



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년09월30일

(11) 등록번호 10-1993188

(24) 등록일자 2019년06월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

A61K 8/899 (2006.01) A61K 8/25 (2006.01)

A61Q 1/04 (2006.01) A61Q 17/04 (2006.01)

A61Q 5/12 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2014-7021753

(22) 출원일자(국제) 2013년01월03일

심사청구일자 2017년12월22일

(85) 번역문제출일자 2014년08월04일

(65) 공개번호 10-2014-0119091

(43) 공개일자 2014년10월08일

(86) 국제출원번호 PCT/US2013/020122

(87) 국제공개번호 WO 2013/103701

국제공개일자 2013년07월11일

(30) 우선권주장

61/582,914 2012년01월04일 미국(US)

(56) 선행기술조사문헌

JP08157336 A*

(뒷면에 계속)

전체 청구항 수 : 총 15 항

(73) 특허권자

모네티브 퍼포먼스 머티리얼즈 인크.

미합중국, 뉴욕 12188, 워터포드 허드슨 리버 로드 260

(72) 발명자

사카르, 알록

인도, 더블유비-732124, 말다, 모이나, 카나이나 가르

삭세나, 아눙하브

인도, 방갈로르 560037, 아이티피엘 로드, 쿤단할리, 해비타트 스플렌더, 비-11

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인 동원

심사관 : 박범용

(54) 발명의 명칭 말단-관능화된 이온성 실리콘을 함유하는 퍼스널 케어 조성물

(57) 요약

본 발명의 퍼스널 케어 조성물 적어도 1종의 퍼스널 케어 성분과 적어도 1종의 말단-관능화된 이온성 실리콘을 함유한다.

(72) 발명자

티와리, 산딕

인도, 방갈로르 560037, 아이티피엘 로드, 쿤다라
할리, 시냅스 네스트, 샵403

폴크, 벤자민

미국, 뉴욕 10591, 요크타운 헤이즈, 3308 올드 크
롬폰드 로드

(56) 선행기술조사문헌

JP06247835 A*

JP06032724 A*

JP10273414 A

JP06247827 A

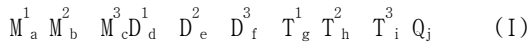
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명세서

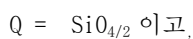
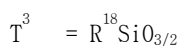
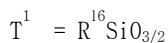
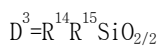
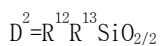
청구범위

청구항 1

적어도 1종의 퍼스널 케어 성분 및 적어도 1종의 말단-관능화된 이온성 실리콘을 포함하여 구성되며, 상기 말단-관능화된 이온성 실리콘은 하기 식(I)을 가지는, 퍼스널 케어 조성물:



[여기서,



여기서

$R^1, R^2, R^3, R^5, R^6, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{13}, R^{15}$ 및 R^{16} 은 각각 독립적으로 1 내지 60개의 탄소원자를 가지는 지방족, 방향족 또는 플루오로 1가 탄화수소 기이고;

R^4, R^{12} 및 R^{17} 은 각각 독립적으로 이온-쌍을 보유하며 식 $-A-I^{x-}M_n^{y+}$ 을 가지는 1가의 기 또는 식 $-R'-N^+(R'')_2-R'''-I^-$ 을 가지는 켜비터이온이고, 여기서 A는 적어도 하나의 스페이싱 원자를 가지는 스페이싱 모이어티이고, 상기 스페이싱 모이어티는 2가의 탄화수소 기 및 하이드로카본옥시 기로 이루어진 군에서 선택되고, I는 이온성 기이고, R' 는 1 내지 20개의 탄소원자를 가지는 2가의 탄화수소 기이고, R'' 는 1 내지 20개의 탄소원자를 가지는 1가의 탄화수소 기이고, R''' 는 2 내지 20개의 탄소원자를 가지는 2가의 탄화수소 기이며, 각각의 M은 독립적으로 수소 또는 알칼리금속, 알칼리토금속, 전이금속, 4차 암모늄 기 및 포스포늄 기에서 독립적으로 선택되는 양이온이고;

R^7, R^{14} 및 R^{18} 은 각각 독립적으로 $-CH_2CH(R^{19})(C_nH_{2n})-O-(C_2H_4O)_o-(C_3H_6O)_p-(C_4H_8O)_q-R^{19}$ 이고, 여기서 R^{19} 는 수소 또는 위에서 정의한 R^1 기이고;

첨자 x 및 y는 양의 정수이나, 단 $x = ny$ 의 제한을 받는다; 각 첨자 n은 독립적으로 0 내지 6의 값을 가지고, 첨자 o, p 및 q는 각각 독립적으로 0 내지 1000의 값을 가지나, 단 $o + p + q \geq 1$ 이고; 그리고,

첨자 a, c, d, e, f, g, h, i 및 j는 각각 독립적으로 영(0) 또는 양의 정수이나, 단 $2 \leq$

$a+b+c+d+e+f+g+h+i+j \leq 4500$ 이고, $b \geq 2$ 인 제한을 받음].

청구항 2

삭제

청구항 3

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, $R^1, R^2, R^3, R^5, R^6, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{13}, R^{15}$ 및 R^{16} 기는 각각 독립적으로 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소-펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 노닐, 데실, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 사이클로헵틸, 메틸사이클로헥실, 나프틸; 톨릴, 자일릴, 에틸페닐 및 벤질에서 선택되는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 4

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, 2가의 스페이싱 기 A는 알킬렌 기 $-(CHR^{20})_m-$ 이고, 여기서 R^{20} 은 수소 또는 R^1 기이고, 첨자 m은 1 내지 100의 범위에 있는 양의 정수인, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 5

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, 2가의 스페이싱 기 A는 $-(CHR^{21})_kC_6H_4(CH_2)_r-CH_2CH(R')(CH_2)_kC_6H_4-$ 또는 $-CH_2CH(R^{22})(CH_2)_rC_6H_3R^{23}$ 에서 선택되는 아릴렌 기이고, 여기서 R'는 수소 또는 R^1 기이고, R^{21} 은 수소 또는 R^1 기이고, R^{22} 는 수소 또는 R^1 기이고, R^{23} 은 1 내지 20개의 탄소원자를 갖는 1가의 기이며, 첨자 k 및 r은 영(0) 또는 양의 정수이나, 단 $0 \leq k + r \leq 100$ 인 제한을 받는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 6

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, 2가의 스페이싱 기 A는 $-(CHR^{24})_s-(O-CHR^{24}CH_2)_s-$ 및 $-O-(CH_2)_t-$ 에서 선택되는 하이드로카본옥시 기이고, 여기서 R^{24} 는 수소 또는 R^1 기이고, s는 0 내지 50의 값을 가지고, s'는 1 내지 50의 값을 가지며, t는 0 내지 50의 값을 가지나, 단 $1 \leq s + s' + t \leq 100$ 인 제한을 받는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 7

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, 상기 이온-쌍-보유 기와 상기 쯔비터이온에 있는 I^- 는 설포네이트 $-SO_3^-$ 및 설페이트 $-OSO_3^-$ 에서 선택되는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 8

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, M^+ 는 Li, Na, K, Cs, Mg, Ca, Ba, Zn, Cu, Fe, Ni, Ga, Al, Mn, Cr, Ag, Au, Pt, Pd, Ru 및 Rh에서 선택되는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 9

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, 상기 쯔비터이온에 있는 R'은 1 내지 20개의 탄소원자를 갖는 2가의 탄화수소 기이고, R"는 1 내지 20개의 탄소원자를 갖는 1가의 탄화수소 기이며, R'"는 2 내지 20개의 탄소원자를 갖는 2가의 탄화수소 기인, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 10

삭제

청구항 11

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)에서, 첨자 b는 2이고; 첨자 a, c, e, f, g, h, i 및 j는 0 이고; 첨자 d는 5 내지 1000이고, R^5 , R^6 , R^{10} 및 R^{11} 은 메틸 또는 에틸인, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 12

제1항에 있어서, 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)이 소듐 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 은(silver) 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 마그네슘 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 칼슘 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 아연 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산 및 트리에탄올암모늄 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산 중의 적어도 1종인, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 13

제1항에 있어서, 적어도 1종의 비-관능화 실리콘을 더 포함하여 구성되는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 14

제1항에 있어서, 적어도 1종의 유기 용매를 더 포함하여 구성되는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 15

제1항에 있어서, 수중유형 또는 유중수형 에멀전으로 제제화된, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 16

제1항에 있어서, 상기 퍼스널 케어 조성물이 데오도란트, 발한억제제(antiperspirants), 스프레이, 스틱 및 롤-온 제품(sprays, sticks and roll-on products), 웨이빙제, 스킨 로션, 모이스처라이저, 토너, 목욕제, 클렌징 제, 샴푸, 콘디셔너, 조합된 샴푸/콘디셔너, 무스, 스타일링 젤, 헤어스프레이, 모발염색제, 모발색제, 모발표 백제, 웨이빙제(waving products), 헤어스트레이트너, 네일폴리시(nail polish), 네일폴리시 리무버, 네일 크림 및 로션, 각질 연화제, 썬스크린, 방충제, 노화방지제, 립스틱, 화운데이션, 페이스 파우더, 아이라이너, 아이 쉐도우, 블러쉬(blushes), 메이크업, 마스크라, 모이스처라이징 조제(moisturizing preparations), 화운데이션, 바디 및 핸드 조제, 스킨케어 조제, 페이스 및 넥 조제(face and neck preparations), 토닉, 드레 싱, 헤어 그루밍 에이드(hair grooming aids), 에어로졸 픽사티브(aerosol fixatives), 향 조제(fragrance preparations), 애프터셰이브, 메이크-업 조제, 소프트 포커스 용품(soft focus applications), 밤 및 낮 스킨 케어 조제, 비-착색 모발 조제(non-coloring hair preparations), 태닝 조제(tanning preparations), 합성 및 비-합성 비누바, 핸드 리퀴드(hand liquids), 노우즈 스트립(nose strips), 퍼스널 케어용 부직포 용품, 베이비 로션, 베이비 베스 및 샴푸, 베이비 콘디셔너, 웨이빙 조제, 큐컴버 슬라이스(cucumber slices), 스킨 패드 (skin pads), 메이크업 리무버, 페이스 클렌징제, 콜드크림, 썬스크린제, 무스, 스프리츠(spritzes), 페이스트 마스크 및 머드, 페이스 마스크, 콜로뉴 및 화장수, 헤어 큐티클 코트(hair cuticle coats), 샴푸젤, 페이스 및 바디 워시, 퍼스널 케어 린스-오프제, 젤, 폼 베스(foam baths), 스크러빙 클렌저(scrubbing cleansers), 아 스트린젠트(astringents), 네일 콘디셔너, 아이쉐도우 스틱, 페이스 또는 아이용 파우더(powders for face or eye), 립밤, 립글로스, 헤어케어 펌프 스프레이 및 기타 비-에어로졸 스프레이, 헤어-프리즈-콘트롤 젤, 헤어 리브-인 콘디셔너, 헤어 포마드, 헤어 디텐글링제(hair de-tangling products), 모발 고정제, 헤어 블리치제 (hair bleach products), 스킨 로션, 프리셰이브 및 프리일렉트릭 셰이브(pre-shaves and pre-electric shaves), 무수 크림 및 로션, 유/수형, 수/유형, 멀티폴 매크로 및 마이크로 에멀전, 내수성 크림 및 로션, 여 드림피부용 조제, 구강세척제, 마사지 오일, 치약, 클리어 젤 및 스틱, 연고 베이스, 국부 상처치유제, 에어로 졸 탈크, 배리어 스프레이(barrier sprays), 비타민 및 노화방지 조제, 허브추출물 조제, 베스 솔트(bath salts), 베스 및 바디 밀크, 헤어 스타일링 에이드(hair styling aids), 헤어-, 아이-, 네일- 및 스킨-소프트 용품, 방출 조절 퍼스널 케어제, 헤어 콘디셔닝 미스트, 스킨 케어 모이스처라이징 미스트, 스킨 와이프(skin wipes), 포어 스킨 와이프, 포어 클렌저, 블레미시 리듀서(blemish reducers), 스킨 엑스폴리에이터(skin exfoliators), 박피개선제(skin desquamation enhancers), 스킨 타월레트 및 클로스(skin towelettes and cloths), 제모제, 퍼스널 케어 윤활제, 네일 착색 조제, 피부에 적용되는 의약 조성물의 국부 적용을 위한 약물 전달 시스템 및 이들의 조합들의 군에서 선택되는, 퍼스널 케어 조성물.

청구항 17

삭제

청구항 18

제1항에 있어서, R^{10} 은 $-CH_2CH(H \text{ 또는 } CH_3)-A-SO_3M$ 이고; A는 2가의 벤질 기이고; M^+ 는 Li, Na, K, Ag, 4차 암모늄 기, 암모늄 염 또는 포스포늄 기인, 퍼스널 케어 조성물.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 출원은 2012년 1월 4일자로 출원된 미국 가특허출원 제61/582,914호와 관련이 있는 것으로 이를 우선권으로 주장하며, 그 전체 내용은 본 출원에 참조문헌으로 통합된다.

[0002] 본 발명은 퍼스널 케어 조성물에 이온성 실리콘의 이용에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 일본특허 제6,247,827호 및 제6,247,835호는 설포네이트-관능화된 실리콘들을 제조하는 방법 및 퍼스널케어 조성물에 이러한 실리콘들의 이용을 설명하고 있다. 그러나, 이러한 방법들은 퍼스널 케어 조성물에 말단-관능화된 이온성 실리콘을 도입하는 것에 대해서 설명하고 있지 않다.

