

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2021年9月2日(02.09.2021)



(10) 国際公開番号

WO 2021/172463 A1

- (51) 国際特許分類:
A61K 8/89 (2006.01) *A61Q 19/00* (2006.01) ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2021/007182 (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- (22) 国際出願日: 2021年2月25日(25.02.2021)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2020-029779 2020年2月25日(25.02.2020) JP
- (71) 出願人: 株式会社 資生堂 (SHISEIDO COMPANY, LTD.) [JP/JP]; 〒1040061 東京都中央区銀座7-5-5 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 松倉 俊彦 (MATSUKURA, Toshihiko); 〒1040061 東京都中央区銀座7丁目5番5号 株式会社資生堂内 Tokyo (JP). 小口 希 (OGUCHI, Nozomi); 〒1040061 東京都中央区銀座7丁目5番5号 株式会社資生堂内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 青木 篤, 外 (AOKI, Atsushi et al.); 〒1050001 東京都港区虎ノ門一丁目23番1号 虎ノ門ヒルズ森タワー 青和特許法律事務所 Tokyo (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL,

添付公開書類:

- 一 国際調査報告 (条約第21条(3))

(54) Title: COSMETIC CONTAINING SILOXANE LINKAGE-CONTAINING POLYMER COMPOUND HAVING HOST GROUP AND/OR GUEST GROUP

(54) 発明の名称: ホスト基及び/又はゲスト基を有するシロキサン結合含有高分子化合物を含む化粧品

(57) Abstract: The purpose of the present disclosure is to provide a cosmetic that provides an excellent feeling in use. A cosmetic comprising a host body including a polymer compound having a host group and a guest body including a polymer compound having a guest group, or comprising a host-guest body including a polymer compound having a host group and a guest group, wherein the polymer compound having a host group and a guest group or at least the polymer compound having a host group or the polymer compound having a guest group, has a siloxane linkage.

(57) 要約: 本開示は、優れた使用感を有する化粧料を提供することを目的とする。ホスト基を有する高分子化合物からなるホスト体及びゲスト基を有する高分子化合物からなるゲスト体、又は、ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物からなるホスト-ゲスト体を含む、かつ、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又はホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる、化粧料。



WO 2021/172463 A1

明 細 書

発明の名称：

ホスト基及び／又はゲスト基を有するシロキサン結合含有高分子化合物を含む化粧品

技術分野

[0001] 本開示は、ホスト基及び／又はゲスト基を有するシロキサン結合含有高分子化合物を含む化粧品に関する。

背景技術

[0002] 架橋された高分子化合物を利用することによって、皮膜を形成することが知られている。特に、架橋されたシリコン樹脂を含む皮膜形成剤が、種々のコーティング剤や化粧品として幅広く利用されている。

[0003] 特許文献1は、皮膜形成剤としてトリメチルシロキシケイ酸等を含有する化粧品を開示している。

[0004] また、ホスト基を有する高分子化合物からなるホスト体及びゲスト基を有する高分子化合物からなるゲスト体、又は、ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物からなるホスト-ゲスト体は、そのホスト基及びゲスト基の組み合わせによって、可逆的に結合を形成できることが知られている（特許文献2）。

[0005] 特許文献3は、ホスト基含有モノマー、ゲスト基含有モノマー及びアクリル系モノマーの水系溶媒溶液の製造方法について開示している。

先行技術文献

特許文献

[0006] 特許文献1：特開2019-99576号公報

特許文献2：国際公開第2012/036069号

特許文献3：国際公開第2013/162019号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0007] 架橋された高分子化合物を含有する従来の化粧品は、使用感が不十分である場合があった。具体的には、架橋された高分子化合物を含有する従来の化粧品では、肌等への適用後に、密着感、はり感、及び／又はつっぱり感に関して、望ましくない使用感を有する場合があった。

[0008] そこで、本開示は、優れた使用感を有する化粧品を提供することを目的とする。

[0009] 本件発明者らは、このような課題を解決するために鋭意検討を重ね、本願を発明するに至った。

課題を解決するための手段

[0010] すなわち、本開示に係る発明は、下記の態様を含む：

〈態様1〉

ホスト基を有する高分子化合物からなるホスト体及びゲスト基を有する高分子化合物からなるゲスト体、又は、ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物からなるホスト-ゲスト体を含む、かつ、

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる、化粧品

〈態様2〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる、態様1に記載の化粧品。

〈態様3〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、主鎖にシロキサン結合を含んでいる、態様1に記載の化粧品。

〈態様4〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物

物が、主鎖にシロキサン結合を含んでいる、態様 3 に記載の化粧品。

〈態様 5〉

前記ホスト基を有する高分子化合物が、側鎖にホスト基を有しており、かつ

前記ゲスト基を有する高分子化合物が、側鎖にゲスト基を有している、態様 1 ～ 4 のいずれか一項に記載の化粧品。

〈態様 6〉

前記ホスト基を有する高分子化合物が、側鎖にホスト基を有しており、かつ

前記ゲスト基を有する高分子化合物が、末端にゲスト基を有している、態様 1 ～ 4 のいずれか一項に記載の化粧品。

〈態様 7〉

前記ホスト基を有する高分子化合物が、末端にホスト基を有しており、かつ

前記ゲスト基を有する高分子化合物が、側鎖にゲスト基を有している、態様 1 ～ 4 のいずれか一項に記載の化粧品。

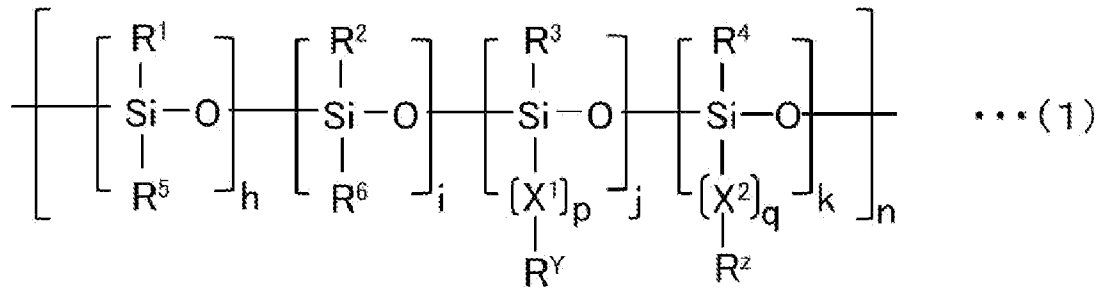
〈態様 8〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物の少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、架橋されている、態様 1 ～ 7 のいずれか一項に記載の化粧品。

〈態様 9〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式 (1) で表される構造を有する、態様 1 ～ 8 のいずれか一項に記載の化粧品：

[化1]



[式(1)中、 $R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリアル基、アリアルオキシ基、1価の複素環基、1価のスピロ環化合物、1価の縮合環化合物、 $-R^{R^1}-COOH$ で表される基、又は $-R^{R^2}-C(O)O-R^{R^3}$ で表される基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 R^{R^1} 、 R^{R^2} 、及び R^{R^3} は、それぞれ、1~10の炭素数のアルキル基又はアルキレン基である； X^1 及び X^2 は、それぞれ独立に、O、 $Si(OH)_2$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $N(H)$ 、若しくは $N(COCH_3)$ であるか、若しくはウレタン結合、ウレア結合であるか、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はカルボニル基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、2価の複素環基、ウレタン基、ウレア基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい； R^{10} は、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリアル基、アリアルオキシ基、又は複素環基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい；複数の R^{10} は、それぞれ同一でも異なってもよい； X^1 及び X^2 は、それぞれ複数ある場合、それらは同一でも異なってもよい； p 及び q は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す； R^Y は、ホスト基である； R^Z は、ゲスト基である； h 、 i 、 j 、及び k は、それぞれ、0以上の整数を表し、これらは互いに同一であっても異なってもよい；少なくとも j 又は k が、1以上の整数である； n は、1以上の整数を表す。]

〈態様 10〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物が、前記式（1）で表される構造を有する、態様9に記載の化粧品。

〈態様 11〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、主鎖に、前記式（1）で表される構造を有する、態様9又は10に記載の化粧品。

〈態様 12〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、

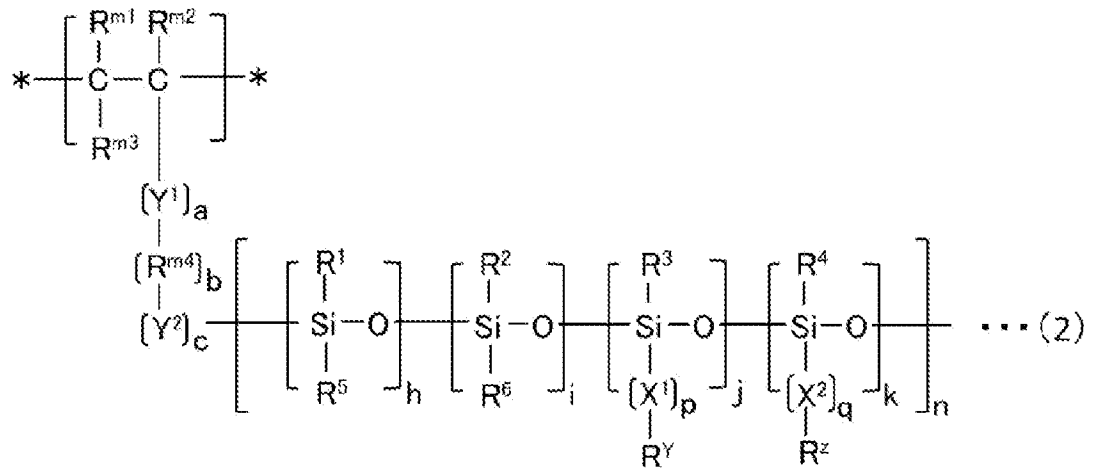
ビニル主鎖、アクリル主鎖、ウレタン主鎖、エポキシ主鎖、ポリイミド主鎖、ポリエステル主鎖、ポリウレア主鎖、又はポリカーボネート主鎖を有しており、かつ、

側鎖に、前記式（1）で表される構造を有している、態様9又は10に記載の化粧品。

〈態様 13〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式（2）で表される構造単位を有する、態様1～12のいずれか一項に記載の化粧品：

[化2]



[式(2)中、 $R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリーロキシ基、1価の複素環基、1価のスピロ環化合物、1価の縮合環化合物、 $-R^{R1}-COOH$ で表される基、又は $-R^{R2}-C(O)O-R^{R3}$ で表される基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 R^{R1} 、 R^{R2} 、及び R^{R3} は、それぞれ、1~10の炭素数のアルキル基又はアルキレン基である； X^1 及び X^2 は、それぞれ独立に、O、 $Si(OH)_2$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、NH、若しくは $N(COCH_3)$ であるか、若しくはウレタン結合、ウレア結合であるか、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はカルボニル基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、2価の複素環基、ウレタン基、ウレア基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい； R^{10} は、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリーロキシ基、又は複素環基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい；複数の R^{10} は、それぞれ同一でも異なってもよい； X^1 及び X^2 は、それぞれ複数ある場合、同一でも異なってもよい； p 及び q は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す； R^γ は、ホスト基である； R

z は、ゲスト基である； h 、 i 、 j 、及び k は、それぞれ、0以上の整数を表し、これらは互いに同一であっても異なってもよく、少なくとも j 又は k が、1以上の整数である； n は、1以上の整数を表す； $R^{m1} \sim R^{m3}$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基であり、 Y^1 は、エーテル結合、アミド結合、又はエステル結合であり、 R^{m4} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 Y^2 は、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合、 O 、 $Si(OH)_2$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $N(H)$ 、又は $N(COCH_3)$ であり、 a 、 b 、 c は、それぞれ独立に、0～3の整数を表す；*は、高分子化合物の主鎖を構成する単結合を表す。

]

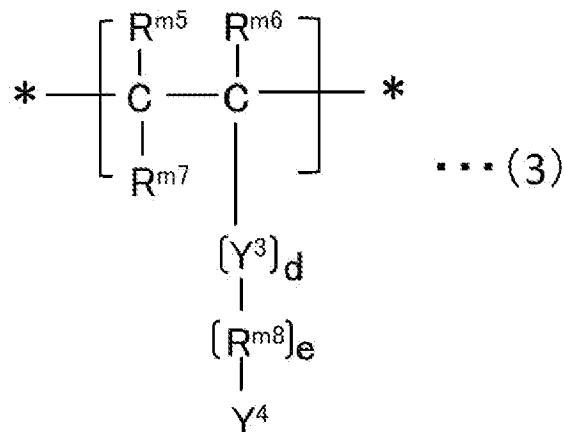
〈態様14〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物が、前記式(2)で表される構造を有する、態様13に記載の化粧品。

〈態様15〉

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式(3)で表される構造単位をさらに有する、態様13又は14に記載の化粧品：

[化3]



[式(3)中、 $R^{m5} \sim R^{m7}$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基であり、 Y^3 は、エーテル結合、アミド結合、又はエステル結合であり、 R^{m8} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 Y^4 は、水素原子、アルキル基、水酸基、 $Si(OH)_3$ 、 $Si(R^{10})_3$ 、 NH_2 、 $C(O)CH_3$ 、 $C(O)NH_2$ 、又は $N(COCH_3)$ であり、 d 及び e は、それぞれ独立に、0～3の整数を表す；*は、高分子化合物の主鎖を構成する単結合を表す。]

<態様16>

前記式(1)及び/又は前記式(2)において、

R^Y で表されるホスト基が、 α -シクロデキストリン、 β -シクロデキストリン、又は γ -シクロデキストリンであり、かつ、

R^Z で表されるゲスト基が、置換基を有してもよいアルキル基、又は置換基を有してもよいアリール基である、

態様9～15のいずれか一項に記載の化粧品。

<態様17>

前記式(1)及び/又は前記式(2)において、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 及び R^5 が、メチル基である、

態様9～16のいずれか一項に記載の化粧品。

<態様18>

前記式(1)及び/又は前記式(2)において、

$k=0$ であり、かつ、

$R^1 \sim R^3$ 、 R^5 、及び R^6 が、アルキル基である、

態様9～16のいずれか一項に記載の化粧品。

<態様19>

前記式(1)及び/又は前記式(2)において、

$k=0$ であり、

$R^1 \sim R^3$ 及び R^5 が、メチル基であり、かつ

R⁶が、ペンチル基である、
態様9～16のいずれか一項に記載の化粧品。

〈態様20〉

前記式(1)又は(2)において、

(X¹)_pが、 $-(CH_2)_3-N(COCH_3)-$ であり、かつjが1以上の整数であり、かつ/又は

(X²)_qが、 $-R^{11}-CO-O-$ 又は $-R^{11}-CO-NH-$ であり、R¹¹は置換基を有していてもよい炭素数1～12のアルキレン基であり、かつkが1以上の整数である、

態様9～19のいずれか一項に記載の化粧品。

〈態様21〉

前記ホスト基と前記ゲスト基が、以下の組み合わせ(a)～(c)のいずれか1種である、態様1～20のいずれか一項に記載の化粧品：

(a) 前記ホスト基が、 α -シクロデキストリンであって、かつ、

前記ゲスト基が、(1)炭素数4～18の直鎖アルキル基、(2)水酸基を有する炭素数4～18の直鎖アルキル基、(3)カルボキシル基を有する炭素数4～18の直鎖アルキル基、(4)アミノ基を有する炭素数4～18の直鎖アルキル基、(5)環状アルキル基、(6)フェニル基、(7)アゾベンゼン基、及び(8)桂皮酸基からなる群から選ばれた少なくとも1種である；

(b) 前記ホスト基が、 β -シクロデキストリンであって、かつ、

前記ゲスト基が、(1') t -ブチル基、(2')アダマンチル基、(3')アリール基、(4')水酸基を有するアリール基、(5')カルボキシル基を有するアリール基、(6')アミノ基を有するアリール基、(7')フェロセニル基、(8')アゾベンゼン基、及び(9')ダンシル基からなる群から選ばれた少なくとも1種である；

(c) 前記ホスト基が、 γ -シクロデキストリンであって、かつ、

前記ゲスト基が、(1'')炭素数18までのアルキル基、(2'')

