C 2 1 炭化水素と、互いに同じ重量比で C 2 0 および C 2 2 炭化水素を含有する。本発明の好ましい実施態様において、直鎖状 C 1 9 炭化水素の直鎖状 C 2 1 炭化水素に対する重量比、および C 2 0 炭化水素の C 2 2 炭化水素に対する重量比は、いずれも 1 . 5 ~ 3 . 5 である。

## 【 0 0 9 0 】

本発明の炭化水素混合物は、特に化粧品および / または医薬品製剤における使用のために、特に油体および / または分散体として適当である。

## 【 0 0 9 1 】

さらに、本発明は、請求項 1 ~ 13 のいずれかに記載された炭化水素混合物を、化粧品のおよび / または医薬的な適当な担体に添加する、化粧品および / または医薬品製剤の製造方法を提供する。

本発明の炭化水素混合物は、特に皮膚および / または毛髪ケア用の化粧品製剤における使用に適している。

本発明の炭化水素混合物は、特に日焼け防止用の化粧品製剤における使用に適している。

#### 【 0 0 9 2 】

本発明の炭化水素混合物は、特に装飾用化粧品製剤、例えば口紅、リップグロス、アイシャドー、マスカラ、アイペンシル（コール）、マニキュア溶液、および全ての種類のメイクアップ製剤（パウダー、クリーム、ファンデーション、カバースティック等）における使用に適している。

10

#### 【 0 0 9 3 】

本発明の炭化水素混合物は、特に皮膚および / 毛髪の洗浄用製剤、例えばシャンプー、シャワージェル、入浴剤、コンディショナー等における使用に適している。

#### 【 0 0 9 4 】

本発明の炭化水素混合物は、微細エマルジョン、例えばナノエマルジョン、マイクロエマルジョンまたは P I T エマルジョンの製造にも適している。このような微細エマルジョンにおいて、油滴は通常、10 ~ 1000 nm の、好ましくは 100 ~ 500 nm の範囲の直径で存在する。これらは、例えば、Wadle 等による Parfuemerie und Kosmetik（Perfumery and Cosmetics）、第 77 巻、No.4/96、第 250 ~ 254 頁に記載された P I T エマルジョンの製造方法のような当業者に既知の方法により製造される。

20

#### 【 0 0 9 5 】

##### 〔炭化水素混合物の製造〕

本発明の炭化水素混合物は、例えば、植物性脂肪アルコールの還元的脱メチル化により得ることができる。本発明の炭化水素混合物を製造するための特に適当な方法は、国際出願 P C T / E P 2 0 0 6 / 0 1 1 6 4 7（Cognis）に記載される、植物由来の脂肪アルコールからの還元的脱ヒドロキシメチル化の方法である。この方法において、例えば、所望の炭素鎖長の脂肪アルコールに対して上記方法中の個々の工程を施し、その結果得られる炭化水素を混合し、本発明の炭化水素混合物を得ることができる。しかしながら、対応する脂肪アルコールを含有する混合物を直接還元的脱ヒドロキシメチル化することが好ましく、その結果直接的に得られる反応生成物は本発明の炭化水素混合物である。その後、これは、さらなる精製なしに、直接的に化粧品および / または医薬品製剤に使用することができる。

30

#### 【 0 0 9 6 】

##### 〔化粧品および / または医薬品製剤〕

さらに、本発明は、0.1 ~ 80 重量%、好ましくは 5 ~ 50 重量%、特に 10 ~ 30 重量%の<sup>14</sup>C 含有炭化水素混合物を含む化粧品および / または医薬品製剤に関する。重量%は、化粧品および / または医薬品製剤の総重量に基づく。

#### 【 0 0 9 7 】

本発明の製剤中に存在する炭化水素混合物は、常に、少なくとも 2 つの異なる炭化水素の混合物である。これらは、1、2、3、4 個等の炭素原子により炭素数が異なっていてよい。好ましい実施態様において、化粧品および / または医薬品製剤は、炭素数が 1 を超えて、好ましくは 2 異なる炭化水素を含有する。

40

#### 【 0 0 9 8 】

本発明の製剤において存在する炭化水素混合物中の<sup>14</sup>C 同位体の<sup>12</sup>C 同位体に対する割合は、 $1 \times 10^{-16}$  以上、特に  $1 \times 10^{-15}$  以上、好ましくは  $7.5 \times 10^{-14}$  以上、好ましくは  $1.5 \times 10^{-13}$  以上、特に  $3 \times 10^{-13}$  以上である；本発明の製剤において存在する炭化水素混合物中の<sup>14</sup>C 同位体の<sup>12</sup>C 同位体に対する割合は、好ましくは  $6 \times 10^{-13} \sim 1.2 \times 10^{-12}$  の範囲内である。

50

## 【 0 0 9 9 】

本発明の製剤に存在する炭化水素混合物は、好ましくは、少なくとも1つの $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素を含有し、好ましくは2つの異なる $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素を含有する。より好ましくは、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる、2つの異なる炭化水素が $^{14}\text{C}$ 同位体を含有する。

## 【 0 1 0 0 】

好ましい実施態様において、本発明の化粧品および/または医薬品製剤は、炭化水素の総量に基づいて、50重量%以下、特に20重量%以下、10重量%以下、好ましくは5重量%以下、特に1重量%以下の分枝状炭化水素を含む炭化水素混合物を含有する。

## 【 0 1 0 1 】

化粧品および/または医薬品製剤におけるパラメーター「炭化水素の総量」は、炭素数に関係なく、化粧品および/または医薬品製剤中に存在する全ての炭化水素を包含する。

## 【 0 1 0 2 】

好ましい実施態様において、本発明の化粧品および/または医薬品製剤は、炭化水素の総量に基づいて、20重量%以下、特に10重量%以下、好ましくは5重量%以下、好ましくは1重量%以下の芳香族炭化水素を含む炭化水素混合物を含有する。本発明の好ましい実施態様において、本発明の製剤は、炭化水素の総量に基づいて、0.1重量%以下、特に0.01重量%以下、特に0.001重量%以下の芳香族炭化水素を含有する。

## 【 0 1 0 3 】

好ましい実施態様において、本発明の化粧品および/または医薬品製剤は、炭化水素の総量に基づいて、50重量%以下、特に20重量%以下、特に10重量%以下、特に5重量%以下、好ましくは1重量%以下の不飽和炭化水素を含む炭化水素混合物を含有する。本発明の好ましい実施態様において、本発明の製剤は、炭化水素の総量に基づいて、0.1重量%以下、特に0.01重量%以下、特に0.001重量%以下の不飽和炭化水素を含有する。

## 【 0 1 0 4 】

好ましい実施態様において、本発明の化粧品および/または医薬品製剤は、炭化水素の総量に基づいて、20重量%以下、特に15重量%以下、特に10重量%以下、好ましくは9重量%以下、特に8重量%以下、特に5重量%以下の偶数炭化水素を含む炭化水素混合物を含有する。

## 【 0 1 0 5 】

さらに、本発明は、 $^{14}\text{C}$ を含有し、2つの異なる炭化水素が、炭化水素の総量に基づいて、少なくとも50重量%、好ましくは60重量%を構成する炭化水素混合物を、0.1~80重量%、好ましくは5~50重量%、特に10~30重量%含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

## 【 0 1 0 6 】

2つの異なる炭化水素の総量が、炭化水素の総量に基づいて、70重量%以上、特に80重量%以上、好ましくは90重量%以上、より好ましくは95重量%以上、特に99重量%以上である化粧品および/または医薬品製剤が、特に好ましい。本発明の1つの実施態様において、化粧品および/または医薬品製剤の炭化水素混合物は、もっぱら2つの異なる炭化水素のみからなる。

## 【 0 1 0 7 】

好ましい実施態様において、本発明の化粧品および/または医薬品製剤は、 $^{14}\text{C}$ 同位体を含有し、2つの異なる炭化水素が、

- 直鎖状C<sub>11</sub>および直鎖状C<sub>13</sub>炭化水素、
- 直鎖状C<sub>11</sub>および直鎖状C<sub>15</sub>炭化水素、
- 直鎖状C<sub>13</sub>および直鎖状C<sub>15</sub>炭化水素、
- 直鎖状C<sub>15</sub>および直鎖状C<sub>17</sub>炭化水素、
- 直鎖状C<sub>17</sub>および直鎖状C<sub>19</sub>炭化水素および/または
- 直鎖状C<sub>19</sub>および直鎖状C<sub>21</sub>炭化水素

10

20

30

40

50

からなる群から選択される炭化水素混合物を、0.1～80重量%、好ましくは5～50重量%、特に10～30重量%含有する。

【0108】

これらの製剤は、例えば、本発明の炭化水素混合物を用いることにより、または規定量の個々の炭化水素を用いることにより得ることができる。

【0109】

炭化水素の総量に基づいて、

- 炭素数  $n$  の炭化水素を50～90重量%含有し、
- 炭素数  $n + 2$  の炭化水素を10～50重量%含有する [  $n$  は7～23の整数、好ましくは11～21である ]、

$^{14}\text{C}$  同位体含有炭化水素混合物を0.1～80重量%含む化粧品および/または医薬品製剤が、特に好ましく挙げられる。

【0110】

炭化水素の総量に基づいて、

- 炭素数  $n$  の炭化水素を55～80重量%、特に60～75重量%、特に65～70重量%含有し、
- 炭素数  $n + 2$  の炭化水素を20～45重量%、特に24～40重量%、特に24～30重量%含有する [  $n$  は7～23の整数、好ましくは11～21である ]、

$^{14}\text{C}$  同位体含有炭化水素混合物を0.1～80重量%含む化粧品および/または医薬品製剤が、特に好ましく挙げられる。

【0111】

本発明の好ましい実施態様において、化粧品および/または医薬品製剤における炭素数  $n$  の炭化水素と炭素数  $n + 2$  の炭化水素の重量比は、1.5～3.5である。

【0112】

本発明の化粧品および/または医薬品製剤は、軽く、安定な化粧品および/または医薬品製剤であり、特に、それらがさらに制汗/脱臭成分を含有する場合に軽く、安定である。

【0113】

したがって、本発明は、0.1～80重量%の $^{14}\text{C}$  同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つの制汗/脱臭活性成分を含有する化粧品および/または医薬品製剤に関する。

【0114】

本発明によれば、適当な制汗/脱臭活性成分は、体臭を中和し、隠し、除去する全ての活性成分である。体臭は、アポクリン腺発汗での皮膚細菌の作用により形成され、不快臭の分解生成物が形成される。適当な制汗/脱臭活性成分は、制汗剤、エステルゼ阻害剤、殺菌または静菌活性成分および/または汗吸着物質からなる群から選択される特定の化合物である。

【0115】

〔制汗剤〕

制汗剤は、アルミニウム、ジルコニウムまたは亜鉛の塩である。そのような適当なアンチハイドロティック (antihydrotic) 活性成分は、例えばアルミニウムクロリド、アルミニウムクロロヒドレート、アルミニウムジクロロヒドレート、アルミニウムセスキクロロヒドレート、およびそれらと例えば1,2-プロピレングリコールとの錯体、アルミニウムヒドロキシアラントイネート、アルミニウムクロリドタートレート、アルミニウムジルコニウムトリクロロヒドレート、アルミニウムジルコニウムテトラクロロヒドレート、アルミニウムジルコニウムペンタクロロヒドレート、およびそれらと例えばグリシンのようなアミノ酸との錯体である。アルミニウムクロロヒドレート、アルミニウムジルコニウムテトラクロロヒドレート、アルミニウムジルコニウムペンタクロロヒドレートおよびそれらの錯体が好ましく挙げられる。

【0116】



本発明の製剤は、化粧品および／または医薬品製剤の総重量に基づいて、1～50重量%、好ましくは5～30重量%、特に8～25重量%の量の制汗剤を含有し得る。

【0117】

〔エステラーゼ阻害剤〕

脇の下での発汗において、細菌は細胞外酵素（エステラーゼ、好ましくはプロテアーゼおよび／またはリパーゼ）を形成する。それらは汗に存在するエステルを開裂し、その結果臭気物質を放出する。適当なエステラーゼ阻害剤は、好ましくはクエン酸トリアルキル、例えばクエン酸トリメチル、クエン酸トリプロピル、クエン酸トリイソプロピル、クエン酸トリブチル、および特にクエン酸トリエチル（独国デュッセルドルフ、Cognis GmbH、Hydagen（登録商標）CAT）である。該物質は、酵素活性を阻害し、それにより臭気形成を減少させる。他のエステラーゼ阻害剤は、ステロールスルフェートまたはホスフェート、例えばラノステロール、コレステロール、カンペステロール、スチグマステロールおよびシトステロールスルフェートまたはホスフェート、ジカルボン酸およびそのエステル、例えばグルタル酸、グルタル酸モノエチルエステル、グルタル酸ジエチルエステル、アジピン酸、アジピン酸モノエチルエステル、アジピン酸ジエチルエステル、マロン酸およびマロン酸ジエチルエステル、ヒドロキシカルボン酸およびそのエステル、例えばクエン酸、リンゴ酸、酒石酸または酒石酸ジエチルエステル、および亜鉛グリシネートである。

10

【0118】

本発明の製剤は、化粧品および／または医薬品製剤の総重量に基づいて、0.01～20重量%、好ましくは0.1～10重量%、特に0.3～5重量%の量のエステラーゼ阻害剤を含有し得る。

20

【0119】

〔殺菌または静菌活性成分〕

適当な殺菌または静菌活性成分の典型例は、特にキトサンおよびフェノキシエタノールである。5-クロロ-2-(2,4-ジクロロフェノキシ)フェノールも特に効果的であることが見出されており、これはスイス、バーゼルのCiba-GeigyよりIrgasan（登録商標）の商標の下販売されている。適当な殺菌剤は、原則として、グラム陽性菌に対して作用する全ての物質、例えば、4-ヒドロキシ安息香酸およびその塩ならびにそのエステル、N-(4-クロロフェニル)-N'-(3,4-ジクロロフェニル)尿素、2,4,4'-トリクロロ-2'-ヒドロキシジフェニルエーテル（トリクロサン）、4-クロロ-3,5-ジメチルフェノール、2,2'-メチレンビス(6-ブromo-4-クロロフェノール)、3-メチル-4-(1-メチルエチル)フェノール、2-ベンジル-4-クロロフェノール、3-(4-クロロフェニル)-1,2-プロパンジオール、3-ヨード-2-プロピニルブチルカルバメート、クロロヘキシジン、3,4,4'-トリクロロカーバニリド（TTC）、抗細菌香料、チモール、タイム油、オイゲノール、チョウジ油、メントール、ミント油、ファルネソール、フェノキシエタノール、グリセリルモノカプレート、グリセリルモノカプリレート、グリセリルモノラウレート（GML）、ジグリセリルモノカプレート（DMC）、N-アルキルサリチルアミド、例えば、n-オクチルサリチルアミドまたはn-デシルサリチルアミドである。