발명의 내용

해결하려는 과제

과제의 해결 수단

[0004] 적어도 1종의 퍼스널 케어 성분 및 하기 식(I)을 가지는 적어도 1종의 말단-관능화된 이온성 실리콘을 포함하여 구성되는, 퍼스널 케어 조성물이 제공된다:

[0005] $M_a^1 M_b^2 M_c^3 D_d^1 D_e^2 D_f^3 T_g^1 T_h^2 T_i^3 Q_j$ (I)

[0006] 여기서,

[0007] $M^1 = R^1 R^2 R^3 SiO_{1/2}$

[0008] $M^2 = R^4 R^5 R^6 SiO_{1/2}$

[0009] $M^3 = R^7 R^8 R^9 SiO_{1/2}$

[0010] $D^1 = R^{10} R^{11} SiO_{2/2}$

[0011] $D^2 = R^{12} R^{13} SiO_{2/2}$

[0012] $D^3 = R^{14} R^{15} SiO_{2/2}$

[0013] $T^1 = R^{16} SiO_{3/2}$

[0014] $T^2 = R^{17} SiO_{3/2}$

- [0015] $T^3 = R^{18}SiO_{3/2}$
- [0016] $Q = SiO_{4/2}$ 이고,
- [0017] 여기서
- [0018] $R^1, R^2, R^3, R^5, R^6, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{13}, R^{15}$ 및 R^{16} 은 각각 독립적으로 1 내지 60개의 탄소원자를 가지는 지방족, 방향족 또는 플루오로 1가 탄화수소 기이고;
- [0019] R^4, R^{12} 및 R^{17} 은 각각 독립적으로 이온-쌍을 보유하며 식 $-A-I^x-M_n^{y+}$ 을 가지는 1가의 기 또는 식 $-R'-N^+(R'')_2-$ $R'-I^-$ 을 가지는 쓰비터이온이고, 여기서 A는 적어도 하나의 스페이싱 원자를 가지는 스페이싱 모이어티이고, 상기 스페이싱 모이어티는 2가의 탄화수소 기 및 하이드로카본옥시 기로 이루어진 군에서 선택되고, I는 이온성 기이고, R'는 1 내지 20개의 탄소원자를 가지는 2가의 탄화수소 기이고, R''는 1 내지 20개의 탄소원자를 가지는 1가의 탄화수소 기이고, R'''는 2 내지 20개의 탄소원자를 가지는 2가의 탄화수소 기이며, 각각의 M은 독립적으로 수소 또는 알칼리금속, 알칼리토금속, 전이금속, 4차 암모늄 기 및 포스포늄 기에서 독립적으로 선택되는 양이온이고;
- [0020] R^7, R^{14} 및 R^{18} 은 각각 독립적으로 $-CH_2CH(R^{19})(C_nH_{2n})-O-(C_2H_4O)_o-(C_3H_6O)_p-(C_4H_8O)_q-R^{19}$ 이고, 여기서 R^{19} 는 수소 또는 위에서 정의한 R¹기이고;
- [0021] 첨자 x 및 y는 양의 정수이나, 단 $x = ny$ 이며; 각 첨자 n은 독립적으로 0 내지 6의 값을 가지고, 첨자 o, p 및 q는 각각 독립적으로 0 내지 1000의 값을 가지나, 단 $o + p + q \geq 1$ 이고; 그리고,
- [0022] 첨자 a, c, d, e, f, g, h, i 및 j는 각각 독립적으로 영(0) 또는 양의 정수이나, 단 $2 \leq a+b+c+d+e+f+g+h+i+j \leq 4500$ 이고 $b \geq 2$ 이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0023] 본 명세서 및 특허청구의 범위에서, 다음의 용어들 및 표현은 아래 제시하는 바와 같이 이해되어야 한다.
- [0024] 특허청구의 범위를 포함하는 본 명세서에서 사용된, 단수 형태의 "하나의", 및 "상기"는 복수형태를 포함하며, 특정 수치에 대한 참조는 문맥상 달리 명시하지 않는 한, 적어도 그 특정 값을 포함한다.
- [0025] 실시예 또는 달리 표시하는 곳 이외에, 수치 및 범위는 지시된 수치와 그 근사값을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 이러한 범위가 표현될 때, 다른 구체체들은 하나의 특정 값과 다른 특정 값 또는 하나의 특정 값 내지 다른 특정 값을 포함한다. 마찬가지로, 값이 근사치로서 표현될 때, 예를 들어 수식어 "약"을 사용할 때, 그 특정 값은 또 하나의 구체체를 구성하는 것임을 이해하여야 한다.
- [0026] 또한 여기에서 언급된 수치 범위는 그 범위 내의 아-범위를 포함하는 것으로 의도된 것임을 이해하여야 한다.
- [0027] 본 명세서에서 설명된 모든 방법들은 문맥상 달리 명시하지 않는 한 임의의 적절한 순서로 수행될 수 있다. 본 명세서에서 사용된 일부 및 모든 예들 및 예시 용어(예를 들어, '~과 같은')은 본 발명을 더 잘 이해할 수 있도록 의도한 것이며, 달리 청구하지 않는 한 본 발명의 범위에 제한을 가하고자 한 것은 아니다. 본 명세서에 사용된 언어는 본 발명의 구현에 필수적인 임의의 비청구 요소들을 지시하는 것으로 해석되지 않아야 한다.
- [0028] 본 명세서에서 사용된 용어 "포함하여 구성되는", "포함하는", "함유하는", "특징으로 하는" 그리고 이의 문법적 등가 표현은 추가적인, 제시되지 않은 요소들, 방법 단계들을 배제하지 않는 개방형 용어이며, 보다 제한적인 용어 "구성되는" 및 "본질적으로 구성되는"을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.
- [0029] 또한, 본 명세서에서 명시적으로 또는 암묵적으로 제시된 및/또는 청구항에서 언급된 구조적, 조성적 및/또는 기능적으로 연관된 화합물, 재료 또는 물질에 속하는 임의의 화합물, 재료 또는 물질은 이들의 집단 및 모든 조합들에 개별적인 대표자로 포함된 것으로 이해되어야 한다.
- [0030] 본 발명의 말단-관능화된 이온성 실리콘(I)은, 본 조성물에서 이온성 필러로서 작용하는, 예를 들어 40 내지 200nm의 치수를 가지는 이온-리치 도메인(ion-rich domains)에 대한 이온성 기들의 응집체를 형성한다. 이러한 이온성 응집체들은 가교로서 기능하고, 재료의 모듈러스를 증가시킨다. 가교로서 기능하는 것 이외에도, 상기

응집체들은 또한 보강 필러 입자로도 기능하여, 이를 함유하는 본 퍼스널 케어 조성물의 모듈러스를 더 증가시킬 수도 있다. 또한, 이온 상호작용의 가역적 성질로 인해, 특정 수준(예를 들어, 약 180℃)으로 가열되면, 상기 이온성 응집체들은 다소 탈응집하여 냉각시에 열역학적으로 보다 안정한 이온성 응집체들을 형성한다. 이러한 현상의 결과로서, 이러한 물질의 점도는 가열/냉각 사이클을 반복하는 동안 계속 증가한다. 게다가, 상기 이온성 응집체들은 물과 같은 극성용매에 용해되고 용매의 제거로 재형성될 수 있다. 또한 이온성 기들의 존재는 본 실리콘(I)을 모이스처라이저, 선스크린 등과 같은 퍼스널 케어 용도에 통상적으로 이용되는 친수성 및 친유성 성분들과 예상외의 상용성을 갖게 한다.

[0031] 본 발명의 말단 관능화된 이온성 실리콘(I)의 상기한 바와 같은 특유의 물리화학 특성들은 립 칼라 제제들에서 높은 전달저항성 및 고풍택, 선스크린제 및 기타 퍼스널 케어 제품 들에서 활성 성분 및 물질의 방출조절 등과 같은 매우 바람직한 제품 성능 특성을 제공하는 중요한 역할을 하는 것으로 생각된다.

[0032] 본 발명의 말단-관능화된 이온성 실리콘(I)에서, $R^1, R^2, R^3, R^5, R^6, R^8, R^9, R^{10}, R^{11}, R^{13}, R^{15}$ 및 R^{16} 기 각각은 바람직하게 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소-펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸; n-헥실과 같은 헥실; n-헵틸과 같은 헵틸; n-옥틸과 같은 옥틸; n-노닐과 같은 노닐; n-데실과 같은 데실, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 사이클로헵틸 및 메틸사이클로헥실 라디칼과 같은 사이클로알킬 라디칼이며, 대표적인 방향족 기는 페닐, 나프틸; 오르쏘-, 메타- 및 파라-톨릴, 자일릴, 에틸페닐 및 벤질을 포함한다.

[0033] R^4, R^{12} 및 R^{17} 기에서,

[0034] 이온-쌍 $-A-I_n^{x-}M_m^{y+}$ 의 2가의 탄화수소 스페이싱 기(spacing group) A는 예를 들어 $-(CHR^{20})_m-$ 와 같은 알킬렌 기((여기서 R^{20} 은 수소 또는 위에서 정의한 R^1 기이고, 첨자 m은 1 내지 100의 범위, 바람직하게 1 내지 20의 범위에 있는 양의 정수임), 또는 $-(CHR^{21})_kC_6H_4(CH_2)_r-CH_2CH(R')-(CH_2)_kC_6H_4-$ 또는 $-CH_2CH(R^{22})(CH_2)_rC_6H_4R^{23}$ 와 같은 아릴렌 기(여기서 R' 는 수소 또는 위에서 정의한 R^1 기이고, R^{21} 은 수소 또는 위에서 정의한 R^1 기이고, R^{22} 는 수소 또는 위에서 정의한 R^1 기이고, R^{23} 은 1 내지 20개의 탄소원자를 갖는 1가의 라디칼이며, 첨자 k 및 r은 영(0) 또는 양의 정수이나, 단 $0 \leq k + r \leq 100$ 임)이다.

[0035] 또한, 2가의 탄화수소 스페이싱 기 A는 예를 들어 $-(CHR^{24})_s-(O-CHR^{24}CH_2)_s'-O-(CH_2)_t-$ 에서 선택되는 2가의 하이드로카본옥시 기이고, 여기서 R^{24} 는 수소 또는 위에서 정의한 R^1 기이고, s는 0 내지 50의 값을 가지고, s'는 1 내지 50의 값을 가지며, t는 0 내지 50의 값을 가지나, 단 $1 \leq s + s' + t \leq 100$ 이다.

[0036] 상기 이온-쌍-보유 기와 상기 쓰비터이온에 있는 I^- 는 바람직하게 설포네이트 $-SO_3^-$, 설페이트 $-OSO_3^-$ 및 그 동종물이다.

[0037] 양이온 M^+ 의 예는 Li, Na, K, Cs, Mg, Ca, Ba, Zn, Cu, Fe, Ni, Ga, Al, Mn, Cr, Ag, Au, Pt, Pd, Ru 및 Rh를 포함한다.

[0038] 상기 쓰비터이온에서, R' 은 1 내지 20개의 탄소원자를 갖는 2가의 탄화수소 라디칼, 예를 들어 $-(CH_2)_s-$ 이고; R'' 는 1 내지 20개의 탄소원자를 갖는 1가의 탄화수소 라디칼, 예를 들어 $-CH_2CH_3$ 이고, R''' 는 2 내지 20개의 탄소원자를 갖는 2가의 탄화수소 라디칼, 예를 들어 $-(CH_2)_4-$ 이다.

[0039] 말단-관능화된 이온성 실리콘(I)에 있어서, R^7, R^{14} 및 R^{18} 은 각각 독립적으로 $-CH_2CH(R^{19})(C_nH_{2n})-O-(C_2H_4O)_o-(C_3H_6O)_p-(C_4H_8O)_q-R^{19}$ 이고, 여기서 R^{19} 는 수소 또는 위에서 정의한 R^1 기이고; 각 첨자 n은 독립적으로 0 내지 6의 값을 가지고, 첨자 o, p 및 q는 각각 독립적으로 $o + p + q \geq 1$ 인 것을 전제로 하는 값을 갖는다.

[0040] 말단-관능화된 이온성 실리콘(I)에 있어서, 첨자 a, c, d, e, f, g, h, i 및 j는 각각 독립적으로 영(0) 또는 양수이나, 단, $2 \geq a+b+c+d+e+f+g+h+i+j \geq 4500$ 이고, $b \geq 2$ 이다. 하나의 구체예에서, 첨자 b는 2이고; 첨자 a, c, e, f, g, h, i, j, k, l 및 m은 0이고; 첨자 d는 5 내지 1000, 더 바람직하게 10 내지 500, 더더욱

바람직하게 10 내지 200이고, R^5 , R^6 , R^{10} 및 R^{11} 은 메틸 또는 에틸이고; R^{10} 은 $-\text{CH}_2\text{CH}(\text{H}$ 또는 $\text{CH}_3)-\text{A}-\text{SO}_3\text{M}$ 이고; A는 2가의 벤질 라디칼이고; M은 Li, Na, K, Ag, 4차 암모늄 기, 암모늄 염 또는 포스포늄 기이다.

[0041] 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)의 예는 소듐 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 은(silver) 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 마그네슘 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 칼슘 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산, 아연 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산 및 트리에탄올암모늄 설퍼네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산을 포함한다.