水酸基を有する炭素数18までのアルキル基、(3'')カルボキシル基を有する炭素数18までのアルキル基、(4'')アミノ基を有する炭素数18までのアルキル基、(5'')アダマンチル基、(6'')炭素原子で構成されるクラスター類を有する基、(7'')アリール基を有するダンシル基、(8'')フェロセニル基、及び(9'')アントラセニル基からなる群から選ばれた少なくとも1種である。

〈態様22〉

溶媒をさらに含む、態様1～19のいずれか一項に記載の化粧品。

〈態様23〉

前記溶媒が、揮発性のシリコン、又は揮発性の炭化水素化合物である、態様20に記載の化粧品。

発明の効果

[0011] 本開示によれば、優れた使用感を有する化粧品が提供される。

発明を実施するための形態

[0012] 〈化粧品〉

本開示に係る化粧品は、

ホスト基を有する高分子化合物からなるホスト体及びゲスト基を有する高分子化合物からなるゲスト体、又は、ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物からなるホスト-ゲスト体を含み、かつ、

ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又はホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる。

[0013] 共有結合を介して高分子化合物を架橋させることによって皮膜を形成する従来の化粧品では、肌等に適用した場合に、良好な使用感が得られない場合があった。

[0014] これに対して、本願の発明者らは、ホスト基及び／又はゲスト基を有する高分子化合物を含む化粧品が、従来の化粧品と比較して優れた使用感を有していることを見出した。具体的には、ホスト基及び／又はゲスト基を有

するシロキサン結合含有高分子化合物を含有する化粧料が、密着感、はり感、及びつっぱり感に関して、優れた特性を有することを見出した。さらに、本開示に係る化粧料は、化粧持ちにも優れる。

[0015] 理論によって限定する意図はないが、本開示に係る化粧料は、ホスト基及び／又はゲスト基を有する高分子化合物を含有しているため、肌等に適用された場合に、ホスト-ゲスト相互作用を介して高分子化合物同士が結合して、皮膜（化粧塗膜）を形成すると考えられる。そのため、本開示に係る化粧料は、はり感において優れた特性を示すと考えられる。

[0016] また、理論によって限定する意図はないが、ホスト-ゲスト相互作用を介した結合は非共有結合に基づくものであるため、本開示に係る化粧料によって形成される化粧塗膜は、共有結合によって高分子間を結合させることによって形成される化粧塗膜よりも弾性が比較的高く（ヤング率が小さく）、結果として、密着感及びつっぱり感に関して優れた特性を示すと考えられる。

[0017] さらに、本開示に係る化粧料は、シロキサン結合を有する高分子化合物を用いているため、化学的に特に安定な化粧料を提供することができる。

[0018] また、シロキサン結合を有している高分子化合物を含有している化粧料は、炭化水素オイルやシリコンオイルなどの非極性溶媒への可溶性が比較的高い。ホスト基及び／又はゲスト基を有する従来的高分子化合物は、溶媒への溶解性が不十分である場合があった。これに対して、本開示に係る化粧料に含有される高分子化合物は、シロキサン結合を有しており、それによって、溶解性が向上している。揮発性の非極性溶媒への溶解性が比較的高い場合には、化粧料を塗布によって肌等に適用することが容易となり、かつ、均一でかつ薄い膜を比較的容易に形成することが可能になる。

[0019] 本開示に係る化粧料は、特には、日焼け止め（サンスクリーン）乳液、及び日焼け止めクリームなどの紫外線防御化粧料；化粧下地（ベースメイク）、ファンデーション、コンシーラー、頬紅、アイシャドウ、マスカラ、アイライナー、アイブロウ、オーバーコート剤、及び口紅などのメイクアップ化粧料として好適に用いることができる。

[0020] 〈ホスト基及びゲスト基〉

「ホスト-ゲスト相互作用」とは、ホスト基とゲスト基との間で形成される結合のことをいう。ホスト基は、ゲスト基を包接することによって、ゲスト基に結合する。ゲスト基の大きさが、ホスト基の内部空間に取り込まれることに適しており、かつ、ホスト基とゲスト基とが、疎水性相互作用、水素結合、静電相互作用、及び配位結合のうちの少なくとも1つ以上が関与する相互作用を有する場合に、ホスト-ゲスト相互作用が生じる。

[0021] (ホスト基)

ホスト基としては、例えば、シクロデキストリン (CD) が挙げられる。具体的には、 α -シクロデキストリン、 β -シクロデキストリン及び γ -シクロデキストリンが挙げられる。ホスト基としてこれらの基を用いた場合には、安定的なホスト-ゲスト相互作用を形成することができる。

[0022] (ゲスト基)

ゲスト基は、対応するホスト基に対してゲスト基となりうる基であれば、特に制限されない。ゲスト基としては、例えば、置換基を有してもよいアルキル基、及び置換基を有してもよいアリール基などが挙げられる。ゲスト基としての置換基を有してもよいアルキル基及び置換基を有してもよいアリール基は、1~18、好ましくは3~12、より好ましくは3~9の炭素数を有する。また、ゲスト基として、トリアルキルシリル基 (例えばトリメチルシリル基、トリエチルシリル基、及びトリプロピルシリル基、特にトリメチルシリル基) が挙げられる。

[0023] ゲスト基のうち、置換基を有してもよいアルキル基としては、例えば、直鎖、分岐又は環状のC 1~18のアルキル基が挙げられる。具体的には、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、シクロペンチル、ヘキシル、シクロヘキシル、イソヘキシル、ドデシル、オクタデシル、アダマンチル等のアルキル基が挙げられる。このうち好ましくはアダマンチル基またはブチル基であり、特に好ましくはアダマンチル基である。このアルキル基は、例

例えば、ハロゲン原子（例えば、フッ素、塩素、臭素等）、カルボキシル基、エステル基、アミド基、保護されていてもよい水酸基等の置換基を1～3個有していてもよい。有機金属錯体であるフェロセンを置換基として結合させたアルキル基でもよい。

[0024] ゲスト基のうち、置換基を有してもよいアリール基としては、例えば、単環又は2環以上のアリール基が挙げられ、具体的にはフェニル、トルイル、キシリル、ナフチル、アンスリル、フェナンスリル等が挙げられる。このアリール基は、例えば、アルキル基（例えば、C1～18アルキル基等）、ハロゲン原子（例えば、フッ素、塩素、臭素等）、カルボキシル基、エステル基、アミド基、アリール基を有するアゾ基、保護されていてもよい水酸基等の置換基を1～3個有していてもよい。

[0025] （ホスト基とゲスト基の組み合わせ）

本開示に係る1つの実施態様では、化粧品におけるホスト基とゲスト基が、以下の組み合わせ（a）～（c）のいずれか1種である：

（a） ホスト基が、 α -シクロデキストリンであって、かつ、

ゲスト基が、（1）炭素数4～18の直鎖アルキル基、（2）水酸基を有する炭素数4～18の直鎖アルキル基、（3）カルボキシル基を有する炭素数4～18の直鎖アルキル基、（4）アミノ基を有する炭素数4～18の直鎖アルキル基、（5）環状アルキル基、（6）フェニル基、（7）アゾベンゼン基、及び（8）桂皮酸基からなる群から選ばれた少なくとも1種である；

（b） ホスト基が、 β -シクロデキストリンであって、かつ、

ゲスト基が、（1'）*t*-ブチル基、（2'）アダマンチル基、（3'）アリール基、（4'）水酸基を有するアリール基、（5'）カルボキシル基を有するアリール基、（6'）アミノ基を有するアリール基、（7'）フェロセニル基、（8'）アゾベンゼン基、及び（9'）ダンシル基からなる群から選ばれた少なくとも1種である；

（c） ホスト基が、 γ -シクロデキストリンであって、かつ、

ゲスト基が、(1') 炭素数18までのアルキル基、(2') 水酸基を有する炭素数18までのアルキル基、(3') カルボキシル基を有する炭素数18までのアルキル基、(4') アミノ基を有する炭素数18までのアルキル基、(5') アダマンチル基、(6') 炭素原子で構成されるクラスター類を有する基、(7') アリール基を有するダンシル基、(8') フェロセニル基、及び(9') アントラセニル基からなる群から選ばれた少なくとも1種である。

[0026] 〈高分子化合物〉

「高分子化合物」とは、1種類以上のモノマーからなる重合物を意味し、特には、分子量分布を有し、ポリスチレン換算の数平均分子量が 1×10^3 以上（例えば、 $1 \times 10^3 \sim 1 \times 10^8$ ）である重合体である。高分子化合物は、ブロック共重合体、ランダム共重合体、交互共重合体、グラフト共重合体のいずれであってもよいし、その他の態様であってもよい。

[0027] 本開示に係るホスト基及び／又はゲスト基を有する高分子化合物は、単一のモノマーからなる重合体であってもよく、又は、共重合体、ブロック共重合体、若しくはグラフト共重合体であってもよい。

[0028] 本開示に係るホスト基及び／又はゲスト基を有する高分子化合物に含有されるシロキサン結合において、シロキサン結合を構成しているケイ素原子（Si）は、好ましくは、水素原子、又は R^s で表される基を有している。ここで、 R^s は、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリールオキシ基、又は1価の複素環基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 R^s が複数ある場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。 R^s は、特には、炭素数1～12のアルキル基、又は置換基を有していてもよいアリール基であってもよい。 R^s は、好ましくは炭素数1～12、より好ましくは炭素数1～6、特に好ましくは炭素数1又は2の、アルキル基である。

[0029] 好ましくは、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子

化合物のうちの少なくともいずれか、又はホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、ポリオルガノシロキサン主鎖を含んでいる。本開示に係る化粧料に含有される高分子化合物が主鎖にシロキサン結合を含んでいる場合、又はポリオルガノシロキサン主鎖を含んでいる場合には、化粧料の化学的な安定性がさらに向上する場合があるため好ましく、また、炭化水素オイル及びシリコンオイルなどに対してより優れた溶解性を示すため、好ましい。

[0030] 本開示に係る高分子化合物は、主鎖又は側鎖に、ポリオルガノシロキサンユニットを有してよい。本開示に係る高分子化合物がポリオルガノシロキサンユニットを含んでいる場合、ポリオルガノシロキサンユニットの割合は、高分子化合物全体に対して、20重量%以上、30重量%以上、若しくは40重量%以上であってよく、かつ／又は、100重量%以下、90重量%以下、80重量%以下、70重量%以下、若しくは60重量%以下であってよい。ポリオルガノシロキサンユニットの割合が当該範囲である場合、高分子化合物の化学的な安定性及び溶解性が、さらに向上する。

[0031] 特に好ましくは、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物が、共に、主鎖にシロキサン結合を含んでいる。本開示に係る化粧料に含有されるホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物が、ともに主鎖にシロキサン結合を含んでいる場合には、炭化水素オイル及びシリコンオイルなどに対する本開示に係る化粧料の溶解性が、さらに向上する。

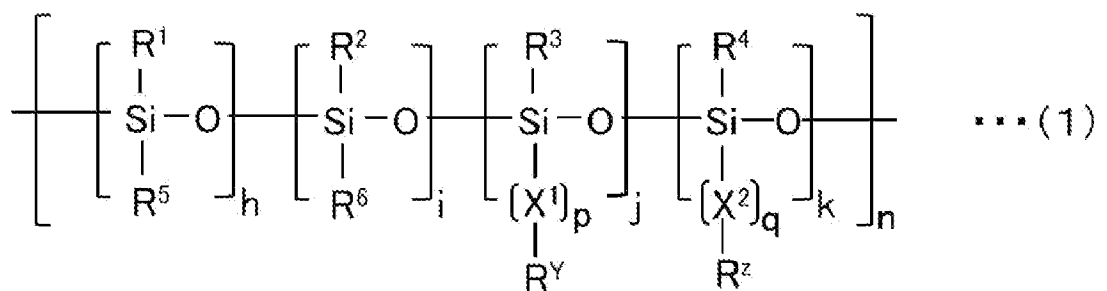
[0032] 本開示に係るホスト基及び／又はゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる場合、そのような高分子化合物（以下、「シロキサン高分子化合物」ともいう）としては、例えば、ポリオルガノシロキサン；ポリオルガノシロキサンと、ビニル樹脂、アクリル樹脂、ウレタン樹脂、エポキシ樹脂、ポリイミド樹脂、ポリエステル樹脂、又はポリカーボネート樹脂とのブロック共重合体；ビニル樹脂、アクリル樹脂、ウレタン樹脂、エポキシ樹脂、ポリイミド樹脂、ポリエステル樹脂、又はポリカーボネート樹脂にポリオルガノシロキサンがグラフトされたグラフト共重合体、が挙げられ

る。これらの樹脂及び／又はポリオルガノシロキサンは、ホスト基及び／又はゲスト基以外の置換基を有していてもよい。また、本開示に係るホスト基及び／又はゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる場合、そのような高分子化合物として、例えば、アクリルシリコーン樹脂、アクリルシリコーン系グラフト共重合体、ポリノルボルネンとシリコーンとの共重合体、プルランとシリコーンとの共重合体、等を挙げることができる。

[0033] ポリオルガノシロキサンとしては、例えば、メチルポリシロキサン、フェニルポリシロキサン、メチルフェニルポリシロキサンが挙げられ、これらのポリシロキサンは、ホスト基及び／又はゲスト基以外の置換基を有していてもよい。本開示に係る高分子化合物は、特に好ましくは、メチルポリシロキサン骨格を有する。

[0034] 好ましくは、ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式（１）で表される構造を有する：

[化4]



[式（１）中、 $R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリアル基、アリアルオキシ基、１価の複素環基、１価のスピロ環化合物、１価の縮合環化合物、 $-R^{R^1}-COOH$ で表される基、又は $-R^{R^2}-C(O)O-R^{R^3}$ で表される基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 R^{R^1} 、 R^{R^2} 、及び R^{R^3} は、それぞれ、１～１０の炭素数のアルキル基又はアルキレン基である； X

X^1 及び X^2 は、それぞれ独立に、 O 、 $Si(OH)_2$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 NH 、若しくは $N(COCH_3)$ であるか、若しくはウレタン結合、ウレア結合であるか、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はカルボニル基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、2価の複素環基、ウレタン基、ウレア基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい； R^{10} は、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリーール基、アリーールオキシ基、又は複素環基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい；複数の R^{10} は、それぞれ同一でも異なってもよい； X^1 及び X^2 は、それぞれ複数ある場合、それらは同一でも異なってもよい； p 及び q は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す； R^Y は、ホスト基である； R^Z は、ゲスト基である； h 、 i 、 j 、及び k は、それぞれ、0以上の整数を表し、これらは互いに同一であっても異なってもよい；少なくとも j 又は k が、1以上の整数である； n は、1以上の整数を表す。]

[0035] 好ましくは、本開示に係る化粧品において、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物が、上記の式(1)で表される構造を有する。

[0036] 本開示に係る樹脂組成物に含有される高分子化合物が上記の式(1)で表される構造を有する場合、当該高分子化合物は、上記の式(1)で表される構造の両端に末端基が結合した構造を有してよい。

[0037] 上記の式(1)で表される構造の末端に結合しうる末端基(R^E)としては、炭素原子数が1~10のアルキル基、特に炭素数1~6のアルキル基、又は $Si(R^{E1})_3$ で表される基が挙げられ、ここで、 R^{E1} は、水素原子であるか、又は、炭素原子数が1~10のアルキル基、若しくはアリーール基である。

[0038] 本開示に係る1つの好ましい実施態様では、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又はホ

スト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、主鎖に、上記の式（１）で表される構造を有する。

[0039] 本開示に係る高分子化合物は、例えば、ビニル樹脂、アクリル樹脂、ウレタン樹脂、エポキシ樹脂、ポリイミド樹脂、ポリエステル樹脂、若しくはポリカーボネート樹脂と、上記の式（１）で表される構造を有するポリオルガノシロキサンとの、ブロック共重合体であってよい。