30

【0120】

本発明の製剤は、化粧品および／または医薬品製剤の総重量に基づいて、0.01～50重量%、好ましくは0.1～2重量%の量の殺菌または静菌活性物質を含有し得る。

40

【0121】

〔汗吸着物質〕

使用し得る汗吸着物質は、変成デンプン、例えばDry Flo Plus（National Starch）、ケイ酸塩、タルクおよび汗の吸着に適当であると思われる他の同様の多形物質である。本発明の製剤は、化粧品および／または医薬品製剤の総重量に基づいて、0.1～30重量%、好ましくは1～20重量%、特に2～8重量%の量の汗吸着物質を含有し得る。

【0122】

本発明の化粧品および／または医薬品製剤は、軽く、安定な化粧品および／または医薬

50

品製剤であり、特に、それらがさらに少なくとも1つのUV光防護フィルターを含有する場合に軽く、安定である。

#### 【0123】

したがって、本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つのUV光防護フィルターを含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0124】

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含有し、かつ炭化水素が、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つのUV光防護フィルターを含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0125】

本発明によれば、適当なUV光防護フィルターは、室温で液体または結晶状であって、紫外線を吸収して、その吸収したエネルギーをより長波長の放射線（例えば熱）の形で放出することのできる有機物質（光防護フィルター）である。UVフィルターは、油溶性または水溶性であり得る。油溶性UV-Bフィルターまたは広域スペクトルUV-A/Bフィルターの典型例には以下のものが含まれる：

- ・EP0693471B1に記載されるような3-ベンジリデンカンファーまたは3-ベンジリデンノルカンファー（Mexoryl SDS 20）およびその誘導体、例えば、3-（4-メチルベンジリデン）カンファー；
- ・3-（4'-トリメチルアンモニウム）ベンジリデンボルナン-2-オンメチルスルフェート（Mexoryl SO）；
- ・3,3'-（1,4-フェニレンジメチン）ビス（7,7-ジメチル-2-オキソビシクロ[2.2.1]ヘプタン-1-メタンスルホン酸）およびその塩（Mexoryl SX）；
- ・3-（4'-スルホ）ベンジリデンボルナン-2-オンおよびその塩（Mexoryl SL）；
- ・N-｛（2および4）-[2-オキソボルン-3-イリデン]-メチル｝ベンジル]アクリルアミド（Mexoryl SW）のポリマー；
- ・2-（2H-ベンゾトリアゾール-2-イル）-4-メチル-6-（2-メチル-3-（1,3,3,3-テトラメチル-1-（トリメチルシリルオキシ）-ジシロキサニル）プロピル）フェノール（Mexoryl SL）；
- ・4-アミノ安息香酸誘導体、好ましくは2-エチルヘキシル4-（ジメチルアミノ）ベンゾエート、2-オクチル4-（ジメチルアミノ）ベンゾエートおよびアミル4-（ジメチル-アミノ）ベンゾエート；
- ・桂皮酸のエステル、好ましくは2-エチルヘキシル4-メトキシシンナメート、プロピル4-メトキシシンナメート、イソアミル4-メトキシシンナメート、2-エチルヘキシル2-シアノ-3,3-フェニルシンナメート（オクトクリレン）；
- ・サリチル酸エステル、好ましくは2-エチルヘキシルサリチレート、4-イソプロピルベンジルサリチレート、ホモ-メンチルサリチレート；
- ・ベンゾフェノン誘導体、好ましくは2-ヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン、2-ヒドロキシ-4-メトキシ-4'-メチルベンゾフェノン、2,2'-ジヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン；
- ・ベンザルマロン酸のエステル、好ましくはジ-2-エチルヘキシル4-メトキシベンズマロネート；
- ・EP0818450A1に記載されるようなトリアジン誘導体、例えば、2,4,6-トリアニリノ（p-カルボ-2'-エチル-1'-ヘキシルオキシ）-1,3,5-トリアジンおよび2,4,6-トリス[p-（2-エチルヘキシルオキシ-カルボニル）アニリノ]-1,3,5-トリアジン（Uvinul T 150）、またはビス（2-エチルヘキシル）4,4'-[（6-[4-（（1,1-ジメチルエチル）アミノカルボニル）-フェニルアミノ]-1,3,5-トリアジン-2,4-ジイル）ジイミノ]-ベンゾエート（Uvasorb（登録商標）HEB）；

10

20

30

40

50

- ・ 2, 2 - (メチレンビス(6 - (2 H - ベンゾトリアゾール - 2 - イル) - 4 - (1, 1, 3, 3 - テトラメチルブチル)フェノール) (Tinosorb M) ;
- ・ 2, 4 - ビス[4 - (2 - エチルヘキシルオキシ) - 2 - ヒドロキシフェニル] - 6 - (4 - メトキシフェニル) - 1, 3, 5 - トリアジン (Tinosorb S) ;
- ・ プロパン - 1, 3 - ジオン、例えば、1 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 3 - (4' - メトキシフェニル) プロパン - 1, 3 - ジオン ;
- ・ EP 0 6 9 4 5 2 1 B 1 に記載されるようなケトトリシクロ(5 . 2 . 1 . 0)デカン誘導体 ;
- ・ ジメチコジエチルベンザルマロネート (Parsol SLX)。

## 【0126】

使用し得る水溶性UVフィルターには以下の物が含まれる :

- ・ 2 - フェニルベンズイミダゾール - 5 - スルホン酸およびそのアルカリ金属塩、アルカリ土類金属塩、アンモニウム塩、アルキルアンモニウム塩、アルカノールアンモニウム塩およびグルカンモニウム塩 ;
- ・ 2, 2 - ((1, 4 - フェニレン)ビス(1 H - ベンズイミダゾール - 4, 6 - ジスルホン酸、モノナトリウム塩) (Neo Heliopan AP) ;
- ・ ベンゾフェノンのスルホン酸誘導体、好ましくは、2 - ヒドロキシ - 4 - メトキシベンゾフェノン - 5 - スルホン酸およびその塩 ;
- ・ 3 - ベンジリデンカンファールのスルホン酸誘導体例えば 4 - (2 - オキソ - 3 - ボルニリデンメチル) - ベンゼンスルホン酸および 2 - メチル - 5 - (2 - オキソ - 3 - ボルニリデン) - スルホン酸ならびにその塩。

## 【0127】

使用し得る典型的なUV - Aフィルターは、特に、DE 1 9 7 1 2 0 3 3 A 1 (BASF) に記載されるようなベンゾイルメタンの誘導体、例えば、1 - (4' - tert - ブチルフェニル) - 3 - (4' - メトキシフェニル) - プロパン - 1, 3 - ジオン、4 - tert - ブチル - 4' - メトキシジベンゾイルメタン (Parsol (登録商標) 1789) または 1 - フェニル - 3 - (4' - イソプロピルフェニル) - プロパン - 1, 3 - ジオンおよびエナミン化合物、ならびに安息香酸、2 - [4 - (ジエチルアミノ) - 2 - ヒドロキシ - ベンゾイル]ヘキシルエステル (Uvinul (登録商標) A plus) である。

## 【0128】

UV - AフィルターとUV - Bフィルターをもちろん混合物として使用できる。特に好ましい組み合わせは、ベンゾイルメタンの誘導体、例えば 4 - tert - ブチル - 4' - メトキシジベンゾイルメタン (Parsol (登録商標) 1789) および 2 - エチルヘキシル 2 - シアノ - 3, 3 - フェニルシンナメート (オクトクリレン) と桂皮酸エステル、好ましくは 2 - エチルヘキシル 4 - メトキシシンナメートおよび / またはプロピル 4 - メトキシシンナメートおよび / またはイソアミル 4 - メトキシシンナメートとの組み合わせからなる。このような組み合わせを、有利には、水溶性フィルター、例えば 2 - フェニルベンズイミダゾール - 5 - スルホン酸およびそのアルカリ金属塩、アルカリ土類金属塩、アンモニウム塩、アルキルアンモニウム塩、アルカノールアンモニウム塩およびグルカンモニウム塩と組み合わせる。

## 【0129】

適当なUV光防護フィルターは、特に、委員会指令 Annex VII (技術的進歩に Annex VII を適合させるための、化粧品に関する理事会指令 76 / 768 / EEC を改正する 2005 年 1 月 28 日の委員会指令 2005 / 9 / EC) により認可された物質である。これを、ここで明らかに参照する。

## 【0130】

上述した可溶性物質に加えて、不溶性光防護顔料、特に微分散金属酸化物および塩もこの目的のために使用し得る。適当な金属酸化物の例は、特に酸化亜鉛および二酸化チタン、さらに鉄、ジルコニウム、ケイ素、マンガ、アルミニウムおよびセリウムの酸化物、ならびにそれらの混合物である。使用し得る塩は、ケイ酸塩 (タルク)、硫酸バリウムま

10

20

30

40

50

たはステアリン酸亜鉛であり得る。該酸化物および塩は、スキンケアおよび皮膚防護エマルジョン、また装飾用化粧品に対して顔料の形態で用いられる。粒子の平均径は、100 nm未満、好ましくは5 ~ 50 nmの間、特に15 ~ 30 nmの間であるべきである。これらは球形であってもよいが、楕円形または球形からその他の方法で偏った形状を有する粒子を使用することもできる。該顔料は表面処理された状態、すなわち親水化または疎水化処理された状態で存在してもよい。それらの典型的な例は、コーティングされた二酸化チタン、例えば、二酸化チタンT 805 (Degussa) またはEusolex (登録商標) T、Eusolex (登録商標) T-2000、Eusolex (登録商標) T Aqua、Eusolex (登録商標) AV0、Eusolex (登録商標) T-ECO、Eusolex (登録商標) T-OLEOおよびEusolex (登録商標) T-S (Merck) である。酸化亜鉛の典型的な例は、例えば中性酸化亜鉛、酸化亜鉛NDM (Symrise) またはZ-Cote (登録商標) (BASF) またはSUNZnO-ASおよびSUNZnO-NAS (Sunjun Chemical Co. Ltd.) である。適当な疎水性コーティング剤は、特にシリコンであり、具体的にはトリアルコキシオクチルシランまたはシメチコンである。日焼け防止組成物においては、マイクロ顔料またはナノ顔料を使用することが好ましい。微粉酸化亜鉛を用いることが好ましい。他の適当なUV光防護フィルターは、P. Finkel、SOEFW Journal 122、8/1996、第543 ~ 548頁およびParf. Kosm. 第80巻、No.3/1999、第10 ~ 16頁の概説において見出すことができる。

#### 【0131】

前記の第1の光防護物質の2つの群に加えて、UV光が皮膚を通る際に開始される光化学反応連鎖を阻害する、抗酸化型の第2の光防護物質を使用することもできる。それらの典型的な例は、非常に少量の耐性容量 (例えばpmolからmol/kg) の、アミノ酸 (例えば、グリシン、ヒスチジン、チロシン、トリプトファン) およびそれらの誘導体、イミダゾール (例えばウロカニン酸) およびそれらの誘導体、D, L - カルノシン、D - カルノシン、L - カルノシンおよびそれらの誘導体 (例えば、アンゼリン) のようなペプチド、カロチノイド、カロテン (例えば、 $\alpha$ -カロテン、 $\beta$ -カロテン、リコピン) およびそれらの誘導体、クロロゲン酸およびその誘導体、リボ酸およびその誘導体 (例えば、ジヒドロリボ酸)、アウロチオグルコース、プロピルチオウラシルおよび他のチオール (例えば、チオレドキシン、グルタチオン、システイン、シスチン、シスタミンおよびそれらのグリコシル、N - アセチル、メチル、エチル、プロピル、アミル、ブチル、ラウリル、パルミトイル、オレイル、リノレイル、コレステリルおよびグリセリルエステル) およびそれらの塩、ジラウリルチオジプロピオネート、ジステアリルチオジプロピオネート、チオジプロピオン酸およびそれらの誘導体 (エステル、エーテル、ペプチド、脂質、ヌクレオチド、ヌクレオシドおよび塩)、およびスルホキシミン化合物 (例えば、ブチオニンスルホキシミン、ホモシステインスルホキシミン、ブチオニンスルホン、ペンタ - 、ヘキサ - およびヘプタ - チオニンスルホキシミン)、さらに (金属) キレート剤 (例えば、 $\alpha$ -ヒドロキシ脂肪酸、パルミチン酸、フィチン酸、ラクトフェリン)、 $\alpha$ -ヒドロキシ酸 (例えば、クエン酸、乳酸、リンゴ酸)、フミン酸、没食子酸、胆汁抽出物、ビリルビン、ビリベルジン、EDTA、EGTAおよびそれらの誘導体、不飽和脂肪酸およびそれらの誘導体 (例えば、 $\alpha$ -リノレイン酸、リノール酸、オレイン酸)、葉酸およびその誘導体、ユビキノンおよびユビキノールならびにそれらの誘導体、ビタミンCおよびその誘導体 (例えば、パルミチン酸アスコルビル、アスコルビルリン酸マグネシウム、酢酸アスコルビル)、トコフェロールおよびその誘導体 (例えば、酢酸ビタミンE)、ビタミンAおよびその誘導体 (パルミチン酸ビタミンA)、およびベンゾイン樹脂の安息香酸コニフェリル、ルチン酸およびその誘導体、 $\alpha$ -グリコシルルチン、フェルラ酸、フルフリリデングルシトール、カルノシン、ブチルヒドロキシトルエン、ブチルヒドロキシアニソール、ノルジヒドロガイアック酸、ノルジヒドロガイアレック酸、トリヒドロキシブチロフェノン、尿酸およびその誘導体、マンノースおよびその誘導体、スーパーオキシドジスムターゼ、亜鉛およびその誘導体 (例えば、ZnO、ZnSO<sub>4</sub>)、セレンおよびその誘導体 (例えば、セレノメチオニン)、スチルベンおよびその誘導体 (例えば、酸化スチルベン、酸化トランス - スチルベン)、および本発明に適当なこれらの特定の活性成分の誘導体 (