[0042] 본 발명에 따르는 퍼스널 케어 조성물의 비한정적인 예는 스프레이, 스틱 및 물-온 제품을 포함하는 데오도란트, 발한억제제(antiperspirants), 데오도란트/발한억제제, 웨이빙제, 스킨 로션, 모이스처라이저, 토너, 목욕제, 클렌징제, 샴푸, 콘디셔너, 조합된 샴푸/콘디셔너, 무스, 스타일링 젤, 헤어스프레이, 모발염색제, 모발색제, 모발표백제, 웨이빙제(waving products), 헤어스트레이트너, 네일폴리시, 네일폴리시 리무버, 네일 크림 및 로션, 각질 연화제, 썬스크린, 방충제, 노화방지제, 립스틱, 화운데이션, 페이스 파우더, 아이라이너, 아이셰도우, 블러쉬(blushes), 메이크업, 마스크라, 모이스처라이징 조제(moisturizing preparations), 화운데이션, 바디 및 핸드 조제, 스킨케어 조제, 페이스 및 넥 조제(face and neck preparations), 토닉, 드레싱, 헤어 그루밍 에이드(hair grooming aids), 에어로졸 픽사티브(aerosol fixatives), 향 조제(fragrance preparations), 애프터셰이브, 메이크-업 조제, 소프트 포커스 용품(soft focus applications), 밤 및 낮 스킨케어 조제, 비-착색 모발 조제(non-coloring hair preparations), 태닝 조제(tanning preparations), 합성 및 비-합성 비누 바, 핸드 리퀴드(hand liquids), 노즈 스트립(nose strips), 퍼스널 케어용 부직포 용품, 베이비로션, 베이비 베스 및 샴푸, 베이비 콘디셔너, 웨이빙 조제, 큐컴버 슬라이스(cucumber slices), 스킨 패드(skin pads), 메이크업 리무버, 페이스 클렌징제, 콜드크림, 썬스크린제, 무스, 스프리츠(spritzes), 페이스 마스크 및 머드, 페이스 마스크, 콜로뉴 및 화장수, 헤어 큐티클 코트(hair cuticle coats), 샤워젤, 페이스 및 바디 워시, 퍼스널 케어 린스-오프제, 젤, 폼 베스(foam baths), 스크러빙 클렌저(scrubbing cleansers), 아스트린젠트(asstringents), 네일 콘디셔너, 아이셰도우 스틱, 페이스 또는 아이용 파우더(powders for face or eye), 립밤, 립글로스, 헤어케어 펌프 스프레이 및 기타 비-에어로졸 스프레이, 헤어-프리즈-콘트롤 젤, 헤어 리브-인 콘디셔너, 헤어 포마드, 헤어 디텐글링제(hair de-tangling products), 모발 고정제, 헤어 블리치제(hair bleach products), 스킨 로션, 프리셰이브 및 프리일렉트릭 셰이브(pre-shaves and pre-electric shaves), 무수 크림 및 로션, 유/수형, 수/유형, 다중 매크로 및 마이크로 에멀전, 내수성 크림 및 로션, 여드름피부용 조제, 구강 세척제, 마사지 오일, 치약, 클리어 젤 및 스틱, 연고 베이스, 국부 상처치유제, 에어로졸 탈크, 배리어 스프레이(barrier sprays), 비타민 및 노화방지 조제, 허브추출물 조제, 베스 솔트(bath salts), 베스 및 바디 밀크, 헤어 스타일링 에이드(hair styling aids), 헤어-, 아이-, 네일- 및 스킨-소프트 용품, 방출 조절 퍼스널 케어제, 헤어 콘디셔닝 미스트, 스킨 케어 모이스처라이징 미스트, 스킨 와이프(skin wipes), 포어 스킨 와이프, 포어 클렌저, 블레미시 리듀서(blemish reducers), 스킨 엑스폴리에이터(skin exfoliators), 박피개선제(skin desquamation enhancers), 스킨 타월레트 및 클로스(skin towelettes and cloths), 제모제, 퍼스널 케어 윤활제, 네일 착색 조제, 피부에 적용되는 의약 조성물의 국부 적용을 위한 약물 전달 시스템 및 상기 퍼스널 케어 용품들 중 적어도 1종을 포함하는 조합제들을 포함한다.

[0043] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 선택적으로 1종 이상의 기타 오가노실록산 레진을 99 중량부 이하로 함유할 수 있다. 이와 같은 추가적인 오가노실록산 레진으로 유용한 몇 가지 예는 $\text{R}_3\text{SiO}_{1/2}$, R_2SiO , $\text{RSiO}_{3/2}$, 및 SiO_2 단위들의 관계 식 $\text{R}_y\text{SiO}_{(4-y)/2}$ (여기서, y는 1.0 내지 1.50의 값을 가지며, R은 메틸기임)을 상호 간에 만족하는 비율의 조합들을 포함한다.

[0044] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 선택적으로 1종 이상의 안료를 99 중량부 이하로 함유할 수 있다. 본 발명에 이용하기에 적합한 안료는 모든 무기 및 유기 착색제/안료를 포함한다. 보통 안료는 알루미늄, 바륨 또는 칼슘의 염 또는 레이크이다. 레이크(lake)는 흡착면에 수용성 염료의 침착에 의해 제조된 유기 안료 또는 고체 희석제로 증량 또는 감량된 안료이며, 보통 알루미늄 수화물이다. 레이크는 또한 산성 또는 염기성 염료의 불용성 염의 침전으로 형성시킨다. 칼슘 및 바륨 레이크 또한 본 발명에 이용될 수 있다. 본 조성물에 함유될 수 있는 Tss 기타 착색제 및 염료의 예는 펄, 산화티타늄, Red 6, Red 21, Blue 1, Orange 5 및 Green 5 염료, 초크, 탈크, 산화철 및 티타네이트드 마이카(titanated mica) 등을 포함한다.

[0045] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 선택적으로 공지 또는 통상의 화장료로 허용가능한 유기 막 형성제(organic film former) 1종 이상을 99 중량부 이하로 함유할 수 있다. 유용한 막형성제의 예는 천연 왁스, 폴리머, 예를 들어 폴리프로필렌 폴리머, PVP, 에틸렌 비닐 아세테이트의 코폴리머, 디메티오닌 겔, 레진, 예를 들어 셀락

(shellac), 폴리테르펜 등을 포함한다.

[0046] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 선택적으로 차단성 및/또는 흡수성 선스크린 제를 50 중량부 이하로 함유할 수 있다. 차단성 선스크린 제는 일반적으로 무기성이며, 그 예를 들면 각종 산화 세슘, 산화크롬, 산화코발트, 산화철, 레드 페트롤라툼(red petrolatum), 실리콘 및 기타 처리된 이산화티탄, 이산화티탄, 산화아연, 및/또는 산화지르코늄, BaTiO₃, CaTiO₃, SrTiO₃ 및 SiC가 있다. 흡수성 선스크린 제는 보통 유기 종이며, 그 비한정적인 예는 일반적으로 320 내지 400 nm의 자외선 스펙트럼 영역의 방사선을 흡수하는 UV-A 흡수제인 안트라닐레이트계, 벤조페논계 및 디벤조일 메탄계 자외선 흡수제 등과; 및 일반적으로 280 내지 320 nm의 자외선 스펙트럼 영역의 방사선을 흡수하는 UV-B 흡수제인 p-아미노벤조산 유도체계, 캄포 유도체계, 신나메이트계 및 살리실레이트계 자외선 흡수제 등을 포함한다.

[0047] 유기 선스크린 제의 구체적인 예는 p-아미노 벤조산, 아보벤존 시녹세이트, 디옥시벤존, 호모살레이트, 멘틸안트라닐레이트, 옥토크릴렌, 옥틸 메톡시신나메이트, 옥틸 살리실레이트, 옥시벤존, 파디메이트, 페닐벤즈이미다졸 설펜산, 술이소벤존, 트롤아민 살리실레이트, 아미노 벤조산, 아밀디멘틸 p-아미노벤조산, 다이 에탄올아민 P-메톡시신나메이트, 디갈로일 트리올레에이트, 2-에틸헥실-2-시아노 -3,3-디페닐아크릴레이트, 에틸헥실 p-메톡시신나메이트, 2-에틸헥실 살리실레이트, 글리세릴 아미노 벤조에이트, 호모멘틸 살리실레이트, 호모살레이트, 3-이미 다졸-4-일 아크릴산 산 및 이의 에틸 에스테르, 메틸 안트라닐레이트, 옥틸디메틸 PABA, 2-페닐벤즈이미다졸-5-설펜산 및 염, 술이소벤존, 트리에탄올아민 살리실레이트, N,N,N-트리메틸-4-(2-옥소-3-일 디엔 메틸) 아닐리늄 메틸 설페이트, 아미노 벤조에이트, 4-이소프로필벤질 살리실레이트, 2-에틸헥실-4-메톡시신나메이트, 메틸 디이소프로필신나메이트, 이소아밀 4-메톡시신나메이트, 3-(4'-트리메틸암모늄)-벤질리덴-보만-2-온 메틸설페이트, 2-히드록시-4-메톡시벤조페논, 2-하이드록시-메톡시벤조페논-5-술포네이트, 2,4-디히드록시벤조페논, 2,2',4,4'-테트라히드 록시벤조페논, 2,2'-디히드록시-4, 4'디메톡시벤조페논, 2-히드록시-4-n-옥톡시벤조페논, 2-히드록시-4-메톡시-4'-메톡시벤조페논, ca-(2-옥소본-3-일리덴)-톨릴-4 -설펜산 및 이의 수용성 염, 3-(4'-술포)벤질리덴-보르난 -2 -온 및 이의 용해성 염, 3-(4'-메틸벤질리덴)-d,1-캄퍼, 3-벤질리덴 -d,1-캄퍼, 벤젠-1,4-디(3-메틸리덴-10-캄포설펜) 산 및 이의 염, 우로칸산, 2,4,6-트리스-(2'-에틸헥실-1'-옥 시카보닐)-아닐리놀 1,3,5-트리아진, 2-(p-(tert-부틸아미도)아닐리놀-4,6-비스-(p-(2'-에틸 헥실 1'-옥시카보닐) 아닐리놀 1,3,5-트리아진, 2,4-비스{1,4- (2-에틸헥실옥시)-2- 히드록시-페닐}-6-(4-메톡시페닐)-1,3,5-트 리아진, N-(2 또는 4)-(2-옥소본-3-일리덴)메틸벤질 아크릴아미드, 1,4-비스벤질이미다졸릴-페닐렌-3,3',5,5'-테트라 트라설펜산 및 이의 염, 벤잘말로네이트-치환 폴리오가노실록산, 벤조트리아졸-치환 폴리오가 노실록산 (드로메트리졸 트리실록산), 용해된 2,2'-메틸렌 -비스-1,6-(2H-벤조트리아졸-2-일)-4-(1,1,3,3-테트 라메틸부틸)페놀, 2-메틸디벤조일메탄, 4-메틸디벤조일메탄, 4-이소프로필디벤조일메탄, 4-tert-부틸디벤조일메 탄, 2,4-디메틸디벤조일메탄, 4,4'-디메톡시디벤조일메탄, 4-tert-부틸-4'-메톡시디벤조일메탄, 2-메틸-5-이소 프로필-4'-메톡시디 벤조일 메탄, 2-메틸-5-tert-부틸-4'- 메톡시디벤조일메탄, 2,4-디메틸-4-메톡시디벤조일메 탄, 2,6-디메틸-4-tert-부틸 -4-메톡시디벤조일메탄, 상기 선스크린 제들 중의 적어도 1종을 포함하는 조합들을 포함한다.

[0048] 하나의 구체예에서, 적어도 3종의 선스크린제 조합이 특히 효과적인 것으로 판명되었다. 또 하나의 구체예에서, 4종의 선스크린제 조합이 특히 효과적이며, 특히 화학 선스크린제가 사용되는 경우 효과적이다.

[0049] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 색조 화장품, 선스크린, 헤어 컨디셔너 및 모이스처라이저로 사용하기 위하여 제제화할 수 있다. 이러한 용도에 적합한 제형 및 제제는 당 분야의 통상의 기술자에게 알려져 있다. 예를 들어, 선스크린 용도로 제제화하는 경우, 본 조성물은 라멜라 에멀전, 마이크로에멀전 또는 나노에멀전형태로 할 수 있다. 게다가, 상기 에멀전은 유체 단일 에멀전, 유체 다중 에멀전, 경질 단일 에멀전, 또는 경질 다중 에멀전일 수 있다. 상기 단일 에멀전 또는 다중 에멀전은 분산된 지질 소포 또는 유적을 함유하는 연속 수성 상, 또는 분산된 지질 소포 또는 유적을 함유하는 연속 지방 상을 포함할 수 있다.

[0050] 하나의 구체예에서, 상기 선스크린 용품은 연속 수성상을 가지는 에멀전이며, 제형은 스틱, 로션, 젤, 스프레이 등일 수 있다. 선스크린 에멀전의 형성에 적합한 유화제의 예는

[0051] 당 분야에 알려진 에톡실화 계면활성제, 예를 들어 폴리소르베이트-20, 라우레스(Laureth)-7, Laureth-4, SEPPIC에서 구입가능한 Sepigel(상표명) 305, 식물성 및 광물성 오일과 같은 오일류; 밀납, 파라핀, 왁스, 캔델릴라 왁스 카마우바 왁스 및 이들의 유도체와 같은 동물성 및/또는 합성 왁스; 젤(Gel) SS71, Gel EA2786, 쿼터늄(Quaternium)-18 벤토나이트, 38 CE, Gel ISD V 또는 Gel ISD와 같은 탄화수소 겔 또는 벤토 타 입 겔; 세틸 디메티콘 코폴리올-폴리글리세릴-4-이소스테아레이트-헥실라우레이트 (ABIL® WE 09: Goldschmidt

Chemical Corporation의 제품, 베헤네이트 디메티콘, 세틸 디메티콘 코폴리올 (ABIL® EM 90), (ABIL® EM 97), 라우릴메티콘 코폴리올 (5200), 사이클로메티콘 및 디메티콘 코폴리올 (DC 5225 C 및 DC 3225 C : Momentive Performance Materials Inc.의 제품), 사이클로펜타실록산 및 디메티콘 코폴리올과 같은 오가노실리콘 유화제 (이들은 또한 Momentive Performance Materials, Inc.에서 구입가능함)를 포함한다.

[0052] 가소제들이 또한 썬스크린 제제에 첨가될 수 있으며, 가소제를 첨가하면 얻어지는 제제의 유연성 및 화장료 특성을 향상시킬 수 있다. 가소제는 종종 막형성제의 부서짐 및 크래킹을 방지하기 위하여 사용된다. 가소제의 예는 레시틴, 폴리소르베이트, 디메티콘 코폴리올, 글리콜, 시트레이트 에스테르, 글리세린, 및 디메티콘을 포함한다. 당 분야의 기술자는 일상적으로 원하는 특성, 예상 용도에 기초하여 가소제의 양을 변화시킬 수 있다.

[0053] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 선택적으로 비타민 또는 피부 영양공급제, 모발 영양공급제, 비듬방지 첨가제, 향균제, 항진균제를 함유한다. 이러한 작용제의 바람직한 몇몇 예에는 세라미드, 히알루론산, 판테놀, 펩타이드(구리 펩타이드-3), AHA (락트산), 레티놀 (레티닐 팔미테이트)-비타민A 유도체, 비타민 C (1-아스코르브산), BHA (살리실산), 차 (녹차, 백차, 홍차), 대두 및 기타 식물 유도체, 이소플라본(포도씨 추출물), 아르기렐린(argireline), 아카이 베리(acai berry), 피리딘티온 염, 1-하이드록시-2-피롤리돈 유도체, 2,2'-디티오비스(피리딘-N-옥사이드), 트리할로카바미드, 트리클로산, 클라임아졸, 케토코나졸, 클로크리마졸, 에코나졸, 이소코나졸 및 미코나졸과 같은 아졸 화합물, 셀레늄 설페이트; 비-광합성, 비-결실 사상균들 중 1종 이상의 추출물, 아연 피리티온, 피록톤 올라민, 셀레늄 디설페이트, 황 및 콜타르가 있다.

