

**(19) 대한민국특허청(KR)**
(12) 공개특허공보(A)**(11) 공개번호** 10-2022-0145828
(43) 공개일자 2022년10월31일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
A61K 8/89 (2006.01) *A61Q 19/00* (2006.01)
(52) CPC특허분류
A61K 8/89 (2013.01)
A61Q 19/00 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2022-7028553
(22) 출원일자(국제) 2021년02월25일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2022년08월18일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2021/007182
(87) 국제공개번호 WO 2021/172463
국제공개일자 2021년09월02일
(30) 우선권주장
JP-P-2020-029779 2020년02월25일 일본(JP)

(71) 출원인
가부시킴가이사 시세이도
일본 도쿄도 주오쿠 긴자 7초메 5반 5고
(72) 발명자
마츠쿠라 도시히코
일본 1040061 도쿄도 주오쿠 긴자 7초메 5반 5고
가부시킴가이사 시세이도 나이
오구치 노조미
일본 1040061 도쿄도 주오쿠 긴자 7초메 5반 5고
가부시킴가이사 시세이도 나이
(74) 대리인
김진희, 김태홍

전체 청구항 수 : 총 23 항

(54) 발명의 명칭 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 실록산 결합 함유 고분자 화합물을 포함하는 화장료**(57) 요약**

본 개시는, 우수한 사용감을 갖는 화장료를 제공하는 것을 목적으로 한다. 호스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트체 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 게스트체, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트-게스트체를 함유하고, 또한 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 실록산 결합을 포함하고 있는 화장료.

(52) CPC특허분류
A61K 2800/56 (2013.01)

명세서

청구범위

청구항 1

호스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트체 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 게스트체, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트-게스트체를 함유하고, 또한

상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 실록산 결합을 포함하고 있는 화장품.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 실록산 결합을 포함하고 있는 화장품.

청구항 3

제1항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 주쇄에 실록산 결합을 포함하고 있는 화장품.

청구항 4

제3항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 주쇄에 실록산 결합을 포함하고 있는 화장품.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 호스트기를 갖고 있고, 또한

상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 게스트기를 갖고 있는 화장품.

청구항 6

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 호스트기를 갖고 있고, 또한

상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 말단에 게스트기를 갖고 있는 화장품.

청구항 7

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물이, 말단에 호스트기를 갖고 있고, 또한

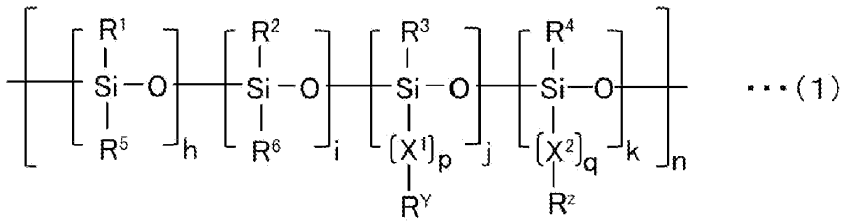
상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 게스트기를 갖고 있는 화장품.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물의 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 가교되어 있는 화장품.

청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 하기의 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는 화장품:



[식 (1) 중, $R^1 \sim R^6$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기, 1가의 복소환기, 1가의 스피로환 화합물, 1가의 축합환 화합물, $-R^1-COOH$ 로 표시되는 기 또는 $-R^2-C(O)O-R^3$ 로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, R^1 , R^2 및 R^3 은, 각각 1~10의 탄소수의 알킬기 또는 알킬렌기이다; X^1 및 X^2 는, 각각 독립적으로 0, $Si(OH)_2$, $Si(R^{10})_2$, $N(H)$ 혹은 $N(COCH_3)$ 이거나, 혹은 우레탄 결합, 우레아 결합이거나, 에테르 결합, 아마이드 결합 혹은 에스테르 결합이거나, 또는 카르보닐기, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기, 2가의 복소환기, 우레탄기, 우레아기 혹은 아릴렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; R^{10} 은, 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기 또는 복소환기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; 복수의 R^{10} 은 각각 동일해도 좋고 상이해도 좋다; X^1 및 X^2 는, 각각 복수인 경우, 이들은 동일해도 좋고 상이해도 좋다; p 및 q는, 각각 독립적으로 0 이상의 정수를 나타낸다; R^y 는 호스트기이다; R^z 는 게스트기이다; h, i, j 및 k는, 각각 0 이상의 정수를 나타내고, 이들은 서로 동일해도 좋고 상이해도 좋다; 적어도 j 또는 k가 1 이상의 정수이다; n은 1 이상의 정수를 나타낸다.]

청구항 10

제9항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는 화장료.

청구항 11

제9항 또는 제10항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 주쇄에 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는 화장료.

청구항 12

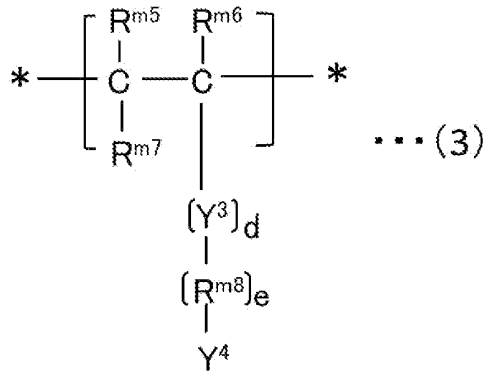
제9항 또는 제10항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이,

비닐 주쇄, 아크릴 주쇄, 우레탄 주쇄, 에폭시 주쇄, 폴리이미드 주쇄, 폴리에스테르 주쇄, 폴리우레아 주쇄 또는 폴리카보네이트 주쇄를 갖고 있고, 또한

측쇄에 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖고 있는 화장료.

청구항 13

제1항 내지 제12항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 하기의 식 (2)로 표시되는 구조 단위를 갖는 화장료:



[식 (3) 중, $R^{m5} \sim R^{m7}$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나 또는 알킬기이며, Y^3 은, 에테르 결합, 아미드 결합 또는 에스테르 결합이며, R^{m8} 은, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기 혹은 아릴렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, Y^4 는, 수소 원자, 알킬기, 수산기, $Si(OH)_3$, $Si(R^{10})_3$, NH_2 , $C(O)CH_3$, $C(O)NH_2$ 또는 $N(COCH_3)$ 이며, d 및 e는, 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타낸다; *는, 고분자 화합물의 주쇄를 구성하는 단결합을 나타낸다.].

청구항 16

제9항 내지 제15항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

R^Y 로 표시되는 호스트기가, α -시클로텍스트린, β -시클로텍스트린 또는 γ -시클로텍스트린이고, 또한

R^Z 로 표시되는 게스트기가, 치환기를 가져도 좋은 알킬기, 또는 치환기를 가져도 좋은 아릴기인 화장품.

청구항 17

제9항 내지 제16항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

R^1 , R^2 , R^3 , R^4 및 R^5 가 메틸기인 화장품.

청구항 18

제9항 내지 제16항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

$k=0$ 이고, 또한

$R^1 \sim R^3$, R^5 및 R^6 이 알킬기인 화장품.

청구항 19

제9항 내지 제16항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

$k=0$ 이고,

$R^1 \sim R^3$ 및 R^5 가 메틸기이고, 또한

R^6 이 펜틸기인 화장품.

청구항 20

제9항 내지 제19항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 식 (1) 또는 (2)에 있어서,

$(X^1)_p$ 가 $-(CH_2)_3-N(COCH_3)-$ 이고, 또한 j가 1 이상의 정수이고, 또한/또는

(X²)_q가 -R¹¹-CO-O- 또는 -R¹¹-CO-NH-이고, R¹¹은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~12의 알킬렌기이고, 또한 k가 1 이상의 정수인 화장료.

청구항 21

제1항 내지 제20항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 호스트기와 상기 게스트기가, 이하의 조합 (a)~(c)의 어느 1종인 화장료:

(a) 상기 호스트기가 α-시클로텍스트린이고, 또한

상기 게스트기가, (1) 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (2) 수산기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (3) 카르복실기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (4) 아미노기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (5) 환형 알킬기, (6) 페닐기, (7) 아조벤젠기, 및 (8) 계피산기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다;

(b) 상기 호스트기가 β-시클로텍스트린이고, 또한

상기 게스트기가, (1') t-부틸기, (2') 아다만틸기, (3') 아릴기, (4') 수산기를 갖는 아릴기, (5') 카르복실기를 갖는 아릴기, (6') 아미노기를 갖는 아릴기, (7') 페로세닐기, (8') 아조벤젠기, 및 (9') 댄실기(dansyl group)로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다;

(c) 상기 호스트기가 γ-시클로텍스트린이고, 또한

상기 게스트기가, (1'') 탄소수 18까지의 알킬기, (2'') 수산기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (3'') 카르복실기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (4'') 아미노기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (5'') 아다만틸기, (6'') 탄소 원자로 구성되는 클러스터류를 갖는 기, (7'') 아릴기를 갖는 댄실기, (8'') 페로세닐기, 및 (9'') 안트라세닐기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다.

청구항 22

제1항 내지 제19항 중 어느 한 항에 있어서, 용매를 더 포함하는 화장료.

청구항 23

제20항에 있어서, 상기 용매가, 휘발성의 실리콘 또는 휘발성의 탄화수소 화합물인 화장료.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 개시는, 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 실록산 결합 함유 고분자 화합물을 포함하는 화장료에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 가교된 고분자 화합물을 이용함으로써, 피막을 형성하는 것이 알려져 있다. 특히, 가교된 실리콘 수지를 포함하는 피막 형성제가, 여러가지 코팅제나 화장료로서 폭넓게 이용되고 있다.