10

20

30

40

50

塩、エステル、エーテル、糖、ヌクレオチド、ヌクレオシド、ペプチドおよび脂質)である。

#### 【0132】

したがって、本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、4-メチルベンジリデンカンファー、ベンゾフェノン-3、ブチル-メトキシジベンゾイルメタン、ビス-エチルヘキシルオキシフェノールメトキシフェニルトリアジン、メチレンビス-ベンゾトリアゾリルテトラメチルブチルフェノール、ジエチルヘキシルブタミドトリアゾン、エチルヘキシルトリアゾンおよびジエチルアミノヒドロキシベンゾイルヘキシルベンゾエート、3-(4'-トリメチルアンモニウム)ベンジリデン-ボルナン-2-オンメチルスルフェート、3,3'-(1,4-フェニレン-ジメチン)ビス(7,7-ジメチル-2-オキソビシクロ[2.2.1]ヘプタン-1-メタンスルホン酸)およびその塩、3-(4'-スルホ)-ベンジリデンボルナン-2-オンおよびその塩、N-{(2および4)-[2-オキソボルン-3-イリデン)メチル}ベンジル]アクリルアミドのポリマー、2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4-メチル-6-(2-メチル-3-(1,3,3,3-テトラメチル-1-(トリメチルシリルオキシ)ジシロキサニル)-プロピル)フェノール、ジメチルジエチルベンザルマロネートおよびそれらの混合物からなる群から選択される、少なくとも1つのUV光防護フィルターを含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0133】

したがって、本発明は、<sup>14</sup>C同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、4-メチルベンジリデンカンファー、ベンゾフェノン-3、ブチル-メトキシジベンゾイルメタン、ビス-エチルヘキシルオキシフェノールメトキシフェニルトリアジン、メチレンビス-ベンゾトリアゾリルテトラメチルブチルフェノール、ジエチルヘキシルブタミドトリアゾン、エチルヘキシルトリアゾンおよびジエチルアミノヒドロキシベンゾイルヘキシルベンゾエート、3-(4'-トリメチルアンモニウム)ベンジリデン-ボルナン-2-オンメチルスルフェート、3,3'-(1,4-フェニレン-ジメチン)ビス(7,7-ジメチル-2-オキソビシクロ[2.2.1]ヘプタン-1-メタンスルホン酸)およびその塩、3-(4'-スルホ)-ベンジリデンボルナン-2-オンおよびその塩、N-{(2および4)-[2-オキソボルン-3-イリデン)メチル}ベンジル]アクリルアミドのポリマー、2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4-メチル-6-(2-メチル-3-(1,3,3,3-テトラメチル-1-(トリメチルシリルオキシ)ジシロキサニル)-プロピル)フェノール、ジメチルジエチルベンザルマロネートおよびそれらの混合物からなる群から選択される、少なくとも1つのUV光防護フィルターを含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0134】

これらのUV光防護フィルターは、例えば以下の商品名の下市販されている：  
 NeoHeliopan (登録商標) MBC (INCI: 4-メチルベンジリデンカンファー、Symrise製) ; NeoHeliopan (登録商標) BB (INCI: ベンゾフェノン-3、Symrise製) ; Parsol (登録商標) 1789 (INCI: ブチルメトキシジベンゾイルメタン、Hoffmann-La Roche (Givaudan) 製) ; Tinosorb (登録商標) S (INCI: ビス-エチルヘキシルオキシフェノールメトキシフェニルトリアジン) ; Tinosorb (登録商標) M (INCI: メチレンビス-ベンゾトリアゾリルテトラメチルブチルフェノール、Ciba Specialty Chemicals Corporation製) ; Uvasorb (登録商標) HEB (INCI: ジエチルヘキシルブタミドトリアゾン、3V Inc.製) ; Uvinul (登録商標) T150 (INCI: エチルヘキシルトリアゾン、BASF AG製) ; Uvinul (登録商標) A plus (INCI: ジエチルアミノヒドロキシベンゾイルヘキシルベンゾエート、BASF AG製) ; Mexoryl (登録商標) S0: 3-(4'-トリメチルアンモニウム)ベンジリデンボルナン-2-オンメチルスルフェート、INCI: カンファーベンザルコニウムメトスルフェート ; Mexoryl (登録商標) SX: 3,3'-(1,4-フェニレンジメチン)ビス(7,7-ジメチル-2-オキソビシクロ[2.2.1]ヘプタン-1-メタンスルホン酸)、

CTFA：INCIテレフタルイリデンジカンファースルホン酸；Mexoryl（登録商標）SL：3 -（4' - スルホ）ベンジリデンボルナン - 2 - オン、INCIベンジリデンカンファースルホン酸；Mexoryl（登録商標）SW：N - {（2および4） - [2 - オキシボルン - 3 - イリデン）メチル}ベンジル]アクリルアミドのポリマー、INCIポリアクリルアミドメチルベンジリデンカンファー；Mexoryl（登録商標）SL：2 -（2H - ベンゾトリアゾール - 2 - イル） - 4 - メチル - 6 -（2 - メチル - 3 -（1, 3, 3, 3 - テトラメチル - 1 -（トリメチルシリルオキシ）ジシロキサニル）プロピル）フェノール；INCI：ドロメトリゾールトリシロキサン；Parsol（登録商標）SLX：ジメチコジエチルベンズマロネート、INCIポリシリコン - 15。

#### 【0135】

10

本発明の製剤は、化粧品および/または医薬品製剤の総重量に基づいて、0.5～30重量%、好ましくは2.5～20重量%、とりわけ5～15重量%の量のUV光防護フィルターを含有し得る。

#### 【0136】

本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つのセルフタンニング剤を含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0137】

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つのセルフタンニング剤を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

20

#### 【0138】

セルフタンニング剤は、皮膚の褐色化を引き起こす物質を意味すると理解される。その例としては、 $\alpha$ 、 $\beta$  - 不飽和アルデヒドが含まれ、それらは皮膚中のアミノ酸とメイラード反応により反応し、着色化合物を生じる。セルフタンニング剤として有用な活性成分には、天然または合成のケトールまたはアルドールが含まれる。適当な活性物質の例には、ジヒドロキシアセトン、エリスルロース、グリセロールアルデヒド、アロキサン、ヒドロキシメチルグリオキサール、 $\alpha$  - ジアルデヒド、6 - アルド - D - フルクトース、ニンヒドリンおよびメソ - タルタルアルデヒドが含まれる。特に適当なセルフタンニング剤は、ジヒドロキシアセトンおよび/またはエリスルロースである。

30

#### 【0139】

上記活性成分と他の活性成分、あるいはムコンアルデヒドおよび/またはナフトキノン、例えば5 - ヒドロキシ - 1, 4 - ナフトキノン（ジユグロン）および2 - ヒドロキシ - 1, 4 - ナフトキノンとの上記活性成分との混合物が、特に有利であることが判明している。

本発明の組成物は、一般的に、化粧品および/または医薬品製剤の総重量に基づいて、1～10重量%、特に2～5重量%の濃度のセルフタンニング剤を含有する。

#### 【0140】

本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つのセルフタンニング剤および少なくとも1つのUV光防護フィルターを含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

40

#### 【0141】

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つのUV光防護フィルターおよび少なくとも1つのセルフタンニング剤を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0142】

本発明の化粧品および/または医薬品製剤は、例えばO/WまたはW/Oケアエマルジョン、日焼け防止剤、制汗/脱臭剤、装飾化粧品用製剤、油性ケア製剤、基質用の含浸溶液、例えば紙および不織布製品として存在し得る。例えば、ウェットワイプ、ティッシュ

50

、おむつ、衛生製品などが含まれる。

【0143】

本発明の炭化水素混合物および本発明の化粧品および／または医薬品製剤は、特に、軽く、噴霧可能な用途用、および／または、ベビー衛生部門におけるティッシュ、ペーパー、ワイプ、スポンジ（例えばポリウレタンスポンジ）、石膏、ベビーケア、スキンケア、日焼け防止、日焼け治療、防虫、洗浄、洗顔および制汗／脱臭用途用エマルション成分としても適当である。それらは、洗浄、衛生および／またはケア部門において使用が見出されるティッシュ、ペーパー、ワイプ、不織布製品、スポンジ、パフ、石膏および包帯に適用し得る（ベビー衛生およびベビーケア用ワイプ、洗浄ワイプ、洗顔ワイプ、スキンケアワイプ、皮膚老化に対する活性成分を含むケアワイプ、日焼け防止剤および防虫剤を含むワイプ、装飾化粧用ワイプまたは日焼け治療用のワイプ、トイレ用ウェットワイプ、制汗用ワイプ、おむつ、ティッシュ、ウェットワイプ、衛生製品、セルフタンニングワイプ、トイレットペーパー、リフレッシュ用ワイプ、アフターシェーブ用ワイプ）。また、それらは、とりわけ、ヘアケア、洗髪または染毛用の処方において使用し得る。本発明の炭化水素混合物の使用は、使用時の感覚性能に良い影響を与える。

10

【0144】

本発明の炭化水素混合物は、装飾化粧品製剤、例えば、口紅、アイメイクアップ、例えばアイシャドウ、マスカラ、アイペンシル、コール、マスカラ液などのメイクアップ処方の成分として特に適当である。

したがって、本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つの顔料および／または染料を含有する化粧品および／または医薬品製剤を提供する。

20

【0145】

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つの顔料および／または染料を含む化粧品および／または医薬品製剤を提供する。

【0146】

用語「顔料」は、白色または着色の、有機または無機の製剤中に不溶であり、製剤を着色化するために役立つ全ての粒子を包含する。好ましい実施態様においては、無機顔料が用いられ、金属酸化物を用いることが特に好ましい。

30

【0147】

無機顔料の例には、以下のものが含まれる：必要に応じて表面被覆された二酸化チタン、酸化ジルコニウムまたは酸化セリウム、酸化亜鉛、酸化鉄（黒、黄または赤）または酸化クロミウム、マンガンバイオレット、ウルトラマリンプール、クロム水和物および青鉄（III）、アルミニウム粉末または銅粉末のような金属粉末。

【0148】

本発明の好ましい実施態様において、顔料は、無機顔料、好ましくは金属酸化物から選択される。好ましい実施態様において、顔料は、二酸化チタン、酸化亜鉛、酸化鉄およびそれらの混合物からなる群から選択される。

40

該顔料は、個々にまたは混合物のいずれで存在していてもよい。

【0149】

本発明においては、白色顔料（例えばカオリン、二酸化チタンまたは酸化亜鉛）および無機着色顔料（例えば酸化鉄顔料、酸化クロミウム）を含む顔料混合物が好ましく、該顔料は被覆された状態または被覆されない状態で存在し得る。着色顔料の中で、酸化鉄が特に好ましい。

【0150】

本発明において有利には、顔料は、純色に加えて、さらなる特性、例えば角度依存性の色彩（変化する（flop））、光沢（表面光沢ではない）または質感を、化粧品製剤に与える効果顔料の群から選択され得る。本発明においてこのような効果顔料は、有利には1つ

50

またはそれ以上の白色および／または着色顔料に加えて用いられる。

【 0 1 5 1 】

効果顔料の最も重要な群は光沢顔料であり、DIN 55944:2003-11によると、それらには金属効果顔料および真珠光沢顔料が含まれる。いくつかの特定の効果顔料、例えば、黒鉛小板、酸化鉄小板および微粉二酸化チタンは、これらの2つの群に割り当てることができず、後者は光沢効果ではなく、むしろ角度依存性の光散乱効果を与える。DIN 55943:2001-10による光沢顔料は主に効果顔料小板である。平行に並べられた光沢顔料は、特徴的な光沢を示す。光沢顔料の視覚的效果は、金属粒子（金属効果顔料）、高い屈折率を有する透明粒子（真珠光沢顔料）上での有向性反射または干渉現象（干渉顔料）に基づく（DIN 55944:2003-11）。

10

【 0 1 5 2 】

本発明に好適な市販の効果顔料の例は、Timiron and #174 ; Merck製、Iriodin and #174 ; Merck製（装飾的工業利用のための真珠光沢および着色光沢顔料）、Xirallic and #174 ; Merck製（強力な着色結晶効果顔料）である。

【 0 1 5 3 】

さらに、本発明の製剤は、有利には有機着色顔料、すなわち製剤に実質的に不溶性である有機染料を含有してよい。DIN 55944:1990-04によると、有機顔料は化学的側面にしたがってアゾ顔料と多環式顔料に分類することができ、着色的側面から有色顔料と黒色顔料とに分類することができる。有機白色顔料は、実際的に意義はない。

【 0 1 5 4 】

20

本発明において、顔料は、市販の油性または水性のブレ分散体の形態のものを有利には用いることができる。本発明の製剤は、一般的には、化粧品および／または医薬品製剤の総重量に基づいて0.1～40重量%の顔料を含有する。

【 0 1 5 5 】

さらに、本発明においては、本発明の薬剤が1つまたはそれ以上の染料を含む場合が有利である。

染料は、合成由来または天然由来のいずれであってもよい。適当な染料のリストをE P 1 3 7 1 3 5 9 A 2の第8頁、第25～27行、第9頁および第10頁ならびに第11頁、第1～54行において見出すことができ、これをここで明らかに参照する。

本発明の薬剤は、一般的には、化粧品および／または医薬品製剤の総重量に基づいて、0.01～5重量%、好ましくは0.1～1.0重量%の染料を含有する。本発明の製剤は、一般的には、化粧品および／または医薬品製剤の総重量に基づいて、0.01～30重量%の範囲の、特に0.1～15重量%の範囲の、好ましくは1～10重量%の範囲の総量の染料および顔料を含有する。

30

【 0 1 5 6 】

適当な染料および顔料は、特に、委員会指令 Annex IV（バージョン：技術的進歩に Annex IVおよびVIを適合させるための、化粧品に関する理事会指令76/768/EECを改正する2007年4月17日の委員会指令2007/22/EC）により認可された物質である。これを、ここで明らかに参照する。

【 0 1 5 7 】

40

化粧品および／または医薬品製剤は、ボディーケア、例えば、ボディーミルク、クリーム、ローション、噴霧可能なエマルション、体臭除去製品等の処方に使用し得る。また、炭化水素混合物は、界面活性剤含有処方中、例えば、シャワージェル、バスジェル、シャンプーおよびケアリンスなどで使用し得る。用途により、化粧品および／または医薬品製剤は、例えば、界面活性剤、さらなる油体、乳化剤、真珠光沢ワックス、粘稠度調整剤、増粘剤、過脂肪剤、安定剤、ポリマー、脂肪、ワックス、レシチン、リン脂質、生体活性物質、フケ防止剤、被膜形成剤、膨張剤、防虫剤、セルフタンニング剤、チロシナーゼ阻害剤（脱色剤）、ヒドロトロップ、可溶化剤、防腐剤、香油、染料等の一連の助剤および添加剤を含有する。これらの例を以下に列挙する。