[0040] 本開示に係る別の好ましい実施態様では、化粧品に含有される高分子化合物が、

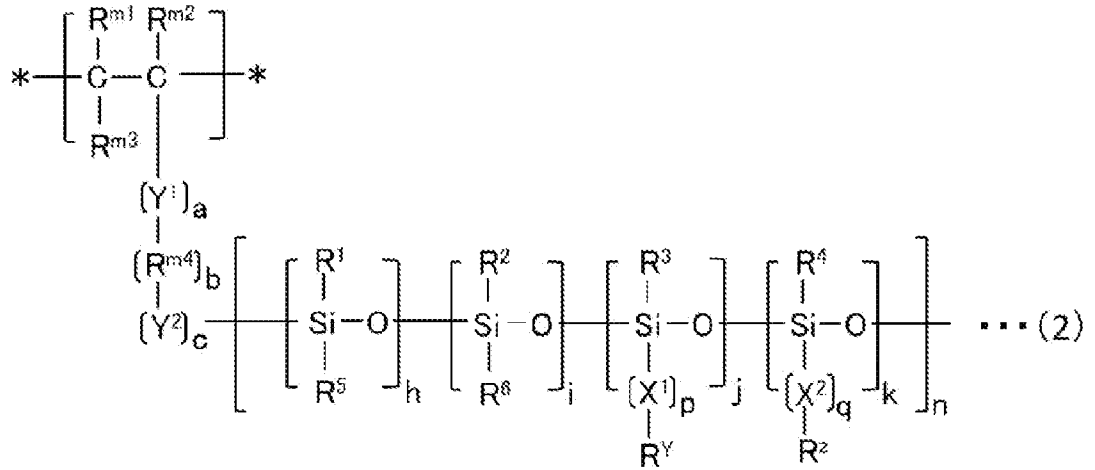
ビニル主鎖、アクリル主鎖、ウレタン主鎖、エポキシ主鎖、ポリイミド主鎖、ポリエステル主鎖、ポリウレア主鎖、又はポリカーボネート主鎖を有しており、かつ、

側鎖に、前記式（１）で表される構造を有している。

[0041] 具体的には、本開示に係る高分子化合物は、例えば、ビニル樹脂、アクリル樹脂、ウレタン樹脂、エポキシ樹脂、ポリウレア樹脂、ポリイミド樹脂、ポリエステル樹脂、若しくはポリカーボネート樹脂などに、上記の式（１）で表される構造を有するポリオルガノシロキサンがグラフトされたグラフト重合体であってよい。

[0042] 本開示に係る別の好ましい実施態様では、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又はホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式（２）で表される構造単位を有する：

[化5]

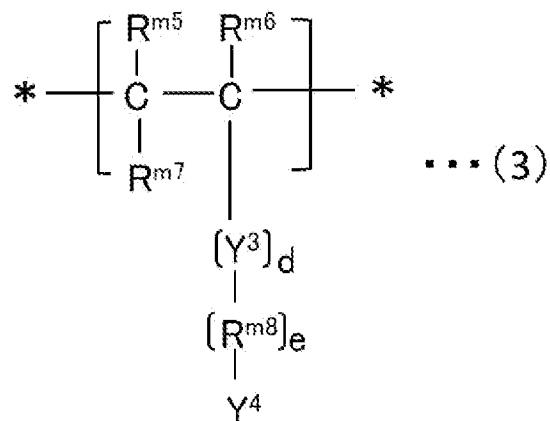


[式(2)中、 $R^1 \sim R^6$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、ウレタン基、ウレア基、複素環基、1価のスピロ環化合物、1価の縮合環化合物、 $-R^{R1}-COOH$ で表される基、又は $-R^{R2}-C(O)O-R^{R3}$ で表される基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 R^{R1} 、 R^{R2} 、及び R^{R3} は、それぞれ、1~10の炭素数のアルキル基又はアルキレン基である； X^1 及び X^2 は、それぞれ独立に、O、Si(OH)₂、Si(R¹⁰)₂、N(H)、若しくはN(COCH₃)であるか、若しくはウレタン結合、ウレア結合であるか、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はカルボニル基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、2価の複素環基、ウレタン基、ウレア基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい； R^{10} は、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリールオキシ基、又は複素環基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい；複数の R^{10} は、それぞれ同一でも異なってもよい； X^1 及び X^2 は、それぞれ複数ある場合、同一でも異なってもよい；p及びqは、それぞれ独立に、0以上

の整数を表す； R^Y は、ホスト基である； R^Z は、ゲスト基である； h 、 i 、 j 、及び k は、それぞれ、0以上の整数を表し、これらは互いに同一であっても異なってもよく、少なくとも j 又は k が、1以上の整数である； n は、1以上の整数を表す； $R^{m1} \sim R^{m3}$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基であり、 Y^1 は、エーテル結合、アミド結合、又はエステル結合であり、 R^{m4} はアルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 Y^2 は、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合、 O 、 $Si(OH)_2$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $N(H)$ 、又は $N(COCH_3)$ であり、 a 、 b 、 c は、それぞれ独立に、0～3の整数を表す；*は、高分子化合物の主鎖を構成する単結合を表す。]

[0043] 本開示に係る好ましい実施態様では、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又はホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、上記の式(2)で表される構造単位に加えて、下記の式(3)で表される構造単位を有する：

[化6]



[式(3)中、 $R^{m5} \sim R^{m7}$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基であり、 Y^3 は、エーテル結合、アミド結合、又はエステル結合であり、 R^{m8} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有して

いてもよく、 Y^4 は、水素原子、アルキル基、水酸基、 $Si(OH)_3$ 、 $Si(R^{10})_3$ 、 NH_2 、 $C(O)CH_3$ 、 $C(O)NH_2$ 、又は $N(COCH_3)$ であり、 d 及び e は、それぞれ独立に、0～3の整数を表す；*は、高分子化合物の主鎖を構成する単結合を表す。】。

[0044] 好ましくは、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物が、上記の式(2)で表される構造単位、及び随意に上記の式(3)で表される構造単位、を有する。

[0045] 上記の式(2)で表される構造単位を有する高分子化合物の末端に末端基(R^E)が結合していてもよい。末端基としては、炭素原子数が1～10のアルキル基、又は $Si(R^{E1})_3-$ で表される基が挙げられ、ここで、 R^{E1} は、水素原子であるか、又は、炭素原子数が1～10、1～6、1～3、若しくは1～2のアルキル基、若しくはアリール基である。

[0046] 上記の式(2)及び(3)で表される構造単位を有する高分子化合物は、ランダムコポリマー、ブロックコポリマー、交互配列コポリマー等であってよく、構成単位の配列順序は特に限定されない。

[0047] 上記の式(2)で表される構造単位を有する高分子化合物における構成単位の含有割合は特に限定されない。例えば、上記の式(2)で表される構造単位を有する高分子化合物を構成する構成単位(モノマー単位)全体に対して、上記の式(2)で表される構成単位の含有割合が、0.01モル%以上、0.1モル%以上、1.0モル%以上、5モル%以上、10モル%以上、若しくは15モル%以上であってよく、かつ/又は、90モル%以下、75モル%以下、50モル%以下、25モル%以下、若しくは20モル%以下であってよい。

[0048] また、上記の式(2)及び(3)で表される構造単位を有する高分子化合物を構成する構成単位(モノマー単位)全体に対して、上記の式(2)で表される構成単位の含有割合が、0.01モル%以上、0.1モル%以上、1.0モル%以上、5モル%以上、10モル%以上、若しくは15モル%以上であってよく、かつ/又は、30モル%以下、25モル%以下、若しくは2

0モル%以下であってよく、かつ、上記の式(3)で表される構成単位の含有割合が、70モル%以上、75モル%以上、若しくは80モル%以上であってよく、かつ/又は、99.99モル%以下、99.9モル%以下、99モル%以下、95モル%以下、若しくは90モル%以下であってよい。

[0049] 上記の式(2)において、 $R^{m1} \sim R^{m3}$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基であり、好ましくは、水素原子、又は炭素数1~12、1~6若しくは1~3のアルキル基であり、特に好ましくは水素原子である。 $R^{m1} \sim R^{m3}$ は、好ましくは、互いに同一である。

[0050] 上記の式(2)において、 R^{m4} は、好ましくは、炭素数1~12、1~6若しくは1~3のアルキレン基であるか、又は炭素数6~12のアリーレン基であり、特に好ましくは、炭素数1~12、1~6若しくは1~3のアルキレン基である。

[0051] 上記の式(2)において、 Y^2 は、好ましくは、エーテル結合、アミド結合、エステル結合、 $N(H)$ 、又は $N(COCH_3)$ であり、特に好ましくは、エーテル結合、アミド結合、又はエステル結合である。

[0052] 上記の式(2)において、 a 、 b 、 c は、好ましくは、それぞれ独立に、0~2の整数であり、特に好ましくは、0又は1である。

[0053] 上記の式(3)において、 $R^{m5} \sim R^{m7}$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基であり、好ましくは、水素原子、又は炭素数1~12、1~6若しくは1~3のアルキル基であり、特に好ましくは水素原子である。 $R^{m1} \sim R^{m3}$ は、好ましくは、互いに同一である。

[0054] 上記の式(3)において、 R^{m8} は、好ましくは、炭素数1~12、1~6若しくは1~3のアルキレン基であるか、又は炭素数6~12のアリーレン基であり、特に好ましくは、炭素数1~12、1~6若しくは1~3のアルキレン基である。

[0055] 上記の式(3)において、 Y^4 は、好ましくは、炭素数1~12、1~6若しくは1~3のアルキル基、 $C(O)CH_3$ 、 $C(O)NH_2$ 、又は $N(COCH_3)$ である。

- [0056] 上記の式(2)において、 d 、 e は、好ましくは、それぞれ独立に、 $0 \sim 2$ の整数であり、特に好ましくは、 0 又は 1 である。
- [0057] 好ましい1つの実施態様においては、上記の式(2)における R^{m1} 、 R^{m2} 、 R^{m3} 、 R^{m4} 、 Y^1 、 a 、及び b が、それぞれ、上記の(3)における R^{m5} 、 R^{m6} 、 R^{m7} 、 R^{m8} 、 Y^3 、 d 、及び e と同じである。
- [0058] 上記の式(1)及び/又は式(2)において、 R^Y で表されるホスト基は、 α -シクロデキストリン、 β -シクロデキストリン、又は γ -シクロデキストリンであることが好ましい。 R^Z で表されるゲスト基は、置換基を有してもよいアルキル基、又は置換基を有してもよいアリール基であることが好ましい。
- [0059] $R^1 \sim R^5$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、又はアリールオキシ基であることが好ましく、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、又はアリール基、アリールオキシ基であることがより好ましく、アルキル基、シクロアルキル基、又はアリール基であることが特に好ましく、アルキル基であることが最も好ましい。 $R^1 \sim R^5$ としてのアルキル基は、好ましくは、 $1 \sim 10$ 、より好ましくは $1 \sim 6$ 、特に好ましくは $1 \sim 3$ 、最も好ましくは $1 \sim 2$ の炭素原子を有する。
- [0060] 上記の式(1)及び/又は式(2)において、 R^Y 及び R^Z については、本開示における上記のホスト基及びゲスト基に関する記載を参照することができる。
- [0061] 上記の式(1)及び/又は式(2)において、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 及び R^5 が、メチル基又はフェニル基であることが好ましく、メチル基であることが特に好ましい。 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 及び R^5 がメチル基である場合には、炭化水素化合物又はシリコンなどの非極性溶媒への溶解性がさらに向上する。
- [0062] 合成がさらに容易になるため、上記の式(1)及び/又は式(2)におい

て、好ましくは、 R^6 が、 $-R^{R1}-COOH$ で表される基、又は $-R^{R2}-COO-R^{R3}$ で表される基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 R^{R1} 、 R^{R2} 、及び R^{R3} は、それぞれ、1~10の炭素数のアルキル基又はアルキレン基である。 R^{R1} 、 R^{R2} 、及び R^{R3} は、それぞれ、炭素数1~8、炭素数1~6、又は炭素数1~3のアルキル基又はアルキレン基であってよい。

[0063] 特には、上記の式(1)及び/又は式(2)において、 R^1 ~ R^5 がメチル基であってよく、かつ/又は、 R^6 が、 $-R^{R1}-COOH$ で表される基若しくは $-R^{R2}-COO-R^{R3}$ で表される基であってよい。

[0064] 本開示に係る化粧料は、ホスト-ゲスト相互作用に基づく自己修復性に起因して、改善された化粧持ちなどの優れた物性をもたらす場合がある。理論によって限定する意図はないが、例えば、本開示に係る化粧料を化粧塗膜として用いた場合には、ホスト-ゲスト相互作用を介して高分子化合物同士が可逆的に再結合することによって化粧塗膜の傷(目視できない微小な傷を含む)が塞がれ、結果として、化粧料の化粧持ちがさらに向上することが考えられる。

[0065] 本開示に係る好ましい1つの実施態様では、上記の式(1)及び/又は上記の式(2)において、 $k=0$ であり、かつ、 R^1 ~ R^3 、 R^5 、及び R^6 が、アルキル基である。この場合には、特に優れた化粧持ちを示す化粧料が得られることがあるため、好ましい。理論によって限定する意図はないが、ホスト基を有する高分子化合物の主鎖又は側鎖を構成するSi原子がアルキル基で修飾されている場合には、比較的高い極性を有する置換基で修飾されている場合と比較して、ホスト基を有する高分子化合物とゲスト基を有する高分子化合物との相溶性が向上し、その結果、ホスト-ゲスト相互作用に基づく結合(再結合)が促進されるため、化粧料の自己修復性がさらに向上すると考えられる。

[0066] 特には、上記の式(1)及び/又は上記の式(2)において、 $k=0$ であり、 R^1 ~ R^3 及び R^5 がメチル基であり、かつ、 R^6 が、炭素数

2以上のアルキル基であり、より好ましくは、炭素数4以上のアルキル基であり、さらに好ましくは、炭素原子数4～30、炭素原子数4～24、炭素原子数4～18、炭素原子数4～12、又は炭素数4～8のアルキル基であり、特にペンチル基である。この場合には、特に優れた自己修復性を有する化粧料を得ることができる。

[0067] 合成がさらに容易になるため、上記の式(1)及び/又は式(2)において、 p 及び/又は q は、それぞれ、1～3であることが好ましく、1又は2であることがより好ましい。

[0068] X^1 及び X^2 は、それぞれ独立に、 $S i(OH)_2$ 、 $N(H)$ 、若しくは $N(COCH_3)$ であるか、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はカルボニル基、アルキレン基、シクロアルキレン基、若しくはアリーレン基であることが好ましく、 $N(H)$ 若しくは $N(COCH_3)$ であるか、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はアルキレン基であることがより好ましい。

[0069] R^{10} は、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基であることが好ましく、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基であることがより好ましく、水素原子であるか、又はアルキル基であることが特に好ましい。アルキル基としての R^{10} は、好ましくは1～10、より好ましくは1～6、特に好ましくは1～3の炭素数を有する。

[0070] 合成がさらに容易になるため、上記の式(1)及び/又は式(2)において、 X^1 は、炭素数1～10のアルキレン基、 $N(COCH_3)$ 、アミド結合、又はカルボニル基であることが、好ましい。アルキレン基としての X^1 は、好ましくは1～6、より好ましくは1～4、特に好ましくは1～2の炭素数を有する。

[0071] 上記の式(1)及び/又は式(2)において、好ましくは、 $(X^1)_p$ が、 $R^{P1}-N(COCH_3)$ 又は $(CH_2)_2-N(COCH_3)$ である。また、上記の式(1)及び/又は式(2)において、特に好ましくは、 $-(X^1)_p-$

R^Y が、 $-R^{P1}-N(COCH_3)-R^Y$ で表される。 R^{P1} は、置換基を有していてもよいアルキレン基であり、好ましくは、1~10、より好ましくは1~6、特に好ましくは1~3の炭素数を有する。 R^{P1} は、好ましくは、置換基を有しない。特に好ましくは、上記の式(1)及び/又は式(2)において、 $(X^1)_p$ が、 $(CH_2)_3-N(COCH_3)$ である。

[0072] 合成がさらに容易になるため、上記の式(1)及び/又は式(2)において、 X^2 は、置換基を有していてもよい炭素数1~12のアルキレン基、アミド結合、又はカルボニル基であることが、好ましい。アルキレン基としての X^2 は、好ましくは1~8、より好ましくは1~6、特に好ましくは1~3の炭素数を有する。

