

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第4643907号
(P4643907)

(45) 発行日 平成23年3月2日(2011.3.2)

(24) 登録日 平成22年12月10日(2010.12.10)

(51) Int. Cl.		F I
C07C 69/24	(2006.01)	C07C 69/24
A61K 8/19	(2006.01)	A61K 8/19
A61K 8/30	(2006.01)	A61K 8/30
A61K 8/49	(2006.01)	A61K 8/49
A61K 8/55	(2006.01)	A61K 8/55

請求項の数 6 (全 67 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2003-535725 (P2003-535725)	(73) 特許権者	501130785 クローダ、インコーポレイテッド アメリカ合衆国ニュージャージー州088 37-3907、エディソン、コロンバス ・サークル 300
(86) (22) 出願日	平成14年10月17日(2002.10.17)	(74) 代理人	100099623 弁理士 奥山 尚一
(65) 公表番号	特表2005-506347 (P2005-506347A)	(74) 代理人	100096769 弁理士 有原 幸一
(43) 公表日	平成17年3月3日(2005.3.3)	(74) 代理人	100107319 弁理士 松島 鉄男
(86) 国際出願番号	PCT/US2002/033198	(74) 代理人	100114591 弁理士 河村 英文
(87) 国際公開番号	W02003/032919	(74) 代理人	100118407 弁理士 吉田 尚美
(87) 国際公開日	平成15年4月24日(2003.4.24)		
審査請求日	平成17年10月12日(2005.10.12)		
(31) 優先権主張番号	60/330, 208		
(32) 優先日	平成13年10月17日(2001.10.17)		
(33) 優先権主張国	米国 (US)		
(31) 優先権主張番号	10/272, 553		
(32) 優先日	平成14年10月16日(2002.10.16)		
(33) 優先権主張国	米国 (US)		

最終頁に続く

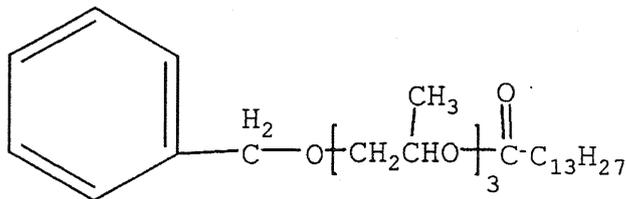
(54) 【発明の名称】 芳香族アルコキシル化アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステル

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

式

【化1】



10

を有する、エステル。

【請求項2】

a) 請求項1に記載されたエステルであって、組成物の0.1~99重量%の量で存在する前記エステル、およびb) 組成物の0.1~60重量%の量で存在する少なくとも1つの機能性成分；を含む組成物であって、パーソナルケアまたは化粧品製品である組成物。

【請求項3】

前記機能性成分が、サンスクリーン活性成分、界面活性剤、保湿剤、コンディショナー、防腐薬、酸化防止剤、還元剤、制汗剤、および香料からなる群より選択される活性成分

20

である、請求項 2 の組成物。

【請求項 4】

前記活性成分が、オクチルメトキシシンナメート、フェニルベンズイミダゾールスルホン酸、メンチルアンスラニレート、シンナミドプロピルトリモニウムクロリド、パラ - アミノ安息香酸、ベンゾフェノン - 1、ベンゾフェノン - 2、ベンゾフェノン - 3、ベンゾフェノン - 4、ベンゾフェノン - 5、ベンゾフェノン - 6、ベンゾフェノン - 8、ベンゾフェノン - 12、メトキシシンナメート、アヴォベンゾン、グリセリルパラ - アミノ安息香酸、メチルアンスラニレート、オクトクリレン、オクチルジメチルパラ - アミノ安息香酸、オクチルサリチレート、酸化亜鉛、二酸化チタン、および赤色ワセリンからなる群より選択されるサンスクリーン化合物である、請求項 3 の組成物。

10

【請求項 5】

前記パーソナルケアまたは化粧品製品が、サンタンローション、サンスクリーンローション、サンスクリーンスプレーローション、UV保護シャンプー、およびUV保護ヘアコンディショナーからなる群より選択される局所サンスクリーン製品調合物である、請求項 4 の組成物。

【請求項 6】

組成物の 1 ~ 40 重量%の量で存在する少なくとも 1 つのシクロメチコン化合物をさらに含む、請求項 2 の組成物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

20

【0001】

本発明は、化学製造および特に、化粧品およびパーソナルケア製品の分野に関する。

【背景技術】

【0002】

シャンプー、コンディショナー、サンスクリーンローション、リップスティック製品、マスカラなどのパーソナルケアおよび化粧品製品の調合は、多数の課題を呈示する。そのような製品の感触および外観は消費者に訴えるべきである。たとえばそのような製品の一部は、べたつかない皮膚触感、良好な皮膚延展性、快い香りなどを有することが望ましい。同時に化粧品およびパーソナルケア製品は通例、多種多様の必要な成分を含む。調合者にとって、消費者に訴える物理的特性を得る必要性は、製品中に必要な機能性成分を含める必要性と共存する。

30

【0003】

パーソナルケアおよび化粧品製品は通例、皮膚軟化薬として機能する化学化合物を含む。皮膚軟化薬は、所望の皮膚触感に寄与するが、調合物中では他の目的も果たすことが多い。

【0004】

製品調合物の主要な部分を構成することが多い皮膚軟化薬は、調合物中の機能性成分の溶解 / 分散にも著しい影響を及ぼすことができる。たとえばサンスクリーン製品は、調合物中に好ましくは均一に溶解または分散するサンスクリーン活性成分を含む。しかし、あるよく使用されるサンスクリーン活性成分は、製品調合物中で不十分な溶解性 / 分散性を示す。活性成分の不均一分布は、サンスクリーン製品の品質および性能の低下を引き起こすことがある。同様に多くの化粧品およびパーソナルケア製品は、また不十分な溶解性 / 分散性を示す香料を含有し、製品調合物中に香料を含むことが困難になる。したがって製品調合物の皮膚軟化薬成分は、機能性成分の溶解性に悪影響を及ぼすべきでなく、好ましくは調合物中で機能性成分が溶解また分散するのを補助すべきである。

40

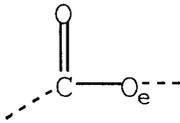
【0005】

ある芳香族エステルは現在、パーソナルケアおよび化粧品製品中で成分として使用されている。たとえばニュージャージー州パーシパニーの Croda Corporation は、米国特許第 5,693,316 号、第 5,597,555 号、第 5,455,025 号、および第 5,302,377 号に開示されている、芳香族ジカルボンおよびトリ

50

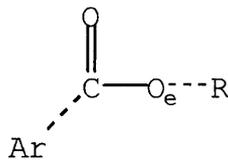
カルボン酸のアルコキシル化エステルを製造および販売している。これらの特許で開示されている芳香族化合物は、芳香族カルボン酸のエステルであり、従ってエステルカルボキシル基（

【化 1】



）を含有し、そこで芳香核（Ar）はエステルカルボキシル基の炭素原子に結合され、脂肪族アルキル基（R）は、エステルカルボキシル基のエステル酸素原子（Oe）に結合される。従ってこれらのエステル中のエステルカルボキシル基への全体の結合順序は、

【化 2】



のように明示される。

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

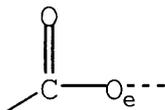
【0006】

これらのエステルはサンスクリーンおよび化粧品の優れた皮膚軟化薬であるが、製品調合者にとってさらなる選択肢を提供するための、パーソナルケアおよび化粧品製品の成分として有用な新しい化合物に対する需要がなお存在する。特に調合物中での活性成分の溶解性を向上させると同時に、快い皮膚触感に寄与する皮膚軟化薬化合物に対する需要が存在する。

【0007】

1つの好ましい態様により、本発明は、化粧品およびパーソナルケア製品の優れた添加剤である、芳香族アルコキシル化アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを提供することによってこれらの需要に対処する。たとえばそれらは皮膚軟化薬、可溶化剤/希釈剤および/または増粘剤として使用できる。好ましくは、芳香族アルコキシル化アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルは、芳香核（Ar）、アルコキシスペーサー（Alk）、エステルカルボキシル基（

【化 3】



）、および脂肪族アルキル基（R）を含む化合物であり、芳香核はアルコキシスペーサー経由でエステルカルボキシル基のエステル酸素原子（Oe）に結合され、脂肪族アルキル基は前記エステルカルボキシル基の炭素原子に結合される。本発明のエステル中のエステルカルボキシル基への全体の結合順序は

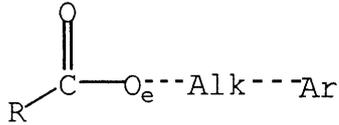
10

20

30

40

【化4】



のように明示される。従って本発明の芳香族エステル構造は、米国特許第5,693,316号、第5,597,555号、第5,455,025号、および第5,302,377号に開示されているエステル構造とは実質的に異なる。

【0008】

芳香族アルコキシル化アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルは好ましくは、1または2のエステルカルボキシル基を有する。本発明のエステルの脂肪族アルキル基(R)は好ましくは、1~39の炭素原子を含有する。芳香族アルコキシル化アルコールおよび脂肪族カルボン酸の好ましいエステルは、10未満の皮膚延展係数または20,000cps未満の粘度を有する。芳香族アルコキシル化アルコールおよび脂肪族カルボン酸の各種の好ましいエステルも本明細書で開示する。

【0009】

別の好ましい態様により、本発明は、a)組成物の約0.1~約99重量%の量で存在する、アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸の少なくとも1つのエステルおよびb)組成物の約0.1~60重量%の量で存在する、少なくとも1つの機能性成分を含む、パーソナルケアまたは化粧品製品組成物を提供する。機能性成分は、活性成分および追加成分を含んでもよい。好ましい組成物は、サンスクリーン製品調合物および制汗剤製品である。従って特に適切な活性成分は、サンスクリーン活性成分および制汗剤活性成分である。

【0010】

本発明の本態様の1つの好ましい実施形態において、組成物は、組成物の約1~99重量%の量で存在する、少なくとも1つのシクロメチコン化合物をさらに含む。

【0011】

なお別の好ましい態様により、本発明は、サンスクリーン活性成分およびアルコキシル化芳香族アルコールならびに脂肪族カルボン酸の少なくとも1つのエステルを含むサンスクリーン製品調合物を提供することと、そのようなサンスクリーン製品調合物を毛髪または皮膚に局所的に塗布することによって、ヒトまたは動物の皮膚または毛髪の放射からの保護を向上させる方法を提供する。

【0012】

なお別の好ましい態様により、本発明は、制汗剤活性成分、少なくとも1つのシクロメチコン化合物およびアルコキシル化芳香族アルコールならびに脂肪族カルボン酸の少なくとも1つのエステルを含む制汗剤製品調合物を提供することと、そのような制汗剤製品調合物を毛髪または皮膚に局所的に塗布することによって、ヒトまたは動物の皮膚または毛髪の発汗からの保護を向上させる方法を提供する。

【発明を実施するための最良の形態】

【0013】

本発明の目的のために、本明細書で使用する各種の用語を以下のように定義する。「化合物」は、同じ化学構造の分子を有する別個の化学物質である。「化合物」は、異なる化学構造を有する分子の混合物ではない。「組成物」は、1つの化合物または化合物の混合物を含んでもよい。「アルキル」基は、炭素原子の鎖を含む基である。アルキル基は、アルキルまたは非アルキル官能性で終結し、アルキルまたは非アルキル官能性によって分子の残りに結合される。本明細書で述べた化合物において、および上で示した定義に一致して、アルキル基は存在する場合、置換または非置換され、直鎖または分岐であり、飽和または不飽和である。「脂肪族」という用語は、アルキル基および/またはカルボン酸に関連して、起源を示すものではない。むしろ「脂肪族」という用語は、疎水性寄与のある本

10

20

30

40

50

発明のエステルを提供する任意の基に関して使用される。純粋に例示のために、酢酸のメチル基は、発明の意味の範囲内の脂肪族基である。本明細書で述べるアルキル基の置換基は存在する場合、メチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、およびブチルなどの1~8の炭素原子を含有するアルキル基である低級アルキル；トリフルオロメチル、ペルフルオロエチル、クロロメチル、およびジクロロメチルなどのハロゲン化低級アルキル；ベンジルなどのアリーールアルキル；p-メチルベンジルなどのアルキルアリーール；フルオロ、クロロおよびブromoなどのハロ；アセトキシおよびエチルカルボキシなどのカルボキシ；アセトキシメチルおよびアセトキシエチルなどのアルキルカルボキシ；アセチルベンジルなどのアリーールアセトキシ；ヒドロキシ；メトキシ、エトキシおよびプロポキシなどのアルコキシ；およびヒドロキシメチルおよびヒドロキシエチルなどのアルキルヒドロキシを含む。

10

【0014】

「アルコキシ化芳香族アルコール」は、本明細書でヒドロキシ基と呼ばれる、1、2またはそれ以上のヒドロキシル基-OHを有する化合物を含む。単一のヒドロキシ基を含有するアルコキシ化芳香族アルコールは、モノヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールと呼ばれる。純粋に例示のために、モノヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールは分子内に構造-[CH₂CH₂O]₅-Hの基1個を有する化合物を含み、他のヒドロキシ基を含まない。2個のヒドロキシ基を含有するアルコキシ化芳香族アルコールは、ジヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールと呼ばれる。純粋に例示のために、分子内に構造-[CH₂CH₂O]₅-Hの基1個、構造-CH₂-OHの基1個を有し、他のヒドロキシ基を含まない化合物と同様に、ジヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールは分子内に、構造-[CH₂CH₂O]₅-Hの基2個を有する化合物を含み、他のヒドロキシ基を含まない。

20

【0015】

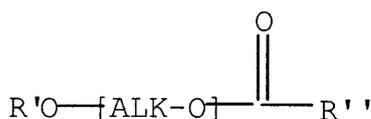
本発明の化合物を定義するのに使用される「アルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステル」という用語は、化合物のエステルのクラスに共通の名称である。本発明のエステルは、エステル基に結合された基の性質によって定義される。本発明のエステルは、アルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸から排他的にとりよりも、当分野で既知のどの方法によっても生成できることが理解されるべきである。本発明のエステルは、モノカルボン酸およびモノヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールのモノエステル、モノカルボン酸およびジヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールのモノエステル、およびモノカルボン酸およびジヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールのジエステルなどの化合物の複数の基を含む。ある他の種類の化合物は除外されないが、ポリエステルおよびオリゴエステルは、本発明の意味の範囲内のアルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルではない。たとえばジカルボン酸（またはジカルボン酸のジカルボキシ誘導体）およびジヒドロキシアルコキシ化芳香族アルコールとの間の縮合反応の生成物は、本発明の意味の範囲内のアルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルではない。

30

【0016】

アルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸の好ましいエステルは構造【化5】

40



を有し、式中、R'は少なくとも1つの芳香核R_Nを含有する有機部分であり；R''は、脂肪族アルキル基であり；そして-[ALK-O]-はアルコキシスペーサーである。

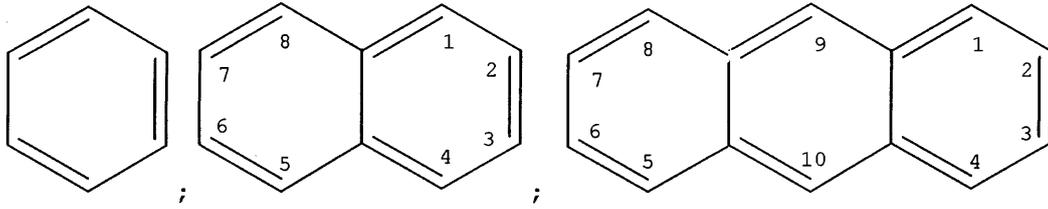
【0017】

芳香核R_Nは、置換を除いて6~20の炭素原子を含有する。6および10の炭素原子

50

を有する核 R_N が好ましい。芳香核 R_N の限定されない例は、ベンゼン、ナフタレンおよびアントラセン核であり、それぞれ 6、10 および 14 の炭素原子を含有する。ベンゼン、ナフタレンおよびアントラセン核の構造は、置換に利用できる炭素原子を命名法にしたがって番号付けして、以下に示す。

【化 6】



10

【0018】

基 R' は、置換または非置換芳香核 R_N を含有してもよい。芳香核 R_N 中に存在する置換基の限定されない例は、メチル、エチル、 n -プロピル、 i -プロピル、およびブチルなどの低級アルキル；アリール；アリールアルキル；アルキルアリール；フルオロ、クロロおよびプロモなどのハロ；アセトキシ；アルキルアセトキシ；アリールアセトキシ；カルボキシ；アルキルカルボキシ；ヒドロキシ；メトキシ、エトキシおよびプロポキシなどのアルコキシ；およびアルキルヒドロキシを含む。

【0019】

基 R' の芳香核 R_N は、アルコキシスペーサー - [ALK-O] - に結合される。芳香核 R_N は、アルコキシスペーサーに直接結合させてもよい。しかし 1 つの好ましい実施形態において、基 R' は、構造 $R_N - (CH_p)_n -$ を有し、ここで $-(CH_p)_n -$ は、核 R_N をアルコキシスペーサーに結合する基である。基 $-(CH_p)_n -$ は、直鎖または分岐、飽和または不飽和でもよい； p は 0、1、または 2 であり、そして n は 1 ~ 6 の範囲で変化する。別の変形において、基 R' は、構造 $R_N - O - (CH_p)_q -$ を有し、ここで $-O - (CH_p)_q -$ は、核 R_N をアルコキシスペーサーに結合する基である。基 $-O - (CH_p)_q -$ は、直鎖または分岐、飽和または不飽和でもよい； p は 0、1、または 2 であり、そして q は 1 ~ 8 の範囲で変化する。

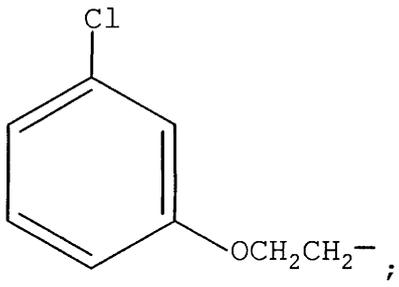
【0020】

基 R' は、1、2、3 またはそれ以上の芳香核 R_N を含有してもよい。1 個の芳香核 R_N を含有する基 R' の限定されない例は、

20

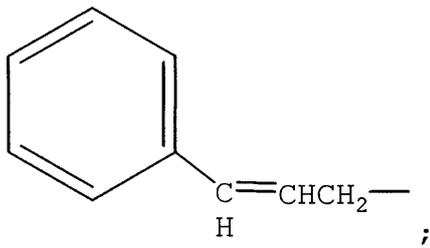
30

【化7A】



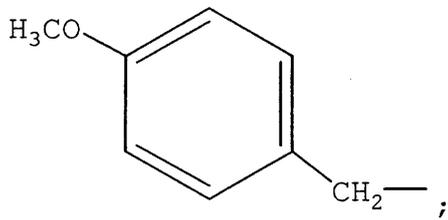
m-クロロフェノキシエチル

10



シンナミル

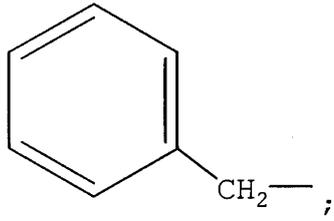
20



p-メトキシベンジル

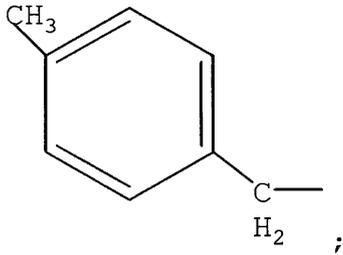
30

【化7B】



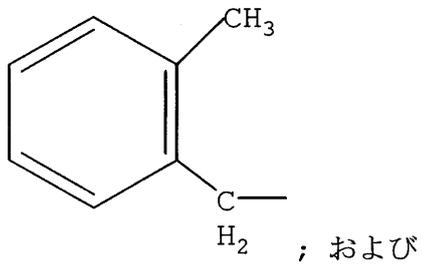
ベンジルー

10



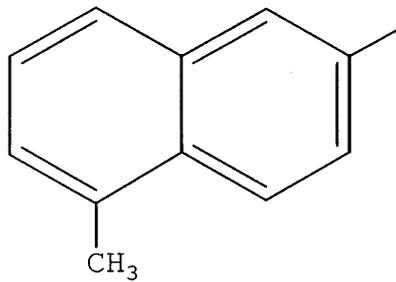
p-メチルベンジルー

20



o-メチルベンジルー

30



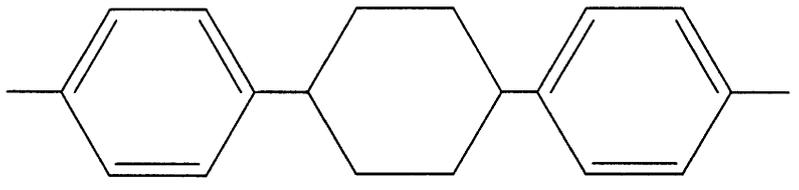
5-メチル-2-ナフー

40

【0021】

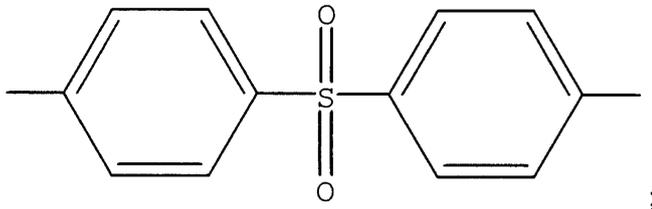
2個の芳香核 R_N を含有する基 R' の限定されない例は

【化8】



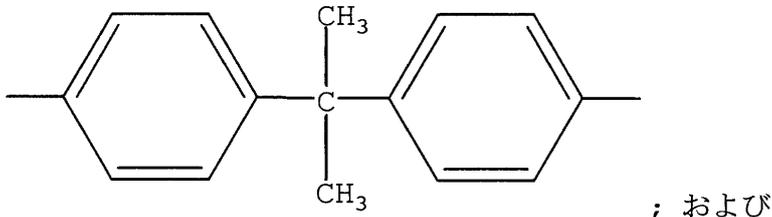
4, 4' -シクロヘキシリデン-ビス-ベンジル-

10



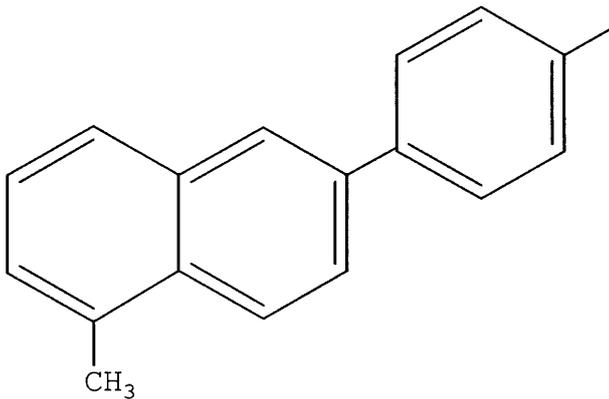
4, 4' -スルホニル-ビス-ベンジル-

20



4, 4' -イソプロピリデン-ビス-ベンジル-

30



p - (5 -メチルナフ) -ベンジル-

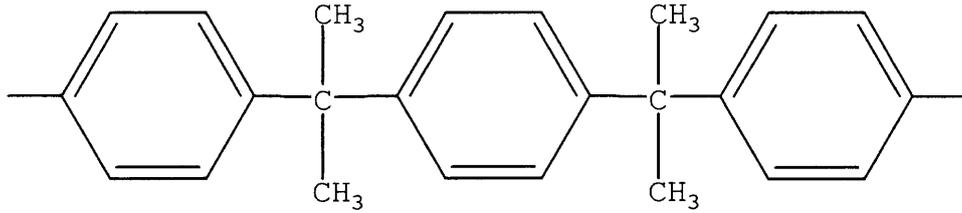
40

である。

【0022】

3個の芳香核 R_N を含有する基 R' の限定されない例は

【化 9】



4, 4' - (1, 4-フェニレンジソプロピリデンル) -

10

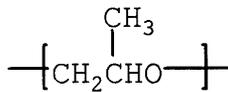
である。

【0023】

アルコキシスペーサー - [ALK-O] - は、同じまたは異なる数 m の構造 - (R' ' ' O)_m - の単位を有し、各 R' ' ' は、直鎖または分岐、飽和または不飽和、置換または非置換の、炭素原子 1 ~ 6 を有するアルキル基であり、 m は 1 ないし 300 の範囲である。好ましくはアルコキシスペーサー - [ALK-O] - は、ブロックで、ランダムに、または交互パターンなどの任意の構造秩序で存在する、数 x の構造 - [CH₂CH₂O] - のエトキシ単位および数 y の構造