[0003] 특허문헌 1은, 피막 형성제로서 트리메틸실록시규산 등을 함유하는 화장료를 개시하고 있다.

[0004] 또한, 호스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트체 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 게스트체, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트-게스트체는, 그 호스트기 및 게스트기의 조합에 의해, 가역적으로 결합을 형성할 수 있는 것이 알려져 있다(특허문헌 2).

[0005] 특허문헌 3은, 호스트기 함유 모노머, 게스트기 함유 모노머 및 아크릴계 모노머의 수계 용매 용액의 제조 방법에 관해 개시하고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 특허문헌 1: 일본특허공개 제2019-99576호 공보

(특허문헌 0002) 특허문헌 2: 국제공개 제2012/036069호

(특허문헌 0003) 특허문헌 3: 국제공개 제2013/162019호

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0007] 가교된 고분자 화합물을 함유하는 종래의 화장료는, 사용감이 불충분한 경우가 있었다. 구체적으로는, 가교된 고분자 화합물을 함유하는 종래의 화장료에서는, 피부 등에 적용한 후에, 밀착감, 탄력감 및/또는 당김감에 관해, 바람직하지 않은 사용감을 갖는 경우가 있었다.
- [0008] 따라서, 본 개시는, 우수한 사용감을 갖는 화장료를 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [0009] 본건 발명자들은, 이러한 과제를 해결하기 위해 예의 검토를 거듭하여 본원을 발명했다.

과제의 해결 수단

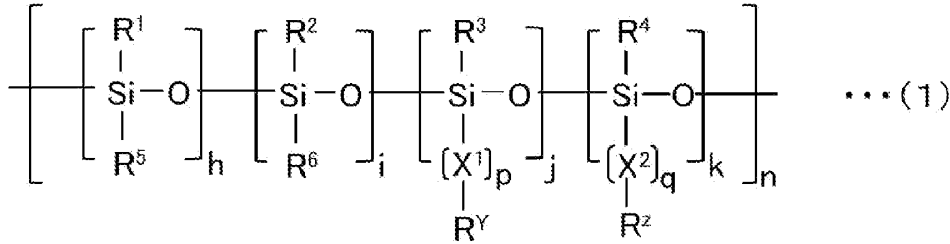
- [0010] 즉, 본 개시에 관한 발명은 하기의 양태를 포함한다:
- [0011] <양태 1>
- [0012] 호스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트체 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 게스트체, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트-게스트체를 함유하고, 또한
- [0013] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 실록산 결합을 포함하고 있는 화장료.
- [0014] <양태 2>
- [0015] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 실록산 결합을 포함하고 있는, 양태 1에 기재된 화장료.
- [0016] <양태 3>
- [0017] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 측쇄에 실록산 결합을 포함하고 있는, 양태 1에 기재된 화장료.
- [0018] <양태 4>
- [0019] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 측쇄에 실록산 결합을 포함하고 있는, 양태 3에 기재된 화장료.
- [0020] <양태 5>
- [0021] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물이 측쇄에 호스트기를 갖고 있고, 또한
- [0022] 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 측쇄에 게스트기를 갖고 있는, 양태 1~4의 어느 한 항에 기재된 화장료.
- [0023] <양태 6>
- [0024] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물이 측쇄에 호스트기를 갖고 있고, 또한
- [0025] 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 말단에 게스트기를 갖고 있는, 양태 1~4의 어느 한 항에 기재된 화장료.
- [0026] <양태 7>
- [0027] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물이 말단에 호스트기를 갖고 있고, 또한
- [0028] 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 측쇄에 게스트기를 갖고 있는, 양태 1~4의 어느 한 항에 기재된 화장료.

[0029] <양태 8>

[0030] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물의 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 가교되어 있는, 양태 1~7의 어느 한 항에 기재된 화장료.

[0031] <양태 9>

[0032] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 하기의 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는, 양태 1~8의 어느 한 항에 기재된 화장료:



[0033]

[0034] [식 (1) 중, R¹~R⁶은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기, 1가의 복소환기, 1가의 스피로환 화합물, 1가의 축합환 화합물, -R^{R1}-COOH로 표시되는 기 또는 -R^{R2}-C(O)O-R^{R3}로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, R^{R1}, R^{R2} 및 R^{R3}은, 각각 1~10의 탄소수의 알킬기 또는 알킬렌기이다; X¹ 및 X²는, 각각 독립적으로 O, Si(OH)₂, Si(R¹⁰)₂, N(H) 혹은 N(COCH₃)이거나, 혹은 우레탄 결합, 우레아 결합이거나, 에테르 결합, 아마이드 결합 혹은 에스테르 결합이거나, 또는 카르보닐기, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기, 2가의 복소환기, 우레탄기, 우레아기 혹은 아릴렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; R¹⁰은, 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기 또는 복소환기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; 복수의 R¹⁰은 각각 동일해도 좋고 상이해도 좋다; X¹ 및 X²는, 각각 복수인 경우, 이들은 동일해도 좋고 상이해도 좋다; p 및 q는, 각각 독립적으로 0 이상의 정수를 나타낸다; R^Y는 호스트기이다; R^Z는 게스트기이다; h, i, j 및 k는, 각각 0 이상의 정수를 나타내고, 이들은 서로 동일해도 좋고 상이해도 좋다; 적어도 j 또는 k가 1 이상의 정수이다; n은 1 이상의 정수를 나타낸다.]

[0035] <양태 10>

[0036] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는, 양태 9에 기재된 화장료.

[0037] <양태 11>

[0038] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 주쇄에 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는, 양태 9 또는 10에 기재된 화장료.

[0039] <양태 12>

[0040] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물,

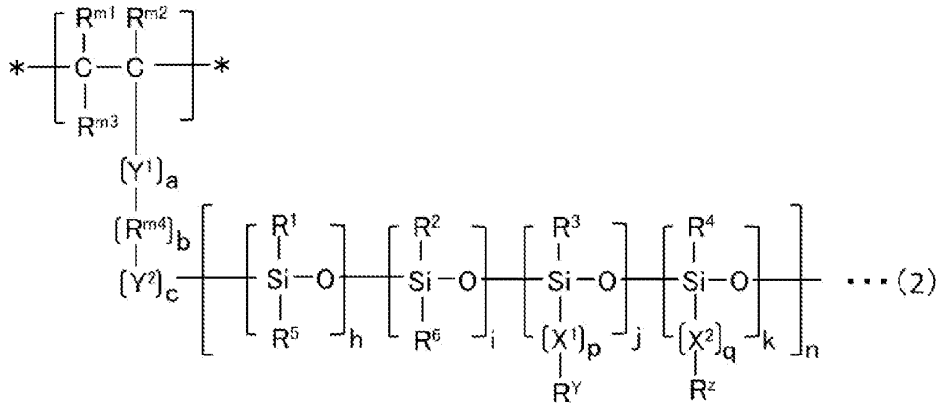
[0041] 비닐 주쇄, 아크릴 주쇄, 우레탄 주쇄, 에폭시 주쇄, 폴리이미드 주쇄, 폴리에스테르 주쇄, 폴리우레아 주쇄 또는 폴리카보네이트 주쇄를 갖고 있고, 또한

[0042] 측쇄에 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖고 있는,

[0043] 양태 9 또는 10에 기재된 화장료.

[0044] <양태 13>

[0045] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 하기의 식 (2)로 표시되는 구조 단위를 갖는, 양태 1~12의 어느 한 항에 기재된 화장료:



[0046]

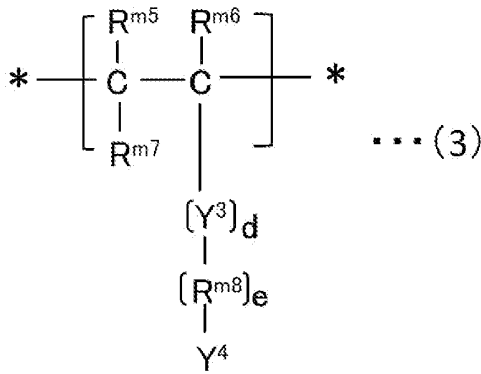
[0047] [식 (2) 중, R¹~R⁶은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기, 1가의 복소환기, 1가의 스피로환 화합물, 1가의 축합환 화합물, -R^{R1}-COOH로 표시되는 기 또는 -R^{R2}-C(O)O-R^{R3}로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, R^{R1}, R^{R2} 및 R^{R3}은, 각각 1~10의 탄소수의 알킬기 또는 알킬렌기이다; X¹ 및 X²는, 각각 독립적으로 O, Si(OH)₂, Si(R¹⁰)₂, N(H) 혹은 N(COCH₃)이거나, 혹은 우레탄 결합, 우레아 결합이거나, 에테르 결합, 아마이드 결합 혹은 에스테르 결합이거나, 또는 카르보닐기, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기, 2가의 복소환기, 우레탄기, 우레아기 혹은 아릴렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; R¹⁰은, 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기 또는 복소환기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; 복수의 R¹⁰은 각각 동일해도 좋고 상이해도 좋다; X¹ 및 X²는, 각각 복수인 경우, 동일해도 좋고 상이해도 좋다; p 및 q는, 각각 독립적으로 0 이상의 정수를 나타낸다; R^y는 호스트기이다; R^z는 게스트기이다; h, i, j 및 k는, 각각 0 이상의 정수를 나타내고, 이들은 서로 동일해도 좋고 상이해도 좋으며, 적어도 j 또는 k가 1 이상의 정수이다; n은 1 이상의 정수를 나타낸다; R^{m1}~R^{m3}은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나 또는 알킬기이며, Y¹은, 에테르 결합, 아마이드 결합 또는 에스테르 결합이며, R^{m4}는, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기 혹은 아릴렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, Y²는, 에테르 결합, 아마이드 결합 혹은 에스테르 결합, O, Si(OH)₂, Si(R¹⁰)₂, N(H) 혹은 N(COCH₃)이며, a, b, c는, 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타낸다; *, 고분자 화합물의 주쇄를 구성하는 단결합을 나타낸다.]