[0073] 上記の式(1)及び/又は式(2)において、 $(X^2)_q$ は、特に好ましくは、 $-R^{11}-CO-O-$ 又は $-R^{11}-CO-N(H)-$ である。また、上記の式(1)及び/又は式(2)において、特に好ましくは、 $-(X^2)_q-R^Z$ が、 $-R^{11}-CO-O-R^Z$ 、又は $-CO-N(H)-R^Z$ で表される。 R^{11} は、置換基を有していてもよい炭素数1~12のアルキレン基であり、好ましくは、1~10、より好ましくは1~6、特に好ましくは2~4、最も好ましくは3の炭素数を有する。 R^{11} は、好ましくは、置換基を有しない。

[0074] 上記の式(1)及び/又は式(2)において、特に好ましくは、
 $(X^1)_p$ が、 $-(CH_2)_3-N(COCH_3)-$ であり、かつjが1以上の整数であり、かつ/又は

$(X^2)_q$ が、 $-R^{11}-CO-O-$ 又は $-R^{11}-CO-N(H)-$ であり、 R^{11} は置換基を有していてもよい炭素数1~12のアルキレン基、特には炭素数3~6のアルキレン基であり、かつkが1以上の整数である。

[0075] 合成がさらに容易になるため、上記の式(1)及び/又は式(2)において、 X^1 及び X^2 のうちの少なくともいずれかが $S_i(R^{10})_2$ で表される場合、 R^{10} が、水素原子、メチル基、又はフェニル基であることが好ましく、水素原子又はメチル基であることが特に好ましく、メチル基であることが最も好ましい。

- [0076] n は、5以上、10以上、20以上、若しくは50以上の整数であってよく、かつ／又は、1000以下、500以下、250以下、200以下、150以下、若しくは100以下の整数であってよい。
- [0077] 上記の式(1)～(3)に関して、アルキル基としては、例えば、置換基を有してもよいアルキル基、直鎖、分岐又は環状のC1～18のアルキル基が挙げられる。具体的には、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、ペンチル、シクロペンチル、ヘキシル、シクロヘキシル、イソヘキシル、ドデシル、オクタデシル、アダマンチル等のアルキル基が挙げられる。アルキレン基としては、例えば、直鎖、分岐又は環状のC1～18のアルキレン基、メチレン、エチレン、*n*-プロピレン、イソプロピレン、*n*-ブチレン、イソブチレンを挙げることができる。
- [0078] 上記の式(1)～(3)に関して、アリール基としては、置換基を有してもよいアリール基が挙げられ、具体的には、例えば、単環又は2環以上のアリール基が挙げられ、具体的にはフェニル、トルイル、キシリル、ナフチル、アンスリル、フェナンスリル等が挙げられる。アリーレン基としては、単環又は2環のアリーレン基、フェニレンなどが挙げられる。
- [0079] 上記の式(1)～(3)に関して、アルケニル基としては、直鎖又は分岐鎖状の炭素数2～20のアルケニル基、例えば、ビニル、1-プロペン-1-イル、2-プロペン-1-イル、イソプロペニル、2-ブテン-1-イル、4-ペンテン-1-イル、及び5-ヘキセン-1-イルが挙げられる。
- [0080] 上記の式(1)～(3)に関して、アルコキシ基としては、炭素数1～10のアルコキシ基、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、イソプロポキシ基、ブトキシ基、イソブトキシ基、*sec*-ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基が挙げられる。
- [0081] 上記の式(1)～(3)に関して、置換基としては、メチル基及びエチル基等のアルキル基、ハロゲン原子、カルボキシ基、エステル基、アミド基、並びに水酸基が挙げられる。

[0082] (ポリオルガノシロキサン構造を構成する各構成単位の存在比率)

上記の式(1)又は式(2)において、 h 、 i 、 j 、及び k それぞれによって添え字されている各構成単位について、上記の式(1)又は式(2)で表される構造を構成する構成単位の全ての合計に対する各構成単位の存在比率 P_h 、 P_i 、 P_j 、及び P_k を、それぞれ、下記のとおり定義することができる。

$$P_h = 100 \times h / (h + i + j + k)$$

$$P_i = 100 \times i / (h + i + j + k)$$

$$P_j = 100 \times j / (h + i + j + k)$$

$$P_k = 100 \times k / (h + i + j + k)$$

[0083] P_h 、 P_i 、 P_j 、及び P_k は、上記の式(1)又は式(2)で表される構造を構成するすべての構成単位の合計のモル数に対する、 h 、 i 、 j 、及び k それぞれによって添え字されている各構成単位のモル数の割合を表している。

[0084] P_h の値は、70mol%~100mol%であってよく、90mol%~100mol%であることが好ましく、95mol%~98mol%であることがより好ましく、96mol%~97mol%であることがさらに好ましい。

[0085] P_i の値は、0mol%~30mol%であってよく、0mol%~20mol%であることが好ましく、0.5mol%~10mol%であることがより好ましく、1mol%~5mol%であることがさらに好ましい。

[0086] P_j の値は、0.01mol%~25mol%、0.01mol%~10mol%、0.1mol%~5mol%、又は0.1mol%~2mol%であってよい。好ましくは、 P_j の値が、0.1mol%~0.9mol%、0.2mol%~0.8mol%、0.3mol%~0.7mol%、又は0.4mol%~0.6mol%であり、この場合には、膜状又はフィルム状の化粧料が、特に良好な弾性を有しうる。

[0087] P_k の値は、0.01mol%~25mol%、0.01mol%~10m

0.1%、0.1mol%~5mol%、又は0.5mol%~3mol%であってよい。

[0088] P_h 、 P_i 、 P_j 、及び P_k の値は、 h 、 i 、 j 、及び k それぞれによって添え字されている各構成単位を製造するために使用した原料の仕込み量、及び、高分子化合物に関する $^1\text{H-NMR}$ 測定データから算出することができる。

[0089] (ホスト基及びゲスト基の位置)

本開示に係る化粧料の1つの実施態様では、

化粧料に含有されるホスト基を有する高分子化合物が、側鎖にホスト基を有しており、かつ

化粧料に含有されるゲスト基を有する高分子化合物が、側鎖にゲスト基を有する。

[0090] 本開示に係る化粧料の別の実施態様では、

化粧料に含有されるホスト基を有する高分子化合物が、側鎖にホスト基を有しており、かつ

化粧料に含有されるゲスト基を有する高分子化合物が、末端にゲスト基を有する。

[0091] 本開示に係るさらに化粧料の別の実施態様では、

化粧料に含有されるホスト基を有する高分子化合物が、末端にホスト基を有しており、かつ

化粧料に含有されるゲスト基を有する高分子化合物が、側鎖にゲスト基を有する。

[0092] (シロキサン結合を含まない高分子化合物)

本開示に係る1つの実施態様では、化粧料に含まれるホスト基を有する高分子化合物又はゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいない。この実施態様において、シロキサン結合を含んでいない高分子化合物(以下、「非シロキサン高分子化合物」ともいう。)としては、例えば、ビニル化合物、アクリル化合物、オレフィン、スチレン、アクリル酸エステル、及びメタクリル酸エステルから選択される少なくとも1つのモノマーの

重合体及び共重合体、並びにこれらの重合体及び共重合体を含むブロック共重合体、が挙げられ、例えば、ビニル樹脂、アクリル樹脂、ウレタン樹脂、エポキシ樹脂、ポリイミド樹脂、ポリエステル樹脂、又はポリカーボネート樹脂が挙げられる。これらの樹脂は、ホスト基及び／又はゲスト基以外の置換基を有してよい。ゲスト基及び／又はホスト基を有しており、かつシロキサン結合を含まない高分子化合物については、特許文献2の記載を参照することができる。

[0093] (化粧品に含まれる高分子化合物の組み合わせ)

例えば、本開示に係る化粧品は、下記(i)～(iv)のうちの少なくともいずれかの高分子化合物を有してよい：

(i) ホスト基を有する非シロキサン高分子化合物、及び、ゲスト基を有するシロキサン高分子化合物；

(ii) ホスト基を有するシロキサン高分子化合物、及び、ゲスト基を有する非シロキサン高分子化合物；

(iii) ホスト基を有するシロキサン高分子化合物、及び、ゲスト基を有するシロキサン高分子化合物；

(iv) ホスト基及びゲスト基を有するシロキサン高分子化合物。

[0094] (ホストとゲストの割合)

化粧品が、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物を含む場合、化粧品におけるそれぞれの含有割合は、特に限定されない。例えば、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物の合計に対して、ホスト基を有する高分子化合物の含有量が10～90質量%であってよく、かつゲスト基を有する高分子化合物の含有量が90質量%～10質量%であってよい。

[0095] 化粧品に含有されるホスト基の量とゲスト基の割合は、特に限定されない。好ましくは、化粧品に含有されるホスト基とゲスト基のモル比が、0.1 : 1～1 : 0.1であってよい。あるいは、化粧品において、ホスト基を有する高分子化合物100質量部に対して、ゲスト基を有する高分子化合物が

、1質量部以上、10質量部以上、若しくは20質量部以上含有されていてもよく、かつ／又は、1000質量部以下、250質量部以下、若しくは100質量部以下含有されていてもよい。

[0096] 《高分子化合物の製造》

〈高分子化合物の製造：ホスト基を有する非シロキサン高分子化合物〉

ホスト基を有する高分子化合物であってシロキサン結合を含まないもの（ホスト基を有する非シロキサン高分子化合物）は、公知の方法によって製造することができ、例えば、特許文献2に記載されている方法によって製造することができる。

[0097] 〈高分子化合物の製造：ゲスト基を有する非シロキサン高分子化合物〉

ゲスト基を有する高分子化合物であってシロキサン結合を含まないもの（ゲスト基を有する非シロキサン高分子化合物）は、公知の方法によって製造することができ、例えば、特許文献2に記載されている方法によって製造することができる。

[0098] 〈高分子化合物の製造：ホスト基を有しかつシロキサン結合を有する高分子化合物の製造〉

ホスト基を有するシロキサン高分子化合物は、例えば、下記の工程を有する方法によって製造することができる：

(i) シロキサン結合を有する高分子化合物（シロキサン高分子化合物）を提供する、高分子提供工程、

(ii) ホスト基前駆体化合物を提供する、ホスト基前駆体提供工程

(iii) シロキサン高分子化合物及びホスト基前駆体化合物を、金属触媒の存在下で反応させて、ホスト基を有するシロキサン高分子化合物を得る、ホスト基付加反応工程。

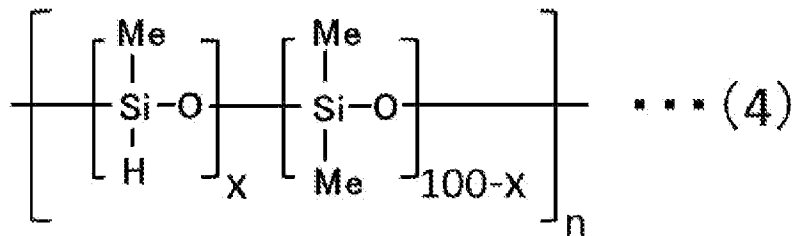
[0099] (高分子提供工程)

高分子提供工程では、シロキサン結合を有する高分子化合物（シロキサン高分子化合物）を提供する。シロキサン結合を有する高分子化合物は、好ましくは、ポリオルガノシロキサンである。シロキサン結合を有する高分子化

合物は、好ましくは、ホスト基前駆体化合物との反応に適した構造を有しており、例えば、Siに直接結合した水素原子を有している。

[0100] 高分子提供工程で提供されるシロキサン高分子化合物は、例えば、SiH含有シリコンであってよく、具体的には、例えば、下記の式(4)で表される構造を有する高分子であってよい：

[0101] [化7]

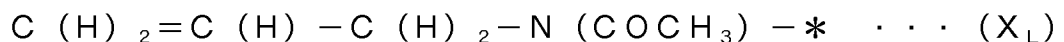


[式(4)中、Xは、1以上の整数を表す；nは、1以上の整数を表す]。

[0102] 上記式(4)において、Xは、2以上、5以上、10以上、若しくは20以上であってよく、かつ／又は、95以下、90以下、75以下、若しくは50以下であってよい。上記式(3)において、nは、5以上、10以上、若しくは50以上であってよく、かつ／又は、1000以下、500以下、250以下、100以下、若しくは75以下であってよい。

[0103] (ホスト基前駆体提供工程)

ホスト基前駆体提供工程では、ホスト基前駆体化合物を提供する。ホスト基前駆体化合物は、好ましくは、シロキサン結合を有する高分子化合物に結合するためのリンカー構造を有する。ホスト基前駆体化合物としては、例えば、リンカー構造を有するシクロデキストリンが挙げられる。リンカー構造としては、例えば、ビニル基が挙げられ、特に下記の式(X_L)で表される基が挙げられる。



[式(X_L)中、*は、シクロデキストリンとの単結合を表す。]

[0104] (ホスト基付加反応工程)

ホスト基付加反応工程では、シロキサン高分子化合物及びホスト前駆体化

化合物を、金属触媒の存在下で反応させて、ホスト基を有するシロキサン高分子化合物を得る。例えば、主鎖のSiに直接結合した水素原子を有するシロキサン高分子化合物と、リンカー構造としてビニル基を有するシクロデキストリンとを、金属触媒の存在下で反応させることによって、シクロデキストリンがリンカー構造を介して主鎖のSi原子に結合したシロキサン高分子化合物を得ることができる。

[0105] 好ましくは、ホスト基付加反応の後で、高分子化合物においてSi原子に直接結合している水素原子を置換する。これによって、得られる樹脂材料の化学的な安定性が、さらに向上する。この置換に用いることができる化合物としては、アクリル酸エステル、又は炭素数2以上のアルケンが挙げられる。炭素数2以上のアルケンを用いた場合には、得られる化粧料の自己修復性が特に優れるため、好ましい。炭素数2以上のアルケンのうち、より好ましい化合物は、炭素数5以上のアルケンであり、さらに好ましい化合物は、炭素数5～30、炭素数5～24、炭素数5～18、炭素数5～12、又は炭素数5～8のアルケンであり、特に1-ペンテンである。

[0106] (金属触媒)

上記のホスト基付加反応工程で使用される金属触媒としては、白金(Pt)が挙げられる。

[0107] <高分子化合物の製造：ゲスト基を有しかつシロキサン結合を有する高分子化合物の製造>

ゲスト基を有するシロキサン高分子化合物は、例えば、下記の工程を有する方法によって製造することができる：

(i) シロキサン結合を有する高分子化合物(シロキサン高分子化合物)を提供する、高分子提供工程、

(ii) ゲスト基前駆体化合物を提供する、ゲスト基前駆体提供工程、

(iii) シロキサン高分子化合物及びゲスト基前駆体化合物を溶媒中で反応させて、ゲスト基を有するシロキサン高分子化合物を得る、反応工程。

[0108] (高分子提供工程)

高分子提供工程では、カルボキシ基を有するシロキサン結合を有する高分子化合物を提供する。シロキサン結合を有する高分子化合物は、好ましくは、ポリオルガノシロキサンである。高分子提供工程で提供されるシロキサン結合を有する高分子化合物は、好ましくは、ゲスト基前駆体化合物と反応してゲスト基を有するシロキサン高分子化合物を生ずるために適した構造を有しており、例えば、炭素数1～12のアルキレン基を介して主鎖のSiに結合したカルボキシ基を有する。

[0109] (ゲスト基前駆体提供工程)

ゲスト基前駆体提供工程では、ゲスト基前駆体化合物を提供する。ゲスト基前駆体化合物は、好ましくは、シロキサン結合を有する高分子化合物に結合するためのリンカー構造を有する。ゲスト基前駆体化合物としては、具体的には、例えば、リンカー構造を有するアダマンチルが挙げられる。リンカー構造としては、例えば、アミノ基が挙げられる。

[0110] (反応工程)