[0054] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 우선적으로 캐리어, 특히 도포 후에 신속하게 휘발하는 휘발성 캐리어에 혼합된다. 본 발명의 휘발성 캐리어들은 휘발성 탄화수소들, 휘발성 실리콘들 및 이들의 혼합물로 이루어진 군에서 선택된다. 본 발명에 유용한 탄화수소 오일들은 60-260°C 범위의 비점을 가지는 탄화수소 오일들을 포함하며, 더욱 바람직하게 탄화수소 오일들은 약 C8 내지 약 C20의 사슬 길이를 가지는 것이며, 더욱더 바람직하게 C8 내지 C20의 이소파라핀들이다. 가장 바람직한 탄화수소 오일은 이소도데칸, 이소헥사데칸, 이소에오코산, 2,2,4-트리메틸헥탄, 2,3-디메틸헥산 및 이들의 혼합물들로 이루어진 군에서 선택되는 것이다. 바람직한 휘발성 실리콘 유체들은 식 $(R_2SiO)_x$ (여기서 x는 약 3 내지 약 6 임)에 대응하는 3, 4 및 5-원 고리 구조를 가지는 사이클로메티콘, 또는 식 $(R_3SiO(R_2SiO)SiR_3)_n$ 에 대응하는 선형 메티콘을 포함한다.

[0055] 증점 폴리머도 본 발명에 유용할 수 있다. 여기서, "증점 폴리머 (thickening 추출물)"라는 표현은 본 발명의 목적을 위하여 25°C에서 물 또는 에탄올 중에 1중량%의 활성 물질을 함유하는 용액 또는 분산액에서 1 s^{-1} 의 전단 속도(shear rate)에서 0.2 포아즈 보다 큰 점도를 가지는 폴리머를 의미하는 것으로 이해될 것이다. 상기 점도는 써모일렉트론(THERMO ELECTRON)의 HAAKE RS600 점도계로 측정될 수 있다. 상기 점도계는 (예를 들어 60 mm의 직경 및 1도 각도의) 콘-플레이트 지오메트리(cone-plate geometry)를 갖는 스트레스-조절형(controlled-stress) 점도계이다. 증점제의 예는 연합형 증점제, 가교된 아크릴산 호모폴리머, 가교된 (메트)아크릴산과 (C1-C6)알킬 아크릴레이트의 코폴리머; 에스테르 및 아마이드 형태의 에틸렌성 불포화 모노머를 함유하는 비이온성 호모폴리머 및 코폴리머; 암모늄 아크릴레이트 호모폴리머 또는 암모늄 아크릴레이트와 아크릴아미드의 코폴리머; (메트)아크릴아미드(C1-C4)알킬설포산 호모폴리머 및 코폴리머; 가교된 메타크릴로일(C1-C4)알킬트리(C1-C4)알킬암모늄 호모폴리머 및 코폴리머를 포함한다. 미립자상 증점제도 사용될 수 있다. 또는 천연에서 유래한 폴리머 및 발효에 의해 산출된 폴리머도 사용될 수 있으며, 그 예로는 폴리스카라이드 겔, 잔탄 겔, 풀루란 겔, 스크렐로티움 겔, 카라기난 겔, 로커스트 빈 겔, 알지네이트, 젤란 겔, 셀룰로오스, 카복시메틸셀룰로오스, 하이드록시에틸셀룰로오스, 펙틴, 전분, 키토산, 젤라틴 및 이들의 조합이 있다.

[0056] 미립자들이 또한 본 발명의 퍼스널 케어 조성물과 조합하여 사용될 수 있다. 미립자들은 유기 또는 무기 입자이다.

[0057] 무기 입자의 예는 산화 티탄, 티나네이티드 마이카, 산화 지르코늄, 산화아연, 산화세륨, 산화 마그네슘, 황산 바륨, 황산칼슘, 황산마그네슘, 탄산칼슘, 탄산마그네슘, 탈크, 절개한 탈크, 마이카, 카오린, 세리사이트, 무스코바이트, 합성 마이카, 플로코파이트, 레피도라이트, 바이오타이트, 리티아 마이카, 실릭 산, 이산화규소, 폼드 실리카, 합성 이산화규소, 규산알루미늄, 규산마그네슘, 규산알루미늄, 규산마그네슘, 규산 칼슘, 규산 바륨, 규산 스트론튬, 금속 텅스텐산염, 하이드록시아파타이트, 버미큘라이트, 하이ذ라이트, 벤토나이트, 몬모릴로나이트, 헥토라이트, 제올라이트, 세라믹스, 디칼슘 포스페이트, 알루미늄, 수산화 알루미늄, 질화 붕소, 질화붕소 또는 유리로 이루어진 마이크로입자들을 포함한다. 유기 입자의 예는 폴리아미드, 폴리아크릴산/아크릴산 에스테르, 폴리에스테르, 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 폴리스티렌, 스티렌/아크릴산 코폴리머, 디비닐벤젠/

스티렌 코폴리머, 폴리우레탄, 비닐 레진, 우레아 레진, 멜라민 레진, 벤조구아나민, 폴리메틸벤조구아나민, 테트라플루오로에틸렌, 폴리(메틸 메타크릴레이트) 등과 같은 폴리메틸메타크릴레이트, 셀룰로오스, 실크, 나일론, 페놀 레진, 에폭시 레진 또는 폴리카보네이트로 이루어진 분말들을 포함한다.

[0058] 유용한 첨가제들은 pH 조절제/완충제, 및 킬레이트제, 예를 들어 수산화 암모늄, 수산화나트륨, 수산화칼륨, C12-C15 알킬 벤조에이트, 시트르산, 글리콜산, 락트산, 시트르산 나트륨, 트리에탄올아민, 트롤아민, 디소듐 EDTA, 에데테이트 디소듐, 펜타소듐 펜테테이트, 테트라소듐 EDTA, 트리소듐 EDTA를 포함한다.

[0059] 향기 성분들(fragrance ingredients)이 본 발명의 퍼스널 케어 조성물에 혼입될 수 있으며, 그 예로는 디아세틸, 이소아밀 아세테이트, 벤즈알데히드, 신남산 알데히드, 에틸 프로피오네이트, 메틸 안트라닐레이트, 리모넨, 에틸 데카디에노에이트, 알릴 헥사노에이트, 에틸 말톨, 에틸 바닐린, 메틸 살리실레이트, 클레리 추출물, 유칼립투스 글로불루스 오일, 포도 오일, 라다넘 오일, 마스킹 향료(masking fragrance), 매트리카리아 오일, 노필 아세테이트, 페녹시에탄올, 로즈우드 오일, 일랑 일랑 오일, 및 퍼프 오일 등이 있다. 또한, 거론될 수 있는 것은 천연 및/또는 합성 방향 물질들의 퍼프 오일 혼합물이 있다. 천연 방향 물질들은 예를 들어 꽃(릴리, 라벤더, 장미, 자스민, 네롤리, 일랑-일랑) 추출물, 줄기 및 잎(제라늄, 팻초울리, 페티트그레인) 추출물, 과일 (애니시드, 코리안더, 캐라웨이, 주니퍼) 추출물, 과일 껍질(베르가못, 레몬, 오렌지) 추출물, 뿌리 (메이스, 안젤리카, 셀러리, 카다몸, 코스터스, 아이리스, 칼무스) 추출물, 나무 (소나무, 백단향, 유창목, 삼목, 장미목) 추출물, 허브 및 벼과 식물 (사철쭉, 레몬그라스, 세이지, 백리향) 추출물, 침엽 및 잔가지(가문비나무, 소나무, 유럽적송, 마운틴파인) 추출물, 수지 및 발삼 (갈바눔, 엘레미, 안식향, 몰약, 유향, 오포포낙스) 추출물이 있다. 동물성 원료도 포함할 수 있으며, 그 예로는 사향, 비비향 등이 있다. 대표적인 합성 방향 물질의 예는 에스테르, 에테르, 알데히드, 케톤, 알코올 또는 탄화수소 타입의 제품들을 포함한다. 에스테르 타입 방향 물질 화합물의 예는 벤질 아세테이트, 페녹시에틸 이소부티레이트, p-tert-부틸사이클로헥실 아세테이트, 리날릴 아세테이트, 디메틸벤질카비닐 아세테이트, 페닐에틸 아세테이트, 리날릴 벤조에이트, 벤질 포르메이트, 에틸메틸페닐 글리시네이트, 알릴사이클로헥실 프로피오네이트, 스티르알릴 프로피오네이트 및 벤질 살리실레이트를 포함한다.

[0060] 에테르 타입의 예로 벤질 에틸 에테르가 있고; 알데히드 타입의 예로 8 내지 18개의 탄소원자를 가지는 선형 알칸알, 시트랄, 시트로넬랄, 시트로넬릴 옥시아세탈데히드, 사이클라멘 알데히드, 하이드록시시트로넬랄, 릴리알 및 보우르저날이 있으며, 케톤 타입의 예로 이오논(ionones), 이소메틸이오논 및 메틸 세드릴 케톤이 있고; 알코올 타입의 예로 아네톨, 시트로넬롤, 유게놀, 이소유게놀, 게라니올, 리날로올, 페닐 에틸 알코올 및 터피놀이 있으며; 탄화수소 타입의 예로는 테르펜과 발삼이 있다.

[0061] 매력적인 향을 내는, 이들 및 기타 방향 물질들의 조합 혼합물을 사용하는 것이 바람직하다.

[0062] 아로마 성분으로 주로 사용되는, 휘발성이 비교적 낮은 정유(ethereal oil)가 또한 퍼프 오일로 적합하며, 그 예로는 세이지 오일, 샤모일 오일, 클로베 오일, 멜리사 오일, 신나몬 잎 오일, 라임 꽃 오일, 주니퍼 베리 오일, 베티버 오일, 올리바눔 오일, 갈바눔 오일, 라볼라눔 오일, 및 라벤디 오일이 있다. 바람직한 것은 베르가못 오일, 디하이드로미르세놀, 릴리알, 라이랄, 시트로넬롤, 페닐 에틸 알코올, α, α-헥실 신남알데히드, 게라니올, 벤질 아세톤, 사이클라멘 알데히드, 리날로올, 보이삼브렌 포르테, 암브록산, 인돌, 헤디온, 산딜리스, 레몬 오일, 탄제린 오일, 오렌지 오일, 알릴 아밀 글리콜레이트, 사이클로버탈, 라만딘 오일, 머스카텔 세이지 오일, α-다마스콘, 부르봉 제라늄 오일, 사이클로헥실 살리실레이트, 베리토픽스 피호(vertofix coeur), 이소-이-슈퍼(iso-E-Super), 픽솔라이드(Fixolide) NP, 에버닐(evernyl), 이랄데인 감마(iraldein gamma), 페닐아세트산, 제라닐 아세테이트, 벤질 아세테이트, 로즈 옥사이드, 로밀라트(romillat), 이로틸(irotyl) 및 플로라멧(floramat)을 단독으로 사용하거나 조합하여 사용하는 것이다.

[0063] 플레이버 성분들(Flavor ingredients)이 본 발명의 퍼스널 케어 조성물에 사용될 수도 있으며, 그 예로는 스테아릴 글리시리테티베이트, 멘톨, 신나밀 알코올, 아세트산, 이스코르브산, 시트르산, 푸마르산, 락트산, 말산, 인산, 타르타르산, 과일 및 식물 추출물이 있다.

[0064] 피부보호제 및 습윤제(skin protectants and humectants)도 본 발명의 퍼스널 케어 조성물에 사용될 수 있으며, 그 예로는 디메티콘, 펩트올라툼, 글리세린, 암모늄 락테이트, 라놀린, 메틸 글루세스(gluceth)-20, PEG-20, 솔비톨, 1,2,6 헥산트리올, 부틸렌 글리콜, 디프로필렌 글리콜, 글리세린, 헥실렌 글리콜, 판테놀, 파이탄트리올, 판테놀, 프로필렌 글리콜, 소듐 PCA, 솔비톨, 트리에틸렌 글리콜, 폴리글리세릴 솔비톨, 글루코오스, 프룩토즈, 폴리텍스트로즈, 포타슘 피아(potassium pea), 우레아, 수소화 허니, 히알루론산, 이노시톨, 헥산디올 밀납, 헥산트리올 밀납, 가수분해된 엘라스틴, 가수분해된 콜라겐, 가수분해된 실크, 가수분해된 케라

틴, 에리스리톨, 카프릴 글리콜 등이 있다.

[0065] 헤어 컨디셔닝제도 본 발명에서 사용될 수 있으며, 그 예로는 탄화수소계, 실리콘 유체계, 양이온성 물질계 등이 있다. 적합한 탄화수소계는 선형 또는 가지형 사슬을 갖는 것일 수 있고, 약 10 내지 16, 바람직하게 약 12 내지 16의 탄소원자를 함유할 수 있다. 적합한 탄화수소계의 예는 데칸, 도데칸, 테트라데칸, 트리데칸, 및 이들의 혼합물들을 포함한다. 적합한 실리콘 유체계 헤어 컨디셔닝제의 예는 선형 및 사이클릭 폴리디메틸실록산들, 페닐 및 알킬 페닐 실리콘들 및 실리콘 코폴리머들을 포함한다. 본 발명에 유용한 양이온성 물질계 헤어 컨디셔닝제의 예는 4차 암모늄염, 지방아민의 염을 포함한다.