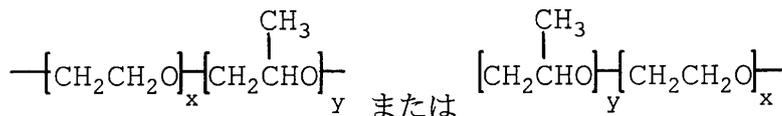
【化 10】

20



のプロポキシ単位を含む。発明のエステルを説明すると、アルコキシスペーサーの構造はたとえば

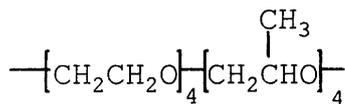
【化 11】



30

として示される。そのような描写は、エトキシおよびプロポキシ単位の数のみを示し、アルコキシスペーサーの基 R' またはエステル基への結合の性質を示していない。さらにアルコキシスペーサーのそのような描写は、特に示さない限り、エトキシおよびプロポキシ単位の構造秩序を示すものではない。たとえば

【化 12】



40

として示されるスペーサーは、プロポキシ基 4 個のブロックに結合されたエトキシ基 4 個のブロックを示すのではない。しかし、4 個のエトキシ単位および 4 個のプロポキシ単位を有するアルコキシスペーサーが考慮されることを意味する。

【0024】

好ましくはアルコキシスペーサー - [ALK-O] - は、エポキシ単位およびプロポキシ単位のみを含み、すなわち m は x および y の和に等しく； x は 0 ないし 150 であり； y は 0 ないし 150 であり；そして x および y の和は 1 ないし 300 の範囲である。エトキシ基およびプロポキシ基の構成および量は、エステルの特性に実質的な影響を有することがある。従って皮膚軟化薬としての使用などのある用途では、20 未満である x および y の和を有するエステルが好ましい。そのようなエステルの 1 つの群において、 x は 0 に

50

等しい。そのようなエステル別の群において、 y は 0 に等しい。そのようなエステルのまた別の群において、 $x > 0$ 、 $y > 0$ 、および $x > y$ である。そのようなエステルのまた別の群において、 $x > 0$ 、 $y > 0$ 、および $y > x$ である。増粘剤としての使用などの他の用途では、100 を超える x および y の和を有するエステルが好ましい。

【0025】

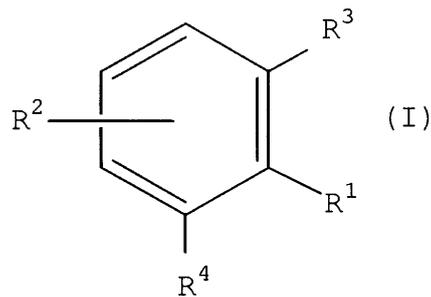
脂肪族アルキル基 R' は直鎖または分岐、飽和または不飽和、置換または非置換でもよく、1 ~ 39 の炭素原子を含有する。さらに好ましくは脂肪族アルキル基 R' は、芳香族基を含まない。さらに好ましくは、1 ~ 21 の炭素原子を含有する脂肪族アルキル基 R' である。なおさらに好ましくは、5 ~ 21 の炭素原子を含有する R' 基である。最も好ましくは、基 R' には 7 ~ 17 の炭素原子が見出される。

10

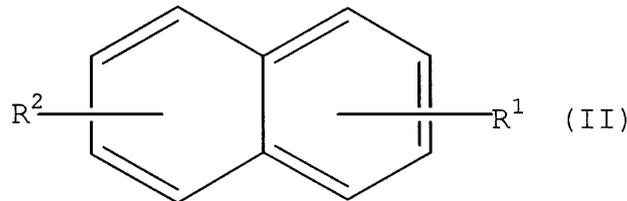
【0026】

アルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のさらに好ましいエステルは、式 (I)、(II) または (III) の化合物である。

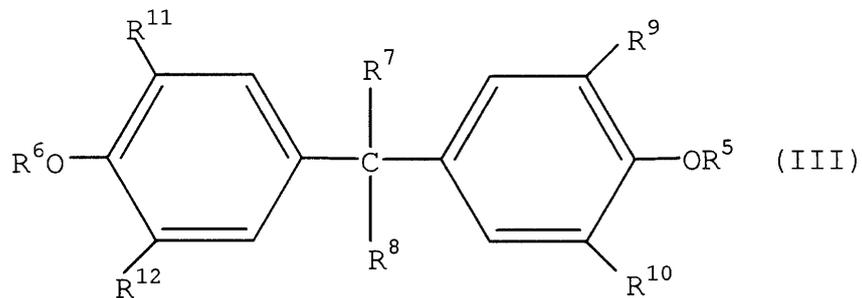
【化13】



20

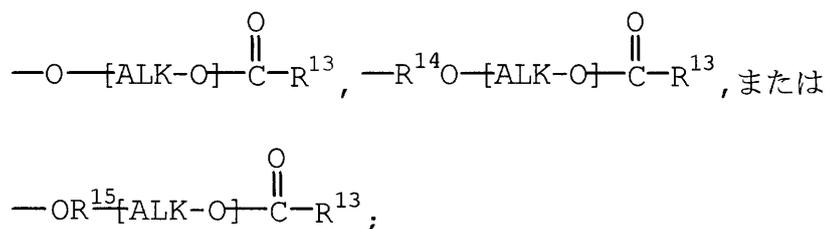


30



式中、 R^1 は、

【化14】

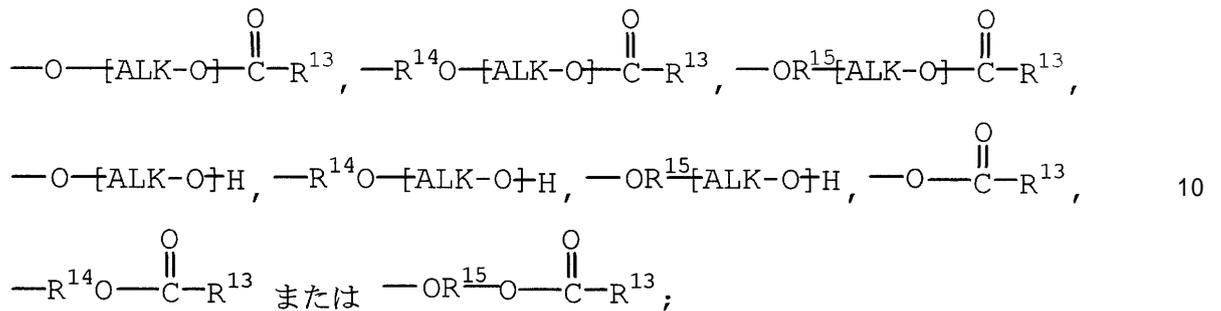


の構造の基であり；

50

R²、R³、およびR⁴は、同じであるかまたは異なってもよく、独立して水素、低級アルキル、低級ハロゲン化アルキル、ヒドロキシ、低級アルキルヒドロキシ、ハロ、低級アルコキシ、

【化15】



であり；

R⁵は

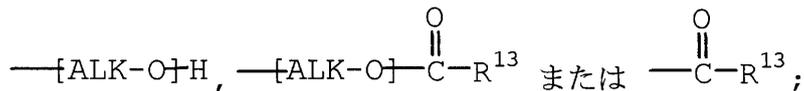
【化16】



であり；

R⁶は、低級アルキル、

【化17】



であり；

R⁷およびR⁸は、同じであるかまたは異なってもよく、独立して水素、ハロ、低級アルキル、アリール、低級アルコキシ、または低級ハロゲン化アルキルであり；

R⁹、R¹⁰、R¹¹、およびR¹²は、同じであるかまたは異なってもよく、独立して水素、ハロ、低級アルキル、低級アルコキシ、および低級ハロゲン化アルキルであり；

R¹³は、基R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、およびR⁶のそれぞれにおいて同じであるかまたは異なってもよく、1~39の炭素原子、好ましくは1~21の炭素原子、さらに好ましくは5~21の炭素原子、最も好ましくは7~17の炭素原子を有する、直鎖または分岐、飽和または不飽和、置換または非置換であるアルキル基であり；

R¹⁴は、基R¹、R²、R³、およびR⁴のそれぞれにおいて同じであるかまたは異なってもよく、好ましくは1~6の炭素原子を含有する、直鎖または分岐、飽和または不飽和、置換または非置換であるアルキル基であり、-R¹⁴-は、pが0、1または2であり、nが1~6の範囲で変化する基-(CH_p)_n-であり；

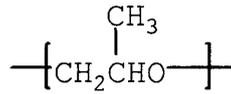
R¹⁵は、基R¹、R²、R³、およびR⁴のそれぞれにおいて同じであるかまたは異なってもよく、好ましくは1~8の炭素原子を含有する、直鎖または分岐、飽和または不飽和、置換または非置換であるアルキル基であり、-R¹⁵-は、pが0、1または2であり、qが1~8の範囲で変化する基-(CH_p)_q-であり；

-[ALK-O]-は、ブロックで、ランダムに、または交互パターンなどの任意の構造秩序で存在する、構造-[CH₂CH₂O]-のエトキシ単位および数yの構造

30

40

【化 1 8】

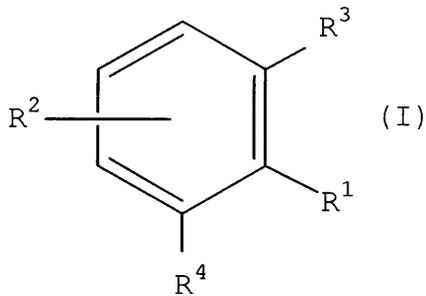


のプロポキシ単位を含むアルコキシスペーサーであり；xおよびyはそれぞれ、基R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、およびR⁶のそれぞれにおいて、同じであるかまたは異なってもよく；xは0ないし150の範囲であり；yは0ないし150の範囲であり；そしてxおよびyの和は1ないし300の範囲である。

【0027】

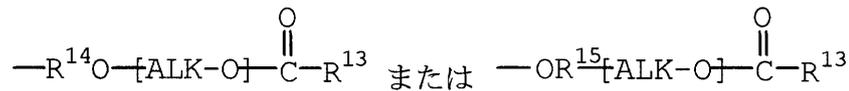
式(I)のエステル

【化 1 9】



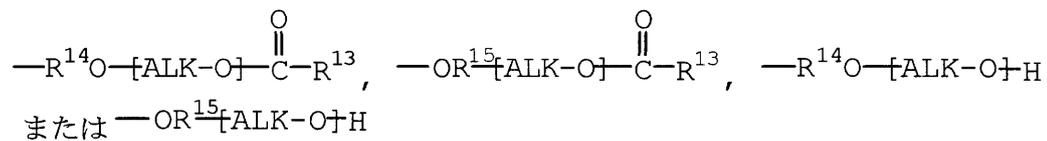
は、1個のベンゼン環を有する、アルコキシ化芳香族アルコールの誘導体である。式(I)のさらに好ましいエステルにおいて、R¹は

【化 2 0】



であり；R²は、水素、

【化 2 1】



であり、そしてR³およびR⁴は独立して、水素、低級アルキルおよびハロゲン化低級アルキルである。R²が水素でないエステルでは、パラ置換が好ましい。しかし好ましくは、R²は水素であり、R³およびR⁴は独立して水素、メチル、エチルまたはプロピルである。

【0028】

式(I)のエステルの限定されない例は

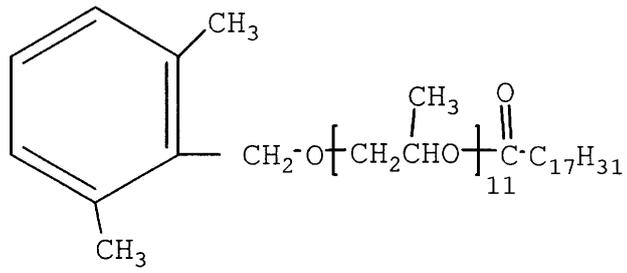
10

20

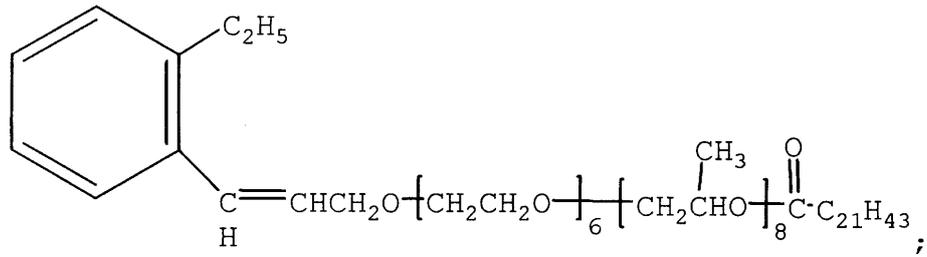
30

40

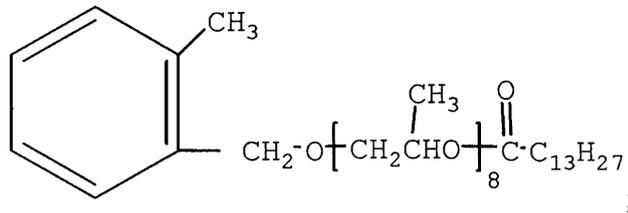
【化 2 2】



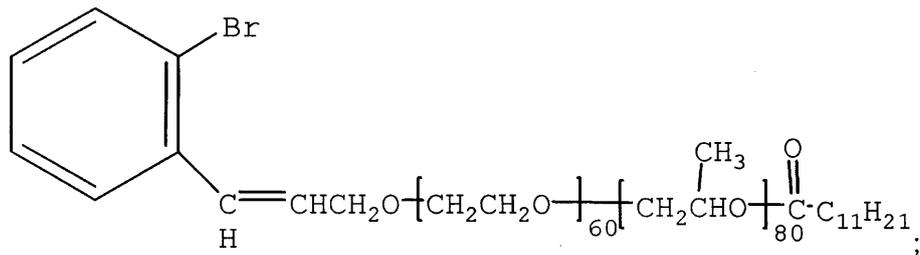
【化 2 3】



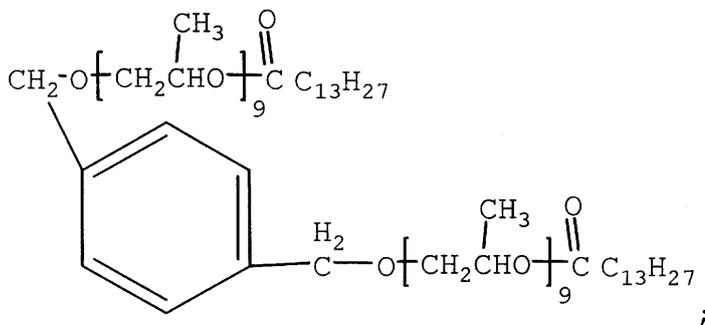
10



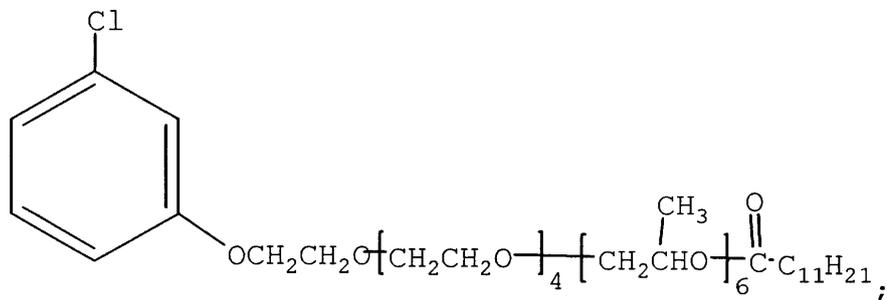
20



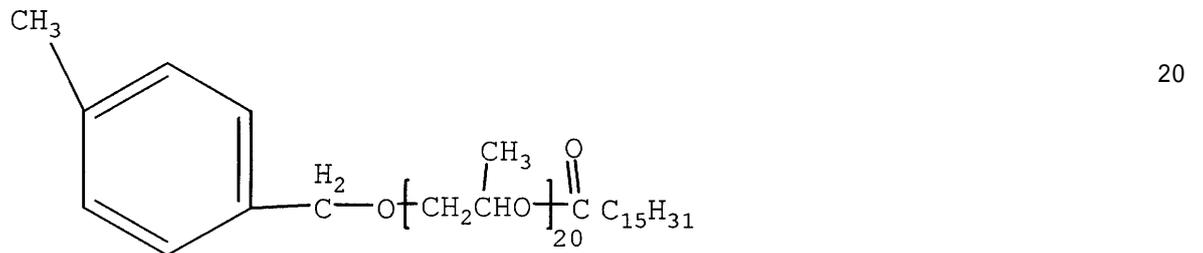
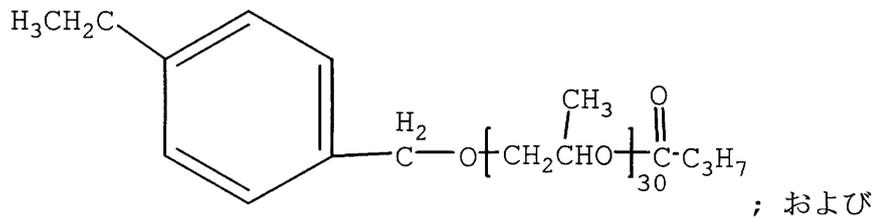
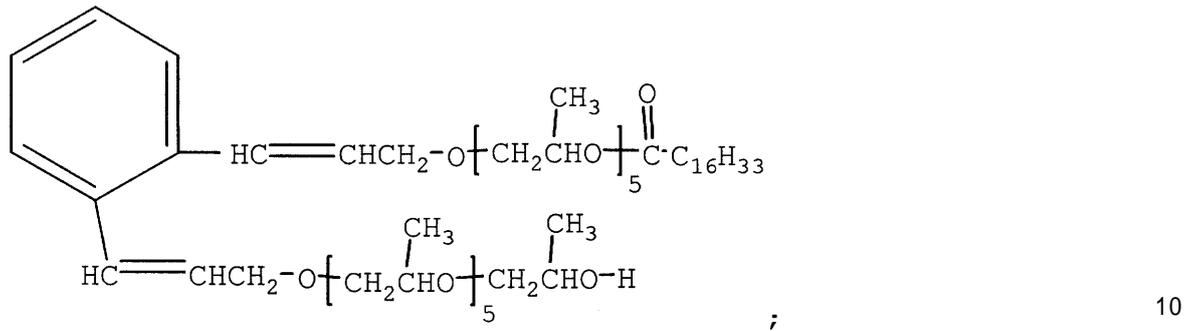
30