反応工程では、シロキサン高分子化合物及びゲスト基前駆体化合物を溶媒中で反応させて、ゲスト基を有するシロキサン高分子化合物を得る。例えば、アルキル基を介して主鎖のSiに結合したカルボキシ基を有するシロキサン高分子化合物と、リンカー構造としてアミノ基を有するアダマンチルとを、縮合剤の存在下において溶媒中で反応させることによって、ゲスト基を有するシロキサン高分子化合物を得ることができる。なお、この場合、ゲスト基を有するシロキサン高分子化合物は、アダマンチルが、リンカー構造を介してシロキサン高分子化合物の主鎖を構成するSi原子に結合した構造を有している。縮合剤としては、例えば、1-ヒドロキシベンゾトリアゾール (HOBt; 東京化成工業株式会社、H0468、Cas: 80029-43-2) 及びN, N'-ジシクロヘキシルカルボジイミド (DCC; ナカライテスク株式会社、11913-52、Cas: 538-75-0) を挙げるることができる。

[0111] <高分子化合物の製造: ホスト基及びゲスト基を有するシロキサン高分子化

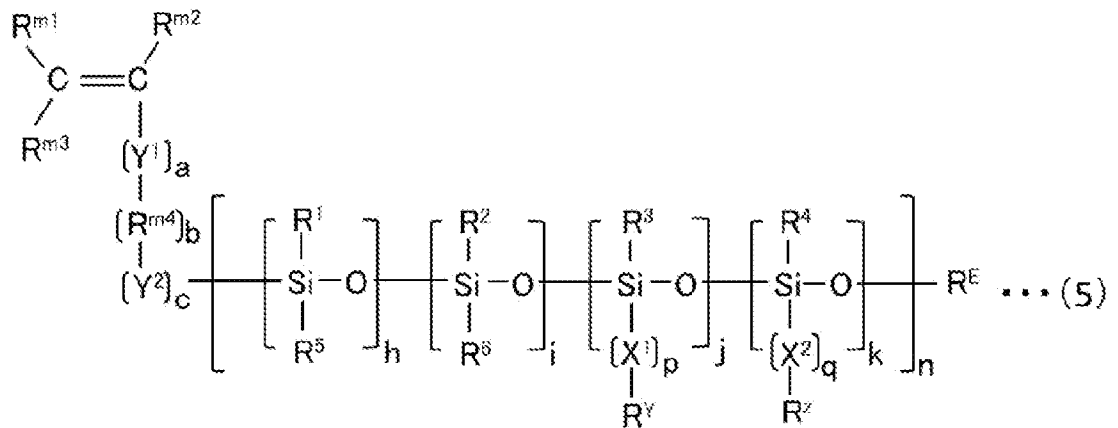
合物〉

ホスト基及びゲスト基を有するシロキサン高分子化合物は、例えば、上記の方法によって製造されたホスト基を有するシロキサン高分子化合物、及び上記の方法によって製造されたゲスト基を有するシロキサン高分子化合物を重合させてブロック共重合体を形成することによって得ることができる。

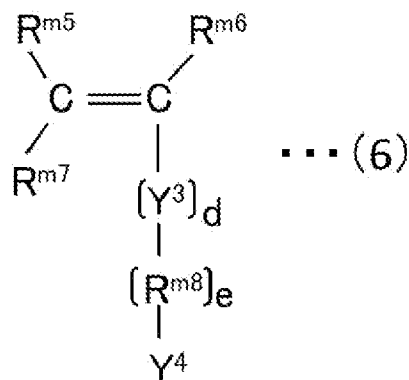
[0112] 〈高分子化合物の製造：ホスト基及び／又はゲスト基を有しかつシロキサン結合を有する高分子化合物の製造〉

ホスト基及び／又はゲスト基を有しかつシロキサン結合を有する高分子化合物は、例えば、下記の式（５）で表されるモノマーと式（６）で表されるモノマーとを重合反応させて製造することもできる。重合反応の様式は特に限定されず、公知の方法を用いることができる。

[0113] [化8]



[0114] [化9]



[0115] 上記の式（５）及び式（６）における各記号については、上述の式（２）

及び式（3）における各記号についての記述を参照することができる。なお、 R^E は、末端基を表す。 R^E についても、上述の記載を参照することができる。

[0116] （架橋）

本開示に係る化粧料の1つの実施態様では、ホスト基を有する高分子化合物及びゲスト基を有する高分子化合物の少なくともいずれか、又はホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、架橋されている。架橋は、ホスト-ゲスト相互作用以外の、例えば共有結合による架橋（例えばシロキサン架橋）であってよい。

[0117] 例えば、ホスト基を有する高分子化合物は、架橋されることによってホスト体を形成してよく、かつ／又は、ゲスト基を有する高分子化合物は、架橋されることによってゲスト体を形成してよい。

[0118] 高分子化合物を架橋する方法及び架橋剤としては、高分子化合物の種類に応じて公知のものを使用してよい。架橋は、例えば、光照射によって形成されてよい。架橋剤としては、例えば、N, N'-メチレンビスアクリルアミド（MBAAm）、及びエチレングリコールジメタクリレート（EDMA）が挙げられる。

[0119] ≪化粧料の製造≫

本開示に係る化粧料は、例えば、ホスト基を有する高分子化合物と、ゲスト基を有する高分子化合物とをそれぞれ個別に製造し、得られたホスト基を有する高分子化合物と、ゲスト基を有する高分子化合物とをそれぞれ混合することで調製することができる。ホスト基を有する高分子化合物と、ゲスト基を有する高分子化合物とを混合するにあたっては、例えば、両者とも固体状態で混合してよく、一方若しくは両方が液体の状態でもよく、又は、一方若しくは両者を溶液にした状態で混合してよい。一方の高分子化合物の溶液に、他方の高分子化合物を固体状態で添加する方法でもよい。

[0120] ホスト基を有する高分子化合物とゲスト基を有する高分子化合物とを混合させる条件は、特に限定されない。例えば、混合時の温度、混合時間、混合

手段等は適宜の条件で行うことができる。

[0121] 本開示に係る化粧料の1つの実施態様では、化粧料が、室温においてペースト状である。化粧料に含有される高分子化合物として、室温においてペースト状のものを選択することによって、ペースト状の化粧料を得ることができる。あるいは、高分子化合物を溶媒に溶解させることによって、液体状の化粧料を得てもよい。室温において液体状又はペースト状である化粧料は、成膜が比較的容易であることから、特に好ましい。

[0122] 室温において液体状である高分子化合物は、例えば、ポリオルガノシロキサンを主鎖に有する高分子化合物、特にジメチルポリシロキサンを挙げることができる。

[0123] 化粧料の製造の際に高分子化合物を溶解させる溶媒は、特に限定されないが、例えば、シリコンオイル、炭化水素油剤が挙げられる。シリコンオイルとしては、オクタメチルシクロテトラシロキサン、デカメチルシクロペンタシロキサン、ドデカメチルシクロヘキサシロキサン、ジメチルポリシロキサン、カプリリルメチコンから選ばれる1種又は2種以上が好ましく、デカメチルシクロペンタシロキサン、ジメチルポリシロキサンから選ばれる1種または2種以上がより好ましく、重合度10以下のジメチルポリシロキサンがさらに好ましい。炭化水素油剤としては、トルエン、及びイソドデカンが挙げることができ、イソドデカンが好ましい。

[0124] 本開示に係る化粧料に含まれる高分子化合物は、ホスト-ゲスト相互作用によって互いに結合していてもよく、ホスト-ゲスト相互作用によって互いに結合していなくてもよい。

[0125] 化粧料は、膜状に形成することができる。化粧料が膜状であれば、肌等の上に適用される化粧塗膜として使用することができる。化粧料が膜状である場合の厚みは特に制限されず、用途に応じて適宜の厚みに設定することができる。例えば、化粧料は、1 nm~1 cmに調節することができ、成膜性が良好であるという点では1 μm~100 μmに調節することができる。

[0126] (成形)

化粧品を化粧塗膜として成形する方法は特に限定されない。例えば、高分子化合物の溶液又は分散液を調製し、この溶液又は分散液を塗布することによって、化粧品を化粧塗膜に形成することができる。

[0127] 化粧品の製造方法は、例えば、下記の工程を含んでよい：

ホスト基を有する高分子化合物を溶媒に溶解させてホスト溶液を作製すること、及び

このホスト溶液にゲスト基を有する高分子化合物を加えることによって化粧品Aを作製すること。

[0128] 上記の方法において、代替的には、ゲスト基を有する高分子化合物を溶媒に溶解させてゲスト溶液を作製し、かつ、このゲスト溶液にホスト基を有する高分子化合物を加えることによって、化粧品Aを作製してもよい。

[0129] 上述のようにして製造された化粧品Aを化粧塗膜にする工程は、例えば、下記の操作を含んでよい：

化粧品Aを指で対象物に塗布し、かつ乾燥させて、化粧塗膜を形成すること。

[0130] 本開示の別の実施態様では、化粧品の製造方法は、例えば、下記の工程を含んでよい：

ペースト状又は液体状のホスト基を有する高分子化合物と、ペースト状又は液体状のゲスト基を有する高分子化合物とを混合して化粧品Bを作成すること。

[0131] 上述のようにして製造された化粧品Bを化粧塗膜にする工程は、例えば、下記の操作を含んでよい：

上記の化粧品Bを、対象物に塗布して、化粧塗膜を形成すること。

[0132] なお、上記の化粧品Bの製造方法において、ホスト基を有する高分子化合物又はゲスト基を有する高分子化合物のいずれかが、ペースト状又は液体状であってもよい。

[0133] 《溶媒》

本開示に係る化粧品は、上述の成分以外に、さらに溶媒を含有することが

できる。溶媒をさらに有していることによって、肌等への塗布性が特に優れている化粧料を提供することができる。

[0134] 本開示に係る化粧料に含有されうる溶媒としては、特に限定されないが、例えば、水、アルコール類、シリコーン類、炭化水素化合物、エステル化合物、エーテル類、及びワックスが挙げられる。

[0135] アルコール類としては、グリセリン、ブチレングリコール（BG）、プロピレングリコール（PG）、ジプロピレングリコール（DPG）、ポリエチレングリコール（PEG）、エタノール、及びオレイルアルコールが挙げられる。

[0136] シリコーン類としては、ドデカメチルシクロヘキサシロキサン、オクタメチルシクロテトラシロキサン、デカメチルシクロペンタシロキサン、ジメチルポリシロキサン、カプリリルメチコン、メチルポリシロキサン、メチルフェニルポリシロキサン、シクロペンタシロキサン、アミノエチルアミノプロピルメチルシロキサン・ジメチルシロキサン共重合体、アミノプロピルジメチコン、メチルトリメチコン、トリス（トリメチルシリル）メチルシラン、テトラキス（トリメチルシリル）シラン、アモジメチコン、シクロメチコン、フェニルトリメチコンが挙げられる。これらの中でも、デカメチルシクロペンタシロキサン、ジメチルポリシロキサンから選ばれる1種または2種以上がより好ましく、重合度10以下のジメチルポリシロキサンがさらに好ましい。

[0137] 炭化水素化合物としては、水添ポリイソブテン、ワセリン、ミネラルオイル、スクワラン、パラフィン、イソパラフィン、安息香酸アルキル、ポリイソブテン、イソドデカン、イソトリデカン、イソヘキサデカン軽質イソパラフィンを挙げることができ、イソドデカンが好ましい。

[0138] エステル化合物としては、パルミチン酸イソプロピル、パルミチン酸エチルヘキシル、ミスチリン酸イソプロピル、ミスチリン酸オクチルドデシルが挙げられる。

[0139] エーテル類としては、エチルパーフルオロブチルエーテルが挙げられる。

[0140] 本開示に係る化粧料がさらに溶媒を有する場合、溶媒は、揮発性であることが特に好ましい。本開示に係る化粧料が揮発性の溶媒を含有する場合には、化粧料を肌等に適用した際に溶媒が揮発することによって化粧料が膜状になるため、容易に化粧塗膜を形成することができる。

[0141] 揮発性の溶媒としては、上記のアルコール類の他、ジメチルポリシロキサン、メチルトリメチコン、オクタメチルシクロテトラシロキサン、デカメチルシクロペンタシロキサン、ドデカメチルシクロヘキサシロキサン、トリス（トリメチルシリル）メチルシラン、テトラキス（トリメチルシリル）シランなどのシリコーン類、イソドデカン、イソトリデカン、イソヘキサデカン、軽質イソパラフィン、水添ポリイソブテンなどの炭化水素化合物、エチルパーフルオロブチルエーテルなどのエーテル類が挙げられる。

[0142] ≪その他の添加物≫

本開示に係る化粧料は、本発明の効果を損なわない程度で、上述の成分以外の各主成分を含有することができ、例えば、低級アルコール、高級アルコール、球状粉末、皮膜形成剤、清涼剤、油性成分、界面活性剤、水性成分、水溶性高分子、紫外線吸収剤、保湿剤、褐色防止剤、酸化防止剤、消泡剤、美容成分、防腐剤、金属イオン封止剤、血行促進剤、各種抽出液、無機顔料、有機顔料、鉱物、有機染料等の色剤、色素、増粘剤、pH調整剤、冷感剤、制汗剤、殺菌剤、皮膚賦活剤、香料等を、各種の効果を付与するために適宜含有することができる。

[0143] 低級アルコールは、使用性調整剤、防腐助剤として化粧料において汎用される。低級アルコールとしては、例えば、エタノール、及びイソプロピルアルコールが挙げられる。

[0144] 球状粉末としては、球状無水ケイ酸などの無機粉末、球状ポリメチルメタクリレート、球状セルロース、球状ナイロン、球状ポリエチレン、球状シリコーンパウダーが挙げられる。

[0145] 皮膜形成剤を追加的に含む場合、皮膜形成剤としては、ポリビニルアルコール、ポリビニルピロリドン、ポリ酢酸ビニル、ポリアクリル酸アルキル等

のラテックス類、デキストリン、アルキルセルロースやニトロセルロースなどのセルロース誘導体などが挙げられる。

[0146] 清涼剤としては、メントール誘導体、カンファー誘導体、精油類が挙げられる。

実施例

[0147] 以下、本開示に係る発明を、実施例により具体的に説明する。

[0148] 《測定法》

下記に示す測定及び評価は、以下の方法で行った。

[0149] 〈¹H-NMR〉

核磁気共鳴（NMR）スペクトルを、機器として日本電子ECA500用いて記録した。計測は、25℃で行った。重水素化クロロホルムを、溶媒として使用した。NMR化学シフトは、7.26 ppm（クロロホルム）における残存溶媒ピークに対して、ppm（パーツパーミリオン）で、記録した。

[0150] 〈IR〉

フーリエ変換赤外スペクトルを、日本分光FT/IR 6100スペクトロメータによって、500 cm⁻¹～4000 cm⁻¹の範囲で計測した。

[0151] 〈MALDI-TOF MS〉

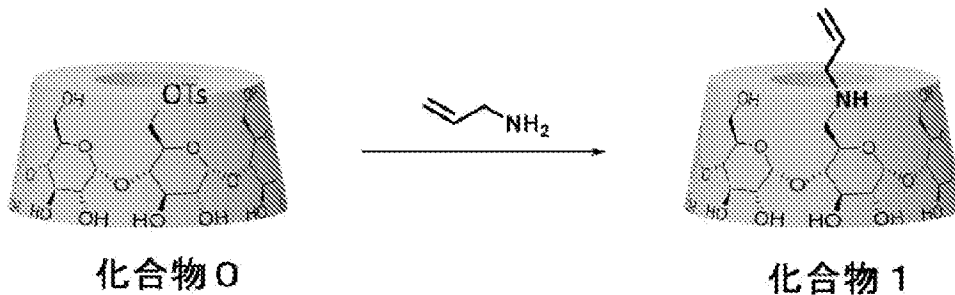
MALDI-TOF MSスペクトルは、機器としてBruker autoflex max LRFを用いて計測した。

[0152] 〈元素分析〉

元素分析は、差動熱伝導度法に基づいて、元素分析装置（ヤナコ製、CHNコーダー）を用いて行った。

[0153] 《化合物の製造》

[化10]