[0066] 네일 컨디셔닝제도 본 발명에 혼입될 수 있으며, 그 예로는 아디프산, 푸마르산, 트리사이클로데칸 디메탄올 코폴리머, AMP-이소스테아로일 가수분해된 실크, 안젤리카 푸르시쥬가(*angelica furcijuga*) 꽃/잎/줄기 추출물, 알-바실러스 리테니포르미스 케라티나제(*r-bacillus licheniformis keratinase*), 비피다/파낙스 인삼 뿌리 세포 배양 추출물 발효 여과액(*bifida/panax ginseng root cell culture extract ferment filtrate*), 비스-아미노프로필 디메티콘/IPDI 코폴리머, 비스-디카프로락톤 에톡시아크릴레이트 IPDI, 비스-hEMA IPDI, 보스웰리아 카르테리(*boswellia carterii*) 검 추출물, 보스웰리아 세라타(*boswellia serrata*) 검 추출물, 칼슘 가수분해된 콜라겐, 카프틸로일 메티오닌/실크 아미노산 메틸 에스테르, 카프틸로일 세린/실크 아미노산 메틸 에스테르, 카울러파 이아세모사(*caulerpa eacemosa*) 추출물, 시트러스 아우란티움 아마라(*citrus aurantium amara*) (비터 오렌지) 과일 즙 추출물, 코멜리나 콤무니스(*commelina communis*) 꽃/잎/줄기 추출물, 콤미포라 미르하(*commiphora myrrha*) 수지 추출물, 디클로로 디하이드록시 디플루오로 에틸클로프로스테놀라니드, 데옥시글루타밀 프록토즈, 디카프로락톤 에톡시아크릴레이트 헤마 이피디(*hema ipdi*), 디카프릴 석시네이트, 디메틸 우레아, 디펜타에리스리틸 헥사아크릴레이트, 디펜타에리스리틸 펜타아크릴레이트, 에치나세아 앵구스티폴리아(*echinacea angustifolia*) 뿌리 추출물, 프라가리아 아나나사(*fragaria ananassa*) (스트로베리) 씨 오일, 푸마르산/무수프탈산/트리사이클로데칸디메탄올 코폴리머, 진교 빌로바 너트(*ginkgo biloba nut*) 추출물, 글리시독 시프로필 트리메톡시실란, 벌꿀 분말, 하이드노카프스 펜탄드루스 케르넬(*hydnocarpus pentandrus kernel*) 오일, 수소화 아세토펜/옥시메틸렌 코폴리머, 가수분해된 콜라겐, 가수분해된 케라틴, 가수분해된 비닐 아세테이트/비닐 아세토아세테이트 코폴리머, 이사티스 틱토티아(*isatis tinctoria*) 뿌리 추출물, 키겔리아 아프리카나(*kigelia africana*) 껍질 추출물, 류칸테뭉 불가레(*leucanthemum vulgare*) 씨 추출물, 로이코노스톡(*leuconostoc*)/알로에바르바덴시스(*aloe barbadensis*) 잎/소르부스 아우크파리아 열매(*sorbus aucuparia fruit*) 발효 여과액, 로벨리아 인플라타(*lobelia inflata*) 추출물, 루피누스 텍센시스(*lupinus texensis*) 씨 추출물, 리시움 바르바룸(*lycium barbarum*) 열매 추출물, 멘타 아쿠라티카(*mentha aquatica*) 추출물, 메타크릴로일에틸 포스페이트, 메틸렌 글리콜, 2-메틸프로판알, 모모르디카 차란티아(*momordica charantia*) 추출물, 나르시수스 슈도-나르시수브(*narcissus pseudo-narcissus*) (수선화) 뿌리 추출물, 오펜티아 투나(*opuntia tuna*) 잎 추출물, 오펜티아 불가리스(*opuntia vulgaris*) 열매 추출물, 팔미틸로일 올리고펩타이드-70, 팔미틸로일 세린/실크 아미노산 메틸 에스테르, 파셀로스 불가리스(*phaseolus vulgaris*) (강낭콩) 추출물, 플록스 드루몬디(*phlox drummondii*) 씨 추출물, 폴리아크릴레이트-12, 폴리아크릴레이트-30, 폴리에스테르-18, 로사(*rosa*) (아메리칸 뷰티) 추출물, 로사 보르보니아나(*rosa borboniana*) 추출물, 로사 록스버그히(*rosa roxburghii*) 씨 오일, 루드베키아 히르타(*rudbeckia hirta*) 씨 추출물, 실버 카프(*silver carp*) 추출물, 소듐 칼슘 아연 포스페이트, 소르부스 아우크파리아(*sorbus aucuparia*) 씨 오일, r-스파이더 폴리펩티드-1(*r-spider polypeptide-1*), r-스파이더 폴리펩티드-2, 운데세노일 세린/실크 아미노산 메틸 에스테르, 박시늄 미르틸러스(*vaccinium myrtillus*) 잎 추출물, 비닐 알코올/비닐포름아미드 코폴리머, 비스텀 알BUM(*viscum album*) (겨우살이) 추출물 등이 있다.

[0067] 양이온성 폴리머가 본 발명의 퍼스널 케어 조성물에 사용될 수 있으며, 그 예는 구아 하이드록시프로필트리모늄 클로라이드 및 하이드록시프로필 구아 하이드록시프로필트리모늄 클로라이드와 같은 양이온성 구아 검 유도체가 있으며, 이는 룽플랑(Rhone-Poulenc)에서 재규어(Jaguar: 상표명) 시리즈로 구입가능하다.

[0068] 자외선 흡수제(UV 흡수제)도 본 발명의 퍼스널 케어 조성물에 유용하며, 자외광에 의해 유도된 화학적 또는 물리적 변질로부터 본 조성물을 보호하는데 이용된다. 선스크린제 등과 같은 UV 흡수제는 입사하는 자외 방사선을 손상이 덜한 적외 방사선(열)으로 변환시키는 능력이 있다. 적합한 UV 흡수제의 예는 아세트아미노살을(아세트아미노살을), 알란토인 PABA, 벤잘프탈라이드, 벤조페논, 벤조페논-1, 벤조페논-2, 벤조페논-3, 벤조페논-4, 벤조페논-5, 벤조페논-6, 벤조페논-7, 벤조페논-8, 벤조페논-9, 벤조페논-10, 벤조페논-11, 및 페논-12와 같은 벤조페논류, 벤조트리아졸릴 도데실 p-크레졸, 3-벤질리덴 캄포, 벤질리덴캄포 가수분해된 콜라겐 설펜아미드, 벤질리덴 캄포 설펜산, 벤질 살리실레이트, 비스-에틸헥실옥시페놀 메톡시페닐 트리아진, 보르넨론,

부메트리졸, 부틸 메톡시디벤조일메탄, 부틸 PABA, 칼로필룸 이노필룸(Callophyllum inophyllum) 씨 오일, 카멜리아 지넨시스(camellia sinensis) 잎 추출물, 카로테노이드, 세리아/실리카, 세리아/실리카 탈크, 시녹세이트, 테아-메톡시신나메이트, 디벤족사조일 나프탈렌, 디-t-부틸 하이드록시벤질리덴 캄포, 디에틸헥실 부타미도 트리아존, 디에틸헥실 2,6-나프탈레이트, 디갈로일 트리올레에이트, 디이소프로필 메틸 신나메이트, 1-(3,4-디메톡시페닐)-4,4-디메틸-1,3-펜탄디엔, 디메틸 PABA 에틸 세테아릴디모니움 토실레이트, 디모폴리노피리다지논, 디페닐 카보메톡시 아세톡시 나프토피란, 디소듐 비스에틸페닐 트리아미노트리아진 스틸베네디설포네이트, 디소듐 디스티릴비페닐 디설포네이트, 디소듐 페닐 디벤즈이미다졸 테트라설포네이트, 드로메트리졸, 드로메트리졸 트리실록산, 에스쿨린, 에틸 디하이드록시프로필 PABA, 에틸 디이소프로필신나메이트, 에틸헥실 디메톡시벤질리덴 디옥소이미다졸리딘 프로피오네이트, 에틸헥실 디메틸 PABA, 에틸헥실 페롤레이트, 에틸헥실 메톡시신나메이트, 에틸헥실 살리실레이트, 에틸헥실 트리아존, 에틸 메톡시신나메이트, 에틸 PABA, 에틸 우로카네이트, 에토크릴렌, 페룰산, 4-(2-메타-글루코피라노실록시) 프로폴시-2-하이드록시벤조페논, 글리세릴 에틸헥사노에이트 디메톡시신나메이트, 글리세릴 PABA, 글리콜 살리실레이트, 헥산디올 살리실레이트, 호모살레이트, 가수분해된 루핀 단백질(lupine protein), 이소아밀 p-메톡시신나메이트, 이소펜틸 트리메톡시신나메이트 트리실록산, 이소프로필벤질 살리실레이트, 이소프로필 디벤조일메탄, 이소프로필 메톡시신나메이트, 멘틸 안트라닐레이트, 멘틸 살리실레이트, 4-메틸벤질리덴 캄포, 메틸렌 비스-벤조트리아졸릴 테트라메틸부틸페놀, 옥토크릴렌, 옥트리졸, PABA, PEG-25 PABA, 펜틸 디메틸 PABA, 페닐벤즈이미다졸 설펜산, 피누스 피나스터(pinus pinaster) 껍질 추출물, 폴리아크릴아미도메틸 벤질리덴 캄포, 폴리실리콘-15, 포타슘 메톡시신나메이트, 포타슘 페닐벤즈이미다졸 설포네이트, 레드 펠트올라툼(Red petrolatum), 소듐 벤조트리아졸릴 부틸페놀 설포네이트, 소듐 이소페롤레이트, 소듐 페닐벤즈이미다졸 설포네이트, 소듐 우로카네이트, 스피룰리나 플라텐시스(Spirulina platensis) 분말, TEA-페닐벤즈이미다졸 설포네이트, TEA-살리실레이트, 테레프탈릴리덴 디캄포 설펜산, 테트라부틸 페닐 하이드록시벤조에이트, 이산화티탄, 토크트리에놀, 트리PABA 판테놀, 우로칸산, 비닐 아세테이트/크로토네이트/메타크릴옥시벤조페논-1 코폴리머 및 비티스 비니페라(Vitis vinifera) (포도) 씨 추출물, 및 SPF 향상제(enhancers)와 같은 폴리머 비드 또는 중공구를 포함한다.

[0069] 진술한 UV 흡수제와 SPF 향상제의 조합이 UV 보호를 향상시킬 수 있으며, SPF 향상제의 예는 스티렌/아크릴레이트 코폴리머 실리카 비드, 스페로이달(spheroidal) 마그네슘 실리케이트, 스페로이달 폴리아미드 분말, 예를 들어 n-락탐 폴리머 [orgasol(상표명) 레인지, 엘프 아토캠(elf atochem)], 가교된 폴리메틸메타크릴레이트(pmma; micopearl m305 seppic) 등이 있다. 홀로스피어(Holosphere) 첨가제 [Sunspheres(상표명) ISP, Silica Shells Kobo.]는 방사를 편향시키고, 이에 따라 광자의 유효 패스 길이가 길어진다 (EP0893119). 몇몇 비드는 바르는 동안 소프트한 감촉을 제공한다. 또한, 이러한 비드(예를 들어 Micropearl M305)의 광학 활성은 반사현상을 줄이는 것으로 피부 빛남을 조정할 수 있고, 간접적으로 UV광을 산란시킬 수 있다.

[0070] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 또한 공기 통상의 가소제를 함유할 수도 있으며, 이러한 가소제는 이를 배합한 제제의 유연성 및 화장료 특성을 향상시킬 수 있다. 가소제는 막 형성제의 부서짐 및 크래킹을 방지하기 위하여 종종 사용되며, 그 예로는 레시틴, 폴리소르베이트, 디메티콘 코폴리올, 글리콜, 시트레이트 에스테르, 글리세린, 및 디메티콘 등이 있다. 당 분야의 기술자는 특정 퍼스널 케어 조성물의 제제화 및 소망 특성에 따라 일상적으로 가소제의 양을 변화시킬 수 있다.

[0071] 본 발명의 퍼스널 케어 조성물은 우선적으로 캐리어, 특히 도포 후에 신속하게 휘발하는 휘발성 캐리어에 혼입된다. 본 발명의 휘발성 캐리어들은 휘발성 탄화수소들, 휘발성 실리콘들 및 이들의 혼합물로 이루어진 군에서 선택된다.

[0072] 본 발명에 유용한 탄화수소 오일들은 60-260℃ 범위의 비점을 가지는 탄화수소 오일들을 포함하며, 더욱 바람직하게 탄화수소 오일들은 약 C8 내지 약 C20의 사슬 길이를 가지는 것이며, 더더욱 바람직하게 C8 내지 C20의 이소파라핀들이다. 가장 바람직한 탄화수소 오일은 이소도데칸, 이소헥사데칸, 이소에오칸, 2,2,4-트리메틸펜탄, 2,3-디메틸헥산 및 이들의 혼합물들로 이루어진 군에서 선택되는 것이다.

[0073] 바람직한 휘발성 실리콘 유체들은 식 $(R_2SiO)_x$ (여기서 x는 약 3 내지 약 6 임)에 대응하는 3, 4 및 5-원 고리 구조를 가지는 사이클로메티콘, 또는 식 $(R_3SiO(R_2SiO)Si_{R3})$ 에 대응하는 선형 메티콘을 포함한다.

[0074] 비교예 1-8: 실시예 1-9

[0075] 본 발명을 실시예를 참조하여 설명하나 이에 제한되는 것을 아니다. 하기 실시예 1 내지 9는 본 발명에 따르는

대표적인 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)들의 제조를 예시한 것이고, 립 칼라 제제들을 하기 실시예 4-9의 이온성 실리콘 (I)으로 제조하였다. 하기 비교예 1-8은 본 발명의 범위에서 벗어난 실리콘의 제조를 예시한 것이고, 이를 함유하는 립 칼라 제제들이 본 발명을 예시하기 위한 것이 아니라 단지 비교 목적으로 제조되었다.

[0076] 비교예 1

[0077] 모노-캡핑된 실폰화 폴리디메틸실록산의 제조.

[0078] 3-목 500 mL 플라스크에 10.0 g (67.5 mmol)의 1,1,1,3,3 펜타메틸디실록산, 9.5 g (81.0 mmol)의 알파-메틸스티렌 및 1.9×10^{-4} g의 백금 촉매를 투입하였다. 그 결과로 얻어진 혼합물을 질소 분위기 하에 가열하면서 115°C에서 48시간 동안 가열하였다. ^1H NMR에서 실리콘 하이드라이드 피크의 사라짐으로 하이드로실릴화의 완료를 나타내었다. 그 결과로 얻어진 혼합물을 150°C의 오일 베스에 2시간 동안 넣어두고 진공 스트리핑하여 미반응 알파메틸스티렌을 제거하여, 17.0 g (95%)의 아틸-치환 디실록산을 수득하였다.

[0079] 5.32 g (20.0 mmol)의 상기 아틸-치환 실록산에 1.0 mL 디클로로메탄에 용해된 4.66 g (40.0 mmol)의 클로로설포산을 30분에 걸쳐 적하식으로 투입하면서 그 혼합물을 주위 온도에서 교반하였다. 그 결과로 얻어진 혼합물을 추가로 30분동안 계속 교반하였다. 상기 반응의 완료는 ^1H NMR에서 파라-치환 방향족 프로톤 피크의 사라짐으로 표시되는 방향족 고리의 전제 설포화로 측정하였다.