40



【化24】

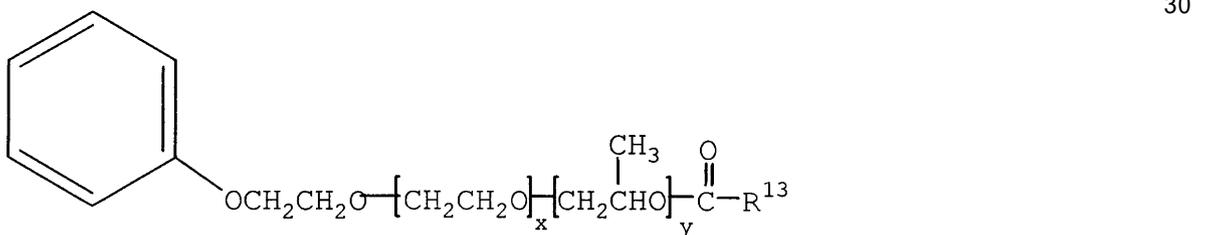


である。

【0029】

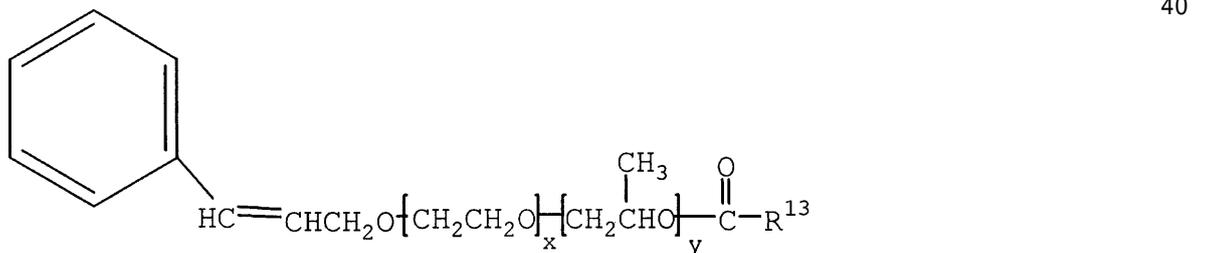
エトキシル化および/またはプロポキシル化フェノキシエタノールのエステル：

【化25】



およびエトキシル化および/またはプロポキシル化シンナミルアルコールのエステル：

【化26】



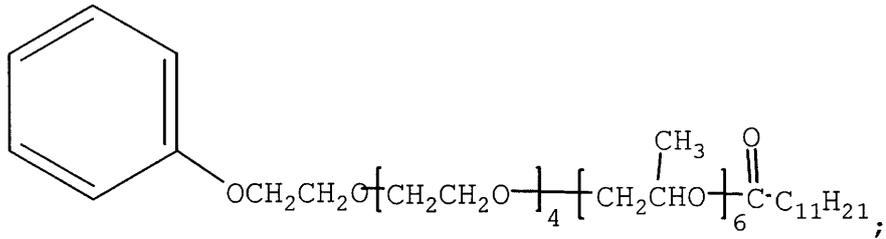
は、式(I)のさらに好ましいエステルである。

【0030】

アルコキシル化フェノキシエタノールのエステルの限定されない例は

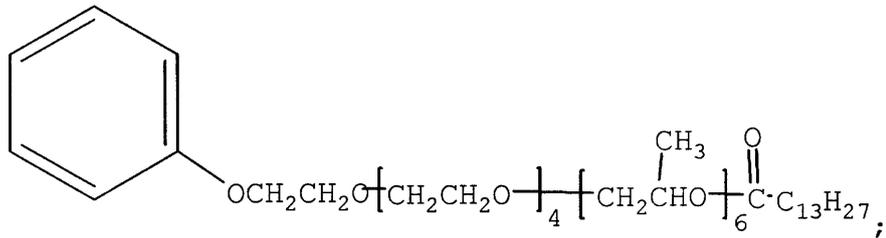
50

【化27】



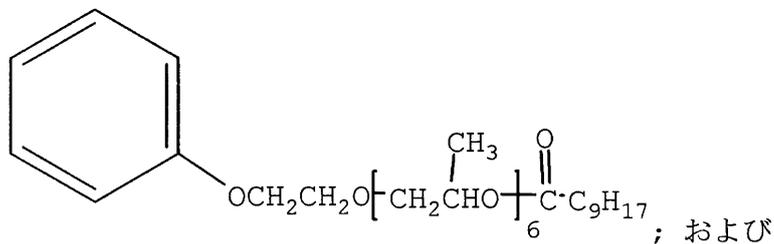
PEG-4 PPG-6 フェノキシラウレート

10



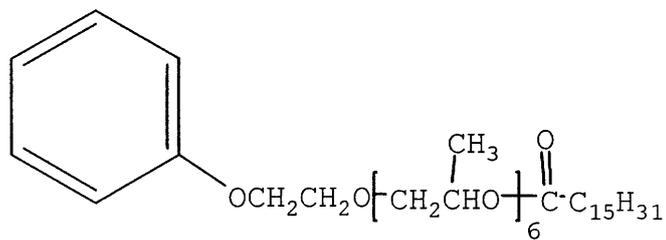
PEG-4 PPG-6 フェノキシミリステート

20



PPG-6 フェノキシカプレート

30



PPG-6 フェノキシパルミテート

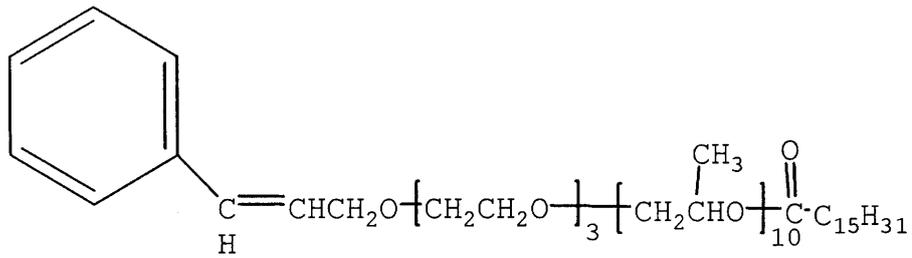
である。

40

【0031】

アルコキシ化シンナミルアルコールのエステルの限定されない例は

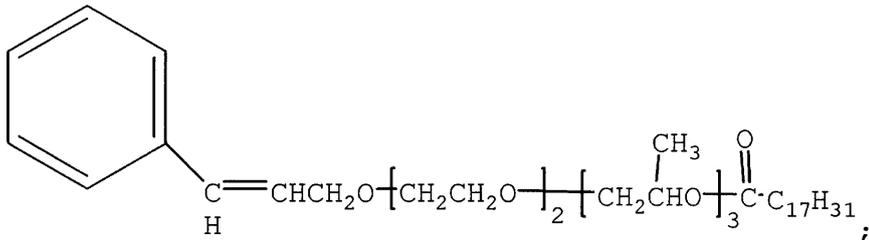
【化28】



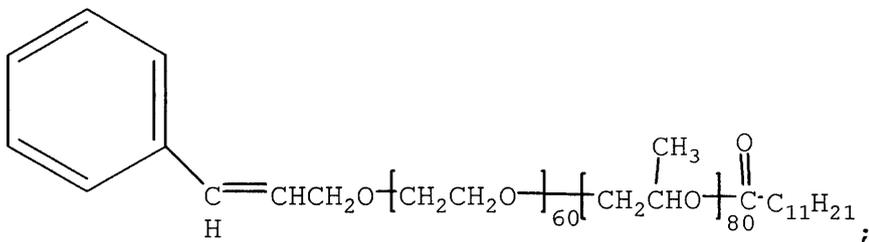
PEG-3 PPG-10 シンナミルパルミテート

10

【化29】

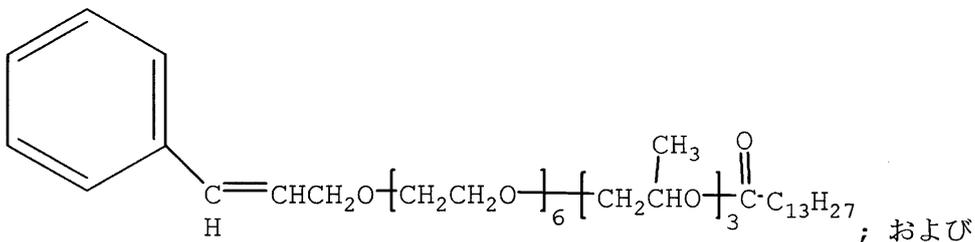
PEG-2 PPG-3 シンナミルリノレアート (シス, シス-9, 12
-オクタデカノジエノアート)

20



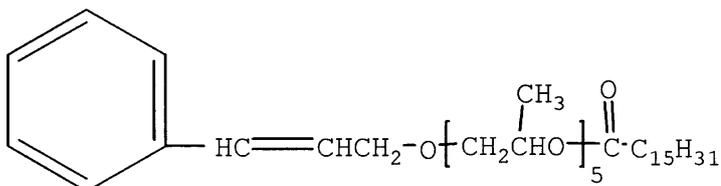
PEG-60 PPG-80 シンナミルラウレート

30



PEG-6 PPG-3 シンナミルミリストート

40



PPG-5 シンナミルパルミテート

である。

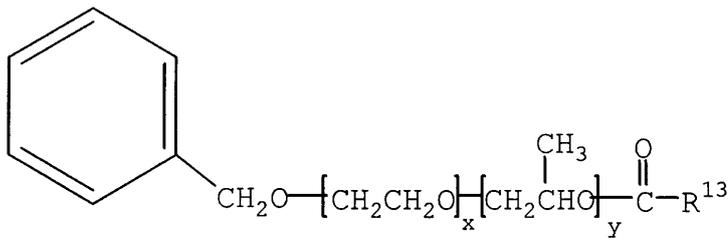
【0032】

エトキシル化および/またはプロポキシル化ベンジルアルコールのエステルは特に好ま

50

しい。

【化30】



10

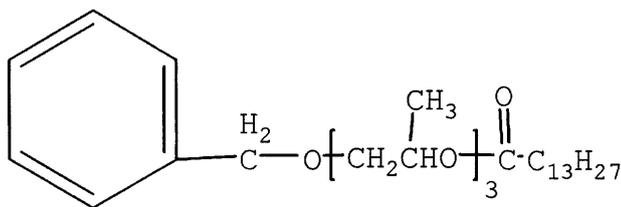
これらのエステルの中の1つの好ましい変形において、 x は0ないし40で変化し、 y は0ないし40で変化し、そして x および y の和は1ないし40で変化し；さらに好ましくは、 x は0ないし30で変化し、 y は0ないし30で変化し、そして x および y の和は1ないし30で変化し；なおさらに好ましくは、 x は0ないし20で変化し、 y は0ないし20で変化し、そして x および y の和は1ないし20の範囲で変化する。別の好ましい変形において、 x は0ないし150で変化し、 y は0ないし150で変化し、そして x および y の和は75ないし300で変化し；さらに好ましくは x および y の和は100ないし300である。

【0033】

アルコキシル化ベンジルアルコールの1つの特に好ましいエステルは、 x が0であり、 y が3であり、そして R^{13} が3個の炭素原子を含む、PPG-3ベンジルミリステートである。

20

【化31】



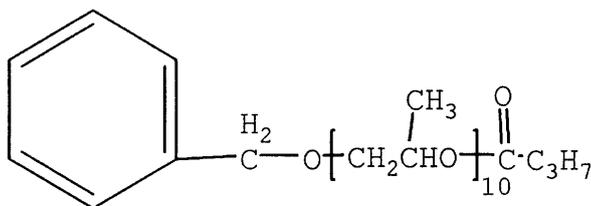
30

PPG-3ベンジルミリステート

【0034】

アルコキシル化ベンジルアルコールの別の特に好ましいエステルは、 x が0であり、 y が10であり、そして R^{13} が3個の炭素原子を含む、PPG-10ベンジルプロピオナートである。

【化32】



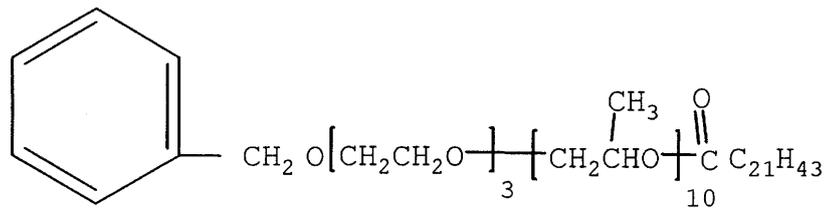
40

PPG-10ベンジルプロピオナート

【0035】

アルコキシル化ベンジルアルコールのエステルの別の限定されない例は、

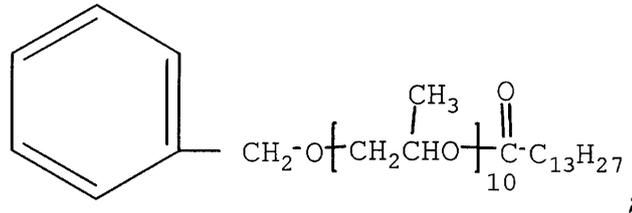
【化33】



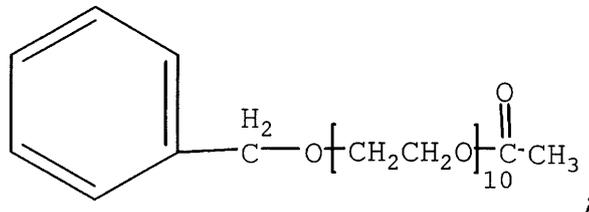
PEG-3, PPG-10 ベンジルベヘナート

【化34】

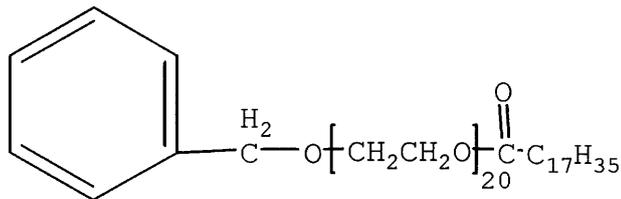
10



PPG-10 ベンジルミリステート



PEG-10 ベンジルアセテート



PEG-20 ベンジルステアレート

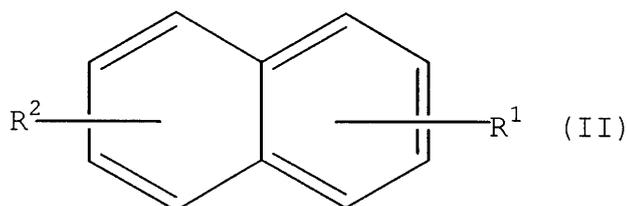
である。

【0036】

式(II)のエステルは

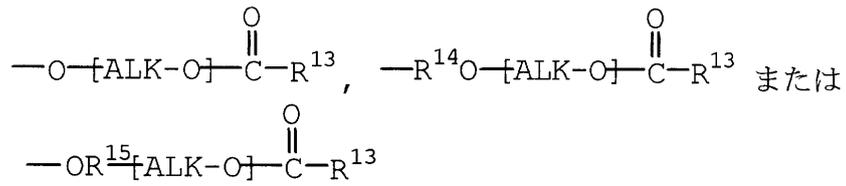
【化35】

40

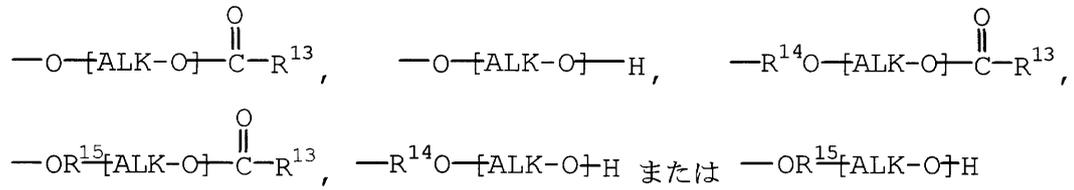


ナフタレン核を含有するアルコキシル化芳香族アルコールの誘導体である。式(II)の好ましいエステルにおいて、 R^1 は

【化 3 6】

であり、R²は、水素、

【化 3 7】

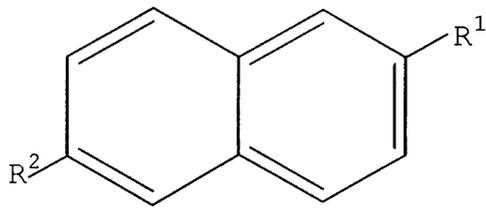


である。

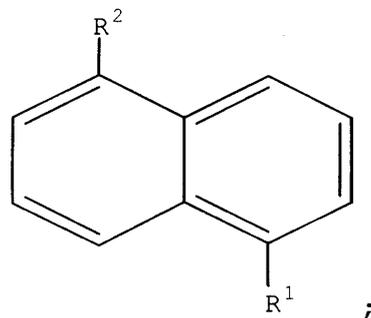
【0037】

式 (II) の二置換エステルでは、好ましい位置異性体は、

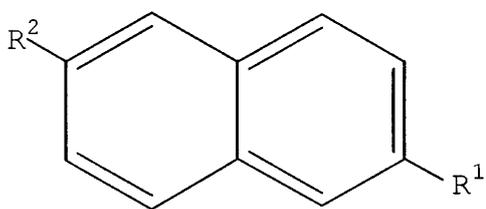
【化 3 8】



2, 6-二置換エステル



4, 8-二置換エステル、および



3, 7-二置換エステル

10

20

30

40

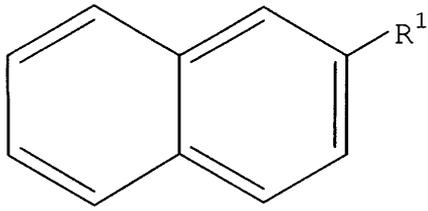
50

である。

【0038】

R^2 が水素である式(II)の一置換エステルがさらに好ましい。式(II)の二置換エステルが特に好ましい。

【化39】

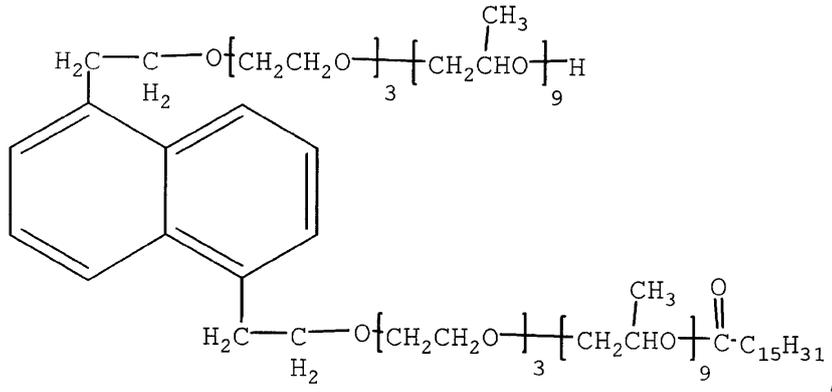


10

【0039】

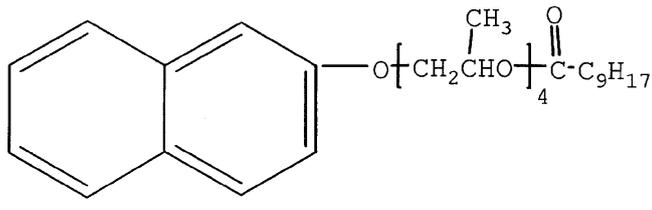
式(II)のエステルの限定されない例は

【化40】



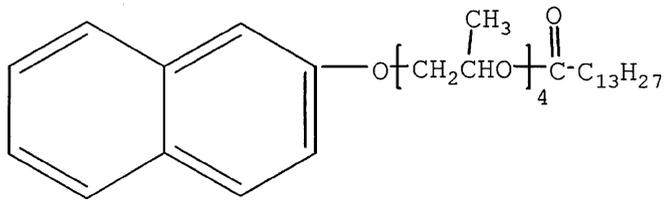
10

ジ- (PEG-3, PPG-9) -4, 8-ジ-ヒドロキシエチル-ナフチルモノパルミテート



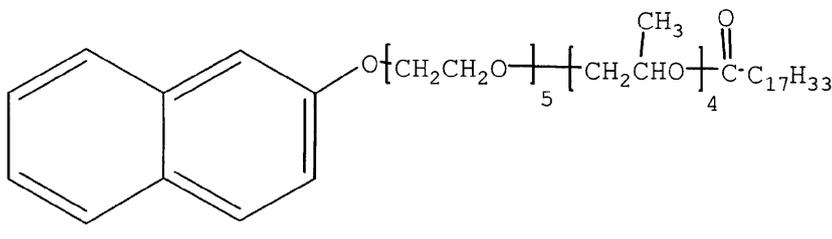
20

PPG-4 2-ナフチルカプラート



30

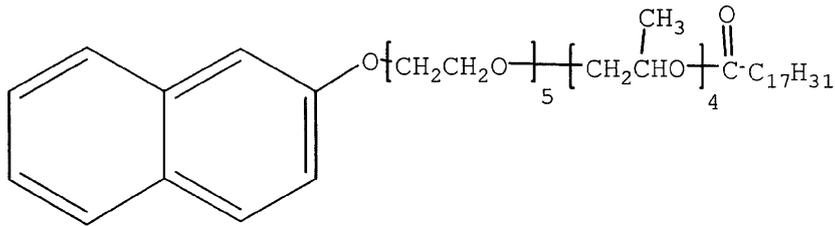
PPG-4 2-ナフチルミリステート



40

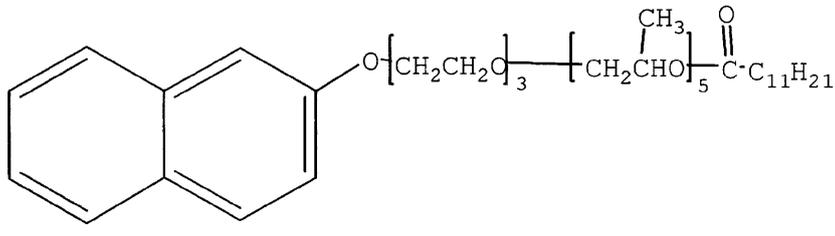
PEG-5, PPG-4 2-ナフチルオレアート (シス-9-オクタデセノアート)

【化 4 1 A】



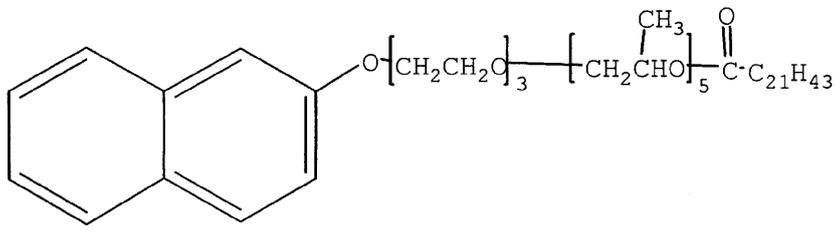
PEG-5, PPG-4 2-ナフチルリノレアート (シス, シス-9, 1
2-オクタデカジノアート)

10



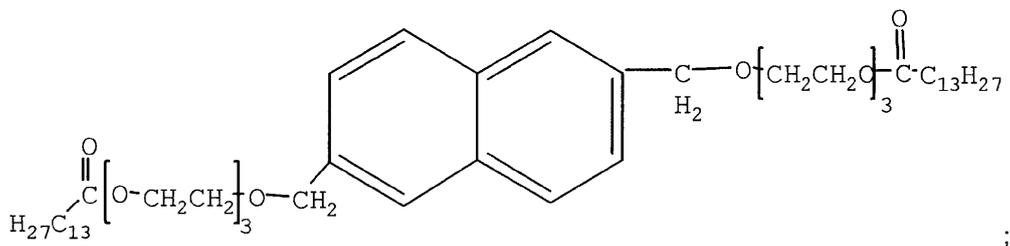
PEG-3, PPG-5 2-ナフチルラウラート

20



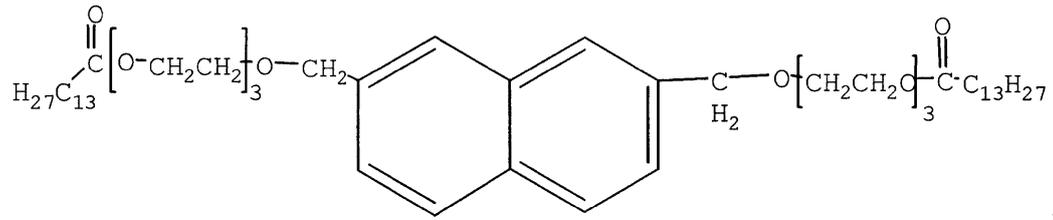
PEG-3, PPG-5 2-ナフチルベヘナート

30



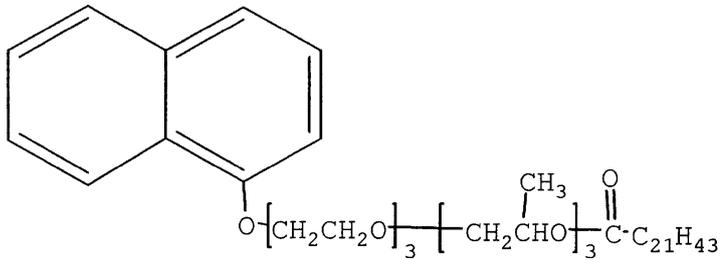
ジ- (PEG-3) -2, 6-ジ-ヒドロキシメチル-ナフチルジミリステート

【化41B】



ジ-(PEG-3)-2,7-ジ-ヒドロキシメチル-ナフチルジミリステート

10



PEG-3, PPG-5 4-ナフチルベヘナート

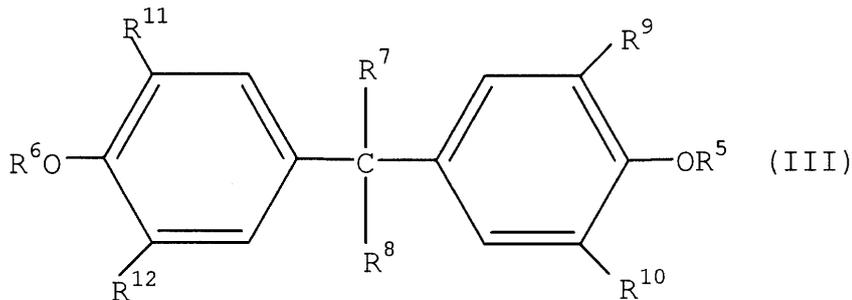
20

である。

【0040】

式(III)のエステルは

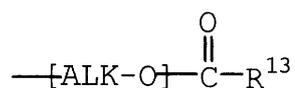
【化42】



30

2以上のベンゼン核を有する、各種のビスフェノール型化合物の誘導体である。式(III)の好ましいエステルにおいて、R⁵は上で定義したとおりであり、R⁶は、-[ALK-O]-Hまたは

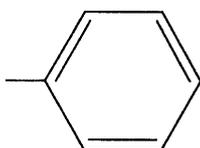
【化43】



40

であり；R⁷は、水素、メチルまたはトリフルオロメチルであり；R⁸は、水素、メチル、トリフルオロメチル、-CHCl₂または

【化44】



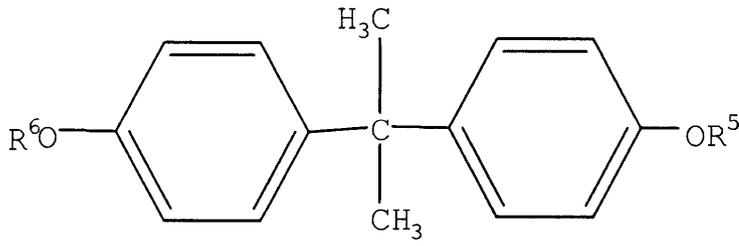
50

であり；そして R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、および R^{12} は独立して水素またはメチルである。