【 0 1 5 8 】

50



本発明は、0.1～80重量%の $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つの乳化剤および/または界面活性剤および/またはワックス成分および/またはポリマーおよび/またはさらなる油体を含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0159】

本発明は、好ましくは、 $^{14}\text{C}$ 同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つの乳化剤および/または界面活性剤および/またはワックス成分および/またはポリマーおよび/またはさらなる油体を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0160】

〔乳化剤〕

本発明の1つの実施態様において、本発明の製剤は、少なくとも1つの乳化剤を含有する。

したがって、本発明は、0.1～80重量%の $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つの乳化剤を含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0161】

本発明は、好ましくは、 $^{14}\text{C}$ 同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つの乳化剤を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

#### 【0162】

本発明の組成物は、一般的には、組成物の総重量に基づいて、0～40重量%、好ましくは0.1～20重量%、好ましくは0.1～15重量%、特に0.1～10重量%の量の乳化剤を含有する。

#### 【0163】

全ての乳化剤は、それらが水溶性または油溶性に適するかどうかを指定する、いわゆるHLB値(0～20の間の無次元数)を割り当てられる。9以下の数は、特異的な油溶性、疎水性乳化剤であることを示し、11以上の数は水溶性、親水性乳化剤であることを示す。

HLB値は、乳化剤の親水性基および親油性基の大きさや強さの平衡のようなものをいう。

#### 【0164】

乳化剤のHLB値は、インクリメントから計算することができ、分子を構成する種々の親水性基および疎水性基に対するHLBインクリメントは、表による検討(例えば、H.P. FiedlerのLexikon der Hilfsstoffe fuer Pharmazie, Kosmetik und angrenzende Gebiete (Lexicon of the Excipients for Pharmacy, Cosmetics and Related Fields)、Editio Cantor Verlag, Aulendorf、第4版、1996年)または製造者データにおいて見出される。2相における乳化剤の溶解度は、エマルジョンタイプを効率的に決定する。水により良好な溶解性を有する乳化剤の場合、O/Wエマルジョンが得られる。これに対して、油相により良好な溶解性を有する乳化剤の場合、他の製造条件が同一であれば、W/Oエマルジョンが生じる。

本発明の1つの実施態様において、本発明の製剤は1つより多くの乳化剤を含有する。他の成分により、当業者は従来の乳化系(例えば、乳化剤および共乳化剤)を使用する。

#### 【0165】

〔非イオン性乳化剤〕

非イオン性乳化剤の群には、例えば以下のものが含まれる：

(1) 8～40個の炭素原子を含有する直鎖状脂肪アルコール、12～40個の炭素原子を含有する脂肪酸およびアルキル基中に8～15個の炭素原子を含有するアルキルフェノールへの、2～50モルのエチレンオキシドおよび/または1～20モルのプロピレンオキシドの付加生成物；

(2) グリセロールへの1～50モルのエチレンオキシド付加生成物の $\text{C}_{12-18}$ 脂肪

10

20

30

40

50

酸モノエステルおよびジエステル；

(3) 6 ~ 22 個の炭素原子を含有する飽和および不飽和脂肪酸のソルビタンモノエステルおよびジエステル、ならびにそのエチレンオキシド付加生成物；

(4) アルキル基中に 8 ~ 22 個の炭素原子を含有するアルキルモノおよびオリゴグリコシドおよびそのエトキシル化類似体；

(5) ヒマシ油および / または水添ヒマシ油への 7 ~ 60 モルのエチレンオキシドの付加生成物；

(6) ポリオールエステル、および、特にポリグリセリルエステル、例えばポリオールポリ - 12 - ヒドロキシステアレート、ポリグリセリルポリリシノレート、ポリグリセリルジイソステアレートまたはポリグリセリルダイメレートなど。これらのクラスの幾つかの化合物の混合物も同様に適当である；

(7) ヒマシ油および / または水添ヒマシ油への 2 ~ 15 モルのエチレンオキシドの付加生成物；

(8) 直鎖状、分枝状、不飽和または飽和  $C_{6-22}$  脂肪酸、リシノール酸および 12 - ヒドロキシステアリン酸と、ポリグリセロール、ペンタエリスリトール、ジペンタエリスリトール、糖アルコール（例えばソルビトール）、アルキルグルコシド（例えばメチルグルコシド、ブチルグルコシド、ラウリルグルコシド）およびポリグルコシド（例えばセルロース）に基づく部分エステル、または混合エステル、例えばグリセリルステアレートシトレートおよびグリセリルステアレートラクテート；

(9) ポリシロキサン - ポリアルキル - ポリエーテル共重合体または対応する誘導体；

(10) ペンタエリスリトール、脂肪酸、クエン酸および脂肪アルコールの混合エステルおよび / または 6 ~ 22 個の炭素原子を含有する脂肪酸、メチルグルコースおよびポリオール、好ましくはグリセロールまたはポリグリセロールの混合エステル。

#### 【0166】

脂肪アルコール、脂肪酸、アルキルフェノール、グリセリルモノエステルおよびジエステル、および脂肪酸のソルビタンモノエステルおよびジエステルまたはヒマシ油へのエチレンオキシドおよび / またはプロピレンオキシドの付加生成物は、既知の市販品である。それらは、エチレンオキシドおよび / またはプロピレンオキシドと、付加反応を行うのに用いられる基質との間の比率に対応する平均アルコキシル化度のホモログ混合物である。これらの乳化剤は、エトキシル化度に応じて W / O または O / W 乳化剤となる。グリセロールへのエチレンオキシドの付加生成物の  $C_{12/18}$  脂肪酸モノエステルおよびジエステルは、化粧品製剤のための再脂化剤として既知である。

#### 【0167】

本発明によれば、特に適当なおよび穏やかな乳化剤は、「Dehymuls（登録商標）PGPH」（W / O 乳化剤）または「Eumulgin（登録商標）VL 75」（ラウリルグルコシドと重量比 1 : 1 で混合、O / W 乳化剤）または「Dehymuls（登録商標）SBL」（W / O 乳化剤）の名称のもと Cognis Deutschland GmbH から上市されているポリオールポリ - 12 - ヒドロキシステアレートおよびそれらの混合物である。これに関して、特に欧州特許 EP 0 7 6 6 6 1 B 1 を参照する。これらの乳化剤のポリオール成分は、少なくとも 2 個、好ましくは 3 ~ 12 個および特に 3 ~ 8 個のヒドロキシ基および 2 ~ 12 個の炭素原子を含有する物質から誘導され得る。

#### 【0168】

特に好ましい乳化剤は、例えば、セチルジメチコンコポリオール（例えば Abil EM-90）、ポリグリセリル - 2 ジポリヒドロキシステアレート（例えば Dehymuls PGPH）、ポリグリセリル - 3 ジイソステアレート（例えば Lameform TGI）、ポリグリセリル - 4 イソステアレート（例えば Isolac GI 34）、ポリグリセリル - 3 オレレート（例えば Isolac GO 33）、ジイソステアリルポリグリセリル - 3 ジイソステアレート（例えば Isolac PDI）、ポリグリセリル - 3 メチルグルコースジステアレート（例えば Tego Care 450）、ポリグリセリル - 3 ミツロウ（例えば Cera Bellina）、ポリグリセリル - 4 カプレート（例えば Polyglycerol Caprate T2010/90）、ポリグリセリル - 3 セチルエーテル（例えば Chimexane

NL)、ポリグリセリル - 3 ジステアレート (例えばCremophor GS 32) およびポリグリセリルポリリシノレート (例えばAdmul WOL 1403)、グリセリルオレート (例えばMonomuls 90-0 18)、アルキルグルコシド (例えばPlantacare 1200、Emulgade PL 68/50、Montanov 68、Tego Care CG 90、Tego Glucosid L 55)、メチルグルコースイソステアレート (例えばTego Care IS)、メチルグルコースセスキステアレート (Tego Care PS)、ココイル加水分解コムギタンパクナトリウム (例えばGludain WK)、セチルリン酸カリウム (例えばAmphisol K、Crodafos CKP)、アルキル硫酸ナトリウム (例えばLanette E)、スクロースエステル (例えばCrodesta F-10、F-20、F-50、F-70、F-110、F-160、SL-40、Emulgade (登録商標) Sucro)、エトキシル化および/またはプロポキシル化脂肪アルコール、脂肪酸、ヒマシ油および水添ヒマシ油 (例えばEumulgin B2、B2、B3、L、HRE 40、HRE 60、RO 40、Cremophor HRE 40、HRE 60、L、WO 7、Dehymuls HRE 7、Arlacel 989)、PEG - 30 ジポリヒドロキシステアレート (例えばArlacel P 135、Dehymuls LE)、ソルビタンエステル、エトキシル化および/またはプロポキシル化ソルビタンエステル、およびそれらの混合物である。特に効果的な混合物は、ポリグリセリル - 2 ジポリヒドロキシステアレートおよびラウリルグルコシドおよびグリセロールからなる (例えばEumulgin VL 75)。また、ポリグリセリル - 4 ジイソステアレート/ポリヒドロキシステアレート/セバシン酸塩 (Isolan (登録商標) GPS)、ジイソステアロイルポリグリセリル - 3 ジイソステアレート (例えばIsolan PDI)、アルカリ金属アシルグルタメート (例えばEumulgin SG) も適当である。

10

#### 【0169】

20

一般的に、適当な親油性W/O乳化剤は、1～8のHLB値を有する乳化剤である。これは、数多くの表に列挙され、および当業者に周知である。これらの乳化剤の幾つかは、例えば、Kirk-Othmer、「Encyclopedia of Chemical Technology」、第3版、1979年、第8巻、第913頁に列挙されている。また、エトキシル化生成物についてのHLB値は、以下の式： $HLB = (100 - L) : 5$  [式中、Lは、エチレンオキシド付加物の重量%における、新油性基、すなわち、脂肪アルキル基または脂肪アシル基の重量%である] から算出することができる。

#### 【0170】

W/O乳化剤の群からの特に有利な乳化剤は、ポリオール、特にC<sub>4</sub> - C<sub>6</sub> ポリオールの部分エステル、例えばペンタエリスリトールの部分エステルまたは糖エステル、例えば、スクロースジステアレート、ソルビタンモノイソステアレート、ソルビタンセスキイソステアレート、ソルビタンジイソステアレート、ソルビタントリイソステアレート、ソルビタンモノオレート、ソルビタンセスキオレート、ソルビタンジオレート、ソルビタントリオレート、ソルビタンモノエルケート、ソルビタンセスキエルケート、ソルビタンジエルケート、ソルビタントリエルケート、ソルビタンモノリシノレート、ソルビタンセスキリシノレート、ソルビタンジリシノレート、ソルビタントリリシノレート、ソルビタンモノヒドロキシステアレート、ソルビタンセスキヒドロキシステアレート、ソルビタンジヒドロキシステアレート、ソルビタントリヒドロキシステアレート、ソルビタンモノタータレート、ソルビタンセスキタータレート、ソルビタンジタータレート、ソルビタントリタータレート、ソルビタンモノシトレート、ソルビタンセスキシトレート、ソルビタンジシトレート、ソルビタントリシトレート、ソルビタンモノマレエート、ソルビタンセスキマレエート、ソルビタンジマレエート、ソルビタントリマレエートおよびそれらの工業用混合物である。また、特定のソルビタンエステルへの1～30、好ましくは5～10モルのエチレンオキシドの付加生成物も適当な乳化剤である。

30

40

#### 【0171】

処方に応じて、非イオン性O/W乳化剤 (HLB値：8～18) および/または可溶化剤の群からの少なくとも一つの乳化剤を使用することがさらに有利であり得る。このような乳化剤の例は、対応する高エトキシル化度、例えばO/W乳化剤に対して10～20のエチレンオキシド単位および可溶化剤に対して20～40のエチレンオキシド単位を有する、緒論において既に記載したエチレンオキシド付加物である。本発明によれば、セテア

50

【 0 1 7 2 】

20

また、レシチンおよびリン脂質のような物質も乳化剤として適当である。挙げ得る天然レシチンの例は、ケファリンであり、これは、ホスファチジン酸とも称され、1, 2 - ジアシル - sn - グリセロール - 3 - リン酸の誘導体である。一方、リン脂質は、通常、リン酸とグリセロール（グリセロールリン酸）とのモノおよび好ましくはジエステルと理解され、これは、通常、脂肪に含まれる。さらに、スフィンゴシンおよびスフィンゴ脂質も適当である。

## 30

乳化剤は、例えばシリコン乳化剤であり得る。これらは、例えば、アルキルメチコンコポリオールおよび／またはアルキルジメチコンコポリオールの群から、特に下記の化学式で特徴付けられる化合物の群から選択され得る：

## 40

[ 式中、XおよびYは、それぞれ独立して、H（水素）および1～24個の炭素原子を有する分枝状アルキル基および非分枝状アルキル基、アシル基およびアルコキシ基の群から選択され、pは0～200、qは1～40、およびrは1～100である ]。

## 50

52、ABIL (登録商標) B 8863、ABIL (登録商標) B 8873およびABIL (登録商標) B 88183の商品名のもと市販されている。

本発明中、特に有利に使用し得る界面活性物質のさらなる例は、セチル P E G / P P G - 1 0 / 1 ジメチコン (セチルジメチコンコポリオール) であり、それらは、Evonik GoldschmidtからABIL (登録商標) EM 90の商品名のもと市販されている。

本発明中、特に有利に使用し得る界面活性物質のさらなる例は、シクロメチコンジメチコンコポリオールであり、それらは、Evonik GoldschmidtからABIL (登録商標) EM 97およびABIL (登録商標) WE 09の商品名のもと市販されている。

さらに、乳化剤ラウリル P E G / P P G - 1 8 / 1 8 メチコン (ラウリルメチコンコポリオール) が非常に有利であることが見出されている。それは、Dow Corning (登録商標) 5200 Formulation Aidの商品名のもとDow Corning Ltdから市販されている。

