

## **3 Materialien**

### **3.1 Lipide**

#### **3.1.1 Cutina CP**

Cutina CP besteht aus Cetylpalmitat und ist ein Handelsprodukt der Firma Henkel (Deutschland). Cetylpalmitat (künstlicher Walrat) ist ein Wachs aus Cetylalkohol verestert mit Palmitinsäure und wird im DAB 2001 mit der Monographie „Cetylpalmitat“ aufgeführt. Neben der Hauptfettsäurekomponente Palmitinsäure kommen noch Myristin- und Stearinsäure vor. Als Ersatz für die Alkoholkomponente werden Myristyl- und Stearylalkohol gefunden. Für Cetylpalmitat ist das Vorliegen zweier Modifikationen bekannt, deren Tropfpunkte bei 52,4-52,9°C bzw. 53,2-53,8°C liegen. Cetylpalmitat ist in Chloroform und Aceton löslich, dagegen unlöslich in Wasser und Paraffin. Die Einzelbestandteile besitzen GRAS-Status, jedoch ist die Substanz Cetylpalmitat an sich in der Lebensmittelzusatzstoffliste der FDA nicht registriert (Food Additive Database der FDA 2002). Eingesetzt wird der Rohstoff als Konsistenzgeber in Salben, Cremes und flüssigen Emulsionen (Fiedler 1996, Pena et al. 1993).

#### **3.1.2 Compritol 888 ATO**

Compritol 888 ATO ist ein sprühgetrocknetes Handelsprodukt der Firma Gattefossé (Deutschland) und ist ein Ester des Glycerols und der Behensäure (C<sub>22</sub>). Dieser Ester stellt ein Gemisch aus Mono- (12-18%), Di- (52%) und Triglyceriden (28 – 32%) dar. Neben der Behensäure ist noch ein Anteil an C<sub>16</sub>-C<sub>20</sub> Fettsäuren vorhanden. Aufgrund des Gehalts an Partialestern zeigt die Substanz schwach amphiphile Eigenschaften (HLB 2), was die gute Emulgierfähigkeit für einzuarbeitende Moleküle begründet. Der Schmelzbereich liegt bei 69-74°C. Der gelagerte Rohstoff liegt in der β'-Modifikation vor. Compritol entspricht der USP XXII-Monographie „Glycerol behenate“ und wird nach INCI (International Nomenclature of Cosmetic Ingredients) als Tribehenin bezeichnet. Es besitzt GRAS-Status und wird in der Kosmetik als

Kompaktiermittel in Pudern, Konsistenzgeber in Emulsionen und Verdicker von wasserfreien Produkten verwendet.

### 3.1.3 Carnaubawachs

Carnaubawachs (Cera Carnauba, Cäsar & Lorentz, Hilden, Deutschland) wird im DAB 10 mit der Monographie „Cera Carnauba“ aufgeführt. Es handelt sich um ein Naturpräparat, das aus dem Wachsüberzug der Blattoberfläche von *Copernicia prunifera*, einer in Südamerika vorkommenden Palmenart, gewonnen wird. Carnaubawachs wird vornehmlich aus gesättigten höheren Fettsäuren gebildet (Ester von aliphatischen unverzweigten  $C_{20}$ - $C_{30}$  Säuren mit  $C_{30}$ - $C_{34}$  Alkoholen, ebenfalls aliphatisch und unverzweigt. Das Produkt ist in Wasser unlöslich, es löst sich jedoch in Lösungsmitteln, wie Petrolether, Ethylacetat und Chloroform. Der Schmelzpunkt liegt zwischen 82 und 88°C. Aufgrund seiner außergewöhnlichen Härte spielt Carnaubawachs vor allem in der dekorativen Kosmetik eine wichtige Rolle. Weiterhin wird das Wachs für Tablettenüberzüge und als Poliermittel für Dragées verwendet. Carnaubawachs ist als Lebensmittelzusatzstoff E 903 als Trennmittel für Lebensmittel und als Überzug von Zitrusfrüchten zugelassen.

### 3.1.4 Miglyol 812

Miglyol 812 (Cäsar & Lorentz, Deutschland) ist ein halbsynthetisches Öl. Es handelt sich um ein Triglyceridgemisch der Capryl-, Caprin- und Laurinsäure (d. h., von Fettsäuren mittlerer Kettenlänge). Der Erstarrungspunkt liegt je nach Modifikation bei -22 bis -50°C. Es ist niedrigviskos, fast farblos, geruchlos und nicht oxidationsempfindlich und wird in oralen Arzneimitteln als Vehikel für Suspensionen und Lösungen eingesetzt. In Salben, Cremes, Emulsionen und Suspensionen dient es als spreitungs- und penetrationsfördernder Zusatz (Fiedler 1996).