[0080] 다음, 얻어진 혼합물을 진공 스트리핑하여 디클로로메탄과 기타 휘발성 물질, 예를 들어 클로로설포산 및 염산을 제거하여 암갈색 점성 액체로 설포화 사이클로테트라실록산을 산출하였다.

[0081] 이 설포화 디실록산에, 118.6 g (400.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 주위 온도에서 계속 교반하면서 첨가하였다. 6시간 반응 후에, ^{29}Si NMR은 ~82%의 평형을 보여주었다. 이 포인트에서, 반응혼합물에 12.0 g의 트리에탄올 아민을 첨가하고 추가로 1시간 동안 계속 교반하였다. 그 결과로 얻어진 혼합물을 하룻밤 동안 진공 스트리핑하여 D4, D5, 등과 같은 휘발성 사이클릭 실론산들을 제거하였다. 마침내, 116.0 g의 생성물이 점성 오일로 회수되었다. 수득한 폴리머의 점도는 20°C에서 HAAKE 레오미터(Rheometer)에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 3.3 Pas이었다.

[0082] 비교예 2

[0083] 술포베타인-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0084] 3-목 500 mL 둥근-바닥 플라스크에 237.3 g (800.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산, 5.36 g (40.0 mmol)의 1,1,3,3 테트라메틸디실록산 및 3.0 g의 산성 IER 262 (이온교환수지)를 투입하였다. 얻어진 혼합물을 60°C에서 6시간 동안 계속 교반하였다. 다음, 이 반응혼합물을 여과하고 진공 스트리핑하여 저비점 실리콘을 제거하고, 201.0 g (83%)의 하이드라이드-말단 폴리디메틸실록산을 수득하였다.

[0085] 3-목 250 mL 플라스크에 72.0 g (10.0 mmol)의 상기 하이드라이드-말단 폴리디메틸실록산, 2.5 g (22.0 mmol)의 알릴글리시딜에테르 및 1.0×10^{-4} g의 백금촉매를 투입하였다. 얻어진 혼합물을 질소 분위기 하에 계속 교반하면서 70°C에서 24시간 동안 가열하였다. 알릴글리시딜에테르의 완전한 하이드로실릴화는 ^1H NMR에서 실리콘 하이드라이드 피크의 사라짐으로 측정하였다. 다음, 얻어진 혼합물을 150°C에서 2시간 동안 오일 베스에 넣어두고 진공 스트리핑하여 미반응 알릴글리시딜에테르를 제거하고, 74.0 g의 글리시딜에테르-말단 폴리실록산을 수득하였다.

[0086] 74.0 g (10.0 mmol)의 상기 글리시딜에테르-말단 폴리실록산, 2.1 g (20.0 mmol)의 디에탄올 아민 및 0.1 g의 티타늄 이소프로폭사이드를 연속하여 첨가하였다. 다음, 얻어진 혼합물을 80°C에서 24시간 동안 계속 교반하였다. 이 혼합물에, 2.72 g (20.0 mmol)의 부탄 술포(butane sulfone)를 첨가하고 추가 24시간 동안 80°C에서 교반하여 79 g의 술포베타인-캡핑된 폴리디메틸실록산을 수득하였다. 수득한 폴리머의 점도는 20°C에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 56.8 Pas이었다.

[0087] 비교예 3

[0088] 트리메틸실릴-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0089] 3-목 500 mL 플라스크에 0.162 g (1.0 mmol)의 헥사메틸디실록산, 148.3 g (500.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산 및 1.5 g의 N-촉매 (테트라메틸암모늄 실록사놀레이트)를 투입하였다. 반응 혼합물을 오일 베스에

정치하여 80℃에서 계속 교반하였다. 8 시간의 반응 후에, 조 반응 혼합물의 고체 함량 분석에서 ~87%의 평형을 보여주었다. 다음, 전체 반응 혼합물을 150℃에서 2 시간 동안 진공 스트리핑하여 휘발성 사이클릭 실록산을 제거하였다. 최종적으로, 130.0 g의 트리메틸실릴-캡핑된 폴리디메틸실록산이 맑은 검 상태로 수득하였다. 상기 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 236.2 Pas이었다.

[0090] 비교예 4

[0091] 펜던트 소듐 설퍼네이트-관능성 폴리오가노실록산의 제조.

[0092] 하기 실시예 2에서 수득한 설퍼산-관능 사이클로테트라실록산 5.7 g (8.0 mmol)에, 474.7 g (1600.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산 및 2.96 g (16.0 mmol)의 1,1,3,3-테트라메틸-1,3-디비닐디실록산을 첨가하고 주위 온도에서 연속 교반하였다. ~87 중량%의 선형 실록산의 평형에 도달한 후에, 반응 혼합물을 70℃에서 10.0 g (128.0 mmol)의 합습 중탄산나트륨을 사용하여 중화시켰다. 감압에서 상기 반응혼합물을 진공 스트리핑하여 밀크같은 오일 형태의 생성물 411.0g을 수득하였다. 상기 생성물의 NMR 분석은 수득된 폴리머가 펜던트-설퍼화 폴리디메틸실록산임을 보여주었다. 상기 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 5.0 Pas이었다.

[0093] 비교예 5

[0094] 펜던트 소듐 설퍼네이트-관능 폴리오가노실록산의 제조.

[0095] 하기 실시예 2에서 수득한 설퍼산-관능 사이클로테트라실록산 5.7 g (8.0 mmol)에, 474.7 g (1600.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산 및 14.8 g (80.0 mmol)의 1,1,3,3-테트라메틸-1,3-디비닐디실록산이 첨가되고 주위 온도에서 연속 교반하였다. ~87 중량%의 선형 실록산의 평형에 도달한 후에, 반응 혼합물을 70℃에서 10.0 g (128.0 mmol) 합습 중탄산 나트륨을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응 혼합물을 진공 스트리핑하여 점성 검 상태의 생성물 427.0 g을 수득하였다. 생성물의 NMR 분석은 수득된 폴리머가 펜던트-설퍼화 폴리디메틸실록산임을 보여주었다.

[0096] 비교예 6

[0097] 소듐 카복실레이트-관능 폴리오가노실록산의 제조.

[0098] 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크에 184.28 g (1M)의 운데세노산 및 300 ml의 톨루엔을 투입하였다. 이 용액을 70℃로 가열하고, 여기에 80.7 g (0.5M)의 헥사메틸디실라잔을 2시간에 걸쳐 첨가하였다. 얻어진 용액을 70-80℃에서 4 시간 동안 계속 교반하였다. 이 용액을 스트리핑하여 용매를 제거하고, 반응 매스(reaction mass)를 1-5 Hg 압력 및 150-160℃에서 감압 증류하여, 운데세노산 트리메틸실릴에스테르 (A)를 수득하였다. 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크에 1.34 g (0.01 M)의 테트라메틸디실록산, 296.6 g (1M)의 옥타메틸사이클로테트라실록산 및 6 g의 산성 이온교환수지를 투입하였다. 이 용액을 55-60℃에서 12 시간동안 계속 교반하여, 하이드라이드-말단 실록산 (B)를 수득하였다.

[0099] 응축기가 장치된 1000 ml 30목 둥근 바닥 플라스크에 5.1 g (0.016 M)의 상기 화합물 (A), 237.8 g (0.008M)의 상기 화합물 (B) 및 0.0003 g의 백금 카스테트 촉매(Platinum Karstedt's catalyst)를 투입하고, 이 용액을 90℃에서 8시간 동안 계속 교반하였다. 후속의 중탄산나트륨에 의한 디프로텍션(deprotection) 및 중화후, 소듐 카복실레이트-관능 폴리디메틸실록산을 수득하였다. 이 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 18 Pas이었다.

[0100] 비교예 7

[0101] 소듐 포스페이트-관능 폴리오가노실록산의 제조.

[0102] 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크 플라스크에 256.3 g (2M) 알릴글리시딜에테르 및 0.0003 g 백금 카스테트 촉매를 투입하고, 이 용액을 70℃로 가열하였다. 이 용액에, 134.3 g (1M)의 테트라메틸디실록산을 70-75℃에서 6시간에 걸쳐 적하식으로 첨가하고, 90℃에서 6시간 동안 추가로 교반하여, 에폭시-관능 테트라메틸디실록산을 수득하였다.

[0103] 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크 플라스크에 3.9 g (0.03M)의 상기 생성물, 296.6 g (1M)의 옥타메틸디실록산 및 6 g의 산성 이온교환수지를 투입하고, 이 용액을 70℃에서 16 시간 동안 연속 교반하여 에폭시-관능 폴리디메틸실록산을 수득하였다.

- [0104] 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크 플라스크에 150 g (0.005M)의 상기 생성물 및 1.2 g (0.01 M)의 인산 (85%)을 투입하고, 이 용액을 85-90℃에서 4 시간 동안 계속 교반하였다. 다음, 이 용액을 약 15℃로 냉각하고, 여기에 1 ml의 물에 용해된 0.8 g (0.02M) 수산화나트륨 용액을 첨가하고 15-20℃에서 2시간 동안 교반하여, 소듐 포스페이트-관능 폴리디메틸실록산을 수득하였다. 이 생성물의 NMR 분석은 수득된 폴리머가 포스페이트-관능화된 폴리오가노실록산임을 보여주었다.
- [0105] **비교예 8**
- [0106] 소듐 카복실레이트-관능 폴리오가노실록산의 제조.
- [0107] 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크 플라스크에 184.28 g (1M)의 운데세노산 및 300 ml의 톨루엔을 투입하였다. 이 용액을 70℃로 가열한 다음 80.7 g (0.5M)의 헥사메틸디실라잔을 2 시간에 걸쳐 투입하였다. 얻어진 용액을 70-80℃에서 4시간 동안 계속 교반하였다. 이 용액에서 용매 및 저비점 물질을 스트리핑하고, 반응 매스를 1-5 mm Hg 진공 및 150-160℃에서 증류하여 운데세노산 트리메틸실릴에스테르 (A)을 수득하였다.
- [0108] 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크 플라스크에 6.7 g (0.05M)의 테트라메틸디실록산, 185.4 g (0.625M)의 옥타메틸사이클로테트라실록산 및 5 g의 산성 이온교환수지를 투입하였다. 이 용액을 55-60℃에서 12 시간 동안 연속교반하여 하이드라이드-말단 실록산 (B)을 수득하였다.
- [0109] 응축기가 장치된 1000 ml 3-목 둥근 바닥 플라스크 플라스크에 10.3 g (0.04 M)의 상기 화합물 (A), 76.4 g (0.02 M)의 상기 화합물 (B) 및 0.0001 g의 백금 카스테트 촉매를 투입하고, 이 용액을 8 h at 90℃에서 8시간 동안 계속 교반하였다. 이어서, 중탄산 나트륨으로 디프로텍션 및 중화하여 소듐 카복실레이트-관능 폴리디메틸실록산을 수득하였다. 수득된 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정하바, 10 rad/s의 전단 속도에서 283 Pas이었다.
- [0110] **실시예 1**
- [0111] 설폰산-관능 테트라메틸디실록산의 제조.
- [0112] 응축기가 장치된 3-목 500 mL 플라스크에 18.16 g (154.0 mmol)의 알파-메틸스티렌 및 27.2×10^{-5} g의 백금 촉매를 투입하였다. 그 결과로 얻어진 혼합물의 온도를 115℃로 승온한 후에, 9.40 g (70.0 mmol)의 1,1,3,3-테트라메틸디실록산을 하이드로실릴화 반응이 완료될 때까지 연속적인 교반 하에 적하식으로 첨가하였다. 하이드로실릴화의 완료는 ^1H NMR에서 실리콘 하이드라이드 피크의 사라짐으로 지시되었다. 그 결과로 얻어진 혼합물을 150℃의 오일 베스에 2 시간 동안 정치하면서 진공 스트리핑하여 미반응 알파-메틸스티렌을 제거하고, 23.2 g의 아르알킬렌-치환 디실록산을 수득하였다 (수율 : 90%).
- [0113] 이 아르알킬렌-치환 디실록산 (23.2 g, 62.4 mmol)에 29.6 g (252.8 mmol)의 클로로설폰산을 30분에 걸쳐 적하식으로 첨가하면서 주위 온도에서 연속 교반하였다. 추가로 30 분 더 교반하였다. 이 반응의 완료는 ^1H NMR에서 파라-치환 방향족 프로톤 피크의 사라짐으로 표시되는 방향족 고리의 완전 설폰화로 측정하였다. 감압하에 반응 혼합물을 진공 스트리핑하여, 갈색의 점성 오일 상태의 33.0 g의 설폰화 디실록산을 수득하였다.
- [0114] **실시예 2**
- [0115] 설폰산-관능 테트라메틸테트라사이클로실록산의 제조.
- [0116] 3-목 500 mL 플라스크에 70.08 g (60.0 mmol)의 알파-메틸스티렌 및 10.0×10^{-4} g의 백금촉매를 투입하였다. 얻어진 혼합물의 온도를 115℃로 승온한 후에, 30.0 g (120.5 mmol)의 1,3,5,7-테트라메틸사이클로테트라실록산을 연속 교반하에 적하식으로 첨가하였다. 반응의 진행과정은 ^1H NMR로 모니터하였다. 12 시간의 반응 후에, ^1H NMR은 실리콘 하이드라이드의 완전 전화를 보여주었다. 다음, 반응 혼합물을 150 ℃에서 2시간 동안 진공 스트리핑하여 미반응 알파-메틸스티렌을 제거하고 80.5 g의 아르알킬렌-치환 사이클로테트라실록산을 수득하였다 (수율: 95%).
- [0117] 14.24 g (20.0 mmol)의 상기 아르알킬렌-치환 사이클로테트라실록산에 4.0 mL 디클로로메탄에 용해된 18.64 g (160.0 mmol)의 클로로설폰산을 30분에 걸쳐 적하하면서 주위 온도에서 계속 교반하였다. 반응 혼합물을 추가로 30분 더 교반하였다. ^1H NMR에서 파라-치환 방향족 프로톤 피크의 사라짐으로 표시된 방향족 고리의 완전 설폰

폰화로 반응의 완료를 보여주었다. 감압하에 반응 혼합물의 진공 스트리핑하여 갈색 점성 검 상태의 설폰산-관능 사이클로테트라실록산 20.6 g을 수득하였다.