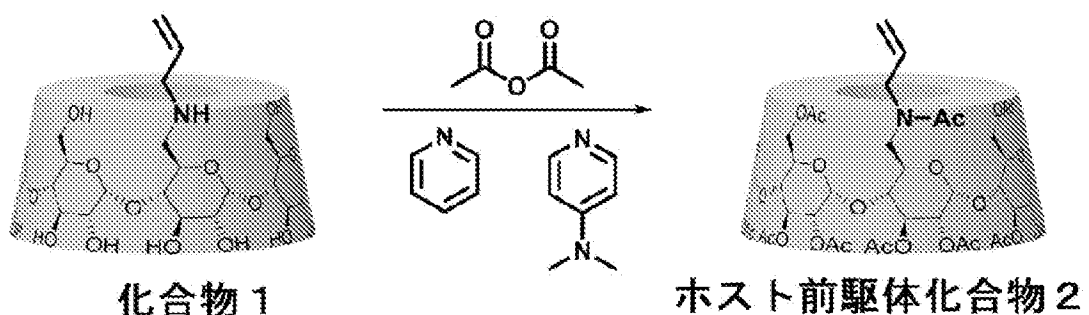
[0154] 〈製造例 1 : 化合物 1 の製造〉

下記の方法に従って、化合物 1 を製造した :

化合物 0 (βシクロデキストリン-OTs ; C-6 monotosylate d-β-CD) を、Tetrahedron Letters、Vol. 25、No. 31、3331-3334、1984 に記載の方法に従って製造した。30.0 g (23.28 mmol) の化合物 0 を、300 g (5.25 mol) のアリルアミンに溶解した後に、一晩還流した。そして、この反応溶液を、エバポレーターで減圧乾燥して、乾固物を得た。得られた乾固物を、600 mL のアセトニトリルに加えて、溶解させた。そして、溶液中の沈殿を吸引ろ過で回収し、600 mL のアセトニトリルへ加え溶解させた。そして、溶液中の沈殿を吸引ろ過で回収し、100°C のバキュームオーブンで一晩にわたって減圧乾燥して、化合物 1 を得た。

[0155] MALDI-TOFMS、¹H-NMR、及び元素分析によって、得られた化合物 1 の合成を確認した。

[0156] [化11]



[0157] 〈製造例 2 : ホスト基前駆体化合物 2〉

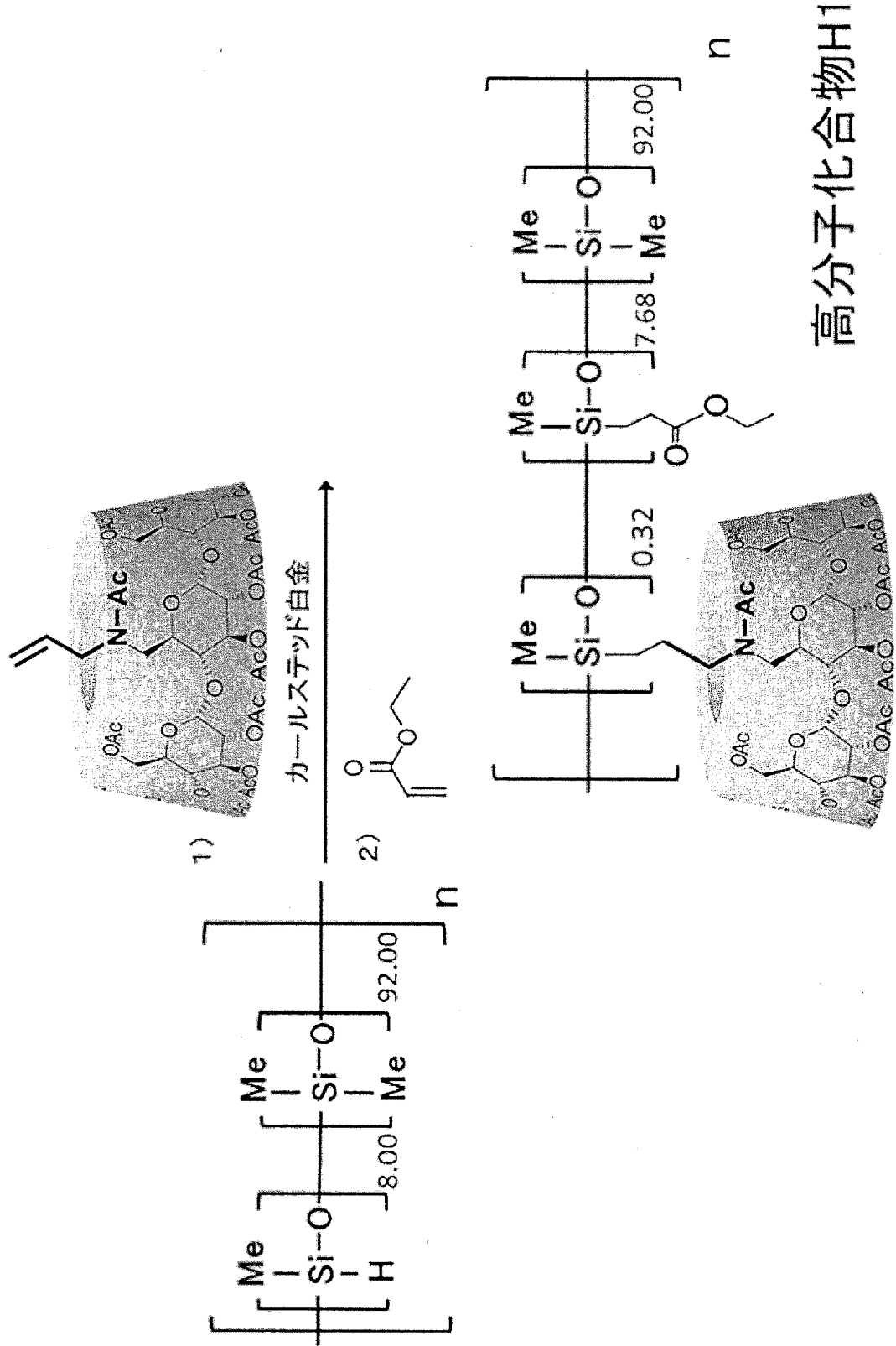
下記の方法に従って、ホスト前駆体化合物 2 を製造した :

上記の方法で得られた化合物 1 を 20 g (17.0 mmol) 用意し、これに、300 mL (300 g, 3.8 mol) の乾燥ピリジン、及び 170 mL (184 g, 1.8 mol) の無水酢酸を加え、70°Cで一晩攪拌した。そして、反応溶液を氷冷しながらメタノール 60 mL を滴下した。そして、反応溶液をエバポレーターで減圧乾燥して、乾固物を得た。得られた乾固物を 100 mL のアセトンに溶解し、水 2 L へ滴下した。そして、溶液中の沈殿を吸引ろ過で回収し、かつ 100 mL のアセトンに溶解して得られた溶液を、水 1.5 L へ滴下した。そして、溶液中の沈殿を吸引ろ過で回収し、70°C のバキュームオーブンで 1 日減圧乾燥して、ホスト前駆体化合物 2 を得た。

[0158] MALDI-TOFMS、¹H-NMR、及び元素分析によって、ホスト前駆体化合物 2 の合成を確認した。

[0159]

[化12]



[0160] 〈製造例3：ホスト基を有する高分子化合物H1の製造〉

ホスト基を有する高分子化合物H1を、下記の方法で製造した：

1. 8 g (0.9 mmol) のホスト前駆体化合物2をトルエン400 ml に溶かして窒素置換し、105℃で攪拌した。そこへ、12.0 g (14.4 mmol) のメチルヒドロジェンポリシロキサン (methyl hydrogen polysiloxane；動粘度20 mm²/s、有効水素量7.5 mol%) 及び165 μLのカールステッド白金溶液を400 ml

トルエンに溶解させた溶液を、1時間かけて滴下によって加えた。なお、カールステッド白金溶液は、白金(0)-1,3-ジビニルテトラメチルジシロキサンコンプレックス(Platinum(0)-1,3-Divinyltetramethyldisiloxane Complex (19.0%-21.5% as Pt)、TCI製、P2075、Cas:68478-92-2製品コード:P2075)を用いて調整した。使用したPtの重量は、28.5mgであった。滴下終了から4時間後に、4.8g(48mmol)のアクリル酸エチル(Ethylacrylate;東京化成工業株式会社製、Cas:140-88-5)を、注射器によって加えた。得られた反応液のうち10gを、イソドデカン(マルカゾールR,丸善石油化学株式会社)114mlに溶かした。溶け残った未反応CD(0.499g)を、酢酸エチルへの抽出によって除いて、イソドデカンに溶解した、ホスト基を有する高分子化合物H1を得た。

[0161] 得られた高分子化合物H1について、¹H-NMRによる分析、及びIRスペクトルによる分析を行って、目的物が得られたことを確認した。

[0162] 得られた高分子化合物H1について、¹H-NMRによって測定したホスト基導入率は、0.32mol%であった。

[0163] 〈製造例4:ホスト基を有する高分子化合物H2の製造〉

0.6g(0.3mmol)のホスト前駆体化合物2、4.0g(4.8mmol)のメチルヒドロジェンポリシロキサン、及び55μLのカールステッド白金溶液を使用したこと以外は、上記のホスト基を有する高分子化合物H1の製造と同様にして、ホスト基を有する高分子化合物H2を製造した。

[0164] ホスト基を有する高分子化合物H2について、¹H-NMRによって測定したホスト基導入率は、0.31mol%であった。

[0165] 〈製造例5:ホスト基を有する高分子化合物H3の製造〉

4.0g(4.8mmol)のホスト前駆体化合物2、4.0g(4.8mmol)のメチルヒドロジェンポリシロキサン、及び55μLのカール

ステッド白金溶液を使用し、溶媒量を調整し主鎖シリコン濃度を34.3 mmolとしたこと以外は、上記のホスト基を有する高分子化合物H1の製造と同様にして、ホスト基を有する高分子化合物H3を製造した。

[0166] ホスト基を有する高分子化合物H3について、¹H-NMRによって測定したホスト基導入率は、0.20 mol%であった。

[0167] 〈製造例6：ホスト基を有する高分子化合物H4の製造〉

2.4 g (1.2 mmol)のホスト前駆体化合物2、16.0 g (19.2 mmol)のメチルヒドロジェンポリシロキサン、及び220 μLのカールステッド白金溶液を使用したこと以外は、上記のホスト基を有する高分子化合物H1の製造と同様にして、ホスト基を有する高分子化合物H4を製造した。

[0168] ホスト基を有する高分子化合物H4について、¹H-NMRによって測定したホスト基導入率は、0.37 mol%であった。

[0169] 〈製造例7：ホスト基を有する高分子化合物H5の製造〉

0.6 g (0.3 mmol)のホスト前駆体化合物2、2.0 g (2.4 mmol)のメチルヒドロジェンポリシロキサン、及び55 μLのカールステッド白金溶液を使用したこと以外は、上記のホスト基を有する高分子化合物H1の製造と同様にして、ホスト基を有する高分子化合物H5を製造した。

[0170] ホスト基を有する高分子化合物H5について、¹H-NMRによって測定したホスト基導入率は、1.0 mol%であった。

[0171] 〈製造例8：ホスト基を有する高分子化合物H6の製造〉

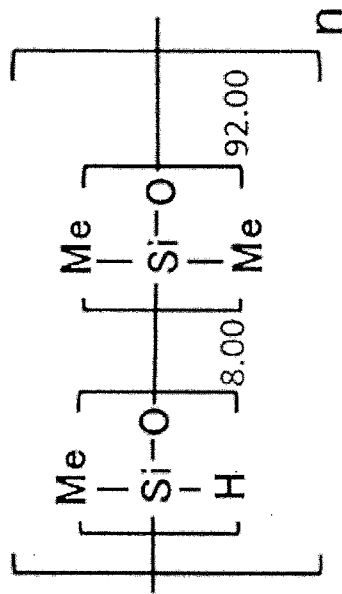
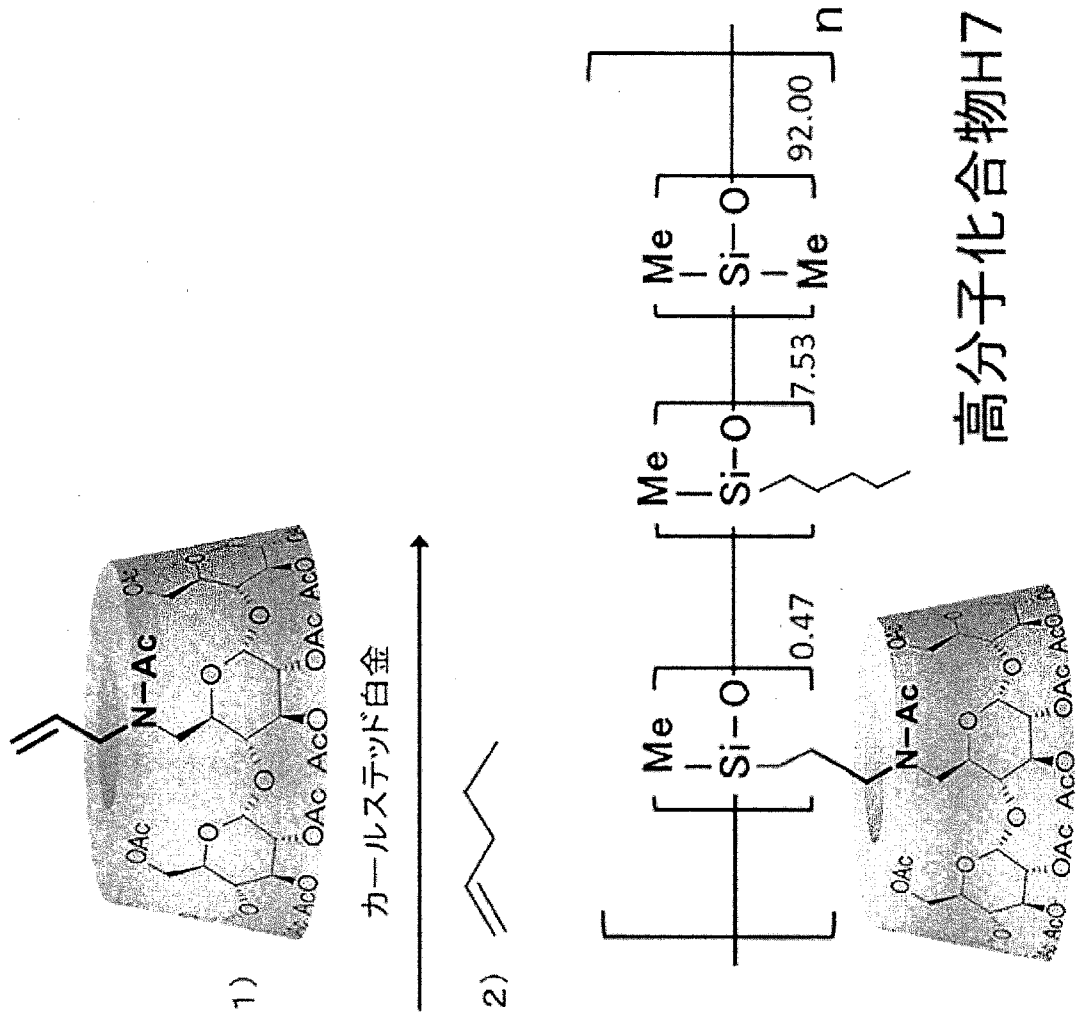
0.6 g (0.3 mmol)のホスト前駆体化合物2、4.0 g (4.8 mmol)のメチルヒドロジェンポリシロキサン、及び55 μLのカールステッド白金溶液を使用したこと以外は、上記のホスト基を有する高分子化合物H1の製造と同様にして、ホスト基を有する高分子化合物H6を製造した。

[0172] ホスト基を有する高分子化合物H6について、¹H-NMRによって測定し

たホスト基導入率は、0.5 mol%であった。

[0173]

[化13]