【0041】

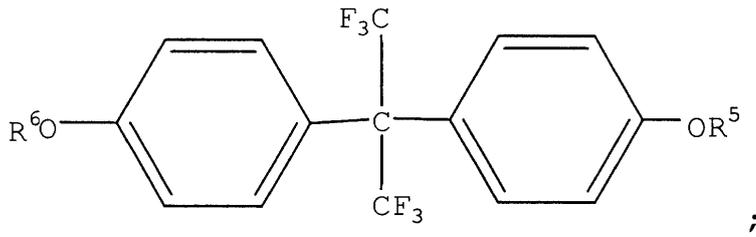
式(III)のエステルの好ましい基は

【化45】



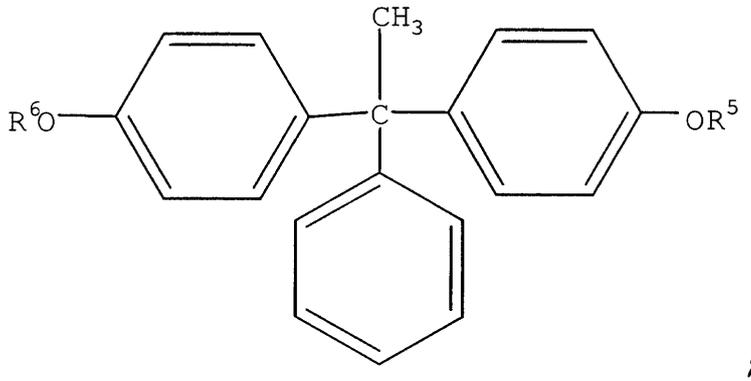
ビスフェノールA

【化46】



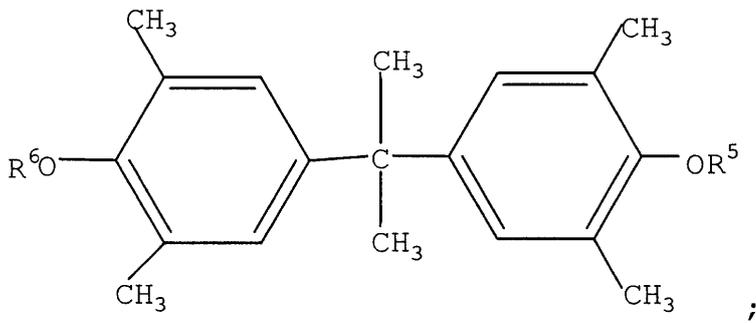
ビスフェノールAF

10



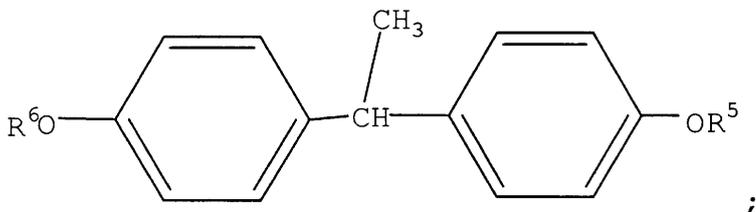
ビスフェノールAP

20



テトラメチルビスフェノールA

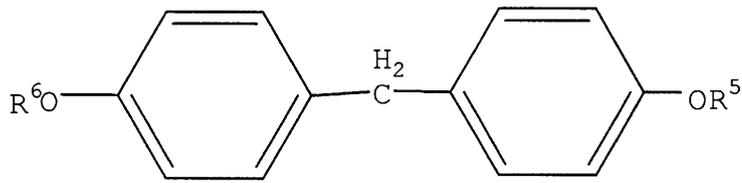
30



ビスフェノールE

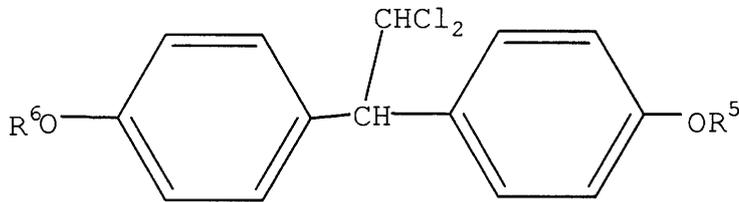
40

【化47】



; および

ビスフェノールF



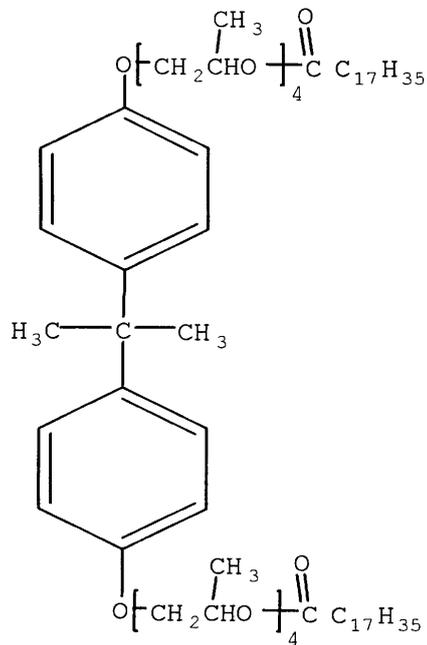
ビスフェノールC

の誘導体を含む。

【0042】

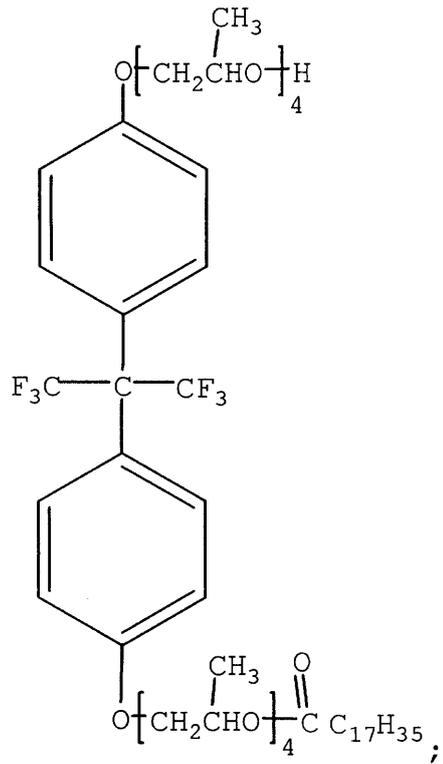
式(III)のエステルの限定されない例は、

【化48】



ジ - (P P G - 4) ビスフェノールAジステアレート

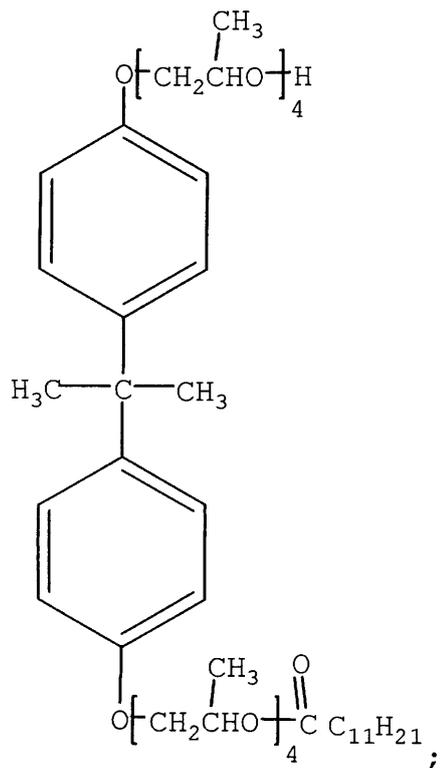
【化49A】



10

20

ジ - (P P G - 4) ビスフェノール A F モノステアレート
【化49B】

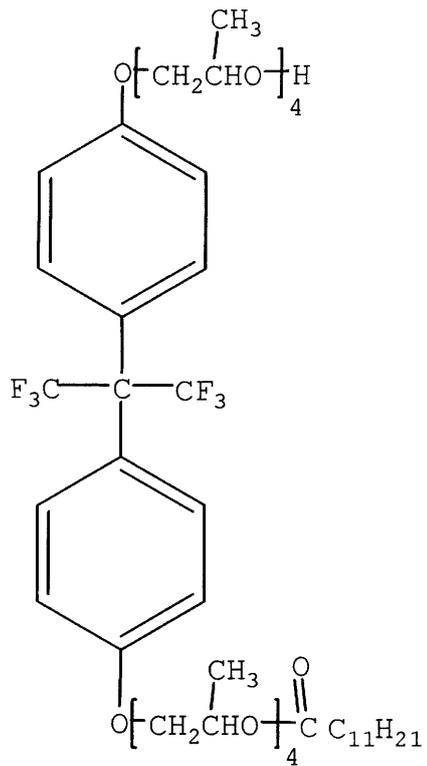


30

40

ジ - (P P G - 4) ビスフェノール A モノラウレート

【化50A】

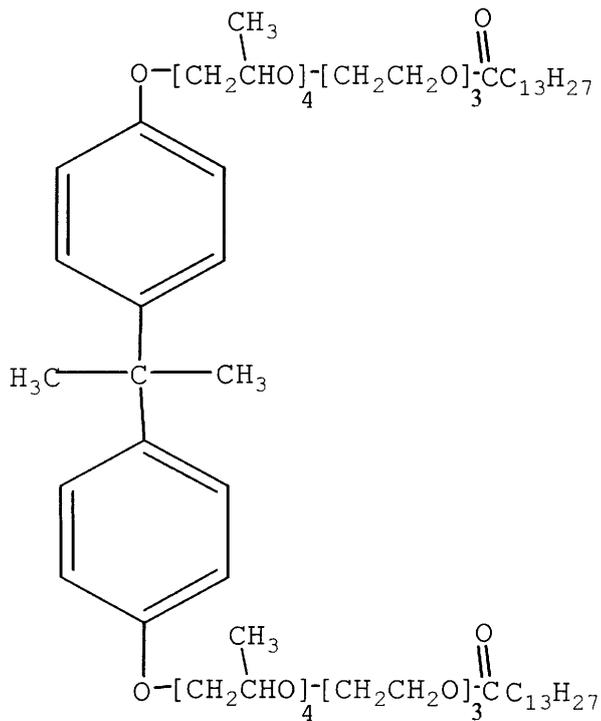


10

20

ジ - (P P G - 4) ビスフェノール A F モノラウラート

【化50B】

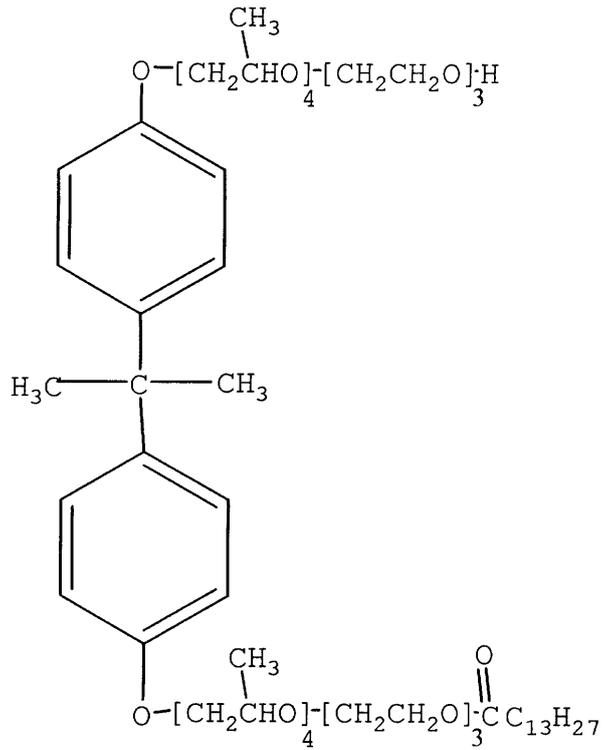


30

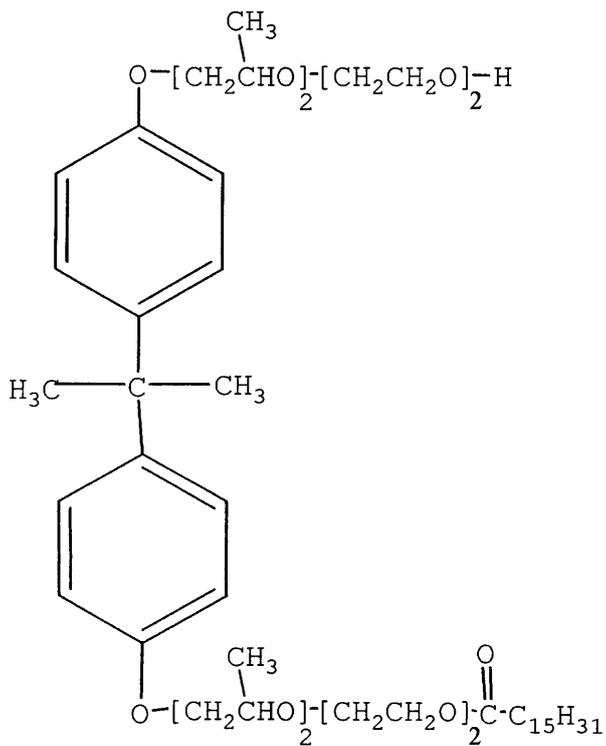
40

ジ - (P E G - 3 , P P G - 4) ビスフェノール A ジオレアート

【化51A】

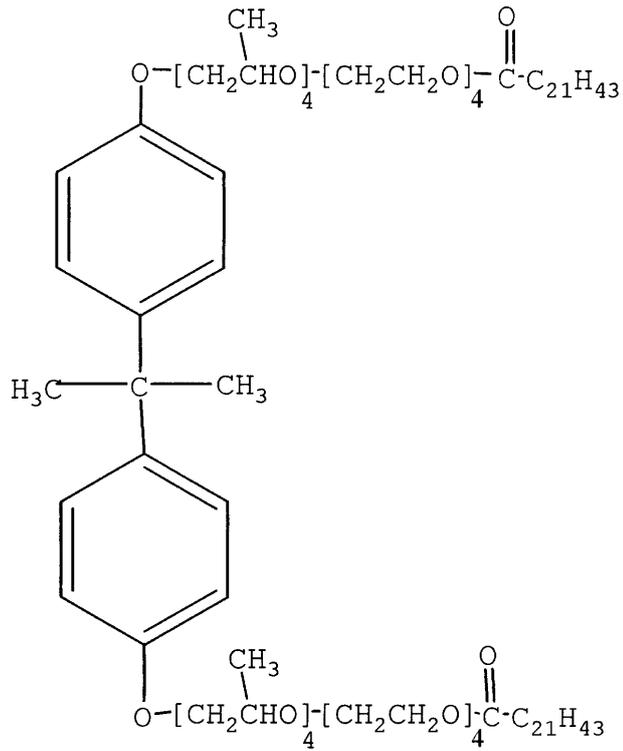


ジ - (P E G - 3 , P P G - 4) ビスフェノール A モノミリスレート
【化51B】



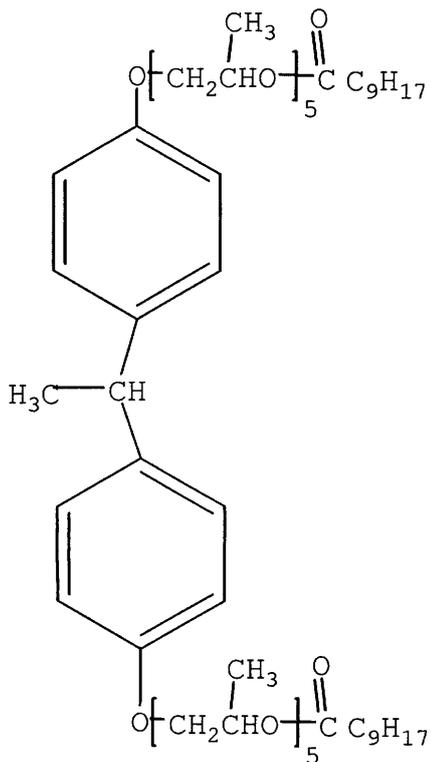
ジ - (P E G - 2 , P P G - 2) ビスフェノール A モノパルミテート

【化52A】



ジ - (P E G - 4 , P P G - 4) ビスフェノールAジベヘナート
 および

【化52B】



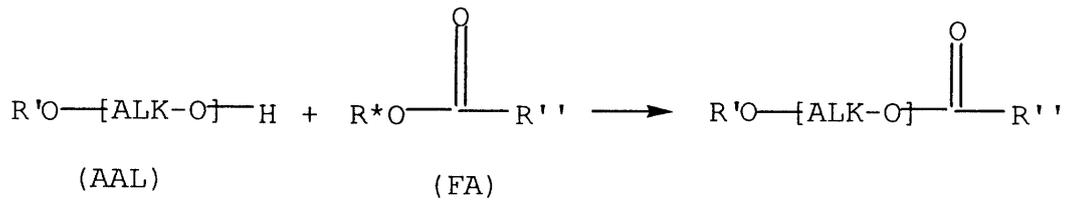
ジ - (P P G - 5) ビスフェノールEジカプラート
 である。

【0043】

本発明のエステルは、各種の方法で調製できる。アルコキシル化芳香族アルコールおよ

び脂肪族カルボン酸の好ましいエステルは反応：

【化53】



の生成物であり、ここでR'、R''および-[ALK-O]-は生成物エステルに関して上で定義したとおりであり、そしてR*は、水素、低級アルキル基、またはカルボキシラート基である。従ってAALは芳香族アルコキシル化アルコールであり、FAは脂肪族カルボン酸、エステルまたは無水物などの脂肪族カルボン酸の誘導体、またはその混合物である。脂肪族カルボキシ基を含有する天然油、合成油およびトリグリセリドも反応性FAとして使用できる。

10

【0044】

適切な脂肪族カルボン酸の限定されない例は、ミスチリン酸、プロピオン酸、カプリン酸、ラウリル酸、ベヘン酸、エルカ酸、リノール酸、モンタン酸、フェニル酢酸、オレイン酸、ステアリン酸、パルミチン酸、ココヤシ油誘導酸混合物、ヤシ油誘導酸混合物、およびその混合物を含む。

20

【0045】

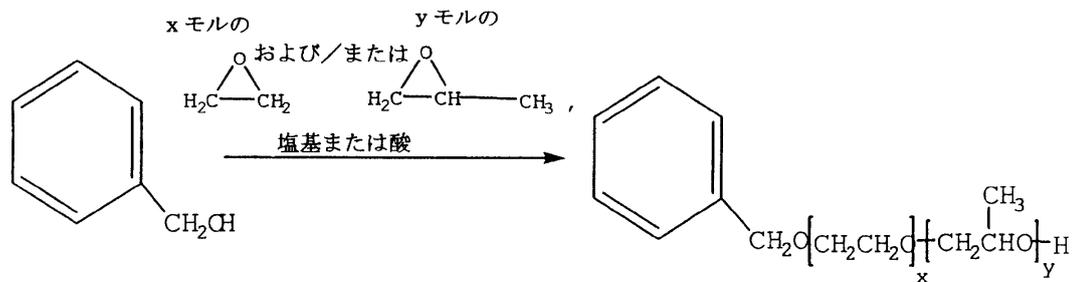
適切なアルコキシル化アルコールの限定されない例は、アルコキシル化ベンジルアルコール、アルコキシル化フェノキシエタノール、アルコキシル化シンナミルアルコール、アルコキシル化フェノキシ-n-プロパノール、アルコキシル化フェノキシ-i-プロパノール、およびその混合物を含む。適切なアルコキシル化アルコールの他の限定されない例は、アルコキシル化ビスフェノールA、アルコキシル化ビスフェノールAF、アルコキシル化ビスフェノールAP、アルコキシル化テトラメチルビスフェノールA、アルコキシル化ビスフェノールF、アルコキシル化ビスフェノールE、アルコキシル化ビスフェノールC、アルコキシル化ビスフェノールM、アルコキシル化ビスフェノールP、アルコキシル化ビスフェノールS、アルコキシル化ビスフェノールZおよびその混合物を含む。

30

【0046】

アルコキシル化芳香族アルコール(AAL)の合成は通例、相当する芳香族アルコールのアルコキシル化を包含する。以下の反応スキームは、アルコキシル化反応を説明し、ベンジルアルコール：

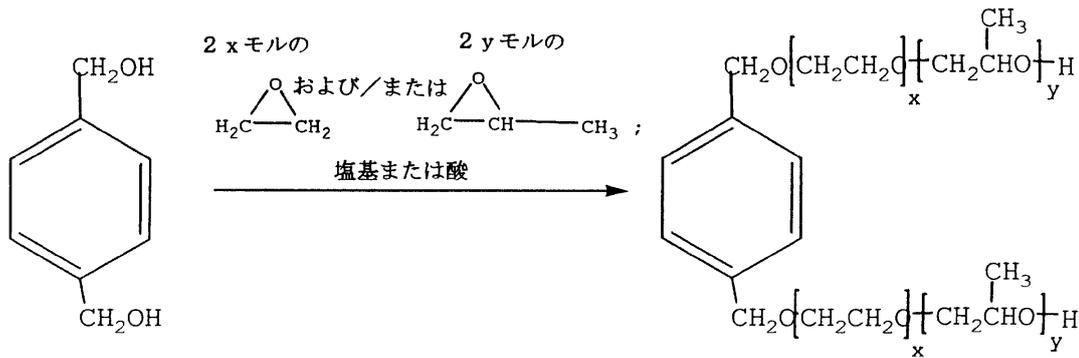
【化54】



40

およびp-ジ-メチルヒドロキシベンジルジオール：

【化55】



10

のエトキシ化 / プロポキシ化を示す。

【0047】

好ましくはアルコキシ化は、エチレンオキシド、プロピレンオキシドまたはエチレンオキシドおよびプロピレンオキシドの混合物によって実施される。モノヒドロキシ芳香族アルコール（たとえばベンジルアルコール、シナミルアルコール、フェノキシエタノールなど）のアルコキシ化は、アルコキシ鎖の末端にヒドロキシ基 1 個を有するアルコキシ化芳香族アルコールを与える。ジヒドロキシ芳香族アルコールのアルコキシ化は通例、各アルコキシ鎖の末端にヒドロキシ基 2 個を有するアルコキシ化芳香族アルコール

20

【0048】

アルコキシ化反応は、対称または非対称アルコキシ化アルコールを生成することがある。アルキルオキシド（たとえばエチルオキシドおよびプロピルオキシド）の添加順序は、エトキシおよびプロポキシ単位の構造秩序、および結合順序を含む最終エステルにおけるアルコキシ置換の性質を変化させるために使用できる。たとえば、アルキルオキシドは連続して、または他の所望の方法で混合物に添加でき、従ってアルコキシ置換の順序を変化させる。反応区域に導入されるアルキルオキシドの量および選択されたアルキルオキシドとの反応の持続時間は、開始芳香族アルコールに添加されるアルキルオキシドのモル数を決定する。エステル中のエトキシおよびプロポキシ単位の数は、その特性に影響を及ぼす。従ってエトキシ化の量の増加は、エステルの溶解性 / 分散性を向上させるために使用され、同時にプロポキシ化の量の増加は流動性を向上させる。

30

【0049】

アルコキシ化反応は、アルカリ性水酸化物ならびに酸化物、プロトン酸ならびにルイス酸、アミン、第四級アンモニウム化合物、水、および触媒混合物などの触媒の存在下で、酸性または塩基性触媒作用を通じて進行する。特に適切な触媒はたとえば、水酸化カリウム、ナトリウムメトキシド、水素化ホウ素ナトリウム、三フッ化ホウ素、塩化第二スズ、および硫酸を含む。好ましい触媒は、水酸化カリウムまたは水酸化ナトリウム、ナトリウムメトキシド、水素化ホウ素ナトリウムまたはその混合物である。

【0050】

触媒は好ましくは、所望のアルコキシ化アルコールの重量の約 0.1 ~ 約 2.0 重量 % の量で使用される。反応は好ましくは、無水条件下で約 110 ~ 約 200 にて、約 10 psig ~ 約 80 psig の圧力下で実施される。より高い温度および圧力も利用できる。反応が完了した後、触媒を中和するために酸（たとえばリン酸または酢酸）を導入してもよい。

40

【0051】

アルコキシ化反応で生成したアルコキシ化芳香族アルコールは次に、エステル化され、本発明のアルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを与える。エステル化反応は、従来の方法で実施してもよい。通例、アルコールおよび脂肪酸の化学量論的量が適切な触媒の存在下で化合される。試薬の 1 つの化学量論的にやや過剰量