[0118] 실시예 3

[0119] 소듐 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0120] 3-목 500 mL 플라스크에 42.4 g (80.0 mmol)의 상기 실시예 1의 설폰화 디실록산 및 118.0 g (400.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 투입하였다. 반응 혼합물을 오일 베스에 정치하고 주위 온도에서 연속 교반하였다. ~87 중량%의 선형 실록산들의 평형에 도달한 후, 반응 혼합물을 70℃에서 26.88 g (320.0 mmol)의 합습 중탄산 나트륨을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응 혼합물을 진공 스트리핑하여 기대한 생성물을 백색 고체로 수득하였다. 생성물의 NMR 분석결과 생성된 폴리머는 설폰화-캡핑된 폴리디메틸실록산이었다.

[0121] 실시예 4

[0122] 소듐 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0123] 3-목 500 mL 플라스크에 21.2 g (40.0 mmol)의 실시예 1의 설폰화 디실록산 및 118.0 g (400.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 투입하였다. 반응 혼합물을 오일 베스에 정치하고 주위 온도에서 연속 교반하였다. ~87 중량%의 선형 실록산들의 평형에 도달한 후, 반응 혼합물을 70℃에서 13.44 g (160.0 mmol)의 합습 중탄산 나트륨을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응혼합물을 진공 스트리핑하여 점성 검 상태의 생성물 123.4 g을 수득하였다. 생성물의 NMR 분석결과 생성된 폴리머는 설폰화-캡핑된 폴리디메틸실록산이었다. 이 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 1325 Pas이었다.

[0124] 실시예 5

[0125] 소듐 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0126] 3-목 500 mL 플라스크에 10.6 g (20.0 mmol)의 상기 실시예 1의 설폰화 디실록산 및 118.0 g (400.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 투입하였다. 반응 혼합물을 오일 베스에 정치한 상태로 주위 온도에서 연속 교반하였다. ~87 중량%의 선형 실록산들의 평형에 도달한 후, 반응 혼합물을 70℃에서 6.7 g (80.0 mmol)의 합습 중탄산나트륨을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응혼합물을 진공 스트리핑하여 점성 검 상태의 생성물 112.0 g을 수득하였다. 생성물의 NMR 분석은 생성된 폴리머가 설폰화-캡핑된 폴리디메틸실록산임을 보여주었다. 생성된 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 1230 Pas이었다.

[0127] 실시예 6

[0128] 소듐 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0129] 3-목 250 mL 플라스크에 2.12 g (4.0 mmol)의 상기 실시예 1의 설폰화 디실록산 및 59.3 g (200.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 투입하였다. 반응 혼합물을 오일 베스에 정치한 상태로 주위 온도에서 연속 교반하였다. ~87 중량%의 선형 실록산들의 평형에 도달한 후, 반응 혼합물을 70℃에서 1.4 g (16.0 mmol)의 합습 중탄산나트륨을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응혼합물을 진공 스트리핑하여 점성 검 상태의 생성물 53.0 g을 수득하였다. 생성물의 NMR 분석은 생성된 폴리머가 설폰화-캡핑된 폴리디메틸실록산임을 보여주었다. 생성된 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 100 Pas이었다.

[0130] 실시예 7

[0131] 소듐 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0132] 3-목 250 mL 플라스크에 1.1 g (2.0 mmol)의 상기 실시예 1의 설폰화 디실록산 및 59.3 (200.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 투입하였다. ~87 중량%의 선형 실록산들의 평형에 도달한 후, 반응 혼합물을 70℃에서 0.7 g (8.0 mmol)의 합습 중탄산나트륨을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응혼합물을 진공 스트리핑하여 점성 검 상태의 생성물 49.0 g을 수득하였다. 생성물의 NMR 분석은 생성된 폴리머가 설폰화-캡핑된 폴리디메틸실록산임을 보여주었다. 생성된 폴리머의 점도는 20℃에서 HAAKE 레오미터에서 측정한바, 10 rad/s의 전단 속도에서 53 Pas이었다.

[0133] 이와 유사하게, 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산 (PDMS)의 갈슘, 마그네슘, 아연, 은 및 코발트 염들이 설폰산-캡핑된 폴리디메틸실록산과 상기 각각의 산화물 간의 중화를 통해 합성되었다.

[0134] 실시예 8

[0135] 소듐 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0136] 3-목 250 mL 플라스크에 0.55 g (1.0 mmol)의 상기 실시예의 설포화 디실록산 및 148.3 g (500.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 투입하였다. ~87 중량%의 선형 실록산들의 평형에 도달한 후, 반응 혼합물을 70 °C에서 0.4 g (4.0 mmol)의 함습 중탄산나트륨을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응혼합물을 진공 스트리핑하여 점성 검 상태의 생성물 132.0 g을 수득하였다. 생성물의 NMR 분석은 생성된 폴리머가 설포화-캡핑된 폴리디메틸실록산임을 보여주었다. 생성된 폴리머의 점도는 20°C에서 HAAKE 레오미터에서 측정하바, 10 rad/s의 전단 속도에서 1209 Pas이었다.

[0137] 실시예 9

[0138] 트리에탄올암모늄 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산의 제조.

[0139] 3-목 500 mL 플라스크에 10.6 g (20.0 mmol)의 실시예 1의 설포산 관능 디실록산 및 118.0 g (400.0 mmol)의 옥타메틸테트라사이클로실록산을 투입하였다. 반응 혼합물을 오일 배스에 정치한 상태로 주위 온도에서 연속 교반하였다. ~87 중량%의 선형 실록산들의 평형에 도달한 후, 반응 혼합물을 70 °C에서 8.56 g (80.0 mmol)의 트리에탄올 아민을 사용하여 중화하였다. 감압하에 반응혼합물을 진공 스트리핑하여 점성 검 상태의 생성물 114.0 g을 수득하였다. 생성물의 NMR 분석은 생성된 폴리머가 설포화-캡핑된 폴리디메틸실록산임을 보여주었다. 생성된 폴리머의 점도는 20°C에서 HAAKE 레오미터에서 측정하바, 10 rad/s의 전단 속도에서 5399 Pas이었다.

[0140] 비교 목적으로, 립 칼라 제제들(lip color formulations: LCFs)을 비-관능화된 실리콘 비교예 1-8의 실리콘을 혼입시켜 제조하고 (LCF 1 내지 LCF 15), 실시예 4-9의 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)들을 혼입한 LCF (LCF 16 내지 LCF 26)와 비교하였다. 상기 LCF의 성능특성들 [전달 저항성(Transfer Resistance), 내수성(Water Resistance), 태키니스(Tackiness), 광택(Gloss), 및 경피수분손실량(Trans Epidermal Water Loss)]을 후술하는 바와 같이 평가하였다.

[0141] 표 1. LCF 1 및 LCF 2(대조구: 관능화되지 않거나 이온성 실리콘이 없음), LCF 3 내지 LCF 15 (비교예 1 내지 8의 실리콘들); LCF 1 내지 LCF 15의 나머지 성분들.

표 1

[0142]

	LCF														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
실리콘 종류 및 양(g)															
비교예 1						2.5									
비교예 2					2.5										
비교예 3			2.5	1											
비교예 4							2.5	1							
비교예 5									2.5	1					
비교예 6											2.5	1.0			
비교예 7													2.5	1.0	
비교예 8															2.5
나머지 다른 성분 및 양(g)															
*SE30(PDMS 겔)	2.5	1													
*SR100 (실리콘 레진)		1.5	-	1.5	-	-	-	1.5	-	1.5	-	1.5	-	1.5	-
*Bentone GEL VS-5PC V (증점제)	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81
*IDD (용매)	4	4	4	4	4	4	-	-	-	-	-	-	-	-	-
*D5 (용매)							4	4	4	4	4	4	4	4	4
*Red Shade Dispersion "GE" (안료)	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4	2.4
*TiO ₂ -MT100 TV (안료)	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29	0.29
탈이온수					1.24	1.24					1.24	1.24	1.24	1.24	1.24

*글리세린 (습윤제)							1.24	1.24	1.24	1.24					
(주): SE30, SR100 및 D5 - Momentive Performance Materials, Inc. 제품; Bentone GEL VS-5PC V - Elementis Specialties Inc. 제품; IDD - Presperse LLC 제품; Red Shade Dispersion "GE" - International Foodcraft Corp. 제품; TiO ₂ -MT100 TV - Tri-K Industries 제품; 글리세린 - Sigma-Aldrich Inc. 제품															

표 2. LCF 16 내지 LCF 26 (실시예 4 내지 9의 이온성 실리콘들); LCF 16 내지 LCF 26의 나머지 성분들.

표 2

	LCF											
	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	
이온성 실리콘 종류 및 양(g)												
실시예 4	2.50	1.00										
실시예 5			1.00					2.50	1			
실시예 6				1.00								
실시예 7					1.00					2.50	1	
실시예 8						1.00						
실시예 9							2.50					
나머지 다른 성분 및 양(g)												
*SR100 (실리콘 레진)		1.50	1.50	1.50	1.5	1.5		-	1.5	-	1.5	
*Bentone GEL VS-5PC V (중점제)	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	0.81	
*IDD (용매)	4.00	4.00	4.00	4.00	4	4	4	-	-	-	-	
*D5 (용매)								4.00	4	4	4	
*Red Shade Dispersion "GE" (안료)	2.40	2.40	2.40	2.40	2.4	2.4	2.4	2.40	2.4	2.4	2.4	
*TiO ₂ -MT100 TV (안료)	0.29	0.29	0.29	0.29	0.3	0.3	0.3	0.29	0.29	0.29	0.29	
탈이온수	1.24	1.24					1.24					
*글리세린(습윤제)								1.24	1.24	1.24	1.24	
(주): SR100 및 D5 - Momentive Performance Maerials, Inc. 제품; Bentone GEL VS-5PC V - Elementis Specialties Inc. 제품; IDD - Presperse LLC 제품; Red Shade Dispersion "GE" - International Foodcraft Corp. 제품; TiO ₂ -MT100 TV - Tri-K Industries 제품; 글리세린 - Sigma-Aldrich Inc. 제품												

A. 전달 저항성

LCF 1 내지 LCF 26의 전달 저항성은 다음과 같은 예외 조건으로 미국특허 제6,074,654호에 기술된 방법을 이용하여 측정하였다:

각 LCF를 인조 피부 필름(사전에 30% 수성 글리세린 용액을 통해 24 시간 동안 수화된 것임)에 개별적으로 도포하고, 40℃에서 건조하였다. 상기 필름들을 테스터 장치를 사용하는 연마 공격(rubbing "insult")을 받게 하였다. 500g 매스(mass)를 백색 먼 니트 천으로 덮어씌워, 코팅된 실험용 피부(in vitro skin)의 표면에 올려놓고, 360도 회전시켰다. 다음 상기 천을 전자적으로 이미지화하여, 전달된 LCF에 의해 어두워진 면적율을 이미지 처리 소프트웨어로 측정하였다. 전달율(%)이 높을수록, 상기 코팅된 실험용 피부에서 상기 백색 천으로 더 많은 LCF가 전달된다. 이러한 과정은 각각의 실험용 피부의 동일한 위치에서 반복된다. 건조된 필름을 가로지르는 연마 면의 각 회전(360도)은 1회 공격(one insult)으로 카운트된다. 최대 전달 범위는 100%인 것으로 간주하며, 이는 전체 연마 면이 LCF 물질로 커버된 것을 의미한다. 전달율(%)이 낮을수록 전달저항이 더 양호함을 보여준다. 전달 저항 시험의 결과들이 하기 표 3 및 4에 제시되어 있다:

표 3. LCF 1 및 LCF 2 (관능화되지 않은 또는 이온성이 아닌 실리콘)와 LCF 3 내지 LCF 15(비교예 1-8의 실리콘)의 전달저항성.

표 3

	LCF 1	LCF 2	LCF 3	LCF 4	LCF 5	LCF 6	LCF 7	LCF 8	LCF 9	LCF 10	LCF 11	LCF 12	LCF 13	LCF 14	LCF 15
1회 공격	91%	19%	89%	45%	54%	76%	67%	48%	61%	16%	56%	34%	67%	39%	30%
2회 공격	92%	4%	90%	59%	28%	76%	24%	29%	19%	13%	17%	11%	18%	21%	4%

3회 공격	83%	2%	87%	27%	17%	74%	7%	9%	5%	14%	7%	5%	8%	9%	3%
4회 공격	85%	1%	78%	4%	10%	73%	3%	10%	2%	4%	9%	4%	3%	9%	2%
5회 공격	59%	0%	8%	4%	12%	72%	3%	11%	1%	3%	3%	6%	3%	7%	0%

표 4. LCF 16 내지 LCF 26 (실시예 4-9의 이온성 실리콘)의 전달저항성

표 4

	LCF 16	LCF 17	LCF 18	LCF 19	LCF 20	LCF 21	LCF 22	LCF 23	LCF 24	LCF 25	LCF 26
1회 공격	1%	0%	0%	0%	1%	35%	37%	36%	9%	58%	4%
2회 공격	1%	0%	0%	0%	0%	2%	36%	13%	7%	23%	4%
3회 공격	0%	0%	0%	0%	1%	2%	13%	7%	9%	13%	5%
4회 공격	1%	0%	0%	0%	0%	1%	10%	2%	3%	4%	4%
5회 공격	0%	0%	0%	0%	0%	2%	13%	2%	1%	3%	4%

B. 내수성

LCF 1 및 LCF 2 (관능화되지 않은 또는 이온성이 아닌 실리콘) 및 LCF 17 내지 LCF 20 [실시예 4-7의 이온성 실리콘 (I)]의 내수성을 측정하였다. 실험용 피부는 전술한 바와 동일하게 준비하였다. LCF 코팅이 상기 피부 표면상에서 건조된 다음, 여기에 수막을 도포하고 15 분 동안 유지하였다. 과량의 물을 털어내고, 전달 시험을 수행하였다. 내수성 시험 결과는 하기 표 5에 제시되어 있다.

표 5. 내수성

표 5

내수성	LCF 1	LCF 2	LCF 17	LCF 18	LCF 19	LCF 20
1회 공격	19%	93%	0%	0%	1%	1%

C. 태키니스(Tackiness)

LCF 2 (관능화되지 않은 또는 이온성이 아닌 실리콘) 및 LCF 20 및 23-25 [각각 실시예 5 및 7의 이온성 실리콘 (I)]의 태키니스를 측정하였다. 실험용 피부는 전술한 바와 동일하게 준비하였다. LCF 코팅이 상기 피부 표면상에서 건조된 다음, 건조된 필름의 태력(tack force)을 다이아-스트론 기기(Dia-Stron MTT 175)를 사용하여 측정하였다. 태력이 낮을수록 LCF의 태키니스가 낮다. 태키니스 시험결과는 하기 표 6에 제시되어 있다.