[0174] 〈製造例9：ホスト基を有する高分子化合物H7の製造〉

ホスト基を有する高分子化合物H7を、下記の方法で製造した：

1. 8 g (0.9 mmol) のホスト前駆体化合物2をトルエン900 mLに溶かして窒素置換し、105°Cで攪拌した。そこへ、12.0 g (11.48 mmol) のメチルヒドロジェンポリシロキサン及び165.0 μ Lのカールステッド白金溶液を250 mLのトルエンに溶解させた溶液を、30分間かけて滴下によって加えた。なお、カールステッド白金溶液は、白金(0)-1, 3-ジビニルテトラメチルジシロキサン コンプレックス (Platinum(0)-1, 3-Divinyltetramethyldisiloxane Complex (19.0%-21.5% as Pt)、TCI製、P2075、Cas: 68478-92-2製品コード: P2075) を用いて調整した。使用したPtの重量は、28.2 mgであり、反応溶液中の試薬濃度は、[Pt] = 0.09 mMであった。滴下終了から4時間後に、2.0 g (29.0 mmol) の1-Pentene (東京化成工業社製) を加えた。一晩にわたって還流を行い、エバポレーターによってトルエンを留去した後、ヘキサンに溶解し、遠心分離器によって沈殿物を取り除いて、ヘキサンに溶解したホスト基を有する高分子化合物H7を得た。

[0175] 得られた高分子化合物H7について、¹H-NMRによる分析、及びIRス

ペクトルによる分析を行って、目的物が得られたことを確認した。

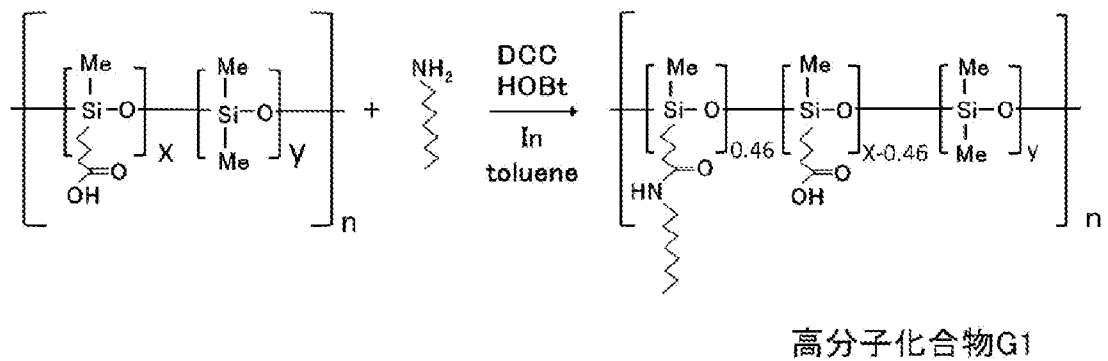
[0176] 得られた高分子化合物H7について、 $^1\text{H-NMR}$ によって測定したホスト基導入率は、 $0.47\text{mol}\%$ であった。

[0177] 〈製造例10：ホスト基を有する高分子化合物H8の製造〉

3.6g (1.8mmol)のホスト前駆体化合物2のホスト前駆体化合物を使用したこと以外は、上記のホスト基を有する高分子化合物H7の製造と同様にして、ホスト基を有する高分子化合物H8を製造した。高分子化合物H8のホスト基導入率は、 $0.63\text{mol}\%$ であった。

[0178] 〈製造例11：ゲスト基を有する高分子化合物G1の製造〉

[0179] [化14]



[式中、 x 及び y は0以上の整数であり、 $x + y = 100$ である。]

[0180] 高分子化合物G1を、下記の方法で製造した：

10.0g (1.3mmol)の側鎖型カルボキシル変性シリコーンオイル(信越シリコーン社製、X-22-3701E、カルボキシル基当量=4, 000g/mol)を100mLのトルエンに溶解させて、溶液1を得た。そして、この溶液1に、68.24mg (0.5mmol)のHOBtを加えて溶液2を得た。そして、トルエン50mLに溶解させた104.19mg (0.5mmol)のDCCをこの溶液2に加えて、溶液3を得た。そして、65.26mg (0.5mmol)のN-オクチルアミン(ナカライテスク(株)、25512-72、Cas:111-86-4)を50mLのトルエンに分散させ、溶液3に加えて溶液4を得た。この溶液4を1晩攪拌して

、透明な上澄み液と白い沈殿を得た。この白い沈殿をろ過によって取り除いて、透明なる液を得た。この透明なる液を飽和重曹水で洗浄し、かつ無水硫酸ナトリウムにて脱水した。エバポレータでトルエンを取り除いて、無色透明のオイルを得た。この無色透明のオイルを、85℃で一晩真空乾燥させて、ゲスト基を有する高分子化合物G1を得た。

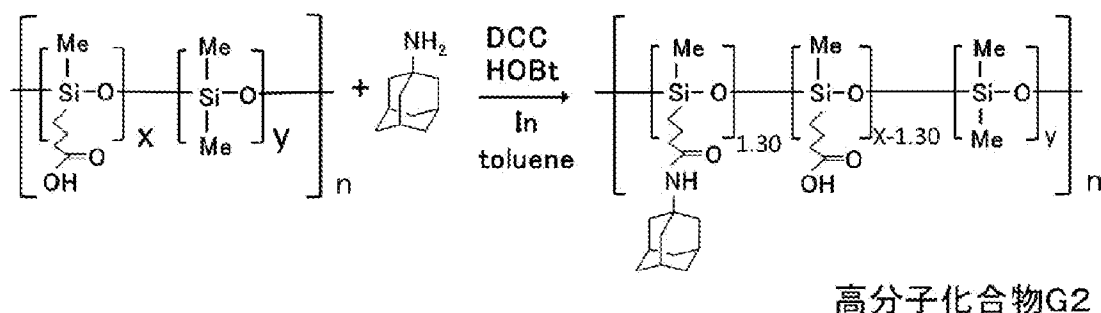
[0181] 得られた高分子化合物G1について、 $^1\text{H-NMR}$ スペクトル(500 MHz)計測によって分析を行った。

[0182] 得られた高分子化合物G1について、 $^1\text{H-NMR}$ によって測定したゲスト基導入率は、0.46mol%であった。

[0183] <製造例12:ゲスト基を有する高分子化合物G1'の製造>

製造例11と同様の方法によって、高分子化合物G1'を得た。高分子化合物G1'におけるゲスト基導入率は、0.51mol%であった。

[0184] [化15]



[式中、x及びyは0以上の整数であり、 $x + y = 100$ である。]

[0185] <製造例13:ゲスト基を有する高分子化合物G2の製造>

10000mg(1.3mol)の側鎖型カルボキシル変性シリコーンオイル、及び、N-オクチルアミンの代わりに95.7mg(0.63mmol)の1-アダマンチルアミン(富士フィルムワコーケミカル社製)を用いたこと以外は、上記のゲスト基を有する高分子化合物G1の製造と同様にして、ゲスト基を有する高分子化合物G2を製造した。

[0186] ゲスト基を有する高分子化合物G2について、 $^1\text{H-NMR}$ によって測定したゲスト基導入率は、1.3mol%であった。

[0187] <製造例 14 : 高分子化合物A2の製造>

[0188] [化16]



高分子化合物A2

[0189] メチルヒドロジェンポリシロキサン及びカールステッド白金溶液、並びに 1-Pentene (東京化成工業社製) を用いて、高分子化合物A2を製造した。

[0190] <製造例 15 : ホスト基を有する高分子化合物CH-4の製造>

Macromolecules 2019, 52 (7)、2659-2668に記載の方法に従って、ポリエチルアクリレート主鎖を有し、かつホスト基として γ -シクロデキストリンを有する高分子化合物CH-4を製造した。なお、得られる高分子化合物中においてホスト基を有するユニットが1.0mol%となるように、製造を行った。

[0191] <<実施例 1 >>

上述の製造例7のとおり製造したホスト基を有する高分子化合物H5と、上述の製造例11のとおり製造したゲスト基を有する高分子化合物G1を、イソドデカンに溶解させ、かつ下記の表1に示される追加の化合物を、表1に示されている量で添加することによって、実施例1に係る化粧料を製造した。

[0192] ポリメチルシロキサン主鎖を有する高分子化合物H5及び高分子化合物G1は、溶媒として使用したイソドデカンに対して、良好な溶解性を示した。

[0193] 実施例1に係る化粧料を指で頬に塗布し、化粧塗膜を形成した。そして、下記の項目について評価を行った：

(a) つっぱり感

- (b) 密着感
- (c) はり感
- (d) 化粧持ち。

[0194] 〈つっぱり感〉

つっぱり感は、下記の3段階基準によって評価判定した：

(判定)：(評価基準)

- ：つっぱり感がない。
- △：ややつっぱり感がある。
- ×：つっぱり感がある。

[0195] 〈密着感〉

密着感は、下記の3段階基準によって評価判定した：

(判定)：(評価基準)

- ◎：密着感が特に優れている
- ：密着感がある
- ×：密着感がない

[0196] 〈はり感〉

はり感は、下記の3段階基準によって評価判定した：

(判定)：(評価基準)

- ：はり感がある。
- △：やはり感がある。
- ×：はり感が無い。

[0197] 〈化粧持ち〉

化粧持ちの良さについては、下記の3段階基準によって評価判定した：

(判定)：(評価基準)

- ：優れている
- △：ふつう
- ×：劣る

[0198] 実施例1について行った評価結果を、表2に示す。

[0199] <<実施例 2 >>

上述の製造例 7 のとおりに製造したホスト基を有する高分子化合物 H 5 と、上述の製造例 1 3 のとおりに製造したゲスト基を有する高分子化合物 G 2 を、イソドデカンに溶解させ、かつ下記の表 1 に示される追加の化合物を、表 1 に示されている量で添加することによって、実施例 2 に係る化粧料を製造した。

[0200] ポリメチルシロキサン主鎖高分子化合物 H 5 と高分子化合物 G 2 は、溶媒として使用したイソドデカンに対して、良好な溶解性を示した。

[0201] 実施例 2 に係る化粧料について、実施例 1 と同様にして使用感の評価を行った。結果を表 2 に示す。

[0202] <<実施例 3 >>

上述の製造例 9 のとおりに製造したホスト基を有する高分子化合物 H 7 と、上述の製造例 1 1 のとおりに製造したゲスト基を有する高分子化合物 G 1 を、イソドデカンに溶解させ、かつ下記の表 1 に示される追加の化合物を、表 1 に示されている量で添加することによって、実施例 3 に係る化粧料を製造した。

[0203] ポリメチルシロキサン主鎖高分子化合物 H 7 及び高分子化合物 G 1 は、溶媒として使用したイソドデカンに対して、良好な溶解性を示した。

[0204] 実施例 3 に係る化粧料について、実施例 1 と同様にして使用感の評価を行った。結果を表 2 に示す。

[0205] <<比較例 1 >>

高分子化合物 H 5 及び高分子化合物 G 1 のイソドデカン溶液の代わりにトリメチルシロキシケイ酸 (MOMENTIVE 社製、SR1000) を用いたこと以外は、実施例 1 と同様にして、比較例 1 に係る化粧料を製造した。

[0206] 比較例 1 に係る化粧料について、実施例 1 と同様にして使用感の評価を行った。結果を表 2 に示す。

[0207] <<比較例 2 >>

高分子化合物 H 5 及び高分子化合物 G 1 のイソドデカン溶液の代わりにシ

リコーンレジン（シロキサン架橋物、Silform Flexible Resin（商品名）（MOMENTIVE社製）を用いたこと以外は、実施例1と同様にして、比較例2に係る化粧品を製造した。

[0208] 比較例2に係る化粧品について、実施例1と同様にして使用感の評価を行った。結果を表2に示す。

[0209]

[表1]

表1

| 成分 | 実施例1 | | 実施例2 | | 実施例3 | | 比較例1 | | 比較例2 | |
|-----------------------------------|------|-----|------|-----|------|-----|------|-----|------|-----|
| | 重量部 | 重量部 | 重量部 | 重量部 | 重量部 | 重量部 | 重量部 | 重量部 | 重量部 | 重量部 |
| 高分子化合物H5及び高分子化合物G1のイソドデカン溶液 | 5 | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 高分子化合物H5及び高分子化合物G2のイソドデカン溶液 | - | 5 | - | - | - | - | - | - | - | - |
| 高分子化合物H7及び高分子化合物G1のイソドデカン溶液 | - | - | 5 | - | - | - | - | - | - | - |
| トリメチルシロキシケイ酸 | - | - | - | - | - | - | 1 | - | - | - |
| シリコーンレジン (Silform Flexible Resin) | - | - | - | - | - | - | - | - | - | 1 |
| デカメチルペンタシロキサン | 25 | 25 | 25 | 25 | 25 | 25 | 29 | 29 | 29 | 29 |
| PPG-17 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| PEG-9ポリジメチルシロキシエチルジメチコン | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 1.5 |
| メトキシケイヒ酸エチルヘキシル | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 |
| オクトクリレン | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| トコフェロール | 適量 | 適量 | 適量 | 適量 | 適量 | 適量 | 適量 | 適量 | 適量 | 適量 |
| ミリスチン酸イソプロピル | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| ビスエチルヘキシルオキシフェノールメトキシフェニルトリアジン | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| ジエチルアミノヒドロキシベンゾイル安息香酸ヘキシル | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 疎水化処理酸化チタン | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 疎水化処理酸化亜鉛 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 | 10 |
| シリカ | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| タルク | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| メタクリル酸メチルクロスポリマー | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 水 | 残余 | 残余 | 残余 | 残余 | 残余 | 残余 | 残余 | 残余 | 残余 | 残余 |
| 合計 | 90 | 90 | 90 | 90 | 90 | 90 | 90 | 90 | 90 | 90 |

[0210]

[表2]

表2

| | ホスト基を有する 高分子化合物 | | | ゲスト基を有する 高分子化合物 | つ つ ぱり感 | 密 着感 | は り感 | 化 粧も ち |
|------|--------------------|------------------------|------------------------|--------------------|---------------|---------|---------|--------------|
| | 識別番 号 | Si原子に 結合した エステル基 | Si原子に 結合した ペンチル基 | 識別番号 | | | | |
| 実施例1 | H5 | あり | - | G1 | ○ | ○ | ○ | △ |
| 実施例2 | H5 | あり | - | G2 | ○ | ○ | ○ | △ |
| 実施例3 | H7 | - | あり | G1 | ○ | ◎ | ○ | ○ |
| 比較例1 | - | | | - | × | × | ○ | × |
| 比較例2 | - | | | シリコーンレジン | △ | × | ○ | × |

[0211] 《実施例4》

上述の製造例15に係るホスト基を有する高分子化合物CH-4と、上述の比較例2で用いたのと同じシロキサン架橋物とを用いて、実施例1と同様にして、化粧料の製造及び評価を行った。結果を下記の表3に示す。

[0212] 《実施例5》

上述の製造例15に係るホスト基を有する高分子化合物CH-4と、上述の製造例13に係るゲスト基を有する高分子化合物G2とを用いて、実施例1と同様にして、化粧料の製造及び評価を行った。結果を下記の表3に示す。

。

[0213] [表3]

表3

| | ホスト基を有する 高分子化合物 | | ゲスト基を有する 高分子化合物 | | つ つ ぱり感 | 密 着感 | は り感 | 化 粧も ち |
|------|--------------------|-------------|--------------------|-------------|---------------|---------|---------|--------------|
| | 識別 番号等 | シロキサン 結合 | 識別 番号等 | シロキサン 結合 | | | | |
| 実施例4 | CH-4 | なし | シリコーンレジン | あり | ○ | ○ | ○ | △ |
| 実施例5 | CH-4 | なし | G2 | あり | △ | ○ | ○ | △ |
| 比較例1 | - | | - | | × | × | ○ | × |
| 比較例2 | - | | シリコーンレジン | あり | △ | × | ○ | × |

請求の範囲

- [請求項1] ホスト基を有する高分子化合物からなるホスト体及びゲスト基を有する高分子化合物からなるゲスト体、又は、ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物からなるホスト-ゲスト体を含み、かつ、
前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる、化粧品。
- [請求項2] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物が、シロキサン結合を含んでいる、請求項1に記載の化粧品。
- [請求項3] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、主鎖にシロキサン結合を含んでいる、請求項1に記載の化粧品。
- [請求項4] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物が、主鎖にシロキサン結合を含んでいる、請求項3に記載の化粧品。
- [請求項5] 前記ホスト基を有する高分子化合物が、側鎖にホスト基を有しており、かつ
前記ゲスト基を有する高分子化合物が、側鎖にゲスト基を有している、
請求項1～4のいずれか一項に記載の化粧品。
- [請求項6] 前記ホスト基を有する高分子化合物が、側鎖にホスト基を有しており、かつ
前記ゲスト基を有する高分子化合物が、末端にゲスト基を有している、
請求項1～4のいずれか一項に記載の化粧品。
- [請求項7] 前記ホスト基を有する高分子化合物が、末端にホスト基を有してお