[0048] <양태 14>

[0049] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 상기 식 (2)로 표시되는 구조를 갖는, 양태 13에 기재된 화장료.

[0050] <양태 15>

[0051] 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 하기의 식 (3)으로 표시되는 구조 단위를 더 갖는, 양태 13 또는 14에 기재된 화장료:



[0052]

[0053] [식 (3) 중, $R^{m5} \sim R^{m7}$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나 또는 알킬기이며, Y^3 은, 에테르 결합, 아미드 결합 또는 에스테르 결합이며, R^{m8} 은, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기 혹은 아릴렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, Y^4 는, 수소 원자, 알킬기, 수산기, $Si(OH)_3$, $Si(R^{10})_3$, NH_2 , $C(O)CH_3$, $C(O)NH_2$ 또는 $N(COCH_3)_2$ 이며, d 및 e는, 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타낸다; *는, 고분자 화합물의 주쇄를 구성하는 단결합을 나타낸다.].

[0054] <양태 16>

[0055] 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

[0056] R^Y 로 표시되는 호스트기가, α -시클로텍스트린, β -시클로텍스트린 또는 γ -시클로텍스트린이고, 또한

[0057] R^Z 로 표시되는 게스트기가, 치환기를 가져도 좋은 알킬기, 또는 치환기를 가져도 좋은 아릴기인,

[0058] 양태 9~15의 어느 한 항에 기재된 화장료.

[0059] <양태 17>

[0060] 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

[0061] R^1 , R^2 , R^3 , R^4 및 R^5 가 메틸기인,

[0062] 양태 9~16의 어느 한 항에 기재된 화장료.

[0063] <양태 18>

[0064] 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

[0065] $k=0$ 이고, 또한

[0066] $R^1 \sim R^3$, R^5 및 R^6 이 알킬기인,

[0067] 양태 9~16의 어느 한 항에 기재된 화장료.

[0068] <양태 19>

[0069] 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,

[0070] $k=0$ 이고,

[0071] $R^1 \sim R^3$ 및 R^5 가 메틸기이고, 또한

[0072] R^6 이 펜틸기인,

[0073] 양태 9~16의 어느 한 항에 기재된 화장료.

[0074] <양태 20>

- [0075] 상기 식 (1) 또는 (2)에 있어서,
- [0076] $(X^1)_p$ 가 $-(CH_2)_3-N(COCH_3)-$ 이고, 또한 j 가 1 이상의 정수이고, 또한/또는
- [0077] $(X^2)_q$ 가 $-R^{11}-CO-O-$ 또는 $-R^{11}-CO-NH-$ 이고, R^{11} 은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~12의 알킬렌기이고, 또한 k 가 1 이상의 정수인,
- [0078] 양태 9~19의 어느 한 항에 기재된 화장료.
- [0079] <양태 21>
- [0080] 상기 호스트기와 상기 게스트기가, 이하의 조합 (a)~(c)의 어느 1종인, 양태 1~20의 어느 한 항에 기재된 화장료:
- [0081] (a) 상기 호스트기가 α -시클로텍스트린이고, 또한
- [0082] 상기 게스트기가, (1) 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (2) 수산기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (3) 카르복실기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (4) 아미노기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (5) 환형 알킬기, (6) 페닐기, (7) 아조벤젠기, 및 (8) 계피산기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다;
- [0083] (b) 상기 호스트기가 β -시클로텍스트린이고, 또한
- [0084] 상기 게스트기가, (1') t-부틸기, (2') 아다만틸기, (3') 아릴기, (4') 수산기를 갖는 아릴기, (5') 카르복실기를 갖는 아릴기, (6') 아미노기를 갖는 아릴기, (7') 페로세닐기, (8') 아조벤젠기, 및 (9') 덴실기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다;
- [0085] (c) 상기 호스트기가 γ -시클로텍스트린이고, 또한
- [0086] 상기 게스트기가, (1'') 탄소수 18까지의 알킬기, (2'') 수산기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (3'') 카르복실기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (4'') 아미노기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (5'') 아다만틸기, (6'') 탄소 원자로 구성되는 클러스터류를 갖는 기, (7'') 아릴기를 갖는 덴실기, (8'') 페로세닐기, 및 (9'') 안트라세닐기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다.
- [0087] <양태 22>
- [0088] 용매를 더 포함하는, 양태 1~19의 어느 한 항에 기재된 화장료.
- [0089] <양태 23>
- [0090] 상기 용매가 휘발성의 실리콘 또는 휘발성의 탄화수소 화합물인, 양태 20에 기재된 화장료.

발명의 효과

- [0091] 본 개시에 의하면, 우수한 사용감을 갖는 화장료가 제공된다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0092] <<화장료>>
- [0093] 본 개시에 관한 화장료는,
- [0094] 호스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트체 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 게스트체, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 호스트-게스트체를 함유하고 있고, 또한
- [0095] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 실록산 결합을 포함하고 있다.
- [0096] 공유 결합을 통해 고분자 화합물을 가교시킴으로써 피막을 형성하는 종래의 화장료에서는, 피부 등에 적용한 경우에 양호한 사용감이 얻어지지 않는 경우가 있었다.
- [0097] 이것에 대하여, 본원의 발명자들은, 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 함유하는 화장료가, 종래의 화장료와 비교하여 우수한 사용감을 갖고 있는 것을 발견했다. 구체적으로는, 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 실록산 결합 함유 고분자 화합물을 함유하는 화장료가, 밀착감, 탄력감 및 당김감에 관해 우수한 특성

을 갖는 것을 발견했다. 또한, 본 개시에 관한 화장료는 화장 유지력도 우수하다.

- [0098] 이론에 의해 한정할 의도는 없지만, 본 개시에 관한 화장료는, 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 함유하고 있기 때문에, 피부 등에 적용된 경우에, 호스트-게스트 상호 작용을 통해 고분자 화합물끼리 결합하여 피막(화장 도막)을 형성한다고 생각된다. 그 때문에, 본 개시에 관한 화장료는, 탄력감에 있어서 우수한 특성을 나타낸다고 생각된다.
- [0099] 또한, 이론에 의해 한정할 의도는 없지만, 호스트-게스트 상호 작용을 통한 결합은 비공유 결합에 기초하는 것이기 때문에, 본 개시에 관한 화장료에 의해 형성되는 화장 도막은, 공유 결합에 의해 고분자 사이를 결합시킴으로써 형성되는 화장 도막보다 탄성이 비교적 높고(영률이 작고), 결과적으로 밀착감 및 당김감에 관해 우수한 특성을 나타낸다고 생각된다.
- [0100] 또한, 본 개시에 관한 화장료는, 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물을 이용하고 있기 때문에, 화학적으로 특히 안정된 화장료를 제공할 수 있다.
- [0101] 또한, 실록산 결합을 갖고 있는 고분자 화합물을 함유하고 있는 화장료는, 탄화수소 오일이나 실리콘 오일 등의 비극성 용매에 대한 가용성이 비교적 높다. 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 종래의 고분자 화합물은, 용매에 대한 용해성이 불충분한 경우가 있었다. 이것에 대하여, 본 개시에 관한 화장료에 함유되는 고분자 화합물은, 실록산 결합을 갖고 있고, 그것에 의해 용해성이 향상되었다. 휘발성의 비극성 용매에 대한 용해성이 비교적 높은 경우에는, 화장료를 도포에 의해 피부 등에 적용하는 것이 용이해지고, 또한 균일하고 얇은 막을 비교적 용이하게 형성할 수 있게 된다.
- [0102] 본 개시에 관한 화장료는, 특히는, 일광 차단(선스크린) 유액 및 일광 차단 크림 등의 자외선 방어 화장료; 화장 베이스(베이스 메이크), 파운데이션, 컨실러, 블러셔, 아이섀도우, 마스크라, 아이라이너, 아이블로우, 오버코트제 및 립스틱 등의 메이크업 화장료로서 적합하게 이용할 수 있다.
- [0103] <호스트기 및 게스트기>
- [0104] 「호스트-게스트 상호 작용」이란, 호스트기와 게스트기의 사이에서 형성되는 결합을 말한다. 호스트기는, 게스트기를 포접함으로써 게스트기에 결합한다. 게스트기의 크기가, 호스트기의 내부 공간에 들어가는 것에 적합하고, 또한 호스트기와 게스트기가, 소수성 상호 작용, 수소 결합, 정전 상호 작용 및 배위 결합 중 적어도 하나 이상이 관여하는 상호 작용을 갖는 경우에, 호스트-게스트 상호 작용이 생긴다.
- [0105] (호스트기)
- [0106] 호스트기로는, 예컨대 시클로헥스트린(CD)을 들 수 있다. 구체적으로는, α -시클로헥스트린, β -시클로헥스트린 및 γ -시클로헥스트린을 들 수 있다. 호스트기로서 이들 기를 이용한 경우에는, 안정적인 호스트-게스트 상호 작용을 형성할 수 있다.
- [0107] (게스트기)
- [0108] 게스트기는, 대응하는 호스트기에 대하여 게스트기가 될 수 있는 기라면 특별히 제한되지 않는다. 게스트기로는, 예컨대, 치환기를 가져도 좋은 알킬기, 및 치환기를 가져도 좋은 아릴기 등을 들 수 있다. 게스트기로서의 치환기를 가져도 좋은 알킬기 및 치환기를 가져도 좋은 아릴기는, 1~18, 바람직하게는 3~12, 보다 바람직하게는 3~9의 탄소수를 갖는다. 또한, 게스트기로서, 트리알킬실릴기(예컨대 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기 및 트리프로필실릴기, 특히는 트리메틸실릴기)를 들 수 있다.
- [0109] 게스트기 중, 치환기를 가져도 좋은 알킬기로는, 예컨대, 직쇄, 분기 또는 환형의 C1~18의 알킬기를 들 수 있다. 구체적으로는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, 펜틸, 시클로펜틸, 헥실, 시클로헥실, 이소헥실, 도데실, 옥타데실, 아다만틸 등의 알킬기를 들 수 있다. 그 중 바람직하게는 아다만틸기 또는 부틸기이며, 특히 바람직하게는 아다만틸기이다. 이 알킬기는, 예컨대, 할로젠 원자(예컨대, 불소, 염소, 브롬 등), 카르복실기, 에스테르기, 아미드기, 보호되어 있어도 좋은 수산기 등의 치환기를 1~3개 갖고 있어도 좋다. 유기 금속 착체인 페로센을 치환기로서 결합시킨 알킬기이어도 좋다.
- [0110] 게스트기 중 치환기를 가져도 좋은 아릴기로는, 예컨대, 단환 또는 2환 이상의 아릴기를 들 수 있고, 구체적으로는 페닐, 톨루일, 크실릴, 나프틸, 안트릴, 페난트릴 등을 들 수 있다. 이 아릴기는, 예컨대, 알킬기(예컨대 C1~18 알킬기 등), 할로젠 원자(예컨대, 불소, 염소, 브롬 등), 카르복실기, 에스테르기, 아미드기, 아릴기를 갖는 아조기, 보호되어 있어도 좋은 수산기 등의 치환기를 1~3개 갖고 있어도 좋다.