표 6. 태키니스 특성

표 6

태력 (gmf)	LCF 2	LCF 20	LCF 23	LCF 24	LCF 25
1차 측정값	49.7	4.9	0.4	3.55	46.4
2차 측정값	51.85	4.85	0.6	4.75	33.7
3차 측정값	52.15	4.55	0.55	5.65	31.95
4차 측정값	52.65	4.8	0.75	6.25	30.35
5차 측정값	54.05	4.95	0.95	6.3	29.4
평균	52.08	4.81	0.65	5.3	34.36
	±1.57	±0.15	±0.21	±1.16	±6.92

[0160] D. 광택성

[0161] LCF 2 (관능화되지 않은 또는 이온성이 아닌 실리콘)과 LCF 24 및 LCF 26 [각각 실시예 5 및 7의 이온성 실리콘 (I)]의 광택성을 측정하였다. 각 제제로 표준 레네타 카드(standard leneta card) 상에서 균일한 두께의 필름을 만들어 40℃에서 건조하였다. BYK 글로스미터(glossmeter)를 사용하여 건조된 막의 60도 및 85도 광택 측정값을 기록하였다. 측정결과는 하기 표 7에 제시되어 있다.

표 7

광택	LCF 2	LCF 23	LCF 24	LCF 26
60도 광택	18.5	52.8	20.5	36.2
85도 광택	66.3	78.4	72.	78.4

[0163] E. 경피수분손실량 (TEWL) 특성

[0164] 코팅하지 않은 실험용 피부와, LCF 2 (관능화되지 않은 또는 이온성이 아닌 실리콘), LCF 8 및 9 (각각 비교예 4 및 비교예 5의 실리콘) 및 본 발명의 LCF 23 및 26 (각각 실시예 5 및 7의 말단-관능화 이온성 실리콘)으로 코팅한 실험용 피부의 경피수분손실량 (TEWL) 특성을 다음과 같은 예외 조건으로 미국 특허 제5,679,335호에 기술된 방법을 이용하여 측정하였다:

[0165] 수화된 실험용 피부를 상기한 LCF로 코팅하고 하룻밤 동안 40℃에서 건조하였다. 한 세트의 파인(Pyne) 컵 각각에 3.00 ml의 물을 넣고 LCF로 코팅된 건조 실험용 피부로 각각 덮었다. 피부 표면에서 수분 손실의 속도를 MPA 580 기기에 부착된 Tewameter(상표명) TM 300 프로브를 사용하여 측정하였다. TWEL 시험 결과는 하기 표 8에 제시되어 있다.

[0166] 표 8. TEWL 특성

표 8

	비-코팅	LCF 2	LCF 8	LCF 9	LCF 23	LCF 26
TEWL (g/mh ²)	10.5	7.70	9.9	9.8	8.7	6.9

[0168] 상기 표 3 내지 8의 데이터들은 본 발명에 따르는 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)을 혼입한 퍼스널 케어 조성물이 관능화되지 않은 실리콘 또는 본 발명의 범위에서 벗어난 이온성 실리콘을 혼입한 퍼스널 케어 조성물에 비하여 우수한 제품 성능 특성들을 가진다는 것을 보여준다. 예를 들어, 본 발명의 말단-관능화된 이온성 실리콘 (I)을 함유하는 립 칼라 제제는 다른 실리콘을 함유하는 립 칼라 제제에 비하여, 전달저항성, 내수성, 광택성, 테크니스의 감소, 및 경피수분손실량 특성에서 상당한 개선을 나타내었다.

[0169] 다음과 같은 실리콘으로 다음과 같은 헤어 케어 제제들(Hair care formulations: HCFs), 즉 본 발명에 따르는 이온성 실리콘((실시예 5의 말단-관능화된 이온성 실리콘)을 함유하는 헤어 케어 제제 (HCF 1), 관능화되지 않은 실리콘을 함유하는 헤어 케어 제제 (HCF 2), 본 발명에서 벗어난 실리콘(비교예 1 및 2의 실리콘)을 함유하는 헤어 케어 제제 (HCF 3 및 HCF 4)을 제조하여, 이들의 광택, 소프트니스(softness) 및 안티프리즈(antifriz) 특성들을 평가하였다. HCF 1-4의 조성은 하기 표 9에 제시되어 있다.

[0170] 표 9: 헤어 케어 제제 HCF 1 내지 HCF 4

표 9

	HCF 성분 및 양(g)	HCF 1	HCF 2	HCF 3	HCF 4
상 A	탈이온수	93.7	93.7	93.7	93.7
	2-하이드록시셀룰로오즈(증점제), Aldrich Chemical Company INC. 제품	1.2	1.2	1.2	1.2
	글리세린(증점제), Merck Inc. 제품	2.0	2.0	2.0	2.0

상 B	실시예 5의 이온성 실리콘	0.5	-	-	-
	SE30(PDMS 겜), Momentive Performance Materials Inc. 제품	-	0.5	-	-
	비교예 1의 실리콘	-	-	0.5	-
	비교예 2의 실리콘	-	-		0.5
	TMN-6(유화제), Sigma-Aldrich, Inc. 제품	0.1	0.1	0.1	0.1
	TMN-10(유화제), Sigma-Aldrich, Inc. 제품	0.2	0.2	0.2	0.2
	IDD (용매), Preperse LLC 제품	0.5	0.5	0.5	0.5
	탈이온수	1.8	1.8	1.8	1.8

[0172] HCF 1-4의 물성은 하기 표 10에 제시되어 있다.

[0173] 표 10: HCF 1-4의 물성

표 10

	HCF 1	HCF 2	HCF 3	HCF 4
점도(Pa-s)	3.41	3.34	5.90	3.51
안정성 (실온에서 5일)	있음	있음	있음	있음
안정성 (50℃에서 5일)	있음	없음	있음	있음

[0175] A. 모발상에서 HCF 1-4의 광택 및 소프트니스 특성

[0176] 각각의 HCF를 약 2g씩 머릿단(~ 2.0 g)에 도포하되, 모발 섬유에 전부 또는 대부분이 조성물과 접촉하도록 도포하였다. 다음, 도포된 머릿단을 물로 행구고, 헤어드라이어로 건조하였다. 건조된 머릿단의 광택을 BYK-가드너 글로سم미터(BYK-Gardner glossmeter)를 사용하여 3개의 다른 각도에서 측정하였다 (측정 결과는 표 11에 제시되어 있다). 처리된 머릿단의 "소프트니스 (softness)" 감촉은 5명의 평가원이 2개의 머릿단을 한 쌍으로 하여 비교하는 것을 기초로 평가하였다 (평가 결과는 표 12에 제시되어 있다).

표 11

광택측정결과				
	HCF 1	HCF 2	HCF 3	HCF 4
20도 광택 (GU)	0.7	0.7	0.6	0.7
60도 광택 (GU)	3.5	3.2	3.2	3.3
85도 광택 (GU)	1.6	1.1	1.1	1.2

표 12

평가원의 쌍 비교에 기초한 소프트니스 평가	
쌍	결과
HCF1/HCF2	80%가 HCF2 보다 HCF1를 양호한 것으로 평가
HCF1/HCF3	60%가 HCF3 보다 HCF1를 양호한 것으로 평가
HCF1/HCF4	60%가 HCF4 보다 HCF1를 양호한 것으로 평가
HCF2/HCF3	60%가 HCF2 보다 HCF3를 양호한 것으로 평가
HCF2/HCF4	60%가 HCF2 보다 HCF4를 양호한 것으로 평가
HCF3/HCF4	60%가 HCF3 보다 HCF4를 양호한 것으로 평가

[0179] 상기한 결과들은 본 발명의 설포네이트-캡핑된 실리콘에 기초한 헤어 케어 제제(HCF 1)가 비교용 및 상업용 벤치마크((HCF 2 내지 4)에 비해 광택 및 소프트니스 특성 모두에 대한 헤어 컨디셔닝이 우수함을 보여준다.

[0180] 분무가능한 컨디셔너 제제들(Sprayable conditioner formulations: SCFs)을 하기 표 13에 제시하는 바와 같이 제조하였다.

표 13

[0181]

말단-설폰화 실리콘 및 비교용 실리콘의 분무가능한 컨디셔너 제제					
SCF 조성성분 및 함량(g)		SCF 1	SCF 2	SCF 3	SCF 4
SE30(PDMS 겔), Momentive Performance Materials Inc. 제품		0.9	-	-	-
SR100(실리콘 레진),Momentive Performance Materials Inc.제품		0.6	-	-	-
실시예 5의 이온성 실리콘		-	1.6	-	-
비교예 1의 이온성 실리콘		-	-	1.6	-
IDD (용매), Preperse LLC 제품		25.0	25.0	25.0	25.0
물			1	-	-

[0182]

B. 안티프리즈 특성

[0183]

각 SCF를 분무 보틀(spraying bottle)를 사용하여 2.0의 백금 표백된(platinum beached) 머릿단에 분무하고 (각 머릿단에 6회 분무), 제제가 균일하게 도포되도록 고루 마사지하였다. 다음, 자동 에어드라이어를 사용하여 상기 머릿단을 건조하였다. 완전히 건조한 후, 머릿단 샘플을 습도실(25℃, 상대습도 90%)에 수직으로 1시간 동안 매달아 두었다. 다음, 안티프리즈 성능을 머릿단의 부피의 관점에서 평가하였다. 부피가 클수록 안티프리즈 성이 약한 것을 나타낸다. 말단-캡핑된 설폰화 실리콘 함유 제제(SCF2)은 실리콘들의 혼합물 함유 제제(SCF1), 비교예 1의 실리콘 함유 제제(SCF3) 및 실리콘 비함유 제제(SCF4) 보다 우수한 안티프리즈 특성을 나타내었다.

[0184]

헤어 스타일링 제제들(Hair styling formulations: HSFs)을 하기 표 14에 제시하는 바와 같이 이온성 실리콘 (I)을 함유시켜(HSF1), 또한 실리콘 없이(PVP-VA를 함유하는 HSF2와, 대조구로 물 만을 함유하는 HSF3) 제조하였다.

표 14

[0185]

말단-관능화된 이온성 실리콘(I) 함유 또는 비함유 헤어스타일링 제제			
조성성분	HSF 1	HSF 2	HSF 3
실시예1의 이온성 실리콘	0.5	-	-
PVP-VA (BASF)	-	0.5	-
물	99.5	99.5	100

[0186]

2.0g의 천연 곱슬 머릿단을 각각의 HSF에 1분 동안 침지하여 함습하고, 함습 머릿단 각각을 컬러 스틱(curler stick)에 올린 상태로 오븐에 넣어 50℃에서 하룻밤 동안 건조하였다. 24시간 후, 머릿단을 스틱에서 제거하고 습도실에 수직으로 매달아두었다. 컬 길이(Curl length)를 15분 간격으로 모니터하였다. 컬-길이 값을 경시적으로 플롯하였다. 본 발명 실시예 3의 이온성 실리콘(HSF1)은 대조구(HSF 2 및 3) 보다 더 오랜 시간 동안 모발의 컬을 유지하였다.

[0187]

이온성 실리콘 (HSF1)의 효율은 가장 잘 알려진 시중 제품의 효율보다 덜 하지만, 상기 시중제품으로 처리된 모발보다 훨씬 더 우수한 소프트니스를 나타내었다.

[0188]

수중의 썬스크린 제제들(Sunscreen formulations: SFs)을 제조하여 자외선 차단(sun protection)에 대하여 평가하였다. 상기 SF들이 하기 표 15에 제시되어 있다.

표 15

[0189]

썬스크린 제제				
상	조성성분	SF 1	SF 2	SF 3
A	탈이온수	40.10	40.10	40.10
	페녹시에탄올 (및) 메틸파라벤 (및) 이소프로필파라벤 (및)	0.90	0.90	0.90
	이소부틸파라벤 (및) 부틸파라벤 (Liquapar Optima, ISP)			
	SOLTERRA (상표명) Boost (메틸셀룰로오즈)	2.00	2.00	2.00

B	메틸 글루코오스 세스키테아레이트 (Glucate SS, Noveon)	1.00	1.00	1.00
	PEG 20 메틸 글루코오스 세스키스테아레이트 (Glucamate SSE 20, Noveon)	1.00	1.00	1.00
	VP/에이코산 코폴리머 (Ganex V220, ISP)	2.00		
	실시예 3의 이온성 실리콘(I)		2.00	
	실시예 7의 이온성 실리콘(I)			2.00
	세테아릴 알코올 (및) 세테아레스-20 (Lipowax D, Lipo Chemicals)	3.00	3.00	3.00
	납 저함유(Low Lead) 산화아연 Z-Cote (ISP)	25.00	25.00	25.00
	C12-15 알킬벤조에이트	25.00	25.00	25.00
C	시트르산 q.s.			
	합계	100.00	100.00	100.00

[0190] SF 1 내지 3의 자외선 차단 지수(sun protection factor : SPF)를 평가하기 위하여, 소정 양의 각 제제를 인조 피부(사전에 30% 수성 글리세린 용으로 24 시간 동안 수화된 것임)에 개별적으로 도포하고 실온에서 건조하였다. 각각의 SPF 막을 UV-생체의외(UV-In Vitro) SPF 분석기를 사용하여 측정하였다. 측정결과는 하기 표 16에 제시되어 있다.

표 16

[0191]

SPF 측정			
	SF 1	SF 2	SF 3
생체의외 SPF	3.2±1.5	27.0±4.9	17.2±3.1

[0192] 위의 상세한 설명은 다수의 구체적인 실시예들을 포함하고 있지만, 이러한 구체적인 실시예들은 본 발명의 바람직한 구현들의 예시들로만 해석되어야지, 본 발명에 제한을 가하기 위한 것으로 해석되어서는 아니 된다. 당 분야의 전문가들은 첨부하는 청구범위에서 한정된 바와 같은 본 발명의 범위 및 정신 안에서 수많은 다른 구현들을 예상할 수 있을 것이다.

【심사관 직권보정사항】

【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 청구항 12

【변경전】

트리에탄올암모늄 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실란

【변경후】

트리에탄올암모늄 설포네이트-캡핑된 폴리디메틸실록산