さらに有利なシリコーン乳化剤は、Wackerからのオクチルジメチコンエトキシグルコシドである。本発明のシリコーン油中水型エマルジョンに対して、このタイプのエマルジョンに使用される全ての既知の乳化剤を使用し得る。本発明に特に好ましいシリコーン中水型乳化剤は、セチル P E G / P P G - 1 0 / 1 ジメチコンおよびラウリル P E G / P P G - 1 8 / 1 8 メチコン (例えば、ABIL (登録商標) EM 90 (Evonik Goldschmidt)、DC5200 Formulation Aid (Dow Corning)) およびこの2つの乳化剤の所望の全混合物である。

【0176】

〔界面活性剤〕

本発明の1つの実施態様において、本発明の製剤は少なくとも1つの界面活性剤を含有する。

【0177】

界面活性剤は、有機、無極性物質を水に溶解できる両親媒性物質である。界面活性剤は、少なくとも1つの親水性分子部分および疎水性分子部分を有するその特異的分子構造の結果として、水の表面張力の低下、皮膚の湿潤、汚れ除去および分解の促進、容易な濯ぎ、必要であれば泡調整をもたらす。

界面活性剤は、一般的に、20より大きなHLB値を有する界面活性物質を意味すると理解される。

【0178】

本発明は、0.1~80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つの界面活性剤を含有する化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

【0179】

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1~80重量%と、少なくとも1つの界面活性剤を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

【0180】

界面活性物質は、陰イオン性、非イオン性、陽イオン性および/または両性または双性イオン性界面活性剤であり得る。例えば、シャワージェル、フォームバス、シャンプー等の界面活性剤含有化粧品製剤においては、少なくとも1つの陰イオン性界面活性剤が存在することが好ましい。

【0181】

本発明の組成物は、一般的には、組成物の総重量に基づいて、0~40重量%、好ましくは0.05~30重量%、特に0.05~20重量%、好ましくは0.1~15重量%、特に0.1~10重量%の量の界面活性剤を含有する。

【0182】

非イオン性界面活性剤の代表例は、脂肪アルコールポリグリコールエーテル、アルキルフェノールポリグリコールエーテル、脂肪酸ポリグリコールエーテル、脂肪酸アミドポリグリコールエーテル、脂肪アミンポリグリコールエーテル、アルコキシ化トリグリセリド、混合エーテルまたは混合ホルマール、場合により部分的に酸化したアルキル (アルケニル) オリゴグリコシドまたはグルクロン酸誘導体、脂肪酸N-アルキルグルカミド、タ

10

20

30

40

50

ンパク質加水分解物（特に、コムギに基づく植物生成物）、ポリオール脂肪酸エステル、糖エステル、ソルピタンエステル、ポリソルベートおよびアミノオキシドである。非イオン性界面活性剤がポリグリコールエーテル鎖を含有する場合、それらは通常と同族体分布を有していてもよいが、好ましくは狭い同族体分布を有する。

#### 【0183】

双性イオン性界面活性剤は、少なくとも1つの第4級アンモニウム基と少なくとも1つの $-COO^-$ または $-SO_3^-$ 基を分子中に有する界面活性化合物をいう。特に適当な双性イオン性界面活性剤は、ベタイン、例えば、N-アルキル-N,N-ジメチルアンモニウムグリシネート（例えば、ココアルキルジメチルアンモニウムグリシネート）、N-アシルアミノプロピル-N,N-ジメチルアンモニウムグリシネート（例えば、ココアシルアミノプロピルジメチルアンモニウムグリシネート）、および2-アルキル-3-カルボキシメチル-3-ヒドロキシエチルイミダゾリンであって、それぞれアルキルまたはアシル基中に8~18個の炭素原子を含むもの、ならびにココアシルアミノエチルヒドロキシエチルカルボキシメチルグリシネートである。好ましい双性イオン性界面活性剤は、INCI名コカミドプロピルベタインとして知られる脂肪酸アミド誘導体である。

10

#### 【0184】

両性界面活性剤は、特に共界面活性剤としても適当である。両性界面活性剤は、分子中に、 $C_{8-18}$ -アルキル基または-アシル基とは別に、少なくとも1つの遊離アミノ基と少なくとも1つの $-COOH$ 基または $-SO_3H$ 基を含有し、分子内塩を形成することができる、界面活性化合物を意味すると理解される。適当な両性界面活性剤の例は、それぞれアルキル基中に約8~18個の炭素原子を含む、N-アルキルグリシン、N-アルキルプロピオン酸、N-アルキルアミノ酪酸、N-アルキルイミノジプロピオン酸、N-ヒドロキシエチル-N-アルキルアミドプロピルグリシン、N-アルキルタウリン、N-アルキルサルコシン、2-アルキルアミノプロピオン酸およびアルキルアミノ酢酸である。特に好適な両性界面活性剤は、N-ココアルキルアミノプロピオン酸塩、ココアシルアミノエチルアミノプロピオン酸塩および $C_{12-18}$ アシルサルコシンである。

20

#### 【0185】

両性または双性イオン性界面活性剤の典型的な例は、アルキルベタイン、アルキルアミドベタイン、アミノプロピルベタイン、アミノグリシネート、イミダゾリウムベタインおよびスルホベタインである。特定の界面活性剤は、もっぱら既知の化合物である。これらの物質の構造および製造に関して、この分野における関連著作を参照し得る。特に適当な穏やかな（すなわち、特に皮膚適合性の）界面活性剤の典型例は、脂肪アルコールポリグリコールエーテルスルフェート、モノグリセリド硫酸エステル、モノおよび/またはジアルキルスルホスクシネート、脂肪酸イセチオネート、脂肪酸サルコシネート、脂肪酸タウリド、脂肪酸グルタメート、 $\alpha$ -オレフィンスルホネート、エーテルカルボン酸、アルキルオリゴグルコシドおよび/またはアルキルオリゴグルコシドカルボン酸塩とそれらの混合物、脂肪酸グルカミド、アルキルアミドベタイン、アンホアセタールおよび/またはタンパク質脂肪酸縮合物（コムギタンパクまたはその塩に基づくものが好ましい）である。

30

#### 【0186】

陰イオン性界面活性剤は、水溶性を与える陰イオン基、例えばカルボキシレート、スルフェート、スルホネートまたはホスフェート基と親油性基を特徴とする。皮膚親和性の陰イオン性界面活性剤は、関連文献から多くの当業者に既知であり、市販されている。これらは、特に、アルカリ金属塩、アンモニウム塩またはアルカノールアンモニウム塩の形態のアルキルスルフェート、アルキルエーテルスルフェート、アルキルエーテルカルボキシレート、アシルイセチオネート、アシルサルコシネート、12~18個の炭素原子を有する直鎖状アルキル基またはアシル基を含有するアシルタウリン、およびアルカリ金属またはアンモニウム塩の形態のスルホスクシネートおよびアシルグルタマートである。

40

#### 【0187】

陰イオン性界面活性剤の典型例は、石けん、アルキルベンゼンスルホネート、アルカンスルホネート、オレフィン-スルホネート、アルキルエーテルスルホネート、グリセロー

50

ルエーテルスルホネート、 $\alpha$ -メチルエステルスルホネート、スルホ脂肪酸、アルキルスルフェート、脂肪アルコールエーテルスルフェート、グリセロールエーテルスルフェート、脂肪酸エーテルスルフェート、ヒドロキシ混合エーテルスルフェート、モノグリセリド（エーテル）スルフェート、脂肪酸アミド（エーテル）スルフェート、モノおよびジアルキルスルホスクシネート、モノおよびジアルキルスルホスクシナメート、スルホトリグリセリド、アミド石けん、エーテルカルボン酸およびその塩、脂肪酸イセチオネート、脂肪酸サルコシネート、脂肪酸タウリド、N-アシルアミノ酸、例えば、アシルラクチレート、アシルタルトレート、アシルグルタメートおよびアシルアスパルテート、アルキルオリゴグルコシドスルフェート、タンパク質脂肪酸縮合物（特にコムギに基づく植物生成物）およびアルキル（エーテル）ホスフェートである。陰イオン性界面活性剤がポリグリコールエーテル鎖を有する場合、それらは通常と同族体分布を有し得るが、それらは好ましくは狭い同族体分布を有する。

10

#### 【0188】

使用し得る適当な陽イオン性界面活性剤は、第4級アンモニウム化合物である。好ましくはアンモニウムハライド、特にクロリドおよびブロミド、例えばアルキルトリメチルアンモニウムクロリド、ジアルキルジメチルアンモニウムクロリドおよびトリアルキルメチルアンモニウムクロリド、例えばセチルトリメチルアンモニウムクロリド、ステアリルトリメチルアンモニウムクロリド、ジステアリルジメチルアンモニウムクロリド、ラウリルジメチルアンモニウムクロリド、ラウリルジメチルベンジルアンモニウムクロリドおよびトリセチルメチルアンモニウムクロリドである。さらに、易生分解性第4級エステル化合物、例えば、Stepantex（登録商標）の商品名のもと市販されているジアルキルアンモニウムメトスルフェートおよびメチルヒドロキシアルキルジアルキルオキシアルキルアンモニウムメトスルフェートおよびDehyquart（登録商標）シリーズの対応する製品などが、陽イオン性界面活性剤として使用することができる。用語「エステルクォート」は、通常、4級化脂肪酸トリエタノールアミンエステル塩を意味すると理解される。本発明によれば、これらは、非常に柔軟な質感を生成物に与えることができる。それらは、有機化学の関連方法によって製造される既知の物質である。本発明における使用に適当な他の陽イオン性界面活性剤は、4級化タンパク質加水分解物である。

20

#### 【0189】

##### 〔ワックス成分〕

30

本発明の1つの実施態様において、本発明の製剤は少なくとも1つのワックス成分を含有する。

#### 【0190】

本発明は、0.1~80重量%の $^{14}\text{C}$ 同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つのワックス成分を含有する化粧品および/または医薬品製剤に関する。

#### 【0191】

本発明は、好ましくは、 $^{14}\text{C}$ 同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1~80重量%と、少なくとも1つのワックス成分を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

40

#### 【0192】

本発明の組成物は、一般的には、組成物の総重量に基づいて、0~40重量%、特に0~20重量%、好ましくは0.1~15重量%、特に0.1~10重量%の量のワックス成分を含有する。

#### 【0193】

用語「ワックス」は、一般的に以下の特性を有する全ての天然または合成物質および物質混合物を意味するものと理解される：それらは、固体から脆いおよび硬いまでのコンシステンシーを有し、粗いから細かいまでの結晶性であり、透明から不透明であり、30より高い温度で分解せずに融解する。それらの融点をわずかに超える場合でさえも、それらは粘度が低く、非曳糸性であり、非常に強い温度依存性のコンシステンシーおよび溶解

50

性を示す。本発明によれば、30 以上で融解する単独のワックス成分またはワックス成分の混合物を使用することができる。

【0194】

本発明によれば、ワックス様コンシステンシーを有する脂肪および脂肪様物質も、それらが所要の融点を有する限りワックスとして使用することができる。これらとしては、とりわけ、脂肪（トリグリセリド）、モノおよびジグリセリド、天然および合成ワックス、脂肪およびワックスアルコール、脂肪酸、脂肪アルコールと脂肪酸とのエステル、および脂肪酸アミドまたはこれらの物質の混合物が挙げられる。

【0195】

脂肪は、トリアシルグリセロール、すなわち、脂肪酸とグリセロールとのトリプルエステルを意味すると理解される。トリアシルグリセロールは、好ましくは飽和、非分枝状および非置換脂肪酸基を含有する。また、それらは、混合エステル、すなわち、グリセロールと種々の脂肪酸とのトリプルエステルでもあり得る。本発明によれば、部分水素化によって得られ、特にコンシステンシー調整剤として適当である硬化脂肪および油を使用することができる。植物性硬化脂肪および油、例えば硬化ヒマシ油、落花生油、大豆油、菜種油、セイヨウアブラナ油、綿実油、大豆油、ヒマワリ油、パーム油、パーム核油、亜麻仁油、アーモンド油、コーン油、オリーブ油、ゴマ油、ココアバターおよびヤシ脂肪が好ましい。

【0196】

適当な例としては、グリセロールとC12 - C16脂肪酸（特にC12 - C36脂肪酸）とのトリプルエステルである。これらとしては、水添ヒマシ油、グリセロールとヒドロキシステアリン酸とのトリプルエステル（例えばCutina HRの名称のもと市販されている）が挙げられる。グリセリルトリステアレート、グリセリルトリベヘネート（例えばSyncrowax HRC）、グリセリルトリパルミテートまたはSyncrowax HGLCの名称のもと既知のトリグリセリド混合物も、ワックス成分または混合物の融点が30 以上である限り、適当である。

【0197】

本発明によれば、使用し得るワックス成分は、特に、これらの部分グリセリドのモノおよびジグリセリドおよび混合物である。本発明に使用し得るグリセリド混合物としては、Cognis Deutschland GmbH & Co. KGから市販されている製品Novata ABおよびNovata B（C12 - C18モノ、ジ - およびトリグリセリドの混合物）およびCutina MDまたはCutina GMS（グリセリルステアレート）が挙げられる。

【0198】

ワックス成分として本発明に使用し得る脂肪アルコールとしては、C12 - C50脂肪アルコールが挙げられる。該脂肪アルコールは、天然脂肪、油およびワックス、例えば、ミリスチルアルコール、1 - ペンタデカノール、セチルアルコール、1 - ヘプタデカノール、ステアリルアルコール、1 - ノナデカノール、アラキジルアルコール、1 - ヘネイコサノール、ベヘニルアルコール、ブラシジルアルコール、リグノセリルアルコール、セリルアルコールまたはミリスチルアルコールなどから得ることができる。飽和非分枝状脂肪アルコールが本発明に好適である。しかしながら、不飽和、分枝状または非分枝状脂肪アルコールも、それらが所要の融点を有する限り、ワックス成分として本発明に使用することができる。天然由来の脂肪および油、例えば牛脂、落花生油、セイヨウアブラナ油、綿実油、大豆油、ヒマワリ油、パーム核油、亜麻仁油、ヒマシ油、コーン油、菜種油、ゴマ油、ココアバターおよびヤシ油などの還元により製造されるような脂肪アルコールカットを、本発明において使用することもできる。しかしながら、合成アルコール、例えばチーグラ合成からの直鎖状偶数脂肪アルコール（アルフォール）またはオキシ合成からの部分分枝状アルコール（ドパノール）も使用することができる。例えば、名称Lanette 18（C18アルコール）、Lanette 16（C16アルコール）、Lanette 14（C14アルコール）、Lanette 0（C16 / C18アルコール）およびLanette 22（C18 / C22アルコール）のもとCognis Deutschland GmbHから市販されるC14 - C22脂肪アルコールは、