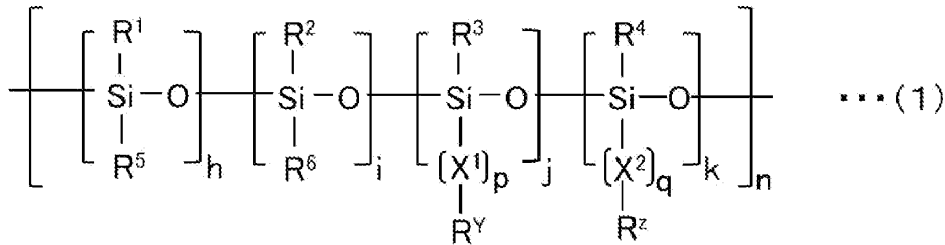
- [0111] (호스트기와 게스트기의 조합)
- [0112] 본 개시에 관한 하나의 실시양태에서는, 화장료에서의 호스트기와 게스트기가, 이하의 조합 (a)~(c)의 어느 1종이다:
- [0113] (a) 호스트기가 α -시클로텍스트린이고, 또한
- [0114] 게스트기가, (1) 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (2) 수산기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (3) 카르복실기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (4) 아미노기를 갖는 탄소수 4~18의 직쇄 알킬기, (5) 환형 알킬기, (6) 페닐기, (7) 아조벤젠기, 및 (8) 계피산기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다;
- [0115] (b) 호스트기가 β -시클로텍스트린이고, 또한
- [0116] 게스트기가, (1') t-부틸기, (2') 아다만틸기, (3') 아릴기, (4') 수산기를 갖는 아릴기, (5') 카르복실기를 갖는 아릴기, (6') 아미노기를 갖는 아릴기, (7') 페로세닐기, (8') 아조벤젠기, 및 (9') 덴실기로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 1종이다;
- [0117] (c) 호스트기가 γ -시클로텍스트린이고, 또한
- [0118] 게스트기가, (1'') 탄소수 18까지의 알킬기, (2'') 수산기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (3'') 카르복실기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (4'') 아미노기를 갖는 탄소수 18까지의 알킬기, (5'') 아다만틸기, (6'') 탄소 원자로 구성되는 클러스터류를 갖는 기, (7'') 아릴기를 갖는 덴실기, (8'') 페로세닐기, 및 (9'') 안트라세닐기로 이루어진 군에서 선택된 적어도 1종이다.
- [0119] <고분자 화합물>
- [0120] 「고분자 화합물」이란, 1종류 이상의 모노머로 이루어진 중합물을 의미하며, 특히는, 분자량 분포를 가지며, 폴리스티렌 환산의 수평균 분자량이 1×10^3 이상(예컨대, $1 \times 10^3 \sim 1 \times 10^8$)인 중합체이다. 고분자 화합물은, 블록 공중합체, 랜덤 공중합체, 교호 공중합체, 그래프트 공중합체의 어느 것이어도 좋고, 그 밖의 양태이어도 좋다.
- [0121] 본 개시에 관한 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물은, 단일의 모노머로 이루어진 중합체일 수 있고, 또는 공중합체, 블록 공중합체 혹은 그래프트 공중합체이어도 좋다.
- [0122] 본 개시에 관한 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물에 함유되는 실록산 결합에 있어서, 실록산 결합을 구성하고 있는 규소 원자(Si)는, 바람직하게는, 수소 원자, 또는 R^S 로 표시되는 기를 갖고 있다. 여기서, R^S 는, 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기, 또는 1가의 복소환기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, R^S 가 복수인 경우, 이들은 각각 동일해도 좋고 상이해도 좋다. R^S 는, 특히는, 탄소수 1~12의 알킬기, 또는 치환기를 갖고 있어도 좋은 아릴기일 수 있다. R^S 는, 바람직하게는 탄소수 1~12, 보다 바람직하게는 탄소수 1~6, 특히 바람직하게는 탄소수 1 또는 2의 알킬기이다.
- [0123] 바람직하게는, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 폴리오르가노실록산 주쇄를 포함하고 있다. 본 개시에 관한 화장료에 함유되는 고분자 화합물이 주쇄에 실록산 결합을 포함하고 있는 경우, 또는 폴리오르가노실록산 주쇄를 포함하고 있는 경우에는, 화장료의 화학적인 안정성이 더욱 향상되는 경우가 있기 때문에 바람직하고, 또한 탄화수소 오일 및 실리콘 오일 등에 대하여 보다 우수한 용해성을 나타내기 때문에 바람직하다.
- [0124] 본 개시에 관한 고분자 화합물은, 주쇄 또는 측쇄에, 폴리오르가노실록산 유닛을 가질 수 있다. 본 개시에 관한 고분자 화합물이 폴리오르가노실록산 유닛을 포함하고 있는 경우, 폴리오르가노실록산 유닛의 비율은, 고분자 화합물 전체에 대하여, 20 중량% 이상, 30 중량% 이상, 혹은 40 중량% 이상일 수 있고, 또한/또는, 100 중량% 이하, 90 중량% 이하, 80 중량% 이하, 70 중량% 이하, 혹은 60 중량% 이하일 수 있다. 폴리오르가노실록산 유닛의 비율이 상기 범위인 경우, 고분자 화합물의 화학적인 안정성 및 용해성이 더욱 향상된다.
- [0125] 특히 바람직하게는, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 모두, 주쇄에 실록산 결합을 포함하고 있다. 본 개시에 관한 화장료에 함유되는 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 모두, 주쇄에 실록산 결합을 포함하고 있는 경우에는, 탄화수소 오일 및 실리콘 오일 등에 대

한 본 개시에 관한 화장료의 용해성이 더욱 향상된다.

[0126] 본 개시에 관한 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 실록산 결합을 포함하고 있는 경우, 그와 같은 고분자 화합물(이하, 「실록산 고분자 화합물」이라고도 함)로는, 예컨대, 폴리오르가노실록산; 폴리오르가노실록산과, 비닐 수지, 아크릴 수지, 우레탄 수지, 에폭시 수지, 폴리이미드 수지, 폴리에스테르 수지, 또는 폴리카보네이트 수지와와 블록 공중합체; 비닐 수지, 아크릴 수지, 우레탄 수지, 에폭시 수지, 폴리이미드 수지, 폴리에스테르 수지, 또는 폴리카보네이트 수지에 폴리오르가노실록산이 그래프트된 그래프트 공중합체를 들 수 있다. 이들 수지 및/또는 폴리오르가노실록산은, 호스트기 및/또는 게스트기 이외의 치환기를 가질 수 있다. 또한, 본 개시에 관한 호스트기 및/또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 실록산 결합을 포함하고 있는 경우, 그와 같은 고분자 화합물로서, 예컨대, 아크릴실리콘 수지, 아크릴-실리콘계 그래프트 공중합체, 폴리노르보넨과 실리콘의 공중합체, 폴루란과 실리콘의 공중합체 등을 들 수 있다.