## **3.2 Emulgatoren**

### **3.2.1 Tego Care 450**

Tego Care 450 ist ein Handelsprodukt der Firma Goldschmidt (Deutschland). Es besteht aus Polyglycerol-Methylglucosidstearat, einem nichtionischen Molekül mit einem HLB-Wert von 11,5, das im schwach sauren bis neutralen Milieu eingesetzt wird. Stabilität ist im pH-Bereich von 4,5-8,5 und über einen großen Temperaturbereich gegeben (Fiedler 1996).

### **3.2.2 Miranol Ultra C32**

Miranol Ultra C32 (Henkel, Deutschland) ist ein Glycinamphoterer mit einem isoelektrischen Punkt bei pH 7. Zwischen pH-Werten von 2 und 13 ist die Substanz als stabil zu betrachten. Die Bezeichnung nach INCI lautet Sodium Cocoamphoacetat. Die Substanz besitzt eine kleine hydrophile Kopfgruppe und die Fettsäureketten sind ebenfalls kurz ( $C_8$ - $C_{16}$ ), (Weiner 1993). Hieraus resultiert die Eigenschaft, Grenzflächen schnell zu besetzen (Westesen, Siekmann 1997). Der HLB-Wert wurde vom Hersteller nicht bestimmt. Jennings schätzte ihn aufgrund entsprechender Experimente auf etwa 34 (Voigt 1993, Jennings 1999).

## **3.3 Wirkstoffe**

### **3.3.1 Ethylhexylmethoxycinnamat**

Bei 2-ethylhexyl-3-(4-methoxyphenyl)-2-propenoat, 2-Ethylhexyl-p-methoxycinnamat, Parsol MCT (Roche Vitamins, Schweiz) handelt es sich um einen hoch effektiven UV-B-Filter. Das Absorptionsmaximum der lipophilen Substanz,  $C_{18}H_{26}O_3$ , (Molekulargewicht 290 g/mol) liegt bei 310 nm. Ethylhexylmethoxycinnamat ist eine leicht gelbe Flüssigkeit mit sehr schwachem Eigengeruch. Der chemische Filter lässt sich problemlos in übliche kosmetische Rohstoffe (Fette und Öle) einarbeiten. Für

Sonnenschutzmittel ist Ethylhexylmethoxycinnamat in der EU (bis max. 10%), (EEC Directive 1983) und den USA (2% bis max. 7,5%) (FDA 1999) zugelassen.

### 3.3.2 Ethylhexyltriazon

Bei 2,4,6-Triänilino-p-(carbo-2`-ethylhexyl-1`oxy)-1,3,5-triazin, Uvinul T-150 (BASF, Deutschland) handelt es sich ebenfalls um einen UV-B-Filter mit einem Absorptionsmaximum von 314 nm. Das Molekulargewicht der Substanz ( $C_{48}H_{66}N_6O_6$ ) beträgt 823 g/mol. Das weiße bis schwach gelbe Pulver ist leicht löslich in kosmetischen Ölen, der Schmelzpunkt liegt bei 126-131°C. Die maximal erlaubte Konzentration in Sonnenschutzmitteln beträgt 5% (Kindl 1993).

### 3.3.3 Tinosorb S

Bis-octyloxyphenol-methoxyphenyl-triazin, Tinosorb S (Ciba Spezialitätenchemie AG, Schweiz), gehört zur Gruppe der molekularen Breitbandfilter. Bei dieser Substanz  $C_{38}H_{49}N_3O_5$ , Molekulargewicht 628 g/mol, handelt es sich um ein gelbliches Pulver. Der Schmelzpunkt liegt bei 80-81°C. Das Absorptionsmaximum liegt bei 342 nm. Dem Filter wird eine ausgezeichnete Photostabilität bescheinigt, ermöglicht durch die Umwandlung der UV-Strahlung in Wärmeenergie (Herstellerinformation).

### 3.3.4 Oxybenzon

2-Hydroxy-4-methoxybenzophenon, Oxybenzon, Benzophenon-3, Uvinul M 40 (BASF, Deutschland) ist ein häufig verwendeter Breitbandfilter mit einem Absorptionsmaximum bei 286 nm und einem Molekulargewicht von 228 g/mol. Oxybenzon ist löslich in Fetten und Ölen. Auch dieser Wirkstoff weist eine hohe Photostabilität auf und wurde deshalb von der FDA als sicher und wirksam eingestuft. Die maximal erlaubten Konzentrationen von Oxybenzon in Lichtschutzformulierungen liegen bei 10% in Europa (EEC Directive 1983) und bei 7,5% in den USA (FDA 1999).