50

を利用してもよい。好ましい触媒は、メタンスルホン酸およびパラトルエンスルホン酸を含む。

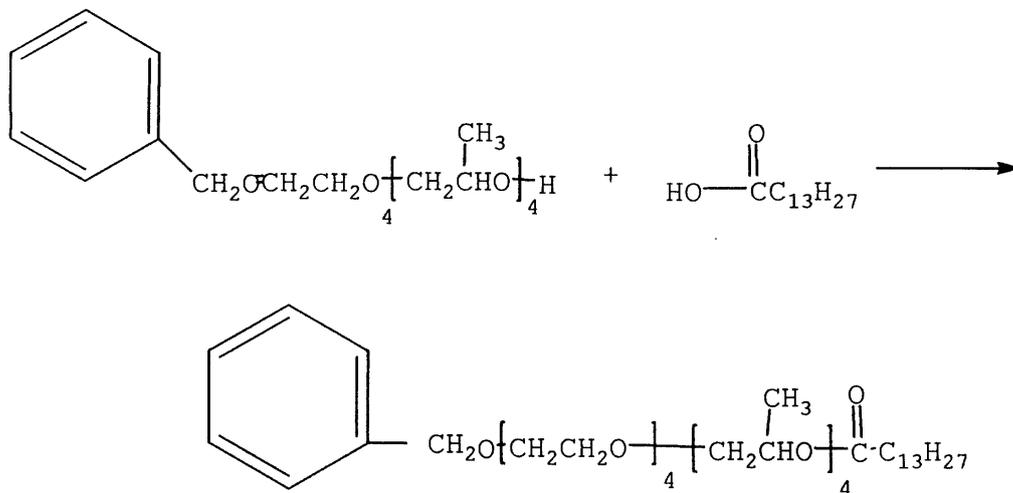
【0052】

一般に、芳香族アルコキシ化アルコール、酸および触媒は、混合しながら化合させて、反応混合物を生成させる。反応混合物は8 mg KOH未満の、好ましくは5 mg KOH未満の酸化が得られるまで、約155 ~ 約250、好ましくは約170 ~ 220の温度にて混合しながら加熱する。反応混合物は85以下に冷却し、水で洗浄する。エステル層を分離し、0.2パーセント未満の含水率が得られるまで真空下で加熱する。

【0053】

ヒドロキシ基1個を有するアルコキシ化芳香族アルコールのエステル化は、簡単である。脂肪酸または脂肪酸の誘導体の化学量論的過剰量が供給される場合、アルコキシ化芳香族アルコールは反応において完全に消費され、アルコキシ化芳香族アルコールおよび脂肪酸のモノエステルが与えられる。以下の反応スキームは、ミスチリン酸によるPEG-4、PPG-4ベンジルエーテルのエステル化を示し、4-PEG-4-PPGベンジルミリスレートが与えられる。

【化56】



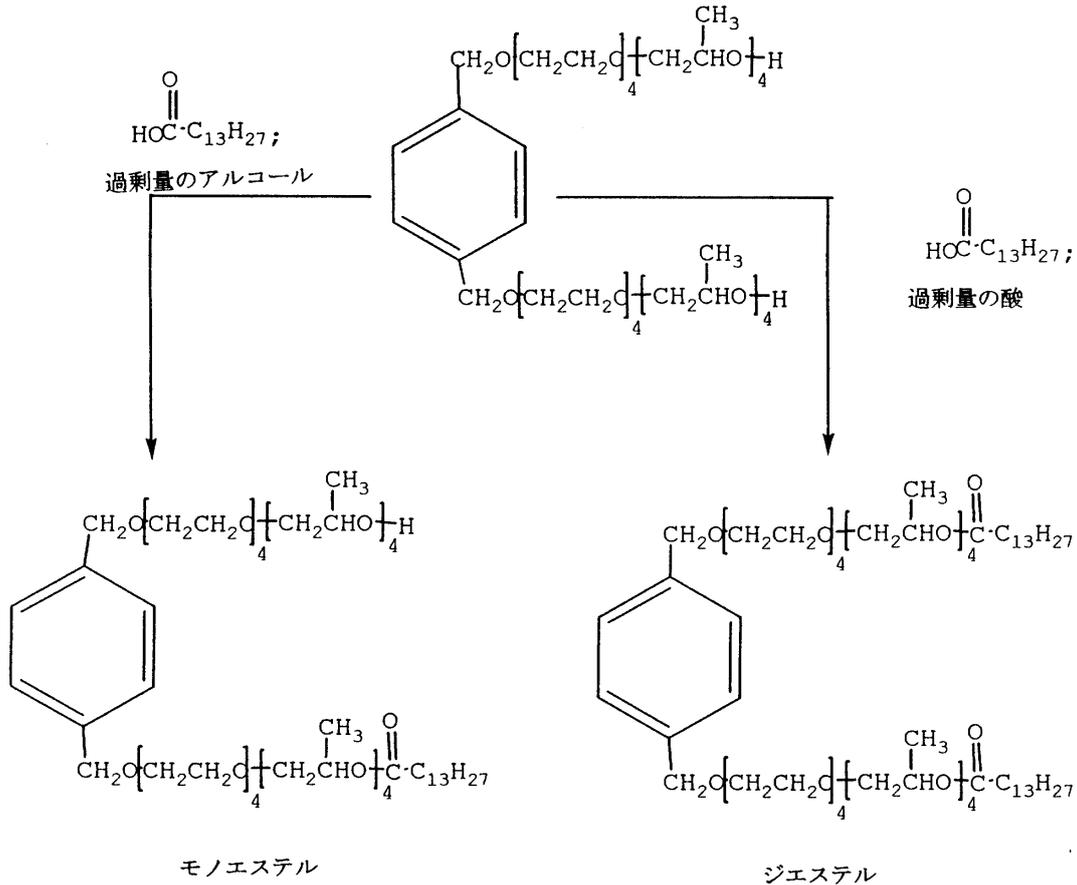
【0054】

エステル化可能である2個以上のヒドロキシ基を有するアルコキシ化芳香族アルコールのエステル化は、モノエステル、ジエステルなどを生じる。エステル化生成物の性質は、脂肪族カルボン酸（またはその誘導体）およびアルコキシ化芳香族アルコールの相対比によって変わる。たとえば2個のヒドロキシ基を有するアルコキシ化芳香族アルコールのエステル化は、要望どおり、一方または両方のヒドロキシ基のエステル化を引き起こす。アルコキシ化芳香族アルコールの化学量論的過剰量が反応混合物中に存在する場合、モノエステルが優勢な生成物である。反対に、脂肪酸の化学量論的過剰量を使用される場合、優勢な生成物はジエステルである。

【0055】

以下の反応スキームは、ミスチリン酸によるPEG-4, PPG-4 p-ジ-メチルヒドロキシベンジルエーテルのエステル化を示し、反応物の相対比によって、ジ-またはモノ-ミリスレートのどちらかが与えられる。

【化57】



10

20

【0056】

米国特許第5,693,316号、第5,597,555号、第5,455,025号、および第5,302,377号のアルコキシル化およびエステル化反応を含む、調製方法の説明は、そのような説明が本発明のエステルの調製に関する程度に、参照により本明細書に組み入れられている。

30

【0057】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルは、化粧品およびパーソナルケア製品用の成分または添加剤として有用である。本明細書で述べるエステルは好ましくは、皮膚軟化薬、可溶化剤、希釈剤、可塑剤、および/または増粘剤として利用される。パーソナルケアおよび化粧品製品の成分として、アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルは、調合者にとって1以上の重要な利点を供給する。第一に、本発明のエステルを含有する調合物は、化粧品およびパーソナルケア製品に望ましいべたつかない皮膚触感を有する。これはもちろん、調合物の他の成分によって変わる。

【0058】

さらに、アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のあるエステル中での化粧品製品のある機能性成分の溶解度は、従来使用されている皮膚軟化薬中での同一の活性成分の溶解度よりも高いことが、驚くべきことに見出されている。たとえば、サンスクリーン製品調合物の既知のサンスクリーン活性成分である、PPG-3ベンジルミリストート中でのベンゾフェノン-3の溶解度は、参照により本明細書に組み入れられている米国特許第4,323,694号で述べられている既知の皮膚軟化成分である、C₁₂、C₁₃、C₁₄、およびC₁₅直鎖第一級アルコールの安息香酸エステルの混合物中におけるベンゾフェノン-3の溶解度よりも大きい。第4,323,694号特許に述べられている皮膚軟化成分の等しい量に溶解される量よりも10%以上多いベンゾフェノン-3の量を溶解する、アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルが好ましい

40

50

【 0 0 5 9 】

本発明のエステルの調製物の合成方法が、エステルを含有する化粧品およびパーソナルケア製品の特性を変化させる能力を提供することは、別の利点である。たとえばアルコキシスパーサー中のエトキシ基およびプロポキシ基の比を変化させることによって、界面活性剤系中のエステルの流動性および/または分散性は、調合者の要望に応じて変更することができる。さらなる流動性を付与するために、エステルのアルコキシスパーサーにプロポキシ単位を含ませてもよい。反対に、エステルの溶解度/分散性を向上させるために、エトキシ単位を含ませてもよい。

【 0 0 6 0 】

製品に低い延展特性を付与する化合物は、より濃厚で、さらに均質なフィルム形成を可能にする。そのような化合物は、たとえば高い耐洗浄性および高いSPF値を備えたサンスクリーン調合物を得るために望ましい。したがって、10未満の皮膚延展係数または20,000cps未満の粘度を有するアルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルが好ましい。さらに好ましいエステルは、5未満の皮膚延展係数または10,000cps未満の粘度を有する。低い延展係数および粘度の両方を示すエステルがなおさらに好ましい。

【 0 0 6 1 】

皮膚延展係数は、たとえば製品5マイクロリットルを、前腕の掌側表面上の直径3.14cmの円に塗布することによって決定される。製品は円内に均一に延展され、15分の期間にわたって延展される。次に試験部位および前腕の周辺領域に、FD&C Blue No. 1の1%溶液を噴霧する。青色染料によって染色されなかった領域は、製品が延展しなかった領域を示す。皮膚延展係数は、生じた領域を最初の領域で割ることによって得られる。本発明により、本発明のエステルを含有する試験調合物は、好ましくは約10未満の、さらに好ましくは約5未満の皮膚延展係数を有する。

【 0 0 6 2 】

所望の顔料湿潤特性は、本発明のエステルを使用することによっても得られる。顔料湿潤特性は、染料スラリーを調製することおよび粘度を測定することによって決定する。たとえばスラリーは、本発明のアルコキシル化脂肪族アルコールジカルボン酸エステルを35パーセントのマイカまたは他の染料と混合することによって調製できる。スラリーの粘度は、スラリーを5分間放置した後に決定する。粘度が低くなればなるほど、エステルの顔料湿潤特性は良好になる。好ましくは本発明により、生じた染料スラリーの粘度は、エステル65%、顔料混合物35%(重量%で測定)に基づいて、約20,000cps、さらに好ましくは約10,000cps未満となる。異なる試験混合物を使用する場合、粘度は変化するであろう。

【 0 0 6 3 】

従って本発明は、本明細書で述べるアルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含む、パーソナルケアまたは化粧品製品組成物を提供する。そのような組成物は本明細書では、最終製品組成物と呼ぶ。本発明の最終製品組成物は、アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸の少なくとも1つのエステルを、組成物の約0.1~約99重量%含有する。製品組成物中のエステルの量は、具体的な用途および調合物の設計によって変わる。好ましくは本発明のエステルは、製品組成物の約0.1~約40重量%、さらに好ましくは約0.1~約10重量%、さらになお好ましくは約0.5~約2重量%の量で存在する。しかし製品の性質によって、異なる量が好ましいこともある。

【 0 0 6 4 】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルに加えて、本発明の最終製品組成物は、従来およびそれ以外の両方の、活性および追加成分を含む、各種の機能性成分を含んでもよい。成分を含有または除外する決定および具体的な活性および追加成分の選択は、具体的な用途および製品調合物によって変わる。「活性」成分と「追加

10

20

30

40

50

成分」との区分は人為的であり、具体的な用途および製品タイプに依存する。1つの用途または製品における「活性」成分である物質は、別のものにおいて「追加」成分であり、逆も同様である。

【0065】

従ってアルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルに加えて、本発明の最終製品組成物は、組成物の0.2~約60重量%、好ましくは約3~約40重量%、さらに好ましくは約5~25重量%の量で存在する、1以上の活性成分を含んでもよい。活性成分は、製品の機能に関連するある利点を提供する。活性成分の限定されない例は、サンスクリーン化合物、有機および無機の両方の、顔料、生物活性物質などの皮膚および毛髪回復剤、保湿剤、皮膜形成剤、ヘアカラー、メイクアップ剤、洗浄剤、増粘剤、乳化剤、防腐薬、脱臭活性物質および界面活性洗浄剤、毛髪コンディショニング剤、皮膚コンディショニング剤、毛髪スタイリング剤、フケ防止剤、毛髪成長促進剤、香料、防腐薬、界面活性剤および経皮送達のための局所目的に有用な医薬品を含む。他の適切な活性成分および活性成分の具体的なタイプは、本明細書の一般成分の節で見出すことができる。

10

【0066】

活性成分の各タイプには、1以上の化合物が存在することがある。同様に、1を超える活性成分のタイプが製品組成物に存在してもよい。活性成分の選択は、所望の化粧品またはパーソナルケア製品の性質によって変わる。たとえばサンスクリーンは、サンスクリーンローション、シャンプー、毛髪ケアローションなどで使用できる。活性成分の選択は、所望の化粧品またはパーソナルケア製品に依存する。たとえばサンスクリーン活性物質は、サンスクリーンローション、シャンプー、薬用シャンプー、毛髪ケアローションなどに使用することができる。

20

【0067】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルおよび活性成分に加えて、本発明の組成物は、1以上の追加の皮膚軟化薬、洗浄剤、乳化剤、湿潤剤、酸化防止剤、柔軟剤、潤滑剤、浸透剤、可塑剤、溶媒および共溶媒、サンスクリーン添加剤、分散剤、制汗剤、コンディショナー、増粘剤、保存料、抗菌剤、緩衝剤、キレート剤、発泡剤、カップリング剤、タンパク質、塩、エッセンシャルオイルおよび香料を含んでもよい。

30

【0068】

本発明の最終製品組成物は、液体、ゲル、クリーム、エマルジョン、エアゾールおよび非エアゾールスプレー、マイクロエマルジョン、フォーム、および固体の形であり、透明または不透明である。透明調製物が好ましい。本明細書で述べる製品の形のものを含む本発明の最終製品組成物は、皮膚と毛髪の両方に使用できる。本発明の最終製品組成物は、家庭用洗浄製品、家庭用洗浄液体および他の同様の製品の形を有することもある。

【0069】

本発明の最終製品組成物は、これに限定されるわけではないが、局所調製物を含む、水性および非水性調製物として調合できる。アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルに加えて、本発明の局所調製物は、本明細書の成分の節で述べる、各種の活性、追加および随意の成分を含有することができる。たとえば追加の、鉱油などの皮膚軟化薬、ワセリン、香料、タンパク質、湿潤剤、塩、保存料、エッセンシャルオイルなどが本発明の局所調製物に含まれる。

40

【0070】

本発明の水性局所調製物は、本発明のアルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを、組成物の約0.20~約60.0重量%、好ましくは約3.0~約40.0重量%、さらに好ましくは5~25重量%の量で、および1以上の活性成分を、組成物の約0.20~約60.0重量%、好ましくは約3.0~約40.0重量%、さらに好ましくは5~30重量%の量で含有する。組成物で追加の従来の皮膚軟化薬を使用する場合、それらは本発明のエステル化合物に対して約10:1~約1:10部の比で存

50

在する。残りは一般に賦形剤および水または一部の水性溶媒系である。

【 0 0 7 1 】

本発明の非水性局所調製物は、アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを、組成物の約 0.10 ~ 約 99.0 重量%、好ましくは約 10 ~ 約 90.0 重量%、およびさらに好ましくは約 15 ~ 約 75 重量%の量で、および 1 以上の活性成分を、組成物の約 0.20 ~ 約 99.0 重量%、好ましくは約 10 ~ 約 90.0 重量%、およびさらに好ましくは約 15 ~ 約 75 重量%の量で含有する。組成物で追加の従来の皮膚軟化薬を使用する場合、それらは本発明のエステル化合物に対して約 10 : 1 ~ 約 1 : 10 の比で含まれる。

【 0 0 7 2 】

本発明の最終製品組成物の限定されない例は、ローション、ゲル、スプレーなどの毛髪および/または皮膚用のサンスクリーン組成物、ハンドクリーナー、浴用組成物、バブルバス製品、サントオイル、制汗剤および/または脱臭組成物、香水およびコロン、コールドクリーム、シェービング製品およびプレシェーブ、脱臭剤、局所用薬用軟膏、皮膚保湿剤、顔用洗浄剤、クレンジングクリーム、皮膚用ゲル、シャンプー、ヘアコンディショナー、洗浄剤、家庭用洗浄製品、不織布トワレ、メイクアップ製品、リップスティック製品、マスカラ、およびヘアカラー製品を含む。

【 0 0 7 3 】

本発明のエステルは、ある化粧品およびパーソナルケア製品での使用に特に適切である。好ましい製品は、シャンプー、ヘアコンディショナー、サンスクリーン製品調合物、制汗剤、ベビーシャンプー、ベビーバス製品、手洗い用食器洗浄液、ボディウォッシュ、洗顔料、およびベビーワイブを含む。

【 0 0 7 4 】

本発明の特に好ましい最終製品組成物は、制汗剤製品およびサンスクリーン製品調合物である。そのようなさらに好ましい組成物は好ましくは、皮膚または毛髪に局所的に塗布される。本発明のエステルは、シクロメチコン化合物などのケイ素液体と高度に適合性である。シクロメチコンは、揮発性化合物であり、制汗剤製品に含まれることが多い。しかし、制汗剤製品において望ましいシクロメチコンの揮発性によって、調合物加工中にそれらを取扱うことが困難になる。驚くべきことに、アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のあるエステルが、制汗剤製品でのその性能に実質的に影響を及ぼすことなく、処理中のシクロメチコンの揮発性を低下させることが発見されている。従って発明は、組成物の約 0.1 ~ 約 40 重量%、さらに好ましくは約 1 ~ 20 重量%の量で存在するアルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステル、組成物の約 1 ~ 約 20 重量%、さらに好ましくは約 5 ~ 約 15 重量%の量で存在する 1 以上の制汗剤活性物質、および組成物の約 1 ~ 約 40 重量%、さらに好ましくは約 2 ~ 約 20 重量%の量で存在する 1 以上のシクロメチコン化合物を含む、制汗剤製品組成物も提供する。本発明のエステルおよび少なくとも 1 つのシクロメチコン化合物の原材料ブレンドも検討される。そのようなブレンドは好ましくは、約 20 ~ 約 80 % のエステルおよび約 20 ~ 約 80 % の少なくとも 1 つのシクロメチコン化合物を含有する。アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含有する制汗剤製品組成物は、伝統的に含まれるものを含め、各種の他の成分も含む。そのような成分の限定されない例は、アルミニウムジルコニウムテトラクロロハイドレックス - グリシンなどのアルミニウムジルコニウム錯体；アルミニウムクロロハイドレート；ナトリウムアルミニウムクロロヒドロキシルアセテート；アルミニウムクロロハイドレックス P . G . ；ジプロピレングリコール、ヘキサレングリコールなどのグリコール；フェニルトリメチコンなどのシリコーン；タルクなど；ヒドロキシエチルセルロースなど；PEG ジステアレートなど；イソプロピルミリステートなどの脂肪族エステル；イソセテス - 20 などのアルコキシル化アルコール；エタノール；ポリデカンなど；ポリエチレン；シリカ；セチル、ステアシルおよびセテアシルなどの脂肪族アルコール；水素化ヒマシ油などの水素化植物油；グリセリルベヘナート；C₁₈ ~ C₃₆ 酸トリグリセライド；および C₁₈ ~ C₃₆ 酸グリコールエステルである。他の適切な具

10

20

30

40

50

体的な成分は、本明細書の一般成分の節で述べる。

【 0 0 7 5 】

本発明のエステルは、サンスクリーンローション、サンスクリーンローションスプレー、UV保護シャンプーおよびコンディショナー、サンプロテクション機能を有する化粧品調合物などのサンスクリーン製品調合物の成分としても特に有用である。従って本発明は、組成物の約0.5～約60重量%、さらに好ましくは約1～約40重量%の量で存在する本発明のエステル、および組成物の約0.1～30重量%、さらに好ましくは約1～約20重量%の量で存在する1以上のサンスクリーン活性成分を含むサンスクリーン製品組成物も提供する。本発明のサンスクリーン製品調合物で使用できるサンスクリーン活性成分の限定されない例は、p-アミノ安息香酸、サリチレート、フェルラ酸誘導体、フェニルベンズイミダゾールスルホン酸、ベンゾフェノンスルホン酸、ベンゾフェノン、チオクト酸誘導体、油溶性シナメートなどを含む。本発明のサンスクリーン製品中に存在するサンスクリーン活性成分は、ベンゾフェノン-3、オクチルメトキシシナメート、フェニルベンズイミダゾールスルホン酸、メチルアンスラニレート、シナミドプロピトリモニウムクロリドなどの非イオン性、カチオン性およびアニオン性UV吸収化合物を含む。サンスクリーン活性成分の他の具体的な限定されない例は、パラ-アミノ安息香酸、ベンゾフェノン-1、ベンゾフェノン-1、ベンゾフェノン-2、ベンゾフェノン-4、ベンゾフェノン-5、ベンゾフェノン-6、ベンゾフェノン-8、ベンゾフェノン-12、メトキシシナメート、アヴォベンゾン、エチルジヒドロキシプロピルパラ-アミノ安息香酸、グリセリルパラ-アミノ安息香酸、メチルアンスラニレート、オクトクリレン、オクチルジメチルパラ-アミノ安息香酸、オクチルサリチレート、酸化亜鉛、二酸化チタン、および赤色ワセリンを含む。1つの好ましい実施形態において、式(II)のエステルはアヴォベンゾンと併せて使用される。

10

20

【 0 0 7 6 】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含有するサンスクリーン製品組成物は、伝統的に含まれるものを含め、各種の他の成分を含有してもよい。本発明のサンスクリーン製品組成物中に存在する、そのような成分の限定されない例は、鉱油；オクチルパルミテートなどの脂肪酸エステル；オレス-10、PEG-10セチルアルコールなどの乳化剤；セチルホスフェートまたはジセチルホスフェートなどの非アルコキシル化アルコールホスフェートエステル；PEG-10セチルホスフェートなどのアルコキシル化アルコールホスフェートエステル；カルボマー型などのポリマー乳化剤；酸化亜鉛および二酸化チタンなどの物理的阻害剤；セチル、ステアリルおよびセテアリルなどの脂肪族アルコール；ビタミンE、Cなどのビタミン；BHT、BHAなどの酸化防止剤である。他の適切な具体的な成分は、本明細書の一般成分の節で述べる。

30

【 0 0 7 7 】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含有するシャンプーは、伝統的に含まれるものを含め、各種の成分を含むことができる。そのような成分の限定されない例は、ラウリル硫酸アンモニウム、ラウレス硫酸アンモニウム、ラウリル硫酸ナトリウム、およびラウレス硫酸ナトリウム；両性界面活性剤（たとえば、ココアンフォグリシナート、ココアミドプロピルベタインなど）；ココアミンオキシドなどのアミンオキシド；たとえばポリクワット10 (polyquat 10) などのセルロースおよびカチオン性セルロース；グァーガムおよびカチオン性グァーガム；ベンゾフェノン-3、フェニルベンズイミダゾールスルホン酸、メンチルアンスラニレート、シナミドプロピトリモニウムクロリド、およびオクチルメトキシシナメートなどのUV吸収化合物；シリコーン液（シクロメチコン）および改質シリコーン液（アモジメチコン）；植物抽出物；およびオクチルステアレートおよび小麦胚種油などの脂肪族エステルならびにトリグリセリドである。他の適切な具体的な成分は、本明細書の一般成分の節で述べる。

40

【 0 0 7 8 】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含有するベビーシャンプーおよびベビーバスは、伝統的に含まれるものを含め、各種の成分を含有しても