り、かつ

前記ゲスト基を有する高分子化合物が、側鎖にゲスト基を有している、

請求項 1 ～ 4 のいずれか一項に記載の化粧品。

[請求項8]

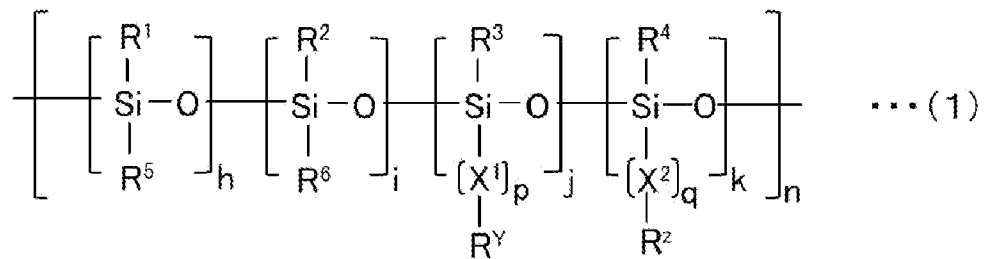
前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物の少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、架橋されている、

請求項 1 ～ 7 のいずれか一項に記載の化粧品。

[請求項9]

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式 (1) で表される構造を有する、請求項 1 ～ 8 のいずれか一項に記載の化粧品：

[化1]



[式 (1) 中、R¹～R⁶は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、1価のスピロ環化合物、1価の縮合環化合物、-R^{R1}-COOHで表される基、又は-R^{R2}-C(O)O-R^{R3}で表される基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、R^{R1}、R^{R2}、及びR^{R3}は、それぞれ、1～10の炭素数のアルキル基又はアルキレン基である；X¹及びX²は、それぞれ独立に、O、Si(OH)₂、Si(R¹⁰)₂、N(H)，若しくはN(COCH₃)であるか、若しくはウレタン結合、ウ

レア結合であるか、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はカルボニル基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、2価の複素環基、ウレタン基、ウレア基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい； R^{10} は、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリーロキシ基、又は複素環基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい；複数の R^{10} は、それぞれ同一でも異なってもよい； X^1 及び X^2 は、それぞれ複数ある場合、それらは同一でも異なってもよい； p 及び q は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す； R^Y は、ホスト基である； R^Z は、ゲスト基である； h 、 i 、 j 、及び k は、それぞれ、0以上の整数を表し、これらは互いに同一であっても異なってもよい；少なくとも j 又は k が、1以上の整数である； n は、1以上の整数を表す。]

[請求項10] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物が、前記式(1)で表される構造を有する、請求項9に記載の化粧品。

[請求項11] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、主鎖に、前記式(1)で表される構造を有する、請求項9又は10に記載の化粧品。

[請求項12] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、

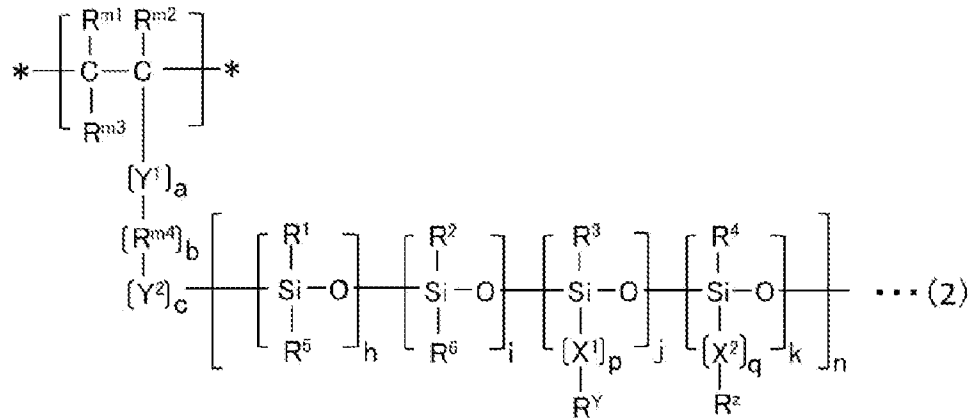
ビニル主鎖、アクリル主鎖、ウレタン主鎖、エポキシ主鎖、ポリイミド主鎖、ポリエステル主鎖、ポリウレア主鎖、又はポリカーボネート主鎖を有しており、かつ、

側鎖に、前記式（１）で表される構造を有している、
請求項 9 又は 10 に記載の化粧品。

[請求項 13]

前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうち少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式（２）で表される構造単位を有する、請求項 1 ～ 12 のいずれか一項に記載の化粧品：

[化 2]



[式（２）中、R¹～R⁶は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリールオキシ基、１価の複素環基、１価のスピロ環化合物、１価の縮合環化合物、-R^{R1}-COOHで表される基、又は-R^{R2}-C(O)O-R^{R3}で表される基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、R^{R1}、R^{R2}、及びR^{R3}は、それぞれ、1～10の炭素数のアルキル基又はアルキレン基である；X¹及びX²は、それぞれ独立に、O、Si(OH)₂、Si(R¹⁰)₂、NH、若しくはN(COCH₃)であるか、若しくはウレタン結合、ウレア結合であるか、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合であるか、又はカルボニル基、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、２価の複素環基、ウレタン基、ウレア基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有し

ていてもよい； R^{10} は、水素原子であるか、又はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ヒドロキシ基、カルボキシ基、アルデヒド基、アリール基、アリーロキシ基、又は複素環基であり、これらの基は、置換基を有していてもよい；複数の R^{10} は、それぞれ同一でも異なってもよい； X^1 及び X^2 は、それぞれ複数ある場合、同一でも異なってもよい； p 及び q は、それぞれ独立に、0以上の整数を表す； R^Y は、ホスト基である； R^Z は、ゲスト基である； h 、 i 、 j 、及び k は、それぞれ、0以上の整数を表し、これらは互いに同一であっても異なってもよく、少なくとも j 又は k が、1以上の整数である； n は、1以上の整数を表す； $R^{m1} \sim R^{m3}$ は、それぞれ独立に、水素原子であるか、又はアルキル基であり、 Y^1 は、エーテル結合、アミド結合、又はエステル結合であり、 R^{m4} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アルケニレン基、アルコキシレン基、若しくはアリーレン基であり、これらの基は、置換基を有していてもよく、 Y^2 は、エーテル結合、アミド結合、若しくはエステル結合、 O 、 $Si(OH)_2$ 、 $Si(R^{10})_2$ 、 $N(H)$ 、又は $N(COCH_3)$ であり、 a 、 b 、 c は、それぞれ独立に、0～3の整数を表す；*は、高分子化合物の主鎖を構成する単結合を表す。]

[請求項14] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物が、前記式(2)で表される構造を有する、請求項13に記載の化粧品。

[請求項15] 前記ホスト基を有する高分子化合物及び前記ゲスト基を有する高分子化合物のうちの少なくともいずれか、又は前記ホスト基及びゲスト基を有する高分子化合物が、下記の式(3)で表される構造単位をさらに有する、請求項13又は14に記載の化粧品：

$k = 0$ であり、かつ、

$R^1 \sim R^3$ 、 R^5 、及び R^6 が、アルキル基である、

請求項 9 ~ 16 のいずれか一項に記載の化粧品。

[請求項19]

前記式 (1) 及び / 又は前記式 (2) において、

$k = 0$ であり、

$R^1 \sim R^3$ 及び R^5 が、メチル基であり、かつ

R^6 が、ペンチル基である、

請求項 9 ~ 16 のいずれか一項に記載の化粧品。

[請求項20]

前記式 (1) 又は (2) において、

$(X^1)_p$ が、 $-(CH_2)_3-N(COCH_3)-$ であり、かつ j が 1 以上の整数であり、かつ / 又は

$(X^2)_q$ が、 $-R^{11}-CO-O-$ 又は $-R^{11}-CO-NH-$ であり、 R^{11} は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 12 のアルキレン基であり、かつ k が 1 以上の整数である、

請求項 9 ~ 19 のいずれか一項に記載の化粧品。

[請求項21]

前記ホスト基と前記ゲスト基が、以下の組み合わせ (a) ~ (c) のいずれか 1 種である、請求項 1 ~ 20 のいずれか一項に記載の化粧品：

(a) 前記ホスト基が、 α -シクロデキストリンであって、かつ、前記ゲスト基が、(1) 炭素数 4 ~ 18 の直鎖アルキル基、(2) 水酸基を有する炭素数 4 ~ 18 の直鎖アルキル基、(3) カルボキシル基を有する炭素数 4 ~ 18 の直鎖アルキル基、(4) アミノ基を有する炭素数 4 ~ 18 の直鎖アルキル基、(5) 環状アルキル基、(6) フェニル基、(7) アゾベンゼン基、及び (8) 桂皮酸基からなる群から選ばれた少なくとも 1 種である；

(b) 前記ホスト基が、 β -シクロデキストリンであって、かつ、前記ゲスト基が、(1') t -ブチル基、(2') アダマンチル基、(3') アリール基、(4') 水酸基を有するアリール基、(5

') カルボキシル基を有するアリール基、(6') アミノ基を有するアリール基、(7') フェロセニル基、(8') アゾベンゼン基、及び(9') ダンシル基からなる群から選ばれた少なくとも1種である；

(c) 前記ホスト基が、 γ -シクロデキストリンであって、かつ、前記ゲスト基が、(1' ') 炭素数18までのアルキル基、(2' ') 水酸基を有する炭素数18までのアルキル基、(3' ') カルボキシル基を有する炭素数18までのアルキル基、(4' ') アミノ基を有する炭素数18までのアルキル基、(5' ') アダマンチル基、(6' ') 炭素原子で構成されるクラスター類を有する基、(7' ') アリール基を有するダンシル基、(8' ') フェロセニル基、及び(9' ') アントラセニル基からなる群から選ばれた少なくとも1種である。

[請求項22] 溶媒をさらに含む、請求項1～19のいずれか一項に記載の化粧品。

[請求項23] 前記溶媒が、揮発性のシリコン、又は揮発性の炭化水素化合物である、請求項20に記載の化粧品。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2021/007182

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
 A61K 8/89 (2006.01) i; A61Q 19/00 (2006.01) i
 FI: A61K8/89; A61Q19/00
 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED
 Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
 A61K8/89; A61Q19/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

| | |
|--|-----------|
| Published examined utility model applications of Japan | 1922-1996 |
| Published unexamined utility model applications of Japan | 1971-2021 |
| Registered utility model specifications of Japan | 1996-2021 |
| Published registered utility model applications of Japan | 1994-2021 |

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
 JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamIII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
|-----------|---|---|
| X A | JP 2005-536653 A (WACKER-CHEMIE GMBH) 02 December 2005 (2005-12-02) claims, paragraphs [0030]-[0094], [0212]-[0214] | 1, 3, 9, 11, 16-17, 20-23 2, 4-8, 10, 12-15, 18-19 |
| A | JP 2015-512955 A (MOMENTIVE PERFORMANCE MATERIALS INC.) 30 April 2015 (2015-04-30) entire text | 1-23 |
| A | US 2018/0362814 A1 (CITY UNIVERSITY OF HONG KONG) 20 December 2018 (2018-12-20) entire text | 1-23 |
| A | CN 110746943 A (UNIV CHINA PETROLEUM EAST CHINA) 04 February 2020 (2020-02-04) entire text | 1-23 |
| E, A | WO 2021/045203 A1 (OSAKA UNIVERSITY) 11 March 2021 (2021-03-11) entire text | 1-23 |

Further documents are listed in the continuation of Box C. See patent family annex.

| | |
|---|--|
| * Special categories of cited documents: | "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention |
| "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance | "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone |
| "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date | "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art |
| "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) | "&" document member of the same patent family |
| "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means | |
| "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed | |

| | |
|---|--|
| Date of the actual completion of the international search 08 April 2021 (08.04.2021) | Date of mailing of the international search report 27 April 2021 (27.04.2021) |
|---|--|

| | |
|--|---|
| Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan | Authorized officer Telephone No. |
|--|---|

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2021/007182

| Patent Documents referred in the Report | Publication Date | Patent Family | Publication Date |
|---|------------------|---|------------------|
| JP 2005-536653 A | 02 Dec. 2005 | US 2006/0009592 A1 claims, paragraphs [0044], [0185]-[0187] WO 2004/018547 A1 EP 1865016 A1 DE 10238818 A1 CN 1678665 A AU 2003255443 A1 | |
| JP 2015-512956 A | 30 Apr. 2015 | US 2013/0172419 A1 entire text WO 2013/103536 A1 EP 2800777 A1 CN 104136500 A KR 10-2014-0116905 A | |
| US 2018/0362814 A1 | 20 Dec. 2018 | (Family: none) | |
| CN 110746943 A | 04 Feb. 2020 | (Family: none) | |
| WO 2021/045203 A1 | 11 Mar. 2021 | (Family: none) | |

| A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） A61K 8/89(2006.01)i; A61Q 19/00(2006.01)i FI: A61K8/89; A61Q19/00 | | |
|--|--|---|
| B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） A61K8/89; A61Q19/00 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2021年 日本国実用新案登録公報 1996-2021年 日本国登録実用新案公報 1994-2021年 | | |
| 国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamII) | | |
| C. 関連すると認められる文献 | | |
| 引用文献の カテゴリー* | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示 | 関連する 請求項の番号 |
| X A | JP 2005-536653 A (ワッカーケミー ゲゼルシヤフト ミット ベシユレンクテル ハフツング) 02.12.2005 (2005-12-02) 特許請求の範囲, [0030]-[0094], [0212]-[0214] | 1, 3, 9, 11, 16-17, 20-23 2, 4-8, 10, 12-15, 18-19 |
| A | JP 2015-512956 A (モメンティブ パフォーマンス マテリアルズ インコーポレイ テッド) 30.04.2015 (2015-04-30) 全文 | 1-23 |
| A | US 2018/0362814 A1 (CITY UNIVERSITY OF HONG KONG) 20.12.2018 (2018-12-20) 全文 | 1-23 |
| A | CN 110746943 A (UNIV CHINA PETROLEUM EAST CHINA) 04.02.2020 (2020-02-04) 全文 | 1-23 |
| E, A | WO 2021/045203 A1 (国立大学法人大阪大学) 11.03.2021 (2021-03-11) 全文 | 1-23 |
| <input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。 | | |
| * 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に 公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若し くは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を 付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の 後に公表された文献 | “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵 触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引 用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性 又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献 との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がな いと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献 | |
| 国際調査を完了した日 08.04.2021 | 国際調査報告の発送日 27.04.2021 | |
| 名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号 | 権限のある職員（特許庁審査官） 池田 周士郎 4D 3909 電話番号 03-3581-1101 内線 3421 | |

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2021/007182

| 引用文献 | | | 公表日 | パテントファミリー文献 | | 公表日 |
|------|--------------|----|------------|-----------------------------------|--|-----|
| JP | 2005-536653 | A | 02.12.2005 | US 2006/0009592 A1 | | |
| | | | | 特許請求の範囲, [0044], [0185]-[0187] | | |
| | | | | WO 2004/018547 A1 | | |
| | | | | EP 1865016 A1 | | |
| | | | | DE 10238818 A1 | | |
| | | | | CN 1678665 A | | |
| | | | | AU 2003255443 A1 | | |
| JP | 2015-512956 | A | 30.04.2015 | US 2013/0172419 A1 | | |
| | | | | 全文 | | |
| | | | | WO 2013/103536 A1 | | |
| | | | | EP 2800777 A1 | | |
| | | | | CN 104136500 A | | |
| | | | | KR 10-2014-0116905 A | | |
| US | 2018/0362814 | A1 | 20.12.2018 | (ファミリーなし) | | |
| CN | 110746943 | A | 04.02.2020 | (ファミリーなし) | | |
| WO | 2021/045203 | A1 | 11.03.2021 | (ファミリーなし) | | |