[0127] 폴리오르가노실록산으로는, 예컨대, 메틸폴리실록산, 페닐폴리실록산, 메틸페닐폴리실록산을 들 수 있고, 이들 폴리실록산은, 호스트기 및/또는 게스트기 이외의 치환기를 가질 수 있다. 본 개시에 관한 고분자 화합물은, 특히 바람직하게는 메틸폴리실록산 골격을 갖는다.

[0128] 바람직하게는, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 상기 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 하기의 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는다:



[0129]

[0130] [식 (1) 중, $R^1 \sim R^6$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기, 1가의 복소환기, 1가의 스피로환 화합물, 1가의 축합환 화합물, $-R^1-COOH$ 로 표시되는 기 또는 $-R^2-C(O)O-R^3$ 로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, R^1 , R^2 및 R^3 은, 각각 1~10의 탄소수의 알킬기 또는 알킬렌기이다; X^1 및 X^2 는, 각각 독립적으로 0, $Si(OH)_2$, $Si(R^{10})_2$, $N(H)$ 혹은 $N(COCH_3)$ 이거나, 혹은 우레탄 결합, 우레아 결합이거나, 에테르 결합, 아마이드 결합 혹은 에스테르 결합이거나, 또는 카르보닐기, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기, 2가의 복소환기, 우레탄기, 우레아기 혹은 아릴렌기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; R^{10} 은, 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 아릴옥시기 또는 복소환기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋다; 복수의 R^{10} 은 각각 동일해도 좋고 상이해도 좋다; X^1 및 X^2 는, 각각 복수인 경우, 이들은 동일해도 좋고 상이해도 좋다; p 및 q는, 각각 독립적으로 0 이상의 정수를 나타낸다; R^Y 는 호스트기이다; R^Z 는 게스트기이다; h, i, j 및 k는, 각각 0 이상의 정수를 나타내고, 이들은 서로 동일해도 좋고 상이해도 좋다; 적어도 j 또는 k가 1 이상의 정수이다; n은 1 이상의 정수를 나타낸다.]

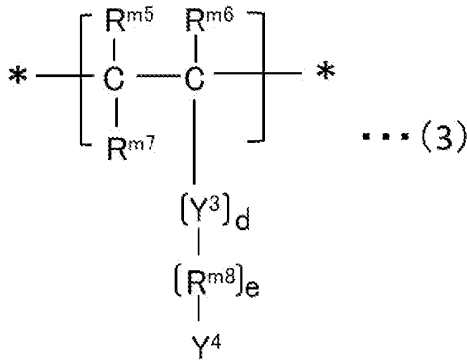
[0131] 바람직하게는, 본 개시에 관한 화장료에 있어서, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는다.

[0132] 본 개시에 관한 수지 조성물에 함유되는 고분자 화합물이 상기 식 (1)로 표시되는 구조를 갖는 경우, 상기 고분자 화합물은, 상기 식 (1)로 표시되는 구조의 양끝에 말단기가 결합한 구조를 가질 수 있다.

[0133] 상기 식 (1)로 표시되는 구조의 말단에 결합할 수 있는 말단기(R^E)로는, 탄소 원자수가 1~10인 알킬기, 특히는 탄소수 1~6의 알킬기, 또는 $Si(R^{E1})_3$ -로 표시되는 기를 들 수 있고, 여기서, R^{E1} 은, 수소 원자이거나, 또는 탄소 원자수가 1~10인 알킬기, 혹은 아릴기이다.

합 혹은 에스테르 결합, O, Si(OH)₂, Si(R¹⁰)₂, N(H) 혹은 N(COCH₃)이며, a, b, c는, 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타낸다; *는, 고분자 화합물의 주쇄를 구성하는 단결합을 나타낸다.]

[0143] 본 개시에 관한 바람직한 실시양태에서는, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물 중 적어도 어느 하나, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 상기 식 (2)로 표시되는 구조 단위에 더하여, 하기의 식 (3)으로 표시되는 구조 단위를 갖는다:



[0144]

[0145] [식 (3) 중, R^{m5}~R^{m7}은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나 또는 알킬기이며, Y³은, 에테르 결합, 아미드 결합 또는 에스테르 결합이며, R^{m8}은, 알킬렌기, 시클로알킬렌기, 알케닐렌기, 알콕실렌기 혹은 아릴렌기이며, 이들은 치환기를 갖고 있어도 좋고, Y⁴는, 수소 원자, 알킬기, 수산기, Si(OH)₃, Si(R¹⁰)₃, NH₂, C(O)CH₃, C(O)NH₂ 또는 N(COCH₃)이며, d 및 e는, 각각 독립적으로 0~3의 정수를 나타낸다; *는, 고분자 화합물의 주쇄를 구성하는 단결합을 나타낸다.].

[0146] 바람직하게는, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 상기 식 (2)로 표시되는 구조 단위, 및 임의로 상기 식 (3)으로 표시되는 구조 단위를 갖는다.

[0147] 상기 식 (2)로 표시되는 구조 단위를 갖는 고분자 화합물의 말단에 말단기(R^f)가 결합하고 있어도 좋다. 말단기로는, 탄소 원자수가 1~10인 알킬기, 또는 Si(R^{E1})₃-로 표시되는 기를 들 수 있고, 여기서, R^{E1}은, 수소 원자이거나, 또는 탄소 원자수가 1~10, 1~6, 1~3 혹은 1~2인 알킬기, 혹은 아릴기이다.

[0148] 상기 식 (2) 및 (3)으로 표시되는 구조 단위를 갖는 고분자 화합물은, 랜덤 코폴리머, 블록 코폴리머, 교호 배열 코폴리머 동일 수 있고, 구성 단위의 배열 순서는 특별히 한정되지 않는다.

[0149] 상기 식 (2)로 표시되는 구조 단위를 갖는 고분자 화합물에서의 구성 단위의 함유 비율은 특별히 한정되지 않는다. 예컨대, 상기 식 (2)로 표시되는 구조 단위를 갖는 고분자 화합물을 구성하는 구성 단위(모노머 단위) 전체에 대하여, 상기 식 (2)로 표시되는 구성 단위의 함유 비율이, 0.01 몰% 이상, 0.1 몰% 이상, 1.0 몰% 이상, 5 몰% 이상, 10 몰% 이상, 혹은 15 몰% 이상일 수 있고, 또한/또는, 90 몰% 이하, 75 몰% 이하, 50 몰% 이하, 25 몰% 이하, 혹은 20 몰% 이하일 수 있다.

[0150] 또한, 상기 식 (2) 및 (3)으로 표시되는 구조 단위를 갖는 고분자 화합물을 구성하는 구성 단위(모노머 단위) 전체에 대하여, 상기 식 (2)로 표시되는 구성 단위의 함유 비율이, 0.01 몰% 이상, 0.1 몰% 이상, 1.0 몰% 이상, 5 몰% 이상, 10 몰% 이상, 혹은 15 몰% 이상일 수 있고, 또한/또는, 30 몰% 이하, 25 몰% 이하, 혹은 20 몰% 이하일 수 있고, 또한 상기 식 (3)으로 표시되는 구성 단위의 함유 비율이, 70 몰% 이상, 75 몰% 이상, 혹은 80 몰% 이상일 수 있고, 또한/또는, 99.99 몰% 이하, 99.9 몰% 이하, 99 몰% 이하, 95 몰% 이하, 혹은 90 몰% 이하일 수 있다.

[0151] 상기 식 (2)에 있어서, R^{m1}~R^{m3}은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나 또는 알킬기이며, 바람직하게는, 수소 원자, 또는 탄소수 1~12, 1~6 혹은 1~3의 알킬기이며, 특히 바람직하게는 수소 원자이다. R^{m1}~R^{m3}은, 바람직하게는 서로 동일하다.