50

よい。そのような成分の限定されない例は、ラウリル硫酸アンモニウム、ラウレス硫酸アンモニウム、ラウリル硫酸ナトリウム、およびラウレス硫酸ナトリウム；ココアソフグリシナート、ココアミドプロピルベタインなどの両性界面活性剤；ココアミンオキシドなどのアミンオキシド；ポリクワット10 (polyquat 10) などのセルロースおよびカチオン性セルロース；グァーガムおよびカチオン性グァーガム；ベンゾフェノン-3 およびオクチルメトキシシンナメートなどのUV吸収化合物；シリコーン液（シクロメチコン）および改質シリコーン液（アモジメチコン）；植物抽出物；オクチルステアレートおよび小麦胚種油などの脂肪族エステルならびにトリグリセリド；PEG-30グリセリルココアートなどのアルコキシル化グリセリド；ポリソルベート20などのアルコキシル化ソルビタンエステル；およびトリデセス-10 (trideceth-10) カルボキシラートなどのカルボキシル化界面活性剤である。他の適切な具体的な成分は、本明細書の一般成分の節で述べる。

10

【0079】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含有するボディおよびフェイシャルウォッシュは、伝統的に含まれるものを含め、各種の成分を含むことができる。そのような成分の限定されない例は、ラウリル硫酸アンモニウム、ラウレス硫酸アンモニウム、ラウリル硫酸ナトリウム、およびラウレス硫酸ナトリウム；ココアソフグリシナート、ココアミドプロピルベタインなどの両性界面活性剤；ココアミンオキシドなどのアミンオキシド；ポリクワット10 (polyquat 10) などのセルロースおよびカチオン性セルロース；グァーガムおよびカチオン性グァーガム；ベンゾフェノン-3 およびオクチルメトキシシンナメートなどのUV吸収化合物；シリコーン液（シクロメチコン）および改質シリコーン液（アモジメチコン）；植物抽出物；オクチルステアレートおよび小麦胚種油などの脂肪族エステルならびにトリグリセリド；PEG-30グリセリルココアートなどのアルコキシル化グリセリド；ポリソルベート20などのアルコキシル化ソルビタンエステル；トリデセス-10 (trideceth-10) カルボキシラートなどのカルボキシル化界面活性剤；ラノリンおよびラノリンクワッツ (lanolin quats) ；およびワセリンである。他の適切な具体的な成分は、本明細書の一般成分の節で述べる。

20

【0080】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含有するヘアコンディショナーは、伝統的に含まれるものを含め、各種の他の成分も含有してもよい。そのような成分の限定されない例は、ベヘントリモニウムクロリドなどの脂肪族quats；セチルアルコールなどの脂肪族アルコール；ポリクワット10 (polyquat 10) などのセルロースおよびカチオン性セルロース；グァーガムおよびカチオン性グァーガム；ベンゾフェノン-3、オクチルメトキシシンナメート、フェニルベンズイミダゾールスルホン酸、メンチルアンスラニレート、シンナミドプロピルトリモニウムクロリドなどの非イオン性、カチオン性およびアニオン性UV吸収化合物；シリコーン液（シクロメチコン）および改質シリコーン液（アモジメチコン）；植物抽出物；オクチルステアレートおよび小麦胚種油などの脂肪族エステルならびにトリグリセリド；ジセチルホスフェートおよびPEG-20セチルホスフェートなどの脂肪族アルキルホスフェートエステル、ポリソルベート20などのアルコキシル化ソルビタンエステル；トリデセス10 (trideceth-10) カルボキシラートなどのカルボキシル化界面活性剤である。他の適切な具体的な成分は、本明細書の一般成分の節で述べる。

30

40

【0081】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸を含有する手洗い用食器洗浄液は、伝統的に含まれるものを含め、各種の他の成分も含有してもよい。そのような成分の限定されない例は、ラウリル硫酸アンモニウム、ラウレス硫酸アンモニウム、ラウリル硫酸ナトリウム、およびラウレス硫酸ナトリウム；ドデシルベンゼンスルホネートのナトリウムおよびマグネシウム塩；ココアミドDEAまたはココアミドMEAなどのアルカノールアミド；ココアソフグリシナート、ココアミドプロピルベタインなどの両性界面活性

50

剤；およびココアミンオキシドなどのアミンオキシドである。

【0082】

アルコキシル化芳香族アルコールおよび脂肪族カルボン酸のエステルを含有するベビーワンプは、伝統的に含まれるものを含め、各種の他の成分も含有してもよい。そのような成分の限定されない例は、ラウリル硫酸アンモニウム、ラウレス硫酸アンモニウム、ラウリル硫酸ナトリウム、およびラウレス硫酸ナトリウム、ココアンフォグリシナート、ココアミドプロピルベタインなどの両性界面活性剤；ココアミンオキシドなどのアミンオキシド；ポリクワット10 (polyquat 10) などのセルロースおよびカチオン性セルロース；グァーガムおよびカチオン性グァーガム；ベンゾフェノン-3およびオクチルメトキシシナメートなどのUV吸収化合物；シリコーン液（シクロメチコン）および改質シリコーン液（アモジメチコン）；植物抽出物；オクチルステアレートおよび小麦胚種油などの脂肪族エステルならびにトリグリセリド；PEG-30グリセリルココアートなどのアルコキシル化グリセリド；PEG-75ラノリン；ポリソルベート20などのアルコキシル化ソルピタンエステル；トリデセス-10 (trideceth-10) カルボキシレートなどのカルボキシル化界面活性剤；セチルホスフェートまたはジセチルホスフェートなどの非アルコキシル化アルコールホスフェートエステル；PEG-10セチルホスフェートなどのアルコキシル化アルコールホスフェートエステルである。他の適切な具体的な成分は、本明細書の一般成分の節で述べる。

10

【0083】

以下の成分も、本発明の組成物中に存在することがある。

20

【0084】

[界面活性剤]

界面活性剤は、1以上の非イオン性界面活性剤、アニオン性界面活性剤、カチオン性界面活性剤、両性界面活性剤、両性イオン界面活性剤、およびその混合物を含め、本発明の組成物中に存在する。本発明の組成物と併せて使用できる界面活性剤の一部については、McCUTCHEONのDetergents and Emulsifiers (1986)、米国特許第5,151,210号、第5,151,209号、第5,120,532号、第5,011,681号、第4,788,006号、第4,741,855号、米国特許第4,704,272号、第4,557,853号、第4,421,769号、第3,755,560号を参照のこと；すべて参照によりその全体が本明細書に組み入れられている。

30

【0085】

[カチオン性界面活性剤]

各種のカチオン性界面活性剤が本発明の組成物中に存在してもよい。本発明の組成物中に存在するカチオン性界面活性剤の量および性質は、組成物の性質に依存する。最終製品組成物において、カチオン性界面活性剤の総量は、本明細書で述べるそのアルコキシル化エステルを含め、製品組成物の0.1~約40重量%、さらに好ましくは約0.1~約15重量%、なおさらに好ましくは約0.5~約2重量%の範囲で変化する。しかし製品の性質によって、カチオン性界面活性剤の異なる量が好ましいことがある。適切な追加のカチオン性界面活性剤は、McCUTCHEON、Detergents & Emulsifiers、(M.C. Publishing Co. 1979)；米国特許第3,155,591号、第3,929,678号、第3,959,461号、第4,387,090号に開示されており、それらは参照により本明細書に組み入れられている。

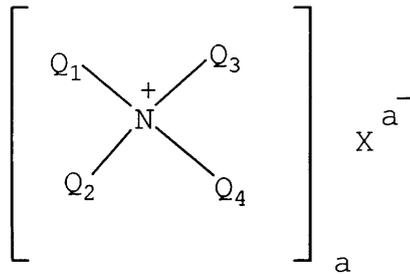
40

【0086】

[アンモニウムクワッツ (Ammonium quats)]

本発明の組成物は、式

【化58】



の第四級アンモニウムカチオン性界面活性剤を含み、式中、Xおよびaは、前に上記したとおりであり、Q₁は、C₁₂~C₂₂アルキル、C₁₂~C₂₂アルキルアミドC₁~C₆アルキレン、C₁₂~C₂₂アルキルヒドロキシであり；Q₂は、C₁₂~C₂₂アルキル、C₁₂~C₂₂アルキルアミドC₁~C₆アルキレン、C₁₂~C₂₂アルキルヒドロキシ、ベンジル、またはC₁~C₆アルキル；Q₃およびQ₄は独立して、C₁~C₆アルキルまたはベンジルである。

【0087】

適切な第四級アンモニウム界面活性剤の例は、セチルアンモニウムクロリド、セチルアンモニウムブロミド、ラウリルアンモニウムクロリド、ラウリルアンモニウムブロミド、ステアリルアンモニウムクロリド、ステアリルアンモニウムブロミド、セチルジメチルアンモニウムクロリド、セチルジメチルアンモニウムブロミド、ラウリルジメチルアンモニウムクロリド、ラウリルジメチルアンモニウムブロミド、ステアリルジメチルアンモニウムクロリド、ステアリルジメチルアンモニウムブロミド、セチルトリメチルアンモニウムクロリド、セチルトリメチルアンモニウムブロミド、ラウリルトリメチルアンモニウムクロリド、ラウリルトリメチルアンモニウムブロミド、ステアリ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ブロミド、ラウリルジメチルアンモニウムクロリド、ステアリルジメチルセチルジタロージメチルアンモニウムクロリド、ジセチルアンモニウムクロリド、ジセチルアンモニウムブロミド、ジラウリルアンモニウムクロリド、ジラウリルアンモニウムブロミド、ジステアリルアンモニウムクロリド、ジステアリルアンモニウムブロミド、ジセチルメチルアンモニウムクロリド、ジセチルメチルアンモニウムブロミド、ジラウリルメチルアンモニウムクロリド、ジラウリルメチルアンモニウムブロミド、ジステアリル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、ジステアリルメチルアンモニウムブロミド、およびその混合物を含む。

【0088】

追加の第四級アンモニウム塩は、C₁₂~C₂₂アルキルは、タロー脂肪酸またはココヤシ脂肪酸に由来するものを含む。これらのタローおよびココヤシ源に由来する第四級アンモニウム塩の例は、ジタロージメチルアンモニウムクロリド、ジタローdimethylアンモニウムメチルサルフェート、ジ(水素化タロー)ジメチルアンモニウムクロリド、ジ(水素化タロー)ジメチルアンモニウムアセテート、ジタロージプロピルアンモニウムホスフェート、ジタロージメチルアンモニウムニトレート、ジ(ココヤシアルキル)ジメチルアンモニウムクロリド、ジ(ココヤシアルキル)ジメチルアンモニウムブロミド、タローアンモニウムクロリド、ココヤシアンモニウムクロリド、ステアラミドプロピルPGジモニウムクロリドホスフェート、ステアラミドプロピルエチルジモニウムエトサルフェート、ステアラミドプロピルジメチル(ミリスチルアセテート)アンモニウムクロリド、ステアラミドプロピルジメチルセテアリルアンモニウムトシラート、ステアラミドプロピルジメチルアンモニウムクロリド、ステアラミドプロピルジメチルアンモニウムラクテート、およびその混合物を含む。

【0089】

さらに好ましい第四級アンモニウム界面活性剤は、ジラウリルジ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、ジミリスチルジメチルアンモニウムクロリド、ジパルミチルジ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

10

20

30

40

50

ニウムクロリド、ステアラミドプロピル P G - ジモニウムクロリドホスフェート、ステアラミドプロピルエチルジモニウムエトサルフェート、ステアラミドプロピルジメチル(ミリスチルアセテート)アンモニウムクロリド、ステアラミドプロピルジメチルセテアリルアンモニウムトシラート、ステアラミドプロピルジメチルアンモニウムクロリド、ステアラミドプロピルジメチルアンモニウムラクテート、およびその混合物である。

【0090】

[脂肪族アミン]

本発明の組成物は、第一級、第二級および第三級 $C_{12} \sim C_{22}$ アミンの塩も含む。そのような適切なアミンの例は、ステアラミドプロピルジメチルアミン、ジエチルアミノエチルステアルアミド、ジメチルステアラミン、ジメチルソイアミン、ソイアミン、トリ(デシル)アミン、エチルステアリルアミン、エトキシ化ステアリルアミン、ジヒドロキシエチルステアリルアミン、およびアラキジルベヘニルアミンを含む。適切なアミン塩は、ハロゲン、アセテート、ホスフェート、ニトレート、シトレート、ラクテートおよびアルキルサルフェート塩を含む。そのような塩は、ステアリルアミンヒドロクロリド、ソイアミンクロリド、ステアリルアミンホルマート、N-タロープロパンジアミンジクロリドおよびステアラミドプロピルジメチルアミンシトレートを含む。本発明の組成物において有用な一部のカチオン性アミン界面活性剤は、参照により本明細書に組み入れられている、米国特許第 4, 275, 055 号で開示されている。

10

【0091】

[アミドアミン]

本発明の組成物は、Croda Inc. に譲渡され、参照により本明細書に組み入れられている米国特許出願第 09/409, 203 号に開示されているようなアミドアミンを含んでもよい。

20

【0092】

[非イオン性界面活性剤]

本発明の組成物は、各種の非イオン性界面活性剤を含んでもよい。適切な非イオン性界面活性剤の中には、 $C_8 \sim C_{30}$ アルコールと糖またはデンプンポリマーとの縮合生成物がある。これらの化合物は、式 $(S)_n - O - R$ によって表され、式中、S はグルコース、フルクトース、マンノース、およびガラクトースなどの糖部分であり；n は約 1 ~ 約 1000 の整数であり、そして R は $C_8 \sim C_{30}$ アルキルである。R 基が由来する適切な $C_8 \sim C_{30}$ アルコールの例は、デシルアルコール、セチルアルコール、ステアリルアルコール、ラウリルアルコール、ミリスチルアルコール、オレイルアルコールなどを含む。これらの界面活性剤の具体的な例は、デシルポリグルコシドおよびラウリルポリグルコシドを含む。

30

【0093】

他の適切な非イオン性界面活性剤は、アルキレンオキシドと脂肪酸との縮合生成物(すなわち脂肪酸アルキレンオキシドエステル)を含む。これらの物質は、一般式 $RCO(X)_nOH$ を有し、式中、R は $C_{10} \sim C_{30}$ アルキルであり、X は $-OCH_2CH_2-$ (エチレンオキシドに由来) または $-OCH_2CHCH_3-$ (プロピレンオキシドに由来) であり、そして n は約 1 ~ 約 200 の整数である。

40

【0094】

また他の適切な非イオン性界面活性剤は、式 $RCO(X)_nOOCR$ を有する、アルキレンオキシドと脂肪酸との縮合生成物(すなわち脂肪酸のアルキレンオキシドジエステル)であり、式中、R は $C_{10} \sim C_{30}$ アルキルであり、X は $-OCH_2CH_2-$ (エチレンオキシドに由来) または $-OCH_2CHCH_3-$ (プロピレンオキシドに由来) であり、そして n は約 1 ~ 約 200 の整数である。

【0095】

また他の非イオン性界面活性剤は、一般式 $R(X)_nOR'$ を有する、アルキレンオキシドと脂肪族アルコールとの縮合生成物(すなわち脂肪族アルコールのアルキレンオキシドエーテル)であり、式中、R は $C_{10} \sim C_{30}$ アルキルであり、n は約 1 ~ 約 200 の整数

50

であり、そしてR'はHまたはC₁₀-C₃₀アルキルである。

【0096】

なお他の非イオン性界面活性剤は、式RCO(X)_nOR'を有する化合物であり、式中、RおよびR'はC₁₀-C₃₀アルキルであり、Xは-OCH₂CH₂-（エチレンオキシドに由来）または-OCH₂CHCH₃-（プロピレンオキシドに由来）であり、そしてnは約1～約200の整数である。

【0097】

アルキレンオキシド誘導非イオン性界面活性剤の例は、セテス-1、セテス-2、セテス-6、セテス-10、セテス-12、セテアレス-2、セテアレス6、セテアレス-10、セテアレス-12、ステアレス-1、ステアレス-2、stearteth-6、ステアレス-10、ステアレス-12、PEG-2ステアレート、PEG4ステアレート、PEG6ステアレート、PEG-10ステアレート、PEG-12ステアレート、PEG-20グリセリルステアレート、PEG-80グリセリルタロワート、PPG-10グリセリルステアレート、PEG-30グリセリルココアート、PEG-80グリセリルココアート、PEG-200グリセリルタロワート、PEG-8ジラウラート、PEG-10ジステアレート、およびその混合物を含む。

10

【0098】

なお他の有用な非イオン性界面活性剤は、参照により本明細書に組み入れられている米国特許第2,965,576号、第2,703,798号、および第1,985,424号で開示されている、ポリヒドロキシ脂肪酸アミドを含む。

20

【0099】

[アニオン性界面活性剤]

本発明の組成物は、各種のアニオン性界面活性剤を含んでもよい。適切なアニオン性界面活性剤の複数の例は、参照により本明細書に組み入れられている米国特許第3,929,678号に開示されている。適切なアニオン性界面活性剤のさらなる例は、アルコイルイセチオネート、およびアルキルエーテルサルフェートを含む。

【0100】

アルコイルイセチオネートは通例、式RCO-OCH₂CH₂-SO₃Mを有し、Rは、C₁₀-C₃₀アルキルであり、Mは、アンモニウム、ナトリウム、カリウム、またはトリエタノールアミンなどの水溶性カチオンである。適切なイセチオネートの例は、アンモニウムココイルイセチオネート、ナトリウムココイルイセチオネート、ナトリウムラウロイルイセチオネート、ナトリウムステアロイルイセチオネート、およびその混合物を含む。本明細書で使用するには、アンモニウムココイルイセチオネート、ナトリウムココイルイセチオネート、およびその混合物が好ましい。

30

【0101】

アルキルエーテルサルフェートは通例、式ROSO₃MおよびRO(C₂H₄O)_xSO₃Mを有し、式中、RはC₁₀-C₃₀アルキルであり、xは約1～約10で変化し、Mはアンモニウム、ナトリウム、カリウム、またはトリエタノールアミンなどの水溶性カチオンである。

【0102】

アニオン性界面活性剤のまた別の適切なクラスは、スクシニアマート、およびC₁₂-C₂₄オレフィンスルホネートおよびカルボキシラートを含む、式R₁-SO₃M（式中、R₁はC₈～C₃₀アルキル；好ましくは、C₁₂～C₂₂アルキルであり、そしてMはカチオンである）の、C₈～C₃₀カルボン酸およびアルキルスルホネートのアルカリ金属塩である。

40

【0103】

[両性界面活性剤]

本発明の組成物は、両性イオンおよび両性界面活性剤を含んでもよい。適切な両性および両性イオン界面活性剤はたとえば、式RN(CH₂)_mCO₂M₂およびRNH(CH₂)_mCO₂M（式中、mは1～4で変化し、RはC₈～C₃₀アルキル；好ましくは、C₁₂～C₂₂アルキルであり、そしてMはH、アルカリ金属、アルカリ土類金属アンモニウム、または

50

アルカノールアンモニウムである)のイミノジアルカノアートおよびアミノアルカノアートを含む、アルキルイミノアセテート、カルボキシラート、スルホネート、サルフェート、ホスフェート、およびホスホネートなどのモノ-またはジ-C₈-C₂₄第二級および第三級アミンの誘導体である。

【0104】

他の適切な両性および両性イオン界面活性剤は、イミダゾリニウムおよびアンモニウム誘導体である。そのような両性界面活性剤の適切な例は、ナトリウム3-ドデシル-アミノプロピオナート、ナトリウム3-ドデシルアミノプロパンスルホネート、N-アルキルタウリン；N-高級アルキルアスパラギン酸、およびコアミドプロピルPG-ジモニウムクロリドホスフェートを含む。適切な両性および両性イオン界面活性剤のさらなる例については、参照により本明細書に組み入れられている米国特許第2,658,072号、第2,438,091号、および第2,528,378号を参照のこと。

10

【0105】

また他の適切な両性および両性イオン界面活性剤は、ベタインである。適切なベタインの例は、ココジメチルカルボキシメチルベタイン、ラウリルジメチルカルボキシメチルベタイン、ラウリルジメチルカルボキシエチルベタイン、セチルジメチルカルボキシメチルベタイン、セチルジメチルベタイン、ラウリルビス-(2-ヒドロキシエチル)カルボキシメチルベタイン、ステアリルビス-(2-ヒドロキシプロピル)カルボキシメチルベタイン、オレイルジメチルカルボキシプロピルベタイン、ラウリルビス-(2-ヒドロキシプロピル)カルボキシエチルベタイン、ココジメチルスルホプロピルベタイン、ステアリルジメチルスルホプロピルベタイン、ラウリルジメチルスルホエチルベタイン、ラウリルビス-(2-ヒドロキシエチル)スルホプロピルベタイン、およびアミドベタインならびにアミドスルホベタイン、オレイルベタイン、およびココアミドプロピルベタインを含む。

20

【0106】

[サンスクリーン化合物]

多種多様なサンスクリーン化合物は、本発明の組成物の使用に適切である。組成物の性質によって、サンスクリーン化合物は、組成物の約40重量%まで、好ましくは約1~約30重量%の量を添加できる。しかし好ましい量は、組成物の性質によって変わる。従って、シャンプーまたはコンディショナーの形の最終製品組成物では、適切なサンスクリーン剤は、組成物の約40重量%まで、好ましくは約0.5~約5重量%、さらに好ましくは組成物の約0.5~約1.5重量%の量で含まれる。適切なサンスクリーン化合物はたとえば、p-アミノ安息香酸、その塩およびその誘導体；アンスラニレート；サリチレート；桂皮酸誘導体；ジヒドロキシ桂皮酸誘導体；トリヒドロキシ桂皮酸誘導体；炭化水素；ジベンザルアセトンおよびベンザルアセトフェノン；ナフトールスルホネート；ジヒドロキシ-ナフトール酸およびその塩；クマリン誘導体；ジアゾール；キニン塩；キノリン誘導体；ヒドロキシまたはメトキシ置換ベンゾフェノン；尿酸およびピロ尿酸；タンニン酸およびその誘導体；ヒドロキノン；アミノ安息香酸、サリチレート、フェルラ酸誘導体、フェニルベンズイミダゾールスルホン酸、ベンゾフェノンスルホン酸、チオクト酸誘導体、油性シナメートおよびベンゾフェノンを含む。他の適切なサンスクリーン化合物については、参照により本明細書に組み入れられている、Segarin,ら、Cosmetics Science and Technology, Chapter VII I, pages 189以下参照を参照すること。

30

40

【0107】

具体的な適切なサンスクリーン化合物は、2-エチルヘキシルp-メトキシシナメート、4,4'-t-ブチルメトキシジベンゾイルメタン、2-ヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン、オクチルジメチルp-アミノ安息香酸、ジガロイルトリオレアート、2,2-ジヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン、エチル-4-ビス(ヒドロキシプロピル)-アミノ安息香酸、2-エチルヘキシル-2-シアノ-3,3-ジフェニルアクリレート、2-エチルヘキシルサリチレート、グリセリルp-アミノ安息香酸、3,3,5

50

- トリメチルシクロヘキシルサリチレート、メチルアンスラニレート、p - ジメチルアミノ安息香酸またはアミノ安息香酸、2 - エチルヘキシル p - ジメチルアミノ安息香酸、2 - フェニルベンズイミダゾール - 5 - スルホン酸、2 - (p - ジメチルアミノフェニル) - 5 - スルホニックベンズオキサゾ酸、パラアミノ安息香酸、ベンゾフェノン - 1、ベンゾフェノン - 1、ベンゾフェノン - 2、ベンゾフェノン - 3、ベンゾフェノン - 4、ベンゾフェノン - 5、ベンゾフェノン - 6、ベンゾフェノン - 8、ベンゾフェノン - 12、メトキシシナメート、アヴォベンゾン、エチルジヒドロキシプロピルパラ - アミノ安息香酸、グリセリルパラ - アミノ安息香酸、メチルアンスラニレート、オクトクリレン、オクチルジメチルパラ - アミノ安息香酸、オクチルメトキシシナメート、オクチルサリチレート、酸化亜鉛、二酸化チタン、および赤色ワセリンを含む。