### 3.3.5 Avobenzon

1-(4-tert-butylphenyl)-3-(4-methoxyphenyl)-propan-1,3-dion, butyl-methoxy-dibenzoyl methan, Avobenzon (Roche Vitamins, Schweiz) gehört in die Gruppe der öllöslichen UV-A-Filter. Das Absorptionsmaximum liegt bei 357 nm, der Schmelzpunkt bei 81-86°C. Es ist ein weißes bis schwach gelbes Pulver mit leicht aromatischem Geruch. Die Substanz wird von der FDA als sicher eingestuft und darf in Sonnenschutzformulierungen in Konzentrationen bis zu 3% eingesetzt werden (FDA 1999).

### 3.3.6 Titandioxid

Bei Titandioxid, Covascreen Ti (LCW, Frankreich) handelt es sich um mit Trimethoxycaprylsilan gecoatetes Titandioxid. Die Partikelgröße des verwendeten Materials betrug 28-32 nm, im Gegensatz zu konventionell verwendeten Titandioxidpulvern (Partikelgröße ca. 200 nm). Erreicht wird damit eine große spezifische Oberfläche und die Vermeidung einer Pigmentcharakteristik. Das ermöglicht eine Reduktion des bei Kosmetika unerwünschte Weißeffekts. Die Hydrophobisierung der Oberfläche führt zu einer guten Dispergierbarkeit in Ölen, erhöht die Wasserfestigkeit und führt zu einem angenehmeren Gefühl auf der Haut. Das Coaten erfolgte ebenfalls, um die Photostabilität der Verbindung zu erhöhen (siehe Kapitel 2.2.2). Mikropigmente, wie Titandioxid, schützen durch Reflexion, Streuung und Absorption im gesamten UV-A-, -B- und -C-Bereich.

### 3.3.7 Vitamin A

Retinol ist ein fettlösliches, ungesättigtes Isoprenoid, welches für Wachstum, Differenzierung und Erhaltung epithelialer Gewebe notwendig ist (Orfanos et al. 1997). In Produkten für die ältere Haut wird es zur Verbesserung der Barrierefunktion, des Wasseraufnahmevermögens und der Elastizität eingesetzt. Übliche Konzentrationen sind 0,05-0,2%. Aufgrund der 5 konjugierten

Doppelbindungen ist Retinol instabil und neigt zu Oxidations- und Isomerisierungsreaktionen (Isler, Brubacher 1982). Retinol wurde als öliges Rezepturkonzentrat Retinol 15D (BASF, Deutschland) eingesetzt. Retinol 15D ist eine 15%- Dispersion von Retinol in mittelkettigen Triglyceriden.

### 3.3.8 Sonstige Rohstoffe

Alle sonstigen Rohstoffe und Reagenzien entsprechen den Herstellerspezifikationen oder offiziellen Monographien. Sie sind in Tab. 3-1 aufgeführt.

Tab. 3-1: Sonstige Rohstoffe und Reagenzien

<b>Substanz</b>	<b>Hersteller/Lieferant</b>	<b>Beschreibung und Verwendung</b>
Phenoxyethanol	Sigma Aldrich GmbH, Deutschland	Konservierungsmittel
Methylparaben	Sigma Aldrich GmbH, Deutschland	Konservierungsmittel
Propylparaben	Sigma Aldrich GmbH, Deutschland	Konservierungsmittel
Carbopol 940	Cäsar & Lorentz, Deutschland	Polyacrylat, Gelbildner und Verdickungsmittel
Tristan	Sigma Aldrich GmbH, Deutschland	= Tromethamol oder Tromethamin, primäres Amin zur Neutralisation von carbopolhaltigen Gelen oder Cremes
Hydroxyethylcellulose	Sigma Aldrich GmbH, Deutschland	Polysaccharid, Verdickungsmittel
Xanthan Gum	Sigma Aldrich GmbH, Deutschland	Polysaccharid bestehend aus einer $\beta$ -1,4-Glucan- Hauptkette, enthält Glucuronsäure, Verdickungsmittel

---

<b>Substanz</b>	<b>Hersteller/Lieferant</b>	<b>Beschreibung und Verwendung</b>
Glycerol 100%	Merck Eurolab GmbH, Deutschland	Feuchthaltemittel
Aceton (HPLC-Qualität)	Merck Eurolab GmbH, Deutschland	Lösungsmittel im Rahmen der HPLC- Analytik
Acetonitril (HPLC-Qualität)	Merck Eurolab GmbH, Deutschland	Bestandteil des verwendeten HPLC- Fließmittels
Wasser	Millipore, Deutschland	Hergestellt durch Umkehrosmose und anschließende Aufreinigung in einer MilliQ-plus-Anlage, entspricht Arzneibuchmonographie „Aqua purificata“