- [0152] 상기 식 (2)에 있어서, R^{m4} 는, 바람직하게는, 탄소수 1~12, 1~6 혹은 1~3의 알킬렌기이거나, 또는 탄소수 6~12의 아릴렌기이며, 특히 바람직하게는, 탄소수 1~12, 1~6 혹은 1~3의 알킬렌기이다.
- [0153] 상기 식 (2)에 있어서, Y^2 는, 바람직하게는, 에테르 결합, 아마이드 결합, 에스테르 결합, N(H), 또는 N(COCH₃)이며, 특히 바람직하게는, 에테르 결합, 아마이드 결합 또는 에스테르 결합이다.
- [0154] 상기 식 (2)에 있어서, a, b, c는, 바람직하게는, 각각 독립적으로 0~2의 정수이며, 특히 바람직하게는 0 또는 1이다.
- [0155] 상기 식 (3)에 있어서, $R^{m5} \sim R^{m7}$ 은, 각각 독립적으로 수소 원자이거나 또는 알킬기이며, 바람직하게는, 수소 원자, 또는 탄소수 1~12, 1~6 혹은 1~3의 알킬기이며, 특히 바람직하게는 수소 원자이다. $R^{m1} \sim R^{m3}$ 은, 바람직하게는 서로 동일하다.
- [0156] 상기 식 (3)에 있어서, R^{m8} 은, 바람직하게는, 탄소수 1~12, 1~6 혹은 1~3의 알킬렌기이거나, 또는 탄소수 6~12의 아릴렌기이며, 특히 바람직하게는, 탄소수 1~12, 1~6 혹은 1~3의 알킬렌기이다.
- [0157] 상기 식 (3)에 있어서, Y^4 는, 바람직하게는, 탄소수 1~12, 1~6 혹은 1~3의 알킬기, C(O)CH₃, C(O)NH₂ 또는 N(COCH₃)이다.
- [0158] 상기 식 (2)에 있어서, d, e는, 바람직하게는, 각각 독립적으로 0~2의 정수이며, 특히 바람직하게는 0 또는 1이다.
- [0159] 바람직한 하나의 실시양태에 있어서는, 상기 식 (2)에서의 R^{m1} , R^{m2} , R^{m3} , R^{m4} , Y^1 , a, 및 b가, 각각 상기 (3)에서의 R^{m5} , R^{m6} , R^{m7} , R^{m8} , Y^3 , d 및 e와 동일하다.
- [0160] 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, R^Y 로 표시되는 호스트기는, α -시클로텍스트린, β -시클로텍스트린 또는 γ -시클로텍스트린인 것이 바람직하다. R^Z 로 표시되는 게스트기는, 치환기를 가져도 좋은 알킬기, 또는 치환기를 가져도 좋은 아릴기인 것이 바람직하다.
- [0161] $R^1 \sim R^5$ 는, 각각 독립적으로 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기, 또는 아릴옥시기인 것이 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기, 알케닐기, 알콕시기, 시클로알콕시기, 히드록시기, 카르복시기, 알데히드기, 또는 아릴기, 아릴옥시기인 것이 보다 바람직하고, 알킬기, 시클로알킬기, 또는 아릴기인 것이 특히 바람직하고, 알킬기인 것이 가장 바람직하다. $R^1 \sim R^5$ 로서의 알킬기는, 바람직하게는 1~10, 보다 바람직하게는 1~6, 특히 바람직하게는 1~3, 가장 바람직하게는 1~2의 탄소 원자를 갖는다.
- [0162] 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, R^Y 및 R^Z 에 관해서는, 본 개시에서의 상기 호스트기 및 게스트기에 관한 기재를 참조할 수 있다.
- [0163] 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 및 R^5 가 메틸기 또는 페닐기인 것이 바람직하고, 메틸기인 것이 특히 바람직하다. R^1 , R^2 , R^3 , R^4 및 R^5 가 메틸기인 경우에는, 탄화수소 화합물 또는 실리콘 등의 비극성 용매에 대한 용해성이 더욱 향상된다.
- [0164] 합성이 더욱 용이해지기 때문에, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, 바람직하게는, R^6 이, $-R^{R1}-COOH$ 로 표시되는 기 또는 $-R^{R2}-COO-R^{R3}$ 로 표시되는 기이며, 이들 기는 치환기를 갖고 있어도 좋고, R^{R1} , R^{R2} 및 R^{R3} 은, 각각 1~10의 탄소수의 알킬기 또는 알킬렌기이다. R^{R1} , R^{R2} 및 R^{R3} 은, 각각 탄소수 1~8, 탄소수 1~6, 또는 탄소수 1~3의 알킬기 또는 알킬렌기일 수 있다.
- [0165] 특히는, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, $R^1 \sim R^5$ 가 메틸기일 수 있고, 또한/또는, R^6 이, $-R^{R1}-COOH$ 로 표시되는 기 혹은 $-R^{R2}-COO-R^{R3}$ 로 표시되는 기일 수 있다.

- [0166] 본 개시에 관한 화장료는, 호스트-게스트 상호 작용에 기초하는 자기 수복성에 기인하여, 개선된 화장 유지력 등의 우수한 물성을 가져오는 경우가 있다. 이론에 의해 한정할 의도는 없지만, 예컨대, 본 개시에 관한 화장료를 화장 도막으로서 이용한 경우에는, 호스트-게스트 상호 작용을 통해 고분자 화합물끼리 가역적으로 재결합함으로써 화장 도막의 손상(눈으로 볼 수 없는 미세한 손상을 포함)이 메워지고, 결과적으로 화장료의 화장 유지력이 더욱 향상되는 것이 생각된다.
- [0167] 본 개시에 관한 바람직한 하나의 실시양태에서는, 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서, $k=0$ 이고, 또한 $R^1 \sim R^3$, R^5 및 R^6 이 알킬기이다. 이 경우에는, 특히 우수한 화장 유지력을 나타내는 화장료가 얻어지는 경우가 있기 때문에 바람직하다. 이론에 의해 한정할 의도는 없지만, 호스트기를 갖는 고분자 화합물의 주쇄 또는 측쇄를 구성하는 Si 원자가 알킬기로 수식되어 있는 경우에는, 비교적 높은 극성을 갖는 치환기로 수식되어 있는 경우와 비교하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물과 게스트기를 갖는 고분자 화합물의 상용성이 향상되고, 그 결과, 호스트-게스트 상호 작용에 기초하는 결합(재결합)이 촉진되기 때문에, 화장료의 자기 수복성이 더욱 향상된다고 생각된다.
- [0168] 특히는, 상기 식 (1) 및/또는 상기 식 (2)에 있어서,
- [0169] $k=0$ 이고, $R^1 \sim R^3$ 및 R^5 가 메틸기이고, 또한 R^6 이, 탄소수 2 이상의 알킬기이며, 보다 바람직하게는, 탄소수 4 이상의 알킬기이며, 더욱 바람직하게는, 탄소 원자수 4~30, 탄소 원자수 4~24, 탄소 원자수 4~18, 탄소 원자수 4~12, 또는 탄소수 4~8의 알킬기이며, 특히는 펜틸기이다. 이 경우에는, 특히 우수한 자기 수복성을 갖는 화장료를 얻을 수 있다.
- [0170] 합성이 더욱 용이해지기 때문에, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, p 및/또는 q는, 각각 1~3인 것이 바람직하고, 1 또는 2인 것이 보다 바람직하다.
- [0171] X^1 및 X^2 는, 각각 독립적으로 Si(OH)₂, N(H) 혹은 N(COCH₃)이거나, 아미드 결합 혹은 에스테르 결합이거나, 또는 카르보닐기, 알킬렌기, 시클로알킬렌기 혹은 아릴렌기인 것이 바람직하고, N(H) 혹은 N(COCH₃)이거나, 아미드 결합 혹은 에스테르 결합이거나, 또는 알킬렌기인 것이 보다 바람직하다.
- [0172] R^{10} 은, 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 카르복시기, 알데히드기, 아릴기인 것이 바람직하고, 수소 원자이거나, 또는 알킬기, 시클로알킬기, 아릴기인 것이 보다 바람직하고, 수소 원자이거나, 또는 알킬기인 것이 특히 바람직하다. 알킬기로서의 R^{10} 은, 바람직하게는 1~10, 보다 바람직하게는 1~6, 특히 바람직하게는 1~3의 탄소수를 갖는다.
- [0173] 합성이 더욱 용이해지기 때문에, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, X^1 은, 탄소수 1~10의 알킬렌기, N(COCH₃), 아미드 결합, 또는 카르보닐기인 것이 바람직하다. 알킬렌기로서의 X^1 은, 바람직하게는 1~6, 보다 바람직하게는 1~4, 특히 바람직하게는 1~2의 탄소수를 갖는다.
- [0174] 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, 바람직하게는, $(X^1)_p$ 가 $R^{P1}-N(COCH_3)$ 또는 $(CH_2)_2-N(COCH_3)$ 이다. 또한, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, 특히 바람직하게는, $-(X^1)_p-R^Y$ 가 $-R^{P1}-N(COCH_3)-R^Y$ 로 표시된다. R^{P1} 은, 치환기를 갖고 있어도 좋은 알킬렌기이며, 바람직하게는 1~10, 보다 바람직하게는 1~6, 특히 바람직하게는 1~3의 탄소수를 갖는다. R^{P1} 은, 바람직하게는 치환기를 갖지 않는다. 특히 바람직하게는, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, $(X^1)_p$ 가 $(CH_2)_3-N(COCH_3)$ 이다.
- [0175] 합성이 더욱 용이해지기 때문에, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, X^2 는, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~12의 알킬렌기, 아미드 결합, 또는 카르보닐기인 것이 바람직하다. 알킬렌기로서의 X^2 는, 바람직하게는 1~8, 보다 바람직하게는 1~6, 특히 바람직하게는 1~3의 탄소수를 갖는다.
- [0176] 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, $(X^2)_q$ 는, 특히 바람직하게는 $-R^{11}-CO-O-$ 또는 $-R^{11}-CO-N(H)-$ 이다. 또한, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, 특히 바람직하게는, $-(X^2)_q-R^Z$ 가 $-R^{11}-CO-O-R^Z$ 또는 $-CO-N(H)-R^Z$ 로 표시된

다. R¹¹은, 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~12의 알킬렌기이며, 바람직하게는 1~10, 보다 바람직하게는 1~6, 특히 바람직하게는 2~4, 가장 바람직하게는 3의 탄소수를 갖는다. R¹¹은, 바람직하게는 치환기를 갖지 않는다.