10

【0108】

[皮膚軟化薬]

本発明の組成物は、脂肪、ワックス、脂質、シリコン、炭化水素、脂肪族アルコールの1または追加の皮膚軟化化合物および多種多様の溶媒物質を含んでもよい。皮膚軟化薬の量は用途に依存する。最終製品組成物では、皮膚軟化薬は一般に、組成物の50重量%までの、好ましくは約0.1~約20重量%、およびさらに好ましくは組成物の約0.5~約10重量%の量で含まれる。

【0109】

適切な皮膚軟化薬の例は、 $C_8 \sim C_{30}$ カルボン酸の $C_8 \sim C_{30}$ アルキルエステル； $C_8 \sim C_{30}$ カルボン酸の $C_1 \sim C_6$ ジオールモノエステルおよびジエステル； $C_8 \sim C_{30}$ カルボン酸のモノグリセリド、ジグリセリド、およびトリグリセリド、 $C_8 \sim C_{30}$ カルボン酸のコレステロールエステル、コレステロール、および炭化水素を含む。これらの物質の例は、ジイソプロピルアジペート、イソプロピルミリステート、イソプロピルパルミテート、エチルヘキシルパルミテート、イソデシルネオペンタノアート、 $C_{12} \sim C_{15}$ アルコールベンゾアート、ジエチルヘキシルマレアート、PPG - 14ブチルエーテル、PPG - 2ミリスチルエーテルプロピオナート、セチルリシノルエート、コレステロールステアレート、コレステロールイソステレート、コレステロールアセテート、ホホバオイル、ココアバター、シアバター、ラノリン、ラノリンエステル、鉱油、ワセリン、および直鎖ならびに分岐 $C_{16} \sim C_{30}$ 炭化水素を含む。

20

【0110】

直鎖および分岐鎖脂肪族 $C_8 \sim C_{30}$ アルコール、たとえばステアリルアルコール、イソステアリルアルコール、ベヘニルアルコール、セチルアルコール、イソセチルアルコール、およびその混合物も有用である。他の適切な皮膚軟化薬の例は、米国特許第4,919,934号に開示されており；それは参照によりその全体が本明細書に組み入れられている。

30

【0111】

他の適切な皮膚軟化薬は、各種のアルコキシル化エーテル、ジエーテル、エステル、ジエステル、およびトリエステルである。適切なアルコキシル化エーテルの例は、PPG - 10ブチルエーテル、PPG - 11ブチルエーテル、PPG - 12ブチルエーテル、PPG - 13ブチルエーテル、PPG - 14ブチルエーテル、PPG - 15ブチルエーテル、PPG - 16ブチルエーテル、PPG - 17ブチルエーテル、PPG - 18ブチルエーテル、PPG - 19ブチルエーテル、PPG - 20ブチルエーテル、PPG - 22ブチルエーテル、PPG - 24ブチルエーテル、PPG - 30ブチルエーテル、PPG - 11ステアリルエーテル、PPG - 15ステアリルエーテル、PPG - 10オレイルエーテル、PPG - 7ラウリルエーテル、PPG - 30イソセチルエーテル、PPG - 10グリセリルエーテル、PPG - 15グリセリルエーテル、PPG - 10ブチレングリコールエーテル、PPG - 15ブチレングリコールエーテル、PPG - 27グリセリルエーテル、PPG - 30セチルエーテル、PPG - 28セチルエーテル、PPG - 10セチルエーテル、PPG - 10ヘキシレングリコールエーテル、PPG - 15ヘキシレングリコールエーテル、PPG - 10 1, 2, 6 - ヘキサントリオールエーテル、PPG - 15 1, 2, 6

40

50

- ヘキサントリオールエーテル、およびその混合物を含む。

アルコキシル化ジエーテルの例は、PPG-10 1, 4-ブタンジオールジエーテル、PPG-12 1, 4-ブタンジオールジエーテル、PPG-14 1, 4-ブタンジオールジエーテル、PPG-2 1, 4-ブタンジオールジエーテル、PPG-10 1, 6-ヘキサジオールジエーテル、PPG-12 1, 6-ヘキサジオールジエーテル、PPG-14 1, 6-ヘキサジオールジエーテル、PPG-20 1, 6-ヘキサジオールジエーテル、およびその混合物を含む。好ましくは、PPG-10 1, 4-ブタンジオールジエーテル、PPG-12 1, 4-ブタンジオールジエーテル、PPG-10 1, 6-ヘキサジオールジエーテル、およびPPG-12 1, 6-ヘキサジオールジエーテル、およびその混合物からなる群より選択されるものである。

10

【0112】

適切な脂質は、 $C_8 - C_{20}$ アルコールモノソルビタンエステル、 $C_8 - C_{20}$ アルコールソルビタンジエステル、 $C_8 - C_{20}$ アルコールソルビタントリエステル、 $C_8 - C_{20}$ アルコールスクロースモノエステル、 $C_8 - C_{20}$ アルコールスクロースジエステル、 $C_8 - C_{20}$ アルコールスクローストリエステル、および $C_2 - C_{62}$ -ヒドロキシ酸の $C_8 - C_{20}$ 脂肪族アルコールエステルを含む。具体的な適切な脂質の例は、ソルビタンジイソステアレート、ソルビタンジオレアート、ソルビタンジステアレート、ソルビタンイソステアレート、ソルビタンラウラート、ソルビタンオレアート、ソルビタンパルミテート、ソルビタンセスキオレアート、ソルビタンエスキステアレート、ソルビタンステアレート、ソルビタントリイソステアレート、ソルビタントリオレアート、ソルビタントリステアレート、スクロースココアート、スクロージラウラート、スクロースジステアレート、スクロースラウラート、スクロースミリステート、スクロースオレアート、スクロースパルミテート、スクロースリシノルエート、スクロースステアレート、スクローストリベヘナート、スクローストリステアレート、ミリスチルラクテート、ステアリルラクテート、イソステアリルラクテート、セチルラクテート、パルミチルラクテート、ココイルラクテート、およびその混合物を含む。

20

【0113】

他の適切な皮膚軟化は、鉱油、ワセリン、コレステロール、ジメチコン、ジメチコノール、ステアリルアルコール、セチルアルコール、ベヘニルアルコール、ジイソプロピルアジペート、イソプロピルミリステート、ミリスチルミリステート、セチルシリノルエート、ソルビタンジステアレート、ソルビタンジラウラート、ソルビタンステアレート、ソルビタンラウラート、スクロースラウラート、スクロースジラウラート、ナトリウムイソステアリルラクチラート、ラウリルピドラート、ソルビタンステアレート、ステアリルアルコール、セチルアルコール、ベヘニルアルコール、PPG-14 1, 4-ブチルエーテル、PPG-15 1, 4-ステアリルエーテル、およびその混合物を含む。

30

【0114】

[乳化剤]

本発明の組成物は、各種の乳化剤を含んでもよい。本発明の最終製品組成物において、乳化剤は、組成物の約10重量%までの量、好ましくは約0.5~約5重量%の量で含まれる。適切な乳化剤の例は、ステアラミドプロピルPG-ジモニウムクロリドホスフェート、ステアラミドプロピルエチルジモニウムエトサルフェート、ステアラミドプロピルジメチル(ミリスチルアセテート)アンモニウムクロリド、ステアラミドプロピルジメチルセテアリルアンモニウムトシラート、ステアラミドプロピルジメチルアンモニウムクロリド、ステアラミドプロピルジメチルアンモニウムラクテート、ポリエチレングリコール、ポリプロピレングリコール、およびその混合物を含む。

40

【0115】

[フケ防止化合物]

本発明の組成物は、フケ防止剤を含んでもよい。適切なフケ防止剤の例は、ジंकピリチオン、硫黄、および硫化セレンウムを含む。

【0116】

50

[毛髪酸化剤]

本発明の組成物は、毛髪酸化 / 還元剤を含んでもよい。適切な毛髪酸化 / 還元剤の例は、過酸化水素、過ホウ酸塩、チオグリコラートおよび過硫酸塩を含む。

【 0 1 1 7 】

[増粘剤]

本発明の組成物は、架橋アクリラート、非イオン性ポリアクリルアミド、キサンタンガム、グァーガム、グランガムなど；ポリアルキルシロキサン、ポリアリールシロキサン、およびアミノシリコーンなどの各種の増粘剤を含んでもよい。本発明の最終製品組成物において、増粘剤は、組成物の約 10 重量%までの量、好ましくは約 0.2 ~ 約 5 重量%の量で含まれる。

10

【 0 1 1 8 】

適切な増粘ケイ素化合物の具体的な例は、ポリジメチルシロキサン、フェニルシリコン、ポリジエチルシロキサン、およびポリメチルフェニルシロキサンを含む。適切なケイ素化合物の一部は、参照により本明細書に組み入れられている、欧州特許出願 E P 9 5 , 2 3 8 および米国特許第 4 , 1 8 5 , 0 1 7 号に述べられている。本発明の組成物は、毛髪に対してスタイル保持とコンディショニングの両方の利点を与える、シリコーンポリマー材料も含む。そのような材料は、参照により本明細書に組み入れられている、米国特許第 4 , 9 0 2 , 4 9 9 号に述べられている。

【 0 1 1 9 】

[ヘアコンディショニング剤]

本発明の組成物は、加水分解動物タンパク質毛髪コンディショニング剤を含んでもよい。Croda Incorporated は、Crotein Q - RTM という商標名で市販物質の例を販売している。他の例は、参照により本明細書に組み入れられている米国特許第 4 , 9 7 6 , 9 5 3 号に述べられているものを含めて、尿素、グリセロール、およびプロポキシ化グリセロールを含む。

20

【 0 1 2 0 】

[ヘアセット剤]

本発明の組成物は、発明毛髪への塗布時にスタイリング上の利点を付与するヘアセット剤を含んでもよい。ヘアセットポリマーは、ホモポリマー、コポリマー、ターポリマーなどでもよい。本明細書のポリマーを説明する便宜のため、ポリマー中に存在するモノマー単位は、それらが由来するモノマーと呼ばれる。モノマーは、イオン性（たとえばアニオン性、カチオン性、両性、両性イオン）または非イオン性でありうる。

30

【 0 1 2 1 】

アニオン性モノマーの例は、アクリル酸、メタクリル酸、マレイン酸、マレイン酸半エステル、イタコン酸、フマル酸、およびクロトン酸などの不飽和カルボン酸モノマー；ヒドロキシエチルアクリレートおよび、ヒドロキシエチルメタクリレート、ヒドロキシプロピルアクリレートなどのヒドロキシル基含有アクリレートおよび / またはメタクリレートによるコハク酸無水物、フタル酸無水物などの不飽和多塩基酸無水物の半エステル；スチレンスルホン酸、スルホエチルアクリレートおよびメタクリレートなどのスルホン酸基を有するモノマー；および酸ホスホオキシエチルアクリレートならびにメタクリレート、3 - クロロ - 2 - 酸ホスホオキシプロピルアクリレートならびにメタクリレートなどのリン酸基を有するモノマーを含む。

40

【 0 1 2 2 】

カチオン性モノマーの例は、アクリル酸またはメタクリル酸に由来するモノマー、および（メタ）アクリルオキシプロピルトリメチルアンモニウムクロリドおよび（メタ）アクリルオキシプロピル - トリエチルアンモニウムプロミドなどのアルキル中に 1 ~ 5 の炭素原子を有するトリアルキルアミンの四級化エピハロヒドリン生成物；ジメチルアミノエチル（メタ）アクリレート、ジエチルアミノエチル（メタ）アクリレート、ジメチルアミノプロピル（メタ）アクリレート、またはジメチルアミノプロピル（メタ）アクリルアミドなどのメタクリル酸またはメタクリルアミドに由来する、メタクリル酸のアミン誘導体ま

50

たはメタクリルアミドのアミン誘導体、および $C_1 \sim C_6$ アルキル基を有するジアルキルアルカノールアミンを含む。

【 0 1 2 3 】

両性モノマーの例は、カリウムモノクロロアセテート、ナトリウムモノプロモプロピオナートなどのハロゲン化脂肪酸塩、モノクロロ酢酸のアミノメチルプロパノール塩、モノクロロ酢酸のトリエタノールアミン塩などによる、ジメチルアミノエチル(メタ)アクリレート、ジメチルアミノプロピル(メタ)アクリルアミドなどの(メタ)アクリル酸の上述のアミン誘導体または(メタ)アクリルアミドのアミン誘導体の両性イオン化誘導体；および上述のようにプロパンスルトンにより修飾された、(メタ)アクリル酸または(メタ)アクリルアミドのアミン誘導体を含む。

10

【 0 1 2 4 】

非イオン性モノマーの例は、メタノール、エタノール、1-プロパノール、2-プロパノール、1-ブタノール、2-メチル-1-プロパノール、1-ペンタノール、2-ペンタノール、3-ペンタノール、2-メチル-1-ブタノール、1-メチル-1-ブタノール、3-メチル-1-ブタノール、1-メチル-1-ペンタノール、2-メチル-1-ペンタノール、3-メチル-1-ペンタノール、t-ブタノール、シクロヘキサノール、2-エチル-1-ブタノール、3-ヘプタノール、ベンジルアルコール、2-オクタノール、6-メチル-1-ヘプタノール、2-エチル-1-ヘキサノール、3,5-ジメチル1-ヘキサノール、3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール、1-デカノール、1-ドデカノール、1-ヘキサデカノール、1-オクタデカノール、スチレンなどの $C_1 \sim C_{24}$ アルコールのアクリル酸またはメタクリル酸エステル；クロロスチレン；ビニルアセテートなどのビニルエステル；ビニルクロリド；ビニリデンクロリド；アクリロニトリル；-メチルスチレン；t-ブチルスチレン；ブタジエン；シクロヘキサジエン；エチレン；プロピレン；ビニルトルエン；アルコキシアルキル(メタ)アクリレート、メトキシエチル(メタ)アクリレート、ブトキシエチル(メタ)アクリレート；アリルアクリレート、アリルメタクリレート、シクロヘキシルアクリレートならびにメタクリレート、オレイルアクリレートならびにメタクリレート、ベンジルアクリレートならびにメタクリレート、テトラヒドロフルフリルアクリレートならびにメタクリレート、エチレングリコールジ-アクリレートならびに-メタクリレート、1,3-ブチレングリコールジ-アクリレートならびに-メタクリレート、ジアセトンアクリルアミド、イソボルニル(メタ)アクリレート、n-ブチルメタクリレート、イソブチルメタクリレート、2-エチルヘキシルメタクリレート、メチルメタクリレート、t-ブチルアクリレート、t-ブチルメタクリレート、およびその混合物である。

20

30

【 0 1 2 5 】

アニオン性ヘアスタイリングポリマーの例は、ビニルアセテートならびにクロトン酸のコポリマー、ビニルアセテート、クロトン酸ならびにビニルネオデカノアートなどの - 分岐飽和脂肪族モノカルボン酸のビニルエステルのターポリマー；およびメチルビニルエーテルならびにマレイン酸無水物のコポリマー、アクリル酸またはメタクリル酸を含有するアクリル酸コポリマーならびにターポリマーである。

カチオン性ヘアスタイリングポリマーの例は、ジメチルアミノエチルメタクリレートなどの低級アルキルアミノアルキルアクリレートまたはメタクリレートモノマーなどのアミノ官能性アクリレートモノマーと、N-ビニルピロリドンまたはメチルメタクリレートならびにエチルメタクリレートなどのアルキルメタクリレートおよびメチルアクリレートならびにブチルアクリレートなどのアルキルアクリレートなどの相溶性モノマーとのコポリマーである。

40

【 0 1 2 6 】

[その他の成分]

本発明の組成物は、広範囲にわたるその他の成分を含んでもよい。化粧品およびパーソナルケア業界で一般に使用される、一部の適切なその他の成分は、参照により本明細書に組み入れられている、The C T F A C o s m e t i c I n g r e d i e n t H

50

and book, (2nd Ed., 1992) に述べられている。

【0127】

従って本発明の組成物は、1以上の吸収剤、抗ニキビ剤、制汗剤、固化防止剤、消発泡剤、抗菌剤、酸化防止剤、フケ防止剤、収斂剤、バインダ、緩衝液、生物学的添加剤、緩衝剤、充填剤、キレート化剤、化学添加剤、カップリング剤、コンディショナー、着色料、化粧品用収斂剤、化粧品用殺生剤、変性剤、薬剤用収斂剤、洗浄剤、分散剤、外用鎮痛薬、フィルム形成剤、発泡剤、香料成分、湿潤剤、角質溶解剤、不透明化剤、pH調整剤、保存料、高圧ガス、タンパク質、レチノイド、還元剤、金属イオン封鎖剤、皮膚漂白剤、皮膚コンディショニング剤（湿潤剤、その他、および密封剤）、皮膚無痛化剤、皮膚治療剤、柔軟剤、可溶化剤、潤滑剤、浸透剤、可塑剤、溶媒および共溶媒、サンスクリーン

10

【0128】

適切なpH調整剤の例は、水酸化ナトリウム、トリエタノールアミン、ならびにアミノメチルプロパノール、およびその混合物を含む。最終製品組成物中にpH調整剤が存在する場合、量は、組成物の約0.01～約5重量%、好ましくは約0.1～約2重量%の範囲で変化する。

【0129】

適切なフィルム形成剤の例は、グリセリン/ジエチレングリコールミリステートコポリマー、グリセリン/ジエチレングリコールアジベートコポリマー、PVM/MAコポリマーのエチルエステル、PVP/ジメチコニルアクリレート/ポリカルバミル/ポリグリコールエステル、およびその混合物を含む。最終製品組成物中にフィルム形成剤が存在する場合、量は、組成物の約0.1～約15.0重量%、好ましくは組成物の約0.1～約2.5重量%の範囲で変化する。

20

【0130】

適切なビタミンの例は、トコフェロール、トコフェロールアセテート、レチノイン酸、レチノール、およびレチノイドを含む。

【0131】

適切な抗ニキビ薬剤の例は、レゾルシノール、硫黄、サリチル酸、エリスロマイシン、亜鉛、および過酸化ベンゾイルを含む。

【0132】

適切な皮膚漂白剤またはライトニング剤の例は、ヒドロキノン、およびコウジ酸を含む。香料、顔料、着色料などの適切な美的成分の例は、パンテノールおよび誘導體（たとえばエチルパンテノール）、アロエベラ、パントテン酸およびその誘導體、クローブ油、メントール、樟脳、ユーカリ油、オイゲノール、メンチルラクテート、ウィッチハーゼル蒸留液、アラントイン、ピサボロール、およびグリチルリチン酸二カリウムを含む。

30

【0133】

従って参照により本明細書に組み入れられている、米国特許第5,693,316号、第5,597,555号、第5,455,025号、および第5,302,377号に述べられた成分は、そのような使用が、本明細書で与えた組成物の説明全体に釣り合う程度まで、本発明の組成物で使用できる。

40

【0134】

本発明を、以下に続く以下の限定されない例を参照してさらに説明する。

【実施例1】

【0135】

PPG-3ベンジルエーテルの調製

ベンジルアルコール2297.75g(21.24モル)を、窒素入口を装備した乾燥した攪拌圧力容器に入れた。KOHの触媒量(6g)を40%水性溶液として添加した。容器を窒素によってパージし、110℃まで加熱した。真空を1時間印加して、水蒸気を容器の上部空き高から除去し、混合物をさらに130℃まで加熱した。プロピレンオキシド3702.25g(63.74モル)を添加した後、反応混合物をさらに3時間攪拌し

50

て反応を完了させた。反応の進行は、試薬の取込および容器内の圧力測定によって監視した。反応混合物を110℃まで冷却し、真空を約1時間印加した。反応混合物中のKOHを中和するために、25%硫酸29gを添加した。混合物を10分間攪拌し、そしてpHを5.7に調整した。冷却して、薄い淡黄色液体のPPG-3ベンジルエーテルを主要生成物として単離した。

【実施例2】

【0136】

PPG-3ベンジルミリステートの調製

機械式スターラー、温度計および窒素入口を装着した四つ首丸底フラスコを、PPG-3ベンジルエーテル342.44g(1.19モル)、ミスチリン酸221g(1.13モル)およびSnO₂ 45gで満たした。混合物を220℃まで加熱した。反応の進行は、経時的に反応混合物の酸価を測定することによって監視した。酸価が安定したら、混合物を25℃まで冷却した。H₂O₂の30%水性溶液0.9gおよび水70gを添加し、混合物を75℃まで再度加熱した。水を真空下で蒸発させて、PPG-3ベンジルミリステートを主生成物として生成した。

10

【実施例3】

【0137】

ジ-(PPG-4)ビスフェノールAエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、ビスフェノールA 1233.86g(5.40モル)およびトルエン1445mLを充填する。容器を窒素でパージし、BF₃/エーテラート溶液の触媒量(4.86g)を充填する。温度を110℃まで上昇させ、容器内部の圧力を50psig以下に維持するために、プロピレンオキシド2511.29g(43.24モル)を一定速度で添加する。プロピレンオキシドすべてを添加した後に、反応混合物をさらに3時間反応させ、その後に温度を150℃まで上昇させて、窒素散布下でトルエンを蒸留により除去する。トルエンの蒸留後、温度を110℃まで冷却し、真空を1時間印加する。

20

【実施例4】

【0138】

ジ-(PPG-4)ビスフェノールAモノラウラートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例3によるプロポキシラート700g(1.01モル)およびラウリル酸202.32g(1.01モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(0.90g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

30

【実施例5】

【0139】

ジ-(PPG-4)ビスフェノールAジステアレートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例3によるプロポキシラート700g(1.01モル)およびステアリン酸550.80g(1.95モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.25g)を充填して、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

40

【実施例6】

【0140】

ジ-(PEG-3, PPG-4)ビスフェノールAエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、実施例3によるプロポキシラ

50

ート2000g(2.89モル)および45%KOHの触媒量(9.33g)を充填する。容器を窒素でパージし、110℃まで加熱する。微量の水を除去するために真空を1時間印加し、温度を150℃まで上昇させる。圧力を50psig以下に維持するために、エチレンオキシドを762.83g(17.34モル)の量で一定速度にて添加する。エチレンオキシドをすべて添加した後、反応混合物をさらに1時間反応させて、その後、温度を110℃に下げて、真空を1時間印加する。反応混合物65℃まで冷却し、触媒は25%硫酸の当モル量によって中和する。

【実施例7】

【0141】

ジ-(PEG-3, PPG-4)ビスフェノールAモノメリステートの調製

10

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例6によるアルコキシラート1000g(1.05モル)およびミスチリン酸239.79g(1.05モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.24g)を充填して、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例8】

【0142】

ジ-(PEG-3, PPG-4)ビスフェノールAジオレートの調製

20

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例6によるアルコキシラート1000g(1.05モル)およびオレイン酸575.59g(2.05モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.58g)を充填して、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例9】

【0143】

ジ-(PEG-2, PPG-2)ビスフェノールAエーテルの調製

30

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、ビスフェノールA1342.52g(5.88モル)およびトルエン1445mLを充填する。容器を窒素でパージし、BF₃/エーテラート溶液の触媒量(5.00g)を充填する。温度を110℃まで上昇させ、容器内部の圧力を50psig以下に維持するために、プロピレンオキシド1366.22g(23.52モル)およびエチレンオキシド1036.19g(23.52モル)の混合物を一定速度で添加する。プロピレンオキシド/エチレンオキシドすべてを添加した後に、反応混合物をさらに3時間反応させ、その後温度を150℃まで上昇させて、窒素散布下でトルエンを蒸留により除去する。トルエンの蒸留後、温度を110℃まで冷却し、真空を1時間印加する。

【実施例10】

40

【0144】

ジ-(PEG-2, PPG-2)ビスフェノールAモノパルミテートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例9によるアルコキシラート1140.69g(1.79モル)およびパルミン酸459.31g(1.79モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.6g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例11】