本発明に特に適当である。脂肪アルコールは、製剤にトリグリセリドよりも乾燥した皮膚感覚を与えるため、トリグリセリドよりも好ましい。

【 0 1 9 9 】

使用するワックス成分は、C 1 4 - C 4 0 脂肪酸またはそれらの混合物であってもよい。これらには、例えば、ミリスチン酸、ペンタデカン酸、パルミチン酸、マルガリン酸、ステアリン酸、ノナデカン酸、アラキン酸、ベヘン酸、リグノセリン酸、セロチン酸、メリシン酸、エルカ酸およびエレオステアリン酸および置換脂肪酸（例えば、1 2 - ヒドロキシステアリン酸など）、および脂肪酸のアミドまたはモノエタノールアミドが含まれる。このリストは、例示であって、いかなる限定も伴わない。

【 0 2 0 0 】

本発明に使用できるワックスは、例えば、天然植物ワックス、例えばキャンデリラワックス、カルナバワックス、木蠟、エスパルトグラスワックス、コルクワックス、グアルマワックス、コメ油ワックス、サトウキビワックス、オウリキュリーワックス、モンタンワックス、ヒマワリワックス、フルーツワックス、例えばオレンジワックス、レモンワックス、グレープフルーツワックス、ヤマモモワックス、および動物ワックス、例えばミツロウ、シェラックワックス、鯨蠟、羊毛ワックスおよび尾脂などである。本発明において、水素化または硬化ワックスを使用することも有利であり得る。また、本発明に使用できる天然ワックスには、鉱物ワックス、例えばセレンシおよびオゾケライトなど、または石油化学ワックス、例えばペトロラタム、パラフィンワックスおよびマイクロワックスが含まれる。また使用し得るワックス成分は、化学変性ワックス、特に硬質ワックス、例えばモンタンエステルワックス、サゾールワックスおよび水素化ホホバワックスが含まれる。本発明に使用できる合成ワックスとしては、例えば、ワックス様ポリアルキレンワックスおよびポリエチレングリコールワックスが挙げられる。植物ワックスは、本発明に好適である。

【 0 2 0 1 】

ワックス成分は、飽和および/または不飽和、分枝状および/または非分枝状アルカンカルボン酸と、飽和および/または不飽和、分枝状および/または非分枝状アルコールとのワックスエステルの群、芳香族カルボン酸、ジカルボン酸、トリカルボン酸およびヒドロキシカルボン酸（例えば1 2 - ヒドロキシステアリン酸）と、飽和および/または不飽和、分枝状および/または非分枝状アルコールとのエステルの群、ならびに、長鎖ヒドロキシカルボン酸のラクチドの群から選択することもできる。そのようなエステルの例は、例えば、C 1 6 - C 4 0 アルキルステアレート、C 2 0 - C 4 0 アルキルステアレート（例えばKesterwachs K82H）、ダイマー酸のC 2 0 - C 4 0 ジアルキルエステル、C 1 8 - C 3 8 アルキルヒドロキシステアロイルステアレートまたはC 2 0 - C 4 0 アルキルエルケートである。使用し得る他の適当なワックス成分は、C 3 0 - C 5 0 アルキルミツロウ、トリステアリルシトレート、トリイソステアリルシトレート、ステアリルヘプタノエート、ステアリルオクタノエート、トリラウリルシトレート、エチレングリコールジパルミテート、エチレングリコールジステアレート、エチレングリコールジ（1 2 - ヒドロキシステアリン酸）、ステアリルステアレート、パルミチルステアレート、ステアリルベヘネート、セチルエステル、セテアリルベヘネートおよびベヘニルベヘネートを使用することも可能である。脂肪酸部分グリセリド、すなわち、グリセロールと1 2 ~ 1 8 個の炭素原子を有する脂肪酸との工業用モノおよび/またはジエステル、例えばグリセロールモノ/ジラウレート、- パルミテート、- ミリステートまたは- ステアレートも、本発明の目的で使用し得る。

【 0 2 0 2 】

さらに、真珠光沢ワックスも適当なワックスである。使用し得る真珠光沢ワックス、特に界面活性製剤中で使用し得る真珠光沢ワックスは、例えば、アルキレングリコールエステル、特にエチレングリコールジステアレート；脂肪酸アルカノールアミド、特にヤシ油脂肪酸ジエタノールアミド；部分グリセリド、特にステアリン酸モノグリセリド；場合によりヒドロキシ置換された、多塩基性のカルボン酸と、6 ~ 2 2 個の炭素原子を有する脂

10

20

30

40

50

肪アルコールとのエステル、特に酒石酸の長鎖エステル；脂肪物質、例えば脂肪アルコール、脂肪ケトン、脂肪アルデヒド、脂肪エーテルおよび脂肪カーボネート（総炭素数が少なくとも24のもの）、特にラウロンおよびジステアリルエーテル；脂肪酸、例えばステアリン酸、ヒドロキシステアリン酸またはベヘン酸；12～22個の炭素原子を有するオレフィンエポキシドと、12～22個の炭素原子を有する脂肪アルコールおよび／または2～15個の炭素原子および2～10個のヒドロキシ基を有するポリオールとの開環生成物、ならびにそれらの混合物である。

【0203】

〔ポリマー〕

本発明の1つの実施態様において、本発明の製剤は少なくとも1つのポリマーを含有する。

10

本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つのポリマーを含有する化粧品および／または医薬品製剤を提供する。

【0204】

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含有し、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つのポリマーを含む化粧品および／または医薬品製剤を提供する。

【0205】

本発明の組成物は、組成物の総重量に基づいて、一般的に、0～20重量%、好ましくは0.1～15重量%、特に0.1～10重量%の量のポリマーを含有する。

20

【0206】

適当な陽イオン性ポリマーは、例えば、陽イオン性セルロース誘導体、例えば、AmercholからPolymer JR 400（登録商標）の名称のもと入手できる4級化ヒドロキシエチルセルロース、陽イオン性デンプン、ジアリルアンモニウム塩とアクリルアミドとの共重合体、4級化ビニルピロリドン／ビニルイミダゾールポリマー、例えば、Luviquat（登録商標）（BASF）、ポリグリコールとアミンとの縮合生成物、4級化コラーゲンポリペプチド、例えば、ラウリルジモニウムヒドロキシプロピル加水分解コラーゲン（Lamequat（登録商標）L/Gruenau）、4級化小麦ポリペプチド、ポリエチレンイミン、陽イオン性シリコーンポリマー、例えば、アミドメチコン、アジピン酸とジメチルアミノヒドロキシプロピルジエチレントリアミンとの共重合体（Cartaretine（登録商標）/Sandoz）、アクリル酸とジメチルジアリルアンモニウムクロリドとの共重合体（Merquat（登録商標）550/Chemviron）、ポリアミノポリアミド、陽イオン性キチン誘導体、例えば、必要に応じて微結晶性分布の4級化キトサン、ジハロアルキレン（例えばジブロモブタン）とビス-ジアルキルアミン（例えばビス-ジメチルアミノ-1,3-プロパン）との縮合生成物、陽イオン性グアーガム、例えば、CelaneseのJaguar（登録商標）CBS、Jaguar（登録商標）C-17、Jaguar（登録商標）C-16、四級化アンモニウム塩ポリマー、例えば、MiranolのMirapol（登録商標）A-15、Mirapol（登録商標）AD-1、Mirapol（登録商標）AZ-1である。

30

【0207】

使用し得る陰イオン性、双性イオン性、両性および非イオン性ポリマーは、例えば、酢酸ビニル／クロトン酸共重合体、ビニルピロリドン／アクリル酸ビニル共重合体、酢酸ビニル／マレイン酸ブチル／アクリル酸イソボルニル共重合体、メチルビニルエーテル／無水マレイン酸共重合体およびそれらのエステル、非架橋ポリアクリル酸およびポリオール架橋ポリアクリル酸、アクリルアミドプロピルトリメチルアンモニウムクロリド／アクリレート共重合体、オクチルアクリルアミド／メタクリル酸メチル／tert-ブチルアミノエチルメタクリレート／メタクリル酸2-ヒドロキシプロピル共重合体、ポリビニルピロリドン、ビニルピロリドン／酢酸ビニル共重合体、ビニルピロリドン／ジメチルアミノエチルメタクリレート／ビニルカプロラクタムターポリマーおよび必要に応じて誘導体化されたセルロースエーテルおよびシリコーンである。

40

【0208】

同様に適当なポリマーは、多糖類、特にキサンタンガム、グアーガム、寒天、アルギ

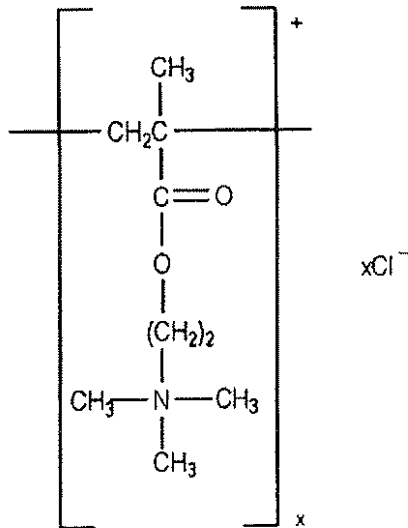
50

ン酸塩およびチロース、ならびに、例えばAerosilグレード（親水性シリカ）、カルボキシメチルセルロースおよびヒドロキシエチルセルロースおよびヒドロキシプロピルセルロース、ポリビニルアルコール、ポリビニルピロリドンおよびベントナイト、例えばBenton e（登録商標）Gel VS-5PC（Rheox）である。

【0209】

例えば、下記一般式で示される4級ポリマー（INCI名ポリクオタニウム - 37）も適当である：

【化2】



10

20

代りに、アルキル化又はプロトン化により得られ得る他のジアルキルアミノアルキル（メタ）アクリレートおよびそれらのアンモニウム塩、またはアルキル化またはプロトン化により得られ得るジアルキルアミノアルキル（メタ）アクリルアミドおよびそれらのアンモニウム塩を使用することもできる。MAPTAC、APTAC、MADAME、ADAME、DMAEMAおよびTMAEMACを含むポリマーが特に好ましい。さらに、本発明において、陰イオン性、さらに陽イオン性または非荷電性モノマーとの共重合体を使用することもでき、特に、特定のアルキルアミノアルキル（メタ）アクリレートまたはアルキルアミノアルキル（メタ）アクリルアミドモノマーと同様に、さらに（メタ）アクリル酸および/または2-アクリルアミド-2-メチルプロパンスルホン酸および/またはアクリルアミドおよび/またはビニルピロリドンおよび/またはアルキル（メタ）アクリレートを含むものを使用し得る。一例として、INCI名ポリクオタニウム - 11、ポリクオタニウム - 13、ポリクオタニウム - 14、ポリクオタニウム - 15、ポリクオタニウム - 28、ポリクオタニウム - 32、ポリクオタニウム - 43、ポリクオタニウム - 47のポリマーを挙げ得る。

30

【0210】

〔油体〕

本発明の実施態様において、本発明の製剤は少なくとも1つの油体を含む。一般的に、本発明の製剤は、炭化水素混合物を油体として含む。したがって、ここで、特定の好ましい実施態様において、本発明の製剤は、「さらなる油体」とも称される本発明の炭化水素混合物以外の油体を含む。

40

【0211】

本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つの（さらなる）油体を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含む、かつ炭化水素が、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含む炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つの（さらなる）油体を含む化粧品および/または医薬品製剤を提供する。

50

## 【 0 2 1 2 】

油体（本発明の炭化水素混合物とさらなる油体）は、一般的に、製剤の総重量に基づいて、0.1～90重量％、特に0.1～80重量％、特に0.5～70重量％、好ましくは1～60重量％、特に1～50重量％、特に1～40重量％、好ましくは5～25重量％、特に5～15重量％の総量で存在する。さらなる油体は、一般的に、製剤の総重量に基づいて0.1～40重量％の量で存在する。

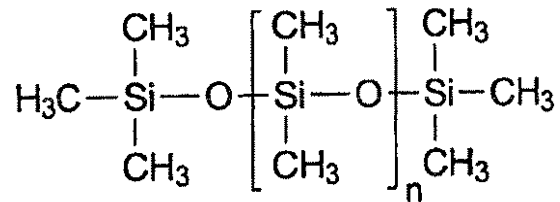
## 【 0 2 1 3 】

適当なさらなる油体は、例えば、6～18個、好ましくは8～10個の炭素原子を有する脂肪アルコールに基づくゲルベアルコール、および他のさらなるエステル、例えば、ミリスチルミリステート、ミリスチルパルミテート、ミリスチルステアレート、ミリスチルイソステアレート、ミリスチルオレエート、ミリスチルベヘネート、ミリスチルエルケート、セチルミリステート、セチルパルミテート、セチルステアレート、セチルイソステアレート、セチルオレエート、セチルベヘネート、セチルエルケート、ステアリルミリステート、ステアリルパルミテート、ステアリルステアレート、ステアリルイソステアレート、ステアリルオレエート、ステアリルベヘネート、ステアリルエルケート、イソステアリルミリステート、イソステアリルパルミテート、イソステアリルステアレート、イソステアリルイソステアレート、イソステアリルオレエート、イソステアリルベヘネート、イソステアリルオレエート、オレイルミリステート、オレイルパルミテート、オレイルステアレート、オレイルイソステアレート、オレイルオレエート、オレイルベヘネート、オレイルエルケート、ベヘニルミリステート、ベヘニルパルミテート、ベヘニルステアレート、ベヘニルイソステアレート、ベヘニルオレエート、ベヘニルベヘネート、ベヘニルエルケート、エルシルミリステート、エルシルパルミテート、エルシルステアレート、エルシルイソステアレート、エルシルオレエート、エルシルベヘネートおよびエルシルエルケートである。さらに適当な油体は、 $C_{18} - C_{38}$  アルキルヒドロキシカルボン酸と直鎖または分枝状  $C_6 - C_{22}$  脂肪アルコール（特にリンゴ酸ジオクチル）とのエステル、直鎖および/または分枝状脂肪酸と多価アルコール（例えば、プロピレングリコール、二量体ジオールまたは三量体トリオール）とのエステル、 $C_6 - C_{10}$  脂肪酸に基づくトリグリセリド、 $C_6 - C_{18}$  脂肪酸に基づく液体モノ-ノジ-ノトリグリセリド混合物、 $C_6 - C_{22}$  脂肪アルコールおよび/またはゲルベアルコールと芳香族カルボン酸（特に安息香酸）とのエステル、 $C_2 - C_{12}$  ジカルボン酸と2～10個の炭素原子および2～6個のヒドロキシ基を有するポリオールとのエステル、植物油、分枝状第1級アルコール、置換シクロヘキサン、直鎖および分枝状  $C_6 - C_{22}$  脂肪アルコールカーボネート、例えばジカプリリルカーボネート（Cetiol（登録商標）CC）、6～18個、好ましくは8～10個の炭素原子を有する脂肪アルコールに基づくゲルベカーボネート、安息香酸と直鎖状および/または分枝  $C_6 - C_{22}$  アルコールとのエステル（例えば、Finsolv（登録商標）TN）、アルキル基に6～22個の炭素原子を有する、直鎖または分枝状の、対称または非対称のジアルキルエーテル、例えばジカプリリルエーテル（Cetiol（登録商標）OE）、エポキシ化脂肪酸エステルのポリオールおよび炭化水素またはそれらの混合物による開環生成物である。