- [0177] 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, 특히 바람직하게는,
- [0178] (X¹)_p가, -(CH₂)₃-N(COCH₃)-이고, 또한 j가 1 이상의 정수이고, 또한/또는
- [0179] (X²)_q가, -R¹¹-CO-O- 또는 -R¹¹-CO-N(H)-이며, R¹¹은 치환기를 갖고 있어도 좋은 탄소수 1~12의 알킬렌기, 특히는 탄소수 3~6의 알킬렌기이고, 또한 k가 1 이상의 정수이다.
- [0180] 합성이 더욱 용이해지기 때문에, 상기 식 (1) 및/또는 식 (2)에 있어서, X¹ 및 X² 중 적어도 어느 하나가 Si(R¹⁰)₂로 표시되는 경우, R¹⁰이, 수소 원자, 메틸기, 또는 페닐기인 것이 바람직하고, 수소 원자 또는 메틸기인 것이 특히 바람직하고, 메틸기인 것이 가장 바람직하다.
- [0181] n은, 5 이상, 10 이상, 20 이상, 혹은 50 이상의 정수일 수 있고, 또한/또는, 1000 이하, 500 이하, 250 이하, 200 이하, 150 이하, 혹은 100 이하의 정수일 수 있다.
- [0182] 상기 식 (1)~(3)에 관해, 알킬기로는, 예컨대, 치환기를 가져도 좋은 알킬기, 직쇄, 분기 또는 환형의 C1~18의 알킬기를 들 수 있다. 구체적으로는, 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, 펜틸, 시클로펜틸, 헥실, 시클로헥실, 이소헥실, 도데실, 옥타데실, 아다만틸 등의 알킬기를 들 수 있다. 알킬렌기로는, 예컨대, 직쇄, 분기 또는 환형의 C1~18의 알킬렌기, 메틸렌, 에틸렌, n-프로필렌, 이소프로필렌, n-부틸렌, 이소부틸렌을 들 수 있다.
- [0183] 상기 식 (1)~(3)에 관해, 아릴기로는, 치환기를 가져도 좋은 아릴기를 들 수 있고, 구체적으로는, 예컨대, 단환 또는 2환 이상의 아릴기를 들 수 있고, 구체적으로는 페닐, 톨루일, 크실릴, 나프틸, 안트릴, 페난트릴 등을 들 수 있다. 아릴렌기로는, 단환 또는 2환의 아릴렌기, 페닐렌 등을 들 수 있다.
- [0184] 상기 식 (1)~(3)에 관해, 알케닐기로는, 직쇄 또는 분기쇄형의 탄소수 2~20의 알케닐기, 예컨대, 비닐, 1-프로펜-1-일, 2-프로펜-1-일, 이소프로페닐, 2-부텐-1-일, 4-펜텐-1-일 및 5-헥센-1-일을 들 수 있다.
- [0185] 상기 식 (1)~(3)에 관해, 알콕시기로는, 탄소수 1~10의 알콕시기, 예컨대, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 이소프로톡시기, 부톡시기, 이소부톡시기, sec-부톡시기, 펜틸옥시기, 헥실옥시기를 들 수 있다.
- [0186] 상기 식 (1)~(3)에 관해, 치환기로는, 메틸기 및 에틸기 등의 알킬기, 할로젠 원자, 카르복실기, 에스테르기, 아미드기 및 수산기를 들 수 있다.
- [0187] (폴리오르가노실록산 구조를 구성하는 각 구성 단위의 존재 비율)
- [0188] 상기 식 (1) 또는 식 (2)에 있어서, h, i, j 및 k 각각에 의해 첨자되어 있는 각 구성 단위에 관해, 상기 식 (1) 또는 식 (2)로 표시되는 구조를 구성하는 구성 단위의 모든 합계에 대한 각 구성 단위의 존재 비율 P_h, P_i, P_j 및 P_k를 각각 하기와 같이 정의할 수 있다.
- [0189] P_h=100×h/(h+i+j+k)
- [0190] P_i=100×i/(h+i+j+k)
- [0191] P_j=100×j/(h+i+j+k)
- [0192] P_k=100×k/(h+i+j+k)
- [0193] P_h, P_i, P_j 및 P_k는, 상기 식 (1) 또는 식 (2)로 표시되는 구조를 구성하는 모든 구성 단위의 합계의 몰수에 대한, h, i, j 및 k 각각에 의해 첨자되어 있는 각 구성 단위의 몰수의 비율을 나타내고 있다.
- [0194] P_h의 값은, 70 mol%~100 mol%일 수 있고, 90 mol%~100 mol%인 것이 바람직하고, 95 mol%~98 mol%인 것이 보다 바람직하고, 96 mol%~97 mol%인 것이 더욱 바람직하다.

- [0195] P_i 의 값은, 0 mol%~30 mol%일 수 있고, 0 mol%~20 mol%인 것이 바람직하고, 0.5 mol%~10 mol%인 것이 보다 바람직하고, 1 mol%~5 mol%인 것이 더욱 바람직하다.
- [0196] P_j 의 값은, 0.01 mol%~25 mol%, 0.01 mol%~10 mol%, 0.1 mol%~5 mol% 또는 0.1 mol%~2 mol%일 수 있다. 바람직하게는, P_j 의 값이, 0.1 mol%~0.9 mol%, 0.2 mol%~0.8 mol%, 0.3 mol%~0.7 mol% 또는 0.4 mol%~0.6 mol%이며, 이 경우에는, 막형 또는 필름형의 화장료가 특히 양호한 탄성을 가질 수 있다.
- [0197] P_k 의 값은, 0.01 mol%~25 mol%, 0.01 mol%~10 mol%, 0.1 mol%~5 mol% 또는 0.5 mol%~3 mol%일 수 있다.
- [0198] P_h , P_i , P_j 및 P_k 의 값은, h, i, j 및 k 각각에 의해 첨자되어 있는 각 구성 단위를 제조하기 위해 사용한 원료의 투입량, 및 고분자 화합물에 관한 $^1\text{H-NMR}$ 측정 데이터로부터 산출할 수 있다.
- [0199] (호스트기 및 게스트기의 위치)
- [0200] 본 개시에 관한 화장료의 하나의 실시양태에서는,
- [0201] 화장료에 함유되는 호스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 호스트기를 갖고 있고, 또한
- [0202] 화장료에 함유되는 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 게스트기를 갖는다.
- [0203] 본 개시에 관한 화장료의 다른 실시양태에서는,
- [0204] 화장료에 함유되는 호스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 호스트기를 갖고 있고, 또한
- [0205] 화장료에 함유되는 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 말단에 게스트기를 갖는다.
- [0206] 본 개시에 관한 화장료의 또 다른 실시양태에서는,
- [0207] 화장료에 함유되는 호스트기를 갖는 고분자 화합물이, 말단에 호스트기를 갖고 있고, 또한
- [0208] 화장료에 함유되는 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 측쇄에 게스트기를 갖는다.
- [0209] (실록산 결합을 포함하지 않는 고분자 화합물)
- [0210] 본 개시에 관한 하나의 실시양태에서는, 화장료에 포함되는 호스트기를 갖는 고분자 화합물 또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 실록산 결합을 포함하지 않는다. 이 실시양태에 있어서, 실록산 결합을 포함하지 않는 고분자 화합물(이하, 「비실록산 고분자 화합물」이라고도 함)로는, 예컨대, 비닐 화합물, 아크릴 화합물, 올레핀, 스티렌, 아크릴산에스테르 및 메타크릴산에스테르에서 선택되는 적어도 하나의 모노머의 중합체 및 공중합체, 및 이들 중합체 및 공중합체를 포함하는 블록 공중합체를 들 수 있고, 예컨대, 비닐 수지, 아크릴 수지, 우레탄 수지, 에폭시 수지, 폴리이미드 수지, 폴리에스테르 수지 또는 폴리카보네이트 수지를 들 수 있다. 이들 수지는, 호스트기 및/또는 게스트기 이외의 치환기를 가질 수 있다. 게스트기 및/또는 호스트기를 갖고 있고, 또한 실록산 결합을 포함하지 않는 고분자 화합물에 관해서는, 특허문헌 2의 기재를 참조할 수 있다.
- [0211] (화장료에 포함되는 고분자 화합물의 조합)
- [0212] 예컨대, 본 개시에 관한 화장료는, 하기 (i)~(iv) 중 적어도 어느 하나의 고분자 화합물을 가질 수 있다:
- [0213] (i) 호스트기를 갖는 비실록산 고분자 화합물, 및 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물;
- [0214] (ii) 호스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물, 및 게스트기를 갖는 비실록산 고분자 화합물;
- [0215] (iii) 호스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물, 및 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물;
- [0216] (iv) 호스트기 및 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물.
- [0217] (호스트와 게스트의 비율)
- [0218] 화장료가, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 포함하는 경우, 화장료에서의 각각의 함유 비율은 특별히 한정되지 않는다. 예컨대, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물의 합계에 대하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물의 함유량이 10~90 질량%일 수 있고, 또한 게스트기를 갖는 고분자 화합물의 함유량이 90 질량%~10 질량%일 수 있다.

[0219] 화장료에 함유되는 호스트기의 양과 게스트기의 비율은 특별히 한정되지 않는다. 바람직하게는, 화장료에 함유되는 호스트기와 게스트기의 몰비가 0.1:1~1:0.1일 수 있다. 혹은, 화장료에 있어서, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 100 질량부에 대하여, 게스트기를 갖는 고분자 화합물이, 1 질량부 이상, 10 질량부 이상, 혹은 20 질량부 이상 함유될 수 있고, 또한/또는, 1000 질량부 이하, 250 질량부 이하, 혹은 100 질량부 이하 함유될 수 있다.