50

【0145】

ジ - (P E G - 2 P P G - 2) ビスフェノール A ジベヘナートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例 9 によるアルコキシラート 783.20 g (1.23 モル) およびベヘン酸 816.80 g (2.40 モル) によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量 (1.6 g) を充填し、反応混合物を窒素散布下で 220 まで加熱する。反応は、好ましくは 5 未満の A V まで酸価を測定することによって監視する。A V に達したら、温度を 85 まで冷却し、触媒を 45% K O H の当モル量によって中和し、水で 1 回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例 12】

【0146】

P P G - 4 2 - ナフトールエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、2 - ナフトール 1434.05 g (9.95 モル) およびトルエン 1445 mL を充填する。容器を窒素でパージし、B F ₃ / エーテラート溶液の触媒量 (4.97 g) を充填する。温度を 110 まで上昇させ、容器内部の圧力を 50 p s i g 以下に維持するために、プロピレンオキシド 2310.86 g (39.79 モル) を一定速度で添加する。プロピレンオキシドすべてを添加した後に、反応混合物をさらに 3 時間反応させ、その後温度を 150 まで上昇させて、窒素散布下でトルエンを蒸留により除去する。トルエンの蒸留後、温度を 110 まで冷却し、真空を 1 時間印加する。

【実施例 13】

【0147】

P P G - 4 2 - ナフチルミリステートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例 12 によるプロポキシラート 500 g (1.33 モル) およびミスチリン酸 289.15 g (1.27 モル) によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量 (0.80 g) を充填し、反応混合物を窒素散布下で 220 まで加熱する。反応は、好ましくは 5 未満の A V まで酸価を測定することによって監視する。A V に達したら、温度を 85 まで冷却し、触媒を 45% K O H の当モル量によって中和し、水で 1 回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例 14】

【0148】

P P G - 4 2 - ナフチルカプラートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例 12 によるプロポキシラート 500 g (1.33 モル) およびカプリン酸 218.80 g (1.27 モル) によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量 (0.70 g) を充填し、反応混合物を窒素散布下で 220 まで加熱する。反応は、好ましくは 5 未満の A V まで酸価を測定することによって監視する。A V に達したら、温度を 85 まで冷却し、触媒を 45% K O H の当モル量によって中和し、水で 1 回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例 15】

【0149】

P E G - 5 P P G - 4 2 - ナフトールエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、実施例 12 によるプロポキシラート 2000 g (5.31 モル) および 45% K O H の触媒量 (10.67 g) を充填する。容器を窒素でパージし、110 まで加熱する。微量の水を除去するために真空を 1 時間印加し、温度を 150 まで上昇させる。圧力を 50 p s i g 以下に維持するために、エチレンオキシドを 1169.53 g (26.55 モル) の量で一定速度にて添加する。エチレンオキシドをすべて添加した後、反応混合物をさらに 1 時間反応させて、その後、温度を 110 に下げて、真空を 1 時間印加する。反応混合物 65 まで冷却し、触

10

20

30

40

50

媒は25%硫酸の当モル量によって中和する。

【実施例16】

【0150】

PEG-5 PPG-4 2-ナフチルオレートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例15によるアルコキシラート1102.84g(1.85モル)およびオレイン酸497.16g(1.76モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.6g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

10

【実施例17】

【0151】

PEG-5 PPG-4 2-ナフチルステアレートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例15によるアルコキシラート1100.40g(1.84モル)およびステアリン酸499.60g(1.76モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.6g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

20

【実施例18】

【0152】

PEG-3 PPG-5 2-ナフトールエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、2-ナフトール952.71g(6.61モル)およびトルエン1445mLを充填する。容器を窒素でパージし、BF₃/エーテラート溶液の触媒量(4.96g)を充填する。温度を110℃まで上昇させ、容器内部の圧力を50psig以下に維持するために、プロピレンオキシド1919.03g(33.04モル)およびエチレンオキシド873.28g(19.82モル)の混合物を一定速度で添加する。プロピレンオキシド/エチレンオキシドすべてを添加した後に、反応混合物をさらに3時間反応させ、その後に温度を150℃まで上昇させて、窒素散布下でトルエンを蒸留により除去する。トルエンの蒸留後、温度を110℃まで冷却し、真空を1時間印加する。

30

【実施例19】

【0153】

PEG-3 PPG-5 2-ナフチルラウレートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例18によるアルコキシラート1197.03g(2.11モル)およびラウリル酸402.97g(2.01モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.6g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45%KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

40

【実施例20】

【0154】

PEG-3 PPG-5 2-ナフチルベヘナートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例18によるアルコキシラート1017.59g(1.80モル)およびベヘン酸582.41g(1.71モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(1.6g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましく

50

は5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85まで冷却し、触媒を45% KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例21】

【0155】

PPG-6 2-フェノキシエタノールエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、2-フェノキシエタノール1419.53g(10.27モル)および45% KOHの触媒量(16.67g)を充填する。容器を窒素でパージし、110℃まで加熱する。微量の水を除去するために真空を1時間印加し、温度を150℃まで上昇させる。圧力を50psig以下に維持するために、プロピレンオキシドを3580.47g(61.65モル)の量で一定速度にて添加する。プロピレンオキシドをすべて添加した後、反応混合物をさらに1時間反応させて、その後、温度を110℃に下げて、真空を1時間印加する。反応混合物65℃まで冷却し、触媒は25%硫酸の当モル量によって中和する。

10

【実施例22】

【0156】

PPG-6 2-フェノキシエチルカプラートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例21によるプロボキシラート500g(1.03モル)およびカプリン酸168.84g(0.98モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(0.67g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45% KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

20

【実施例23】

【0157】

PPG-6 2-フェノキシエチルパルミテートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例21によるプロボキシラート500g(1.03モル)およびパルミチン酸251.29g(0.98モル)によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量(0.75g)を充填し、反応混合物を窒素散布下で220℃まで加熱する。反応は、好ましくは5未満のAVまで酸価を測定することによって監視する。AVに達したら、温度を85℃まで冷却し、触媒を45% KOHの当モル量によって中和し、水で1回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

30

【実施例24】

【0158】

PEG-4 PPG-6 2-フェノキシエタノールエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、実施例21によるプロボキシラート2000g(4.11モル)および45% KOHの触媒量(9.33g)を充填する。容器を窒素でパージし、110℃まで加熱する。微量の水を除去するために真空を1時間印加し、温度を150℃まで上昇させる。圧力を50psig以下に維持するために、エチレンオキシドを724.18g(16.44モル)の量で一定速度にて添加する。エチレンオキシドをすべて添加した後、反応混合物をさらに1時間反応させて、その後、温度を110℃に下げて、真空を1時間印加する。反応混合物65℃まで冷却し、触媒は25%硫酸の当モル量によって中和する。

40

【実施例25】

【0159】

PEG-4 PPG-6 2-フェノキシエチルラウラートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例24によるアルコキシラート1242.41g(1.87モル)およびラウ

50

リル酸 357.59 g (1.79 モル) によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量 (1.6 g) を充填し、反応混合物を窒素散布下で 220 まで加熱する。反応は、好ましくは 5 未満の AV まで酸価を測定することによって監視する。AV に達したら、温度を 85 まで冷却し、触媒を 45% KOH の当モル量によって中和し、水で 1 回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

【実施例 26】

【0160】

PEG-4 PPG-6 2-フェノキシエチルミリステートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例 24 によるアルコキシラート 1204.70 g (1.82 モル) およびミスチリン酸 395.30 g (1.73 モル) によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量 (1.6 g) を充填し、反応混合物を窒素散布下で 220 まで加熱する。反応は、好ましくは 5 未満の AV まで酸価を測定することによって監視する。AV に達したら、温度を 85 まで冷却し、触媒を 45% KOH の当モル量によって中和し、水で 1 回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

10

【実施例 27】

【0161】

PEG-3 PPG-3 2-フェノキシエタノールエーテルの調製

窒素入口を備えた清浄な乾燥した攪拌タンク圧力容器に、2-フェノキシエタノール 1553.93 g (11.25 モル) および 45% KOH の触媒量 (16.67 g) を充填する。容器を窒素でパージし、110 まで加熱する。微量の水を除去するために真空を 1 時間印加し、温度を 150 まで上昇させる。圧力を 50 psig 以下に維持するために、プロピレンオキシド 1919.03 g (33.04 モル) およびエチレンオキシド 873.28 g (19.82 モル) の混合物を一定速度で添加する。プロピレンオキシド/エチレンオキシドすべてを添加した後に、反応混合物をさらに 1 時間反応させて、その後、温度を 110 に下げて、真空を 1 時間印加する。反応混合物 65 まで冷却し、触媒は 25% 硫酸の当モル量によって中和する。

20

【実施例 28】

【0162】

PEG-3 PPG-3 2-フェノキシエチルベヘナートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例 27 によるアルコキシラート 925.05 g (2.08 モル) およびベヘン酸 674.95 g (1.98 モル) によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量 (1.6 g) を充填し、反応混合物を窒素散布下で 220 まで加熱する。反応は、好ましくは 5 未満の AV まで酸価を測定することによって監視する。AV に達したら、温度を 85 まで冷却し、触媒を 45% KOH の当モル量によって中和し、水で 1 回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

30

【実施例 29】

【0163】

PEG-3 PPG-3 2-フェノキシエチルステアレートの調製

窒素入口、機械式スターラー、温度プローブおよび凝縮器を装着した四つ首丸底フラスコを、実施例 27 によるアルコキシラート 994.13 g (2.24 モル) およびステアリン酸 605.87 g (2.13 モル) によって充填する。メタンスルホン酸の触媒量 (1.6 g) を充填し、反応混合物を窒素散布下で 220 まで加熱する。反応は、好ましくは 5 未満の AV まで酸価を測定することによって監視する。AV に達したら、温度を 85 まで冷却し、触媒を 45% KOH の当モル量によって中和し、水で 1 回洗浄する。反応物を真空下で乾燥させ、所望の生成物を得る。

40

【実施例 30】

【0164】

ベンゾフェノン-3 の溶解度試験

50

本発明の化合物中でのベンゾフェノン - 3 の溶解度は、参照により本明細書に組み入れられている米国特許第 4, 275, 222 号に述べられている C₁₂ ~ C₁₅ ベンジルエステルの混合物中でのその溶解度と比較した。試験溶液の組成物は、以下のとおりであった。

【表 1】

試験溶液	ベンゾフェノン-3(g)	C ₁₂ ~C ₁₅ 安息香酸エステルの混合物(g)	PPG-3 ベンジルミリスレート(g)
A	3	17	-
B	3	-	17
C	4	16	-
D	4	-	16

10

【0165】

A . 試験溶液の調製手順

試験溶液を調製するために、ベンゾフェノン - 3 の適切な量を秤量し、小型攪拌棒装備した 50 ml ビーカーに移した。所望のエステルの正確な量をビーカーに添加し、ビーカーの中身を予熱した 70 ~ 75 °C ホットプレート上で加熱した。固体全体が溶解したら、溶液をさらに 10 分間加熱した。ビーカー態様に固体が残らないようにするために注意した。10 分後、ホットプレートからビーカーを外し、冷たい攪拌プレート上に置いて溶液を攪拌しながら約 35 °C まで冷却した。溶液を 2 オンス広口瓶に移した。広口瓶の中身は、25 °C の水浴中で 24 時間、攪乱されないままにした。24 時間後、結晶化の証拠および程度について、広口瓶を目視検査した。

20

【0166】

B . 試験結果

試験溶液 A および B では、結晶形成はなかった。試験溶液 C および D では結晶形成が見られた。試験溶液 C で形成された結晶の量は、試験溶液 D よりも約 3 倍多かった。

【実施例 31】

【0167】

サンスクリーンローション 1

サンスクリーンローションは、PPG - 3 ベンジルミリスレートを含め、以下の成分を含む。

30

【0168】

【表 2】

A相

成分	重量／重量%
Crodafos CES (セテアリアルアルコール (および) ジセチルホスフェート (および) セテスー10ホスフェート)	8.0
PPG-3 ベンジルミリステート	25.0
ベンゾフェノン 3	5.0
オクチルメトキシシンナメート	7.5

10

B相

成分	重量／重量%
水	53.25
水酸化カリウム	0.25

C相

成分	重量／重量%
Germaben II (保存料)	1.0

【0169】

20

A相の成分を合わせて、75℃まで加熱する。別の容器に、B相の成分も合わせて、75℃まで加熱する。A相をB相に攪拌しながら添加し、合わせた相を40℃に冷却しながら攪拌を続ける。C相を添加し、冷却を25℃まで続けると、所望のローションが与えられる。

【実施例32】

【0170】

サンスクリーンスプレーローション

サンスクリーンスプレーローションは、PPG-3ベンジルミリステートを含め、以下の成分を含む。

【0171】

30

【表 3】

A相

成分	重量/重量%
Crodafos CS20 酸 (ジセチルホスフェート、セテスー20 ホスフェートおよびセテアリアルアルコール)	5.0
PPG-3 ベンジルミリステート	10.0
ベンゾフェノン 3	6.0
オクチルメトキシシンナメート	7.5
メンチルアンスラニレート	5.0
Cromollient SCE (ジ-PPG-2 ミレス-10 アジペート)	3.0

10

B相

成分	重量/重量%
水	62.4
水酸化ナトリウム	0.1

C相

成分	重量/重量%
Germaben II (保存料)	1.0

20

【0172】

A相の成分を合わせて、75℃まで加熱する。別の容器に、B相の成分も合わせて、75℃まで加熱する。A相をB相に攪拌しながら添加し、合わせた相を40℃に冷却しながら攪拌を続ける。C相を添加し、冷却を25℃まで続けると、所望のローションが与えられる。

【実施例33】

【0173】

サンスクリーンローション2

【表 4】

A相

成分	重量/重量%
ジ- (PPG-4) ビスフェノール A ジステアレート	2.0
Crodafos CS20 酸 (セテアリアルアルコール (および) セテスー20 ホスフェート (および) ジセチルホスフェート)	4.0
セテアリアルアルコール	4.0
PPG-3 ベンジルミリステート	15.0
ベンゾフェノン 3	5.0
オクチルメトキシシンナメート	7.5

40

B相

成分	重量/重量%
水	61.50

C相

成分	重量/重量%
Germaben II (保存料)	1.0

【0174】

手順：A相の成分を合わせて、75℃まで加熱する。別の容器に、B相の成分も合わせ

50

て、75 まで加熱する。攪拌しながら A 相を B 相に添加し、40 まで冷却しながら攪拌を続ける。C 相を添加し、冷却を 25 まで続ける。

【実施例 34】

【0175】

カチオン性サンスクリーンローション

【表 5】

A 相

成分	重量/重量%
ベントリモニウムメトサルフェート	2.0
ジー (PPG-4) ビスフェノール A モノラウレート	3.0
セテアリアルアルコール	4.0
Crodamol OS (オクチルステアレート)	15.0
ベンゾフェノン 3	5.0
オクチルメトキシシンナメート	7.5

10

B 相

成分	重量/重量%
水	62.5

C 相

成分	重量/重量%
Germaben II (保存料)	1.0

20

【0176】

手順：A 相の成分を合わせて、75 まで加熱する。別の容器に、B 相の成分も合わせて、75 まで加熱する。攪拌しながら A 相を B 相に添加し、40 まで冷却しながら攪拌を続ける。C 相を添加し、冷却を 25 まで続ける。

【実施例 35】

【0177】

保湿ローション

30

【表 6】

A相

成分	重量/重量%	重量/重量%	重量/重量%
セテアリルアルコール	4.0	4.0	4.0
Crodamol OS (オクチルステアレート)	5.0	5.0	5.0
PEG-3,PPG-3 フェノキシエチルベヘナート	5.0	0.0	0.0
PPG-3 ベンジルミリステート	0.0	5.0	0.0
PEG-5,PPG-4 2-ナフチルオレアート	0.0	0.0	5.0
ワセリン	3.5	3.5	3.5
ジメチコン	3.0	3.0	3.0
Crodamol SS (セチルエステル)	5.0	5.0	5.0

10

B相

成分	重量/重量%	重量/重量%	重量/重量%
水	73.28	73.28	73.28
Carbopol 941 (カルボマー) (増粘剤)	0.15	0.15	0.15
NaOH (中和剤)	0.07	0.07	0.07

C相

成分	重量/重量%	重量/重量%	重量/重量%
Germaben II(保存料)	1.0	1.0	1.0

20

【0178】

手順：相BのCarbopol 941を水に混合しながら振り入れる。75～80まで加熱し、NaOHを添加する。相Aの成分を合わせて、混合しながら75～80まで加熱する。相Bを相Aに混合しながら添加し、40まで冷却する。相Cを混合しながら添加し、所望の充填温度まで冷却する。

【実施例36】

【0179】

ヘアコンディショナー

30

【表 7】

A相

成分	重量/重量%
Incroquat ベヘニル TMS-50 (ベヘントリモニウムメトサルフェート (および) セテアリルアルコール)	2.5
Crodacol S-70 (ステアリルアルコール)	2.5
PEG-5,PPG-4 2-ナフチルステアレート	2.0
PPG-6 2-フェノキシエチルカプラート	1.5

B相

成分	重量/重量%
水	90.5

40

C相

成分	重量/重量%
Germaben II (保存料)	1.0

【0180】

手順：A相の成分を合わせて、75まで加熱する。別の容器に、B相の成分も合わせ

50

て、75 まで加熱する。攪拌しながら A 相を B 相に添加し、40 まで冷却しながら攪拌を続ける。C 相を添加し、冷却を 25 まで続ける。

【実施例 37】

【0181】

コンディショニングシャンプー

【表 8】

A 相

成分	重量/重量%
PEG-4,PPG-6 2-フェノキシエチルミリステート	4.0
アンモニウムラウリルサルフェート	25.0
アンモニウムラウレスサルフェート	12.0
Crosultaine C-50 (ココミドプロピルヒドロキシサルタイン)	3.0
Lauramide DEA	1.0
Germaben II (保存料)	1.0
水	52.0

10

B 相

成分	重量/重量%
Incroquat HO-80PG (PEG-3 ジオレイルアミドエチルモニウムメトサルフェート)	2.0

20

【0182】

手順：相 A を合わせて、60 まで加熱する。相 B を添加して、25 まで冷却しながら攪拌を続ける。

【実施例 38】

【0183】

UV 保護コンディショニングシャンプー

【表 9】

A 相

成分	重量/重量%
PEG-6,PPG-8 ビスフェノール A Monomyristae	4.0
アンモニウムラウリルサルフェート	25.0
アンモニウムラウレスサルフェート	12.0
Crosultaine C-50 (ココミドプロピルヒドロキシサルタイン)	3.0
Lauramide DEA	1.0
Germaben II (保存料)	1.0
水	50.0

30

B 相

成分	重量/重量%
Polyquaternium 59 (および) プチレングリコール	3.0
ベンゾフェノン 3	1.0

40

【0184】

手順：相 A を合わせて、60 まで加熱する。相 B を添加して、25 まで冷却しながら攪拌を続ける。

【実施例 39】

【0185】

毛髪の光沢および UV 保護のためのシャンプー

50

【表 1 0】

A相

成分	重量/重量%
PEG-5,PPG-4 ナフチルオレアート	1.0
アンモニウムラウリルサルフェート	25.0
アンモニウムラウレスサルフェート	12.0
Crosultaine C-50 (コカミドプロピルヒドロキシサルタイン)	3.0
Lauramide DEA	1.0
Germaben II (保存料)	1.0
水	53.0

10

B相

成分	重量/重量%
Polyquaternium 59 (および) ブチレングリコール	3.0
ベンゾフェノン 3	1.0

【 0 1 8 6】

手順：相 A を合わせて、60 まで加熱する。相 B を添加して、25 まで冷却しながら攪拌を続ける。

20

【実施例 4 0】

【 0 1 8 7】

【表 1 1】

制汗剤スティック

成分	重量/重量%
Procetyl AWS (PPG-5-セテス-20)	49.0
Crodacol C-95 (セチルアルコール)	16.0
PPG-3 ベンジルミリステート	5.0
ジメチコン	5.0
シクロメチコン	

30

B部

成分	重量/重量%
アルミニウムクロロハイドレート	25.0

【 0 1 8 8】

手順：A部の成分を合わせて、60～65 に加熱する。50～55 に冷却し、B部を混合する間に、空気混入を避けるように注意する。所望の充填温度まで冷却する。

【実施例 4 1】

【 0 1 8 9】

透明脱臭スティック

40

【表 1 2】

A部

成分	重量/重量%
ナトリウムステアレート C-1	7.7
Incromide CA (コカミド DEA)	7.0
PEG-6,PPG-6 ビスフェノールAモノミリステート	2.5
プロピレングリコール	57.0
トリクロサン	0.3
Probutyl DB-10 (PPG-10 ブタンジオール)	7.5

10

B部

成分	重量/重量%
脱イオン水	18.0

【0190】

手順：A部成分を合わせて、強い攪拌を用いて温度70～80 に上昇させる。攪拌を5～10分間攪拌を続けて、温度に達したら次にB部を5～10分間に渡ってゆっくりと添加開始する。型に注入する。

【実施例42】

20

【0191】

マイクロエマルジョンゲル

【表 1 3】

A部

成分	重量/重量%
DEA オレス-3 ホスフェート	7.0
Volpo 5 (オレス-5)	4.0
Volpo 3 (オレス-3)	7.0
PPG-3 ベンジルミリステート	10.0
スクアラン	10.0

30

B部

成分	重量/重量%
脱イオン水	50.0
プロピレングリコール	10.00
グリセリン	1.00

C部

成分	重量/重量%
Glydant (保存料)	1.00

40

【0192】

手順：A部の成分すべてを混合して合わせ、温度を90～95 まで上昇させる。B部の成分を混合して合わせ、90～95 まで加熱する。A部にB部を添加し、95 にて混合する。約70 まで冷却し、C部を添加する。ゲルはこの温度で凝固するはずである。

【0193】

本明細書では特定の実施形態を参照して発明を説明したが、これらの実施形態は、本発明の原理および用途の例示に過ぎないことが理解されるであろう。したがって例示的な実施形態に多くの変更を行えることと、添付請求項で定義されるように、本発明の精神およ

50

び範囲から逸脱せずに、他の構成を案出できることが理解されるであろう。

フロントページの続き

(51) Int. Cl.		F I
A 6 1 K	8/00 (2006.01)	A 6 1 K 8/00
A 6 1 K	8/26 (2006.01)	A 6 1 K 8/26
A 6 1 Q	17/04 (2006.01)	A 6 1 Q 17/04

(31)優先権主張番号 10/272,556
 (32)優先日 平成14年10月16日(2002.10.16)
 (33)優先権主張国 米国(US)

前置審査

(74)代理人 100125380
 弁理士 中村 綾子
 (74)代理人 100125036
 弁理士 深川 英里
 (74)代理人 100142996
 弁理士 森本 聡二
 (74)代理人 100154298
 弁理士 角田 恭子
 (74)代理人 100162330
 弁理士 広瀬 幹規
 (72)発明者 ベレイラ, アベル
 アメリカ合衆国ニュージャージー州07109, ベルヴィル, ユージーン・プレイス 62
 (72)発明者 ウェスターゴム, クリストファー
 アメリカ合衆国ニュージャージー州08844, ヒルズボロ, ブルーバード・ドライヴ 117-1シー
 (72)発明者 オブコフ, パトリック
 アメリカ合衆国ニュージャージー州08863, フォーズ, ダーマン・ドライヴ 22

審査官 関 美祝

(56)参考文献 国際公開第00/068176(WO, A1)
 米国特許第03337490(US, A)
 特開昭60-001213(JP, A)
 特開平01-165679(JP, A)
 特開2001-240512(JP, A)
 特開平02-279607(JP, A)
 特開昭61-283652(JP, A)
 Tanja Renkes et al., Fatty Acid-Oligo(ethylene glycol) Ester Forms Ion Channels in Lipid Membranes, Angew. Chem. Int. Ed., 2000年, Vol.39, No.14, p.2512-2516

(58)調査した分野(Int. Cl., D B名)
 CAplus(STN)
 REGISTRY(STN)