## 【 0 2 1 4 】

さらに使用しうる油体は、例えばシリコーン油である。シリコーン油は、環状および/または直鎖状シリコーン油であってよい。シリコーン油は、ケイ素原子が鎖状および/または格子状に酸素原子を介して結合し、ケイ素の残留原子価が炭化水素基（通常メチル基、さらにまれにエチル基、プロピル基、フェニル基等）により満たされている、高分子量合成ポリマー化合物である。体系的に、シリコーン油はポリオルガノシロキサンと称される。量的にこの群の最も重要な化合物であり、下記構造式：

## 【化 3】



で示されるメチル置換ポリオルガノシロキサンは、ポリジメチルシロキサンまたはジメチコン（INCI名）とも称される。ジメチコンには、様々な鎖長および様々な分子量のものがある。

10

## 【0215】

本発明において有利なポリオルガノシロキサンは、例えば、Evonik GoldschmidtからAbil 10～10000の商品名のもと市販されているジメチルポリシロキサン（ポリ（ジメチルシロキサン））である。さらに、フェニルメチルポリシロキサン（INCI：フェニルジメチコン、フェニルトリメチコン）、INCI名によりシクロメチコンとも称される環状シリコーン（オクタメチルシクロテトラシロキサンまたはデカメチルシクロペンタシロキサン）、アミノ変性シリコーン（INCI：アモジメチコン）およびシリコーンワックス、例えば、Evonik Goldschmidtから種々のAbilワックスグレードで市販されている、ポリシロキサンポリアルキレンコポリマー（INCI：ステアリルジメチコンおよびセチルジメチコン）および

20

## 【0216】

本発明の製剤は、さらに、生体活性物質、防虫剤、チロシナーゼ阻害剤、防腐剤、香油、過脂肪剤、安定剤および／またはヒドロトロップを含有し得る。

## 【0217】

本発明は、0.1～80重量%の<sup>14</sup>C同位体含有炭化水素混合物と、少なくとも1つの生体活性物質、防虫剤、チロシナーゼ阻害剤、防腐剤、香油、安定剤および／またはヒドロトロップを含有する化粧品および／または医薬品製剤を提供する。

30

本発明は、好ましくは、<sup>14</sup>C同位体を含有し、かつ炭化水素が、炭素数が1を超えて異なる、好ましくは2異なる少なくとも2つの異なる炭化水素を含有する炭化水素混合物0.1～80重量%と、少なくとも1つの生体活性物質、防虫剤、チロシナーゼ阻害剤、防腐剤、香油、安定剤および／またはヒドロトロップを含む化粧品および／または医薬品製剤を提供する。

## 【0218】

生体活性物質とは、例えば、トコフェロール、トコフェロールアセテート、トコフェロールパルミテート、アスコルビン酸、（デオキシ）リボ核酸およびその断片化生成物、-グルカン、レチノール、ピサボロール、アラントイン、フィタントリオール、パンテノール、AHA酸、アミノ酸、セラミド、擬似セラミド、精油、植物抽出物、例えばアロエベラ、ブルーベリー抽出物、パンバラナッツ抽出物およびビタミン複合体を意味すると理解される。

40

## 【0219】

使用し得る防虫剤には、例えば、N,N-ジメチル-m-トルアミド、1,2-ペンタンジオールまたは3-(N-n-ブチル-N-アセチルアミノ)プロピオン酸エチルエステル（これはInsect Repellent（登録商標）3535の名称でMerck KGaAから市販されている）およびブチルアセチルアミノプロピオネートが含まれる。

## 【0220】

50

使用し得るチロシナーゼ阻害剤（メラニンの精製を抑制し脱色剤における使用が見出されている）には、例えば、アルブチン、フェルラ酸、コウジ酸、クマリン酸およびアスコルビン酸（ビタミンC）が含まれる。

【0221】

適当な防腐剤は、例えば、フェノキシエタノール、ホルムアルデヒド溶液、パラベン、ペンタンジオールまたはソルビン酸およびSurfacine（登録商標）の商品名のもと既知の銀錯体である。さらに、WO 07 / 048757に記載されている5～8個の炭素原子を有する1,2-アルカンジオールも、防腐剤として適当である。

【0222】

適当な防腐剤は、特に、委員会指令Annex VI（バージョン：技術的進歩にAnnexes IVおよびVを適合させるための、化粧品に関する理事会指令76/768/EECを改正する2007年4月17日の委員会指令2007/22/EC）により認可された物質である。これを、ここで明らかに参照する。

【0223】

香油には、天然および合成香料の混合物が含まれる。天然香料は、花、茎および葉、果実、果皮、根、木、ハーブおよび草、針葉および枝、樹脂およびバルサムからの抽出物である。また、動物性原料、例えばシベットおよびビーバー、およびエステル、エーテル、アルデヒド、ケトン、アルコールおよび炭化水素型の合成香料化合物も通常使用し得る。

【0224】

使用される安定剤は、脂肪酸の金属塩、例えばステアリン酸またはリシノール酸マグネシウム、アルミニウムおよび/または亜鉛であってよい。

【0225】

流動性を改善するために、ヒドロトロップ、例えばエタノール、イソプロピルアルコール、またはポリオールを使用することができる。ここで、使用し得るポリオールは、好ましくは2～15個の炭素原子および少なくとも2個のヒドロキシ基を有する。ポリオールは、他の官能性基、特にアミノ基を含有していてもよく、または窒素で変性されていてもよい。

【実施例】

【0226】

〔調製実施例1：本発明の炭化水素の調製〕

本発明の炭化水素混合物を調製するため、はじめに、互いに別々に、トリデカンおよびウンデカンを特定の脂肪アルコールから調製し、その後互いに対して所望の割合で混合した。

【0227】

〔1a）1-テトラデカノールからのトリデカンの調製〕

はじめに1000gの1-テトラデカノール（4.7モル；CognisからのLorol（登録商標）C14）を、10gのニッケル触媒（EngelhardからのNi-5249P；Ni含有量＝63重量％）とともに攪拌圧力容器へ投入し、240℃まで加熱した。続いて、20barの圧力下、12時間にわたり散布チューブを介して水素を加え、同時に、反応ガスを容器の蓋にあるバルブを介して放出した。その後、生成物を冷却し、放出し、濾過した。最終重量845gの反応生成物が得られた。

【0228】

GC分析は、以下の組成を示した：89.0％トリデカン、2.1％テトラデカン、4.1％1-テトラデカノール、4.2％二量体反応生成物。この反応生成物を蒸留により分別し、純粋なトリデカンを得て、その後窒素により脱臭した。これにより無色の、流動性がある低臭性生成物が得られた。

【0229】

〔1b）1-ドデカノールからのウンデカンの調製〕

はじめに1000gの1-ドデカノール（5.4モル；CognisからのLorol（登録商標）C12）を、10gのニッケル触媒（EngelhardからのNi-5249P；Ni含有量＝63重量％）

10

20

30

40

50

とともに攪拌圧力容器へ投入し、240 まで加熱した。続いて、20 bar の圧力下、12 時間にわたり散布チューブを介して水素を加え、同時に、反応ガスを容器の蓋にあるバルブを介して放出した。その後、生成物を冷却し、放出し、濾過した。最終重量 835 g の反応生成物が得られた。

【0230】

GC 分析は、以下の組成を示した：68.4 % ウンデカン、0.6 % ドデカン、21.7 % 1 - ドデカノール、7.2 % 二量体反応生成物。純粋なウンデカンを得るために、この反応生成物を蒸留した。その後窒素により脱臭した。これにより無色の、流動性がある低臭性生成物が得られた。

【0231】

実施例 1 a ) および実施例 1 b ) により得られる化合物を使用して、下記の本発明の炭化水素混合物を調製した。

実施例 1 の炭化水素混合物の組成物：76 重量 % の n - ウンデカン、24 重量 % の n - トリデカン。

【0232】

〔調製実施例 2〕

本発明の炭化水素混合物を調製するため、調製される炭化水素混合物に対応する C12 および C14 脂肪アルコールを含有する脂肪アルコール混合物を、還元的脱ヒドロキシメチル化した。

【0233】

はじめに 1000 g の Lorol (登録商標) Spezial (Cognis; 脂肪アルコール分布：C12 70 ~ 75 %、C14 24 ~ 30 %、C16 4 % 未満) および 10 g のニッケル触媒 (Engelhard からの Ni-5249P; Ni 含有量 = 63 重量 %) をオートクレーブに投入した。該反応器を閉じ、真空にした。その後、反応混合物を、減圧下で攪拌しながら 30 分間、約 80 まで加熱した。その後、反応器を水素により約 80 bar の状態にし、続けて 250 まで加熱した。圧力が一定のままで、大部分の脂肪アルコールが所望の炭化水素に変換された時、反応は完了する。窒素による減圧および放出後、生成物を蒸留により精製した。無色の液体として精製された生成物が得られた。

調製実施例 2 により得られる炭化水素混合物は、下記の組成を有する (GC 分析)。

【0234】

【表 1】

下記の炭素数を有する炭化水素	炭化水素の総量に対する割合 (重量%)
C11 (直鎖)	67
C12	4
C13 (直鎖)	26
C14	1.5
C9, C10, C15	1.5

【0235】

直鎖状 C11 炭化水素の直鎖状 C13 炭化水素に対する重量比は、2.57 である。C12 炭化水素の C14 炭化水素に対する重量比は、同じく 2.57 である。

【0236】

〔調製実施例 3〕

本発明の炭化水素混合物を調製するため、調製される炭化水素混合物に対応する C12、C14、C16 および C18 脂肪アルコールを含有する脂肪アルコール混合物を、還元的脱ヒドロキシメチル化した：はじめに、1000 g の Lorol (登録商標) Technisch (Co

10

20

30

40

50

gnis ; C 1 2、C 1 4、C 1 6 および C 1 8 脂肪アルコールの脂肪アルコール混合物) および 1 0 g のニッケル触媒 ( EngelhardからのNi-5249P ; Ni含有量 = 6 3 重量%) をオートクレーブに投入した。該反応器を閉じ、真空にした。その後、反応混合物を、減圧下で攪拌しながら 3 0 分間、約 8 0 まで加熱した。その後、反応器を水素により約 8 0 b a r の状態にし、続けて 2 5 0 まで加熱した。圧力が一定のままで、大部分の脂肪アルコールが所望の炭化水素に変換された時、反応は完了する。窒素による減圧および放出後、生成物を蒸留により精製した。無色の液体として精製された生成物が得られた。

【 0 2 3 7 】

調製実施例 3 により得られる炭化水素混合物は、以下の組成を有する ( G C 分析 ) : C 1 1 炭化水素 5 5 %、C 1 3 炭化水素 2 0 %、C 1 5 炭化水素 1 0 %、C 1 7 炭化水素 1 5 %。

10

【 0 2 3 8 】

〔調製実施例 4 A ~ C 〕

本発明の炭化水素混合物を調製するため、調製される炭化水素混合物に対応する C 1 6 および C 1 8 脂肪アルコールを含有する脂肪アルコール混合物を、脱ヒドロキシメチル化した : はじめに、1 0 0 0 g の Stenol ( 登録商標 ) 16 65 ( Cognis ; C 1 6 および C 1 8 脂肪アルコールの脂肪アルコール混合物) および 1 0 g のニッケル触媒 ( EngelhardからのNi-5249P ; Ni含有量 = 6 3 重量%) をオートクレーブに投入した。該反応器を閉じ、真空にした。その後、反応混合物を、減圧下で攪拌しながら 3 0 分間、約 8 0 まで加熱した。その後、反応器を水素により約 8 0 b a r の状態にし、続けて 2 5 0 まで加熱した。圧力が一定のままで、大部分の脂肪アルコールが所望の炭化水素に変換された時、反応は完了する。窒素による減圧および放出後、生成物を蒸留により精製した。無色の液体として精製された生成物が得られた。

20

【 0 2 3 9 】

調製実施例 4 A により得られる炭化水素混合物は、以下の組成を有する ( G C 分析 ) : C 1 5 炭化水素 6 5 %、C 1 7 炭化水素 3 5 %。

【 0 2 4 0 】

1 0 0 0 g の Srenol ( 登録商標 ) 16-18 ( Cognis ; C 1 6 および C 1 8 脂肪アルコールの脂肪アルコール混合物) ( = 調製実施例 4 B )、ならびに 1 0 0 0 g の Hydrenol ( 登録商標 ) D ( Cognis ; C 1 6 および C 1 8 脂肪アルコールの脂肪アルコール混合物) ( = 調製実施例 4 C ) を、同様の方法で変換した。

30

【 0 2 4 1 】

調製実施例 4 B により得られる炭化水素混合物は、以下の組成を有する ( G C 分析 ) : C 1 5 炭化水素 5 0 %、C 1 7 炭化水素 5 0 %。

調製実施例 4 C により得られる炭化水素混合物は、以下の組成を有する ( G C 分析 ) : C 1 5 炭化水素 3 0 %、C 1 7 炭化水素 7 0 %。

【 0 2 4 2 】

〔調製実施例 5 A ~ C 〕

本発明の炭化水素混合物を調製するため、調製される炭化水素混合物に対応する C 1 8、C 2 0 および C 2 2 脂肪アルコールを含有する脂肪アルコール混合物を、脱ヒドロキシメチル化した : はじめに、1 0 0 0 g の Stenol ( 登録商標 ) 1822-45 ( Cognis ; C 1 8、C 2 0 および C 2 2 脂肪アルコールの脂肪アルコール混合物) および 1 0 g のニッケル触媒 ( EngelhardからのNi-5249P ; Ni含有量 = 6 3 重量%) をオートクレーブに投入した。該反応器を閉じ、真空にした。その後、反応混合物を、減圧下で攪拌しながら 3 0 分間、約 8 0 まで加熱した。その後、反応器を水素により約 8 0 b a r の状態にし、続けて 2 5 0 まで加熱した。圧力が一定のままで、大部分の脂肪アルコールが所望の炭化水素に変換された時、反応は完了する。窒素による減圧および放出後、生成物を蒸留により精製した。無色の液体として精製された生成物が得られた。

40

【 0 2 4 3 】

調製実施例 5 A により得られる炭化水素混合物は、以下の組成を有する ( G C 分析 ) :

50



C 1 7 炭化水素 4 5 %、C 1 9 炭化水素 1 0 %、C 2 1 炭化水素 4 5 %。

【 0 2 4 4 】

1 0 0 0 g の Stenol (登録商標) AT (Cognis ; C 1 8、C 2 0 および C 2 2 脂肪アルコールの脂肪アルコール混合物) (= 調製実施例 5 B)、ならびに 1 0 0 0 g の Stenol (登録商標) 1822-70 (Cognis ; C 1 8、C 2 0 および C 2 2 脂肪アルコールの脂肪アルコール混合物) (= 調製実施例 5 C) を、同様の方法で変換した。

【 0 2 4 5 】

調製実施例 5 B により得られる炭化水素混合物は、以下の組成を有する (GC 分析) :  
C 1 7 炭化水素 4 0 %、C 1 9 炭化水素 1 2 %、C 2 1 炭化水素 4 8 %。

調製実施例 5 C により得られる炭化水素混合物は、以下の組成を有する (GC 分析) :  
C 1 7 炭化水素 1 0 %、C 1 9 炭化水素 1 5 %、C 2 1 炭化水素 7 5 %。

【 0 2 4 6 】

〔 使用実施例 1 〕

調製実施例 2 により得られた n - ウンデカンおよび n - トリデカンを、下記の脱臭スティック製剤に使用し、得られた製剤の硬度を試験した (全て重量 % で表す)。

【 0 2 4 7 】

【 表 2 】

成分 INCI (商品名)	本発明の 実施例	比較例
ステアリルアルコール (Lanette (登録商標) 18)	14.7	14.7
水添ヒマシ油 (Cutina (登録商標) HR)	3.7	3.7
シクロメチコン (Dow Corning (登録商標) 245)	—	58.7
調製実施例 2 による n-ウンデカン/n-トリデカン	58.7	—
アルミニウムジシロキサンテトラカボヒドレックスグリシン (Rezal (登録商標) 36 GP)	22.9	22.9
硬度	4.0	3.5

【 0 2 4 8 】

硬度 (押し込み深度) は、Deutsche Einheitsmethoden zur Untersuchung von Fetten, Fettprodukten, Tensiden und verwandten Stoffen (脂肪、脂肪生成物、界面活性剤および関連する物質を分析するための独国の標準方法)、Bestimmung der Haerte von Wachsen (ワックス硬度の測定)、Nadel-Penetration (侵入針) M-III 9b (98) に従って測定した。

【 0 2 4 9 】

〔 使用実施例 2 〕

下記の処方にしたがって作製されたクリームは、5 人の感覚的に熟練した被験者の一団により試験され、感覚的に「軽い」として評価された。

【 0 2 5 0 】

【表 3】

多目的用クリーム（W/O）

相	成分／商品名	INCI	重量%
I.	DEHYMULS(登録商標)E	ジ コイルペ ンタエリスリチルジ ステアリルトレート (および)ソルビ タンセスキオレート (および)セラ アルバ (ミツロウ) (および)ステアリン酸アルミニウム	3.00
	DEHYMULS(登録商標)PGPH	ジ ホ リヒド ロキシステアリン酸ホ リグ リセリル-2	2.00
	CETIOL(登録商標)OE	ジ カブ リリルエーテル	5.00
	CETIOL(登録商標)868	ステアリン酸エチルヘキシル	5.00
	MYRITOL(登録商標)331	ココグ リセリト	1.00
	調製実施例1または調製実施例2による炭化水素混合物		6.00
II.	グリセロール 86%		5.00
	MgSO <sub>4</sub> × 7H <sub>2</sub> O		1.00
	脱イオン水		72.00
III.	防腐剤		適量

10

20

## 【0251】

製造：相Iの成分を80～85 で溶解し、均一になるよう攪拌した。相IIの成分を、80～85 まで加熱し、攪拌しながらゆっくりと相Iへ加えた。混合物をこの温度で5分以上攪拌した。その後、該エマルションを攪拌しながら冷却し、65～55 で均質化（ホモジナイズ）した。エマルションが均質になったらすぐに、さらに攪拌しながら30まで冷却した。その後、相III成分を加え、混合物を再度攪拌した。

## 【0252】

〔処方例〕

30

【表 4】

## 唇の保湿および保護のためのバルサム

相	成分	INCI	重量%
I.	Cerilla Raffinée G*	キャンデリラ(Euphorbia Cerifera)ワックス	7.53
	CUTINA(登録商標)LM conc.	ジヒドロキシステアリン酸ホリグリセリル-2 およびオクチルドデカノールおよび Copernicia Cerifera(カルナバ)ワックス およびEuphorbia Cerifera(キャンデリラ)ワックスおよびミツロウおよびセアリル グルコシド およびセアリルアルコール	6.57
	Colophane claire type Y	ロジン	1.89
	Cerauba T1*	カルナバ(Copernicia Cerifera)ワックス	1.86
	Cerabeil blanche 1*	ミツロウ	5.31
	調製実施例1または2による炭化水素混合物		15.57
	EUTANOL(登録商標)G	オクチルドデカノール	21.71
	Crodamol ML (Croda)	乳酸ミリスチル	1.13
	ELESTAB(登録商標)366		0.43
II.	Castor oil	ヒマシ油	35.00
III.	IRWINOL(登録商標)LS 9319	アフリカワイルドマンゴ-バター	3.00

\* : L a m b e r t - R i v i e r e (フランス) から入手可能

## 【0253】

製造：相Iを85 で溶解し、相IIを加え80 の温度を保った。相IIIを、モールド(50 c t s ジメチコンを塗り40 に予備加熱した)に投入する直前に加えた。原料をモールドに投入し、40 まで冷却した。該モールドを冷凍庫で0 近くまで冷却した。

## 【0254】

【表 5】

## スタイリングワックス

相	成分	INCI	重量%
I.	CUTINA(登録商標)MD	ステアリン酸グリセリル	47.0
	COMPERLAN(登録商標)100	コカミトMEA	2.50
	CUTINA(登録商標)HR粉末	水添ヒマシ油	2.50
	PLANTACARE(登録商標)1200 UP	ラウリルグルコシド	5.00
	LANETTE(登録商標)0	セアリルアルコール	7.00
	CUTINA(登録商標)CP	パルミチン酸セチル	7.00
	EUMULGIN(登録商標)0 20	オレス-20	5.00
	調製実施例1または2による炭化水素混合物		23.5
	Wacker Siliconoil AK 350	ジメチコン	0.50

## 【0255】

10

20

30

40

50

全ての成分を 80℃ まで加熱し、均質化（ホモジナイズ）することにより製造した。

【0256】

【表6】

保湿ボディミルク

相	成分	INCI	重量%
	EMULGADE (登録商標) CM	イソノン酸セテaryl (および) セテレス-20 (および) セテaryl アルコール (および) ステアリン酸グリセリル (および) グリセロール (および) セテレス	5.0
	EUMULGIN (登録商標) VL 75	ラウリルグルコシド (および) ジホリトドキシス テアリン酸ホリグリセリル-2 (および) グリセロール	2.0
	CETIOL (登録商標) OE	ジカプリルエーテル	4.0
	CETIOL (登録商標) J 600	エルカ酸オレイル	1.0
	ミリスチン酸イソプロピル	ミリスチン酸イソプロピル	7.0
	調製実施例1または2による炭化水素混合物		7.0
II.	脱イオン水		100まで 加える
III.	Cosmedia SP	ホリアクリル酸ナトリウム	0.4
IV.	HISPAGEL (登録商標) 200	グリセロール (および) ホリアクリル酸グリセリル	20.0
V.	防腐剤、香料		適量
	pH 5.5		

【0257】

製造は、相Iと水を、室温で、攪拌しながら混合することにより行われた。その後、相I  
Iを加え、上記混合物が均質化され膨張するまで攪拌した。その後、相IVを加え、次いで  
相Vを加え、その後pHを調整した。

【0258】

10

20

30

【表 7】

## O/Wソフトクリーム

相	成分	INCI	重量%
I.	EMULGADE(登録商標)SE-PF	ステアリン酸グリセリル(および)セアレス-20(および)セアレス-12 (および)ステアリルアルコール(および) セアレス-20(および)ジステアリルエーテル	6.0
	LANETTE(登録商標)O	セアリルアルコール	1.0
	CUTINA(登録商標)MD	ステアリン酸グリセリル	2.0
	CETIOL(登録商標)MM	ミリスチン酸ミリスチル	2.0
	調製実施例1または2による炭化水素混合物		8.0
	林ハ <sup>®</sup> 油	Simmondsia Chinensis(林ハ <sup>®</sup> ) 種子油	2.0
	COPHEROL(登録商標)1250	酢酸トコフェロール	0.5
		ジメチコン	0.5
		シクロメチコン	3.0
II.	水	水	100になる まで加える
		フロヒレングリコール	3.0
III.	HISPAGEL(登録商標)200	グリセロール(および)ホリアクリル酸 グリセリル	15.0
IV.	防腐剤		適量
	pH 5.5-6.5		

## 【0259】

このクリームは、相Iを80 まで加熱し、同じく相IIを80 まで加熱し、攪拌しながら相Iへ相IIを加えることにより製造した。この混合物を攪拌しながら冷却し、適当な分散設備(例えば、Ultra Turrax)を用いて約55 で均質化(ホモジナイズ)した。その後相IIIを、攪拌し続けながら加え、相IVを加えて、pHを調整した。

## 【0260】

10

20

30

【表 8】

## W/Oクリーム

相	成分／商品名	INCI	重量%
I.	MONOMULS(登録商標) 90 0 18	オレイン酸グリセリル	2.00
	LAMEFORM(登録商標) TGI	ジイソステアリン酸ホトリゲリセリル-3	4.00
	CETIOL(登録商標)A	ラウリン酸ヘキシル	12.00
	調製実施例1または2による炭化水素混合物		12.00
	SIPOL(登録商標) C 16/18 OR	セテアリルアルコール	1.00
	ステアリン酸亜鉛	ステアリン酸亜鉛	2.00
	酸化亜鉛	CI 77947(または)酸化亜鉛	15.00
	硫酸マグネシウム	硫酸マグネシウム	1.00
	グリセロール	グリセリン	3.00
	防腐剤		適量
	ベンジルアルコール	ベンジルアルコール	0.40
	HYDAGEN(登録商標)B	ヒサホロール	0.50
	水	水	100.00

## 【0261】

はじめの7成分を85にて溶解した。硫酸マグネシウムおよびグリセロールを水に溶解し、この混合物を85に加熱した。この水相を油相に加え、分散した。攪拌しながら、混合物を40まで冷却し、その後、ベンジルアルコールおよびHydagen Bを混合し、エマルジョンへ加えた。さらに攪拌しながら、混合物を30以下まで冷却し、均質化した。

## 【0262】

【表 9】

## 「ボディーウォッシュ」洗浄エマルジョン

相	成分	INCI	重量%
I.	Texapon ALS-IS	ラウリル硫酸アンモニウム	30.00
	TEXAPON(登録商標) NS0	ラウリル硫酸ナトリウム	18.00
	調製実施例1または2による炭化水素混合物		18.00
	Plantacare(登録商標)1200	ラウリルグリコシド	8.00
II.	Jaguar HP 105	ヒドキシプロピルグアー	2.00
	Euxyl K400	メチルジブロモエタノールおよびフェノキシエタノール	0.10
	水	水	23.90
	pH値	5.6	

## フロントページの続き

- (31)優先権主張番号 102008012458.3  
(32)優先日 平成20年3月4日(2008.3.4)  
(33)優先権主張国 ドイツ(DE)  
(31)優先権主張番号 102008017032.1  
(32)優先日 平成20年4月3日(2008.4.3)  
(33)優先権主張国 ドイツ(DE)  
(31)優先権主張番号 102008017034.8  
(32)優先日 平成20年4月3日(2008.4.3)  
(33)優先権主張国 ドイツ(DE)

- (74)代理人 100172605  
弁理士 岩木 郁子  
(72)発明者 ベッティナ・ヤックヴェルト  
ドイツ連邦共和国デー - 4 0 7 6 4 ランゲンフェルト、ハイムヒェンヴェーク 6 番  
(72)発明者 マルクス・ディールカー  
ドイツ連邦共和国デー - 4 0 5 9 7 デュッセルドルフ、ベンローデシュトラッセ 1 2 9 番  
(72)発明者 ロルフ・カヴァ  
ドイツ連邦共和国デー - 4 0 7 8 9 モンハイム、フォンタネシュトラッセ 2 8 番  
(72)発明者 シュテファニー・マウラー  
ドイツ連邦共和国デー - 6 8 1 6 3 マンハイム、シュヴァルトツヴァルトシュトラッセ 2 5 番

## 合議体

審判長 松浦 新司  
審判官 関 美祝  
審判官 小久保 勝伊

- (56)参考文献 国際公開第2004/011581(WO, A1)  
特表2002-501543(JP, A)  
国際公開第2007/042682(WO, A1)  
特開昭63-264513(JP, A)  
特開2005-281151(JP, A)  
英国特許出願公告第543327(GB, A)  
国際公開第2006/094642(WO, A1)  
国際公開第2007/068797(WO, A2)  
特開2005-23462(JP, A)  
特表昭62-501776(JP, A)  
特開2005-306968(JP, A)  
特開2003-201215(JP, A)  
特表2004-502026(JP, A)  
国際公開第2007/068371(WO, A1)  
Naturwissenschaften 80, 30-34(1993)  
Chemical Abstracts, Vol. 84, 1976, 84:149480y  
Chemical Abstracts, Vol. 106, 1987, 106:31527p  
Journal of the American Chemical Society, 1943, Vol. 65, No. 10, 1809-1813

- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)  
A61K 8/00 - 8/99

A61K 47/00 - 47/48

A61Q 1/00 - 90/00

C A P L U S ( S T N )