[0220] <<고분자 화합물의 제조>>

[0221] <고분자 화합물의 제조: 호스트기를 갖는 비실록산 고분자 화합물>

[0222] 호스트기를 갖는 고분자 화합물이며 실록산 결합을 포함하지 않는 것(호스트기를 갖는 비실록산 고분자 화합물)은, 공지의 방법에 의해 제조할 수 있고, 예컨대, 특허문헌 2에 기재되어 있는 방법에 의해 제조할 수 있다.

[0223] <고분자 화합물의 제조: 게스트기를 갖는 비실록산 고분자 화합물>

[0224] 게스트기를 갖는 고분자 화합물이며 실록산 결합을 포함하지 않는 것(게스트기를 갖는 비실록산 고분자 화합물)은, 공지의 방법에 의해 제조할 수 있고, 예컨대, 특허문헌 2에 기재되어 있는 방법에 의해 제조할 수 있다.

[0225] <고분자 화합물의 제조: 호스트기를 가지며 또한 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물의 제조>

[0226] 호스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물은, 예컨대, 하기의 공정을 갖는 방법에 의해 제조할 수 있다:

[0227] (i) 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물(실록산 고분자 화합물)을 제공하는 고분자 제공 공정,

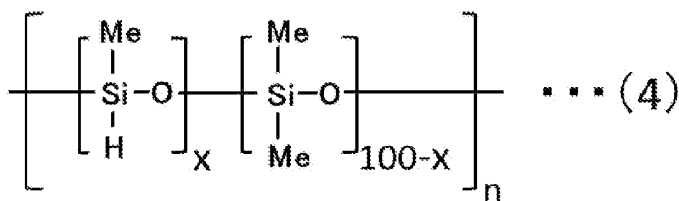
[0228] (ii) 호스트기 전구체 화합물을 제공하는 호스트기 전구체 제공 공정

[0229] (iii) 실록산 고분자 화합물 및 호스트기 전구체 화합물을, 금속 촉매의 존재하에 반응시켜, 호스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물을 얻는 호스트기 부가 반응 공정.

[0230] (고분자 제공 공정)

[0231] 고분자 제공 공정에서는, 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물(실록산 고분자 화합물)을 제공한다. 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물은, 바람직하게는 폴리오르가노실록산이다. 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물은, 바람직하게는, 호스트기 전구체 화합물과의 반응에 적합한 구조를 갖고 있고, 예컨대, Si에 직접 결합한 수소 원자를 갖고 있다.

[0232] 고분자 제공 공정에서 제공되는 실록산 고분자 화합물은, 예컨대, SiH 함유실리콘일 수 있고, 구체적으로는, 예컨대 하기의 식 (4)로 표시되는 구조를 갖는 고분자일 수 있다:

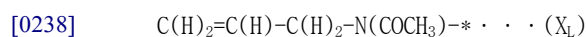


[0233] [식 (4) 중, X는 1 이상의 정수를 나타낸다; n은 1 이상의 정수를 나타낸다].

[0235] 상기 식 (4)에 있어서, X는, 2 이상, 5 이상, 10 이상, 혹은 20 이상일 수 있고, 또한/또는, 95 이하, 90 이하, 75 이하, 혹은 50 이하일 수 있다. 상기 식 (3)에 있어서, n은, 5 이상, 10 이상, 혹은 50 이상일 수 있고, 또한/또는, 1000 이하, 500 이하, 250 이하, 100 이하, 혹은 75 이하일 수 있다.

[0236] (호스트기 전구체 제공 공정)

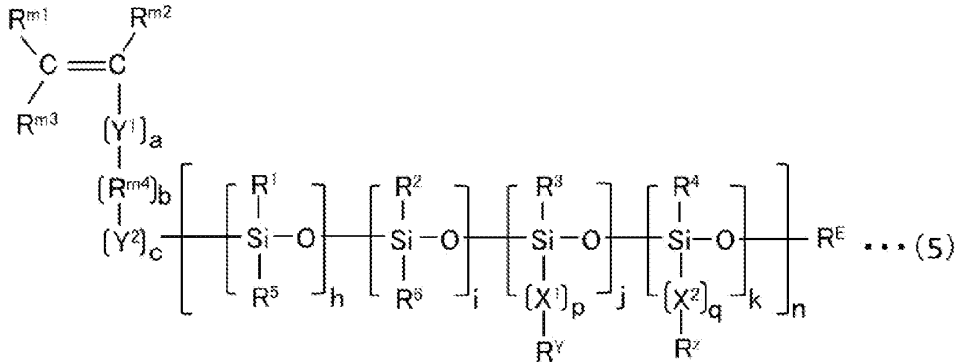
[0237] 호스트기 전구체 제공 공정에서는, 호스트기 전구체 화합물을 제공한다. 호스트기 전구체 화합물은, 바람직하게는, 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물에 결합하기 위한 링커 구조를 갖는다. 호스트기 전구체 화합물은, 예컨대, 링커 구조를 갖는 시클로텍스트린을 들 수 있다. 링커 구조로는, 예컨대, 비닐기를 들 수 있고, 특히는 하기의 식 (X₁)로 표시되는 기를 들 수 있다.



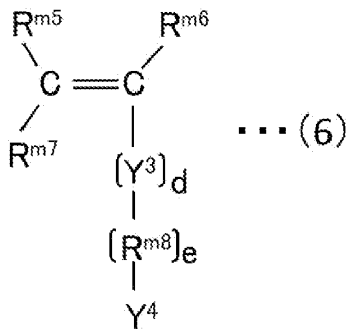
- [0239] [식 (X₁) 중, *은 시클로텍스트린과의 단결합을 나타낸다.]
- [0240] (호스트기 부가 반응 공정)
- [0241] 호스트기 부가 반응 공정에서는, 실록산 고분자 화합물 및 호스트 전구체 화합물을 금속 촉매의 존재하에 반응시켜, 호스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물을 얻는다. 예컨대, 주쇄의 Si에 직접 결합한 수소 원자를 갖는 실록산 고분자 화합물과, 링커 구조로서 비닐기를 갖는 시클로텍스트린을, 금속 촉매의 존재하에 반응시키는 것에 의해, 시클로텍스트린이 링커 구조를 통해 주쇄의 Si 원자에 결합한 실록산 고분자 화합물을 얻을 수 있다.
- [0242] 바람직하게는, 호스트기 부가 반응의 후에, 고분자 화합물에 있어서 Si 원자에 직접 결합하고 있는 수소 원자를 치환한다. 이것에 의해, 얻어지는 수지 재료의 화학적인 안정성이 더욱 향상된다. 이 치환에 이용할 수 있는 화합물로는, 아크릴산에스테르, 또는 탄소수 2 이상의 알켄을 들 수 있다. 탄소수 2 이상의 알켄을 이용한 경우에는, 얻어지는 화장료의 자기 수복성이 특히 우수하기 때문에 바람직하다. 탄소수 2 이상의 알켄 중 보다 바람직한 화합물은, 탄소수 5 이상의 알켄이며, 더욱 바람직한 화합물은, 탄소수 5~30, 탄소수 5~24, 탄소수 5~18, 탄소수 5~12, 또는 탄소수 5~8의 알켄이며, 특히는 1-펜텐이다.
- [0243] (금속 촉매)
- [0244] 상기 호스트기 부가 반응 공정에서 사용되는 금속 촉매로는 백금(Pt)을 들 수 있다.
- [0245] <고분자 화합물의 제조: 게스트기를 가지며 또한 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물의 제조>
- [0246] 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물은, 예컨대, 하기의 공정을 갖는 방법에 의해 제조할 수 있다:
- [0247] (i) 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물(실록산 고분자 화합물)을 제공하는 고분자 제공 공정,
- [0248] (ii) 게스트기 전구체 화합물을 제공하는 게스트기 전구체 제공 공정,
- [0249] (iii) 실록산 고분자 화합물 및 게스트기 전구체 화합물을 용매 중에서 반응시켜, 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물을 얻는 반응 공정.
- [0250] (고분자 제공 공정)
- [0251] 고분자 제공 공정에서는, 카르복시기를 갖는 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물을 제공한다. 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물은, 바람직하게는 폴리오르가노실록산이다. 고분자 제공 공정에서 제공되는 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물은, 바람직하게는, 게스트기 전구체 화합물과 반응하여 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물을 발생시키기 위해 적합한 구조를 갖고 있고, 예컨대, 탄소수 1~12의 알킬렌기를 통해 주쇄의 Si에 결합한 카르복시기를 갖는다.
- [0252] (게스트기 전구체 제공 공정)
- [0253] 게스트기 전구체 제공 공정에서는, 게스트기 전구체 화합물을 제공한다. 게스트기 전구체 화합물은, 바람직하게는, 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물에 결합하기 위한 링커 구조를 갖는다. 게스트기 전구체 화합물로는, 구체적으로는, 예컨대, 링커 구조를 갖는 아다만틸을 들 수 있다. 링커 구조로는, 예컨대, 아미노기를 들 수 있다.
- [0254] (반응 공정)
- [0255] 반응 공정에서는, 실록산 고분자 화합물 및 게스트기 전구체 화합물을 용매 중에서 반응시켜, 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물을 얻는다. 예컨대, 알킬기를 통해 주쇄의 Si에 결합한 카르복시기를 갖는 실록산 고분자 화합물과, 링커 구조로서 아미노기를 갖는 아다만틸을, 축합제의 존재하에서 용매 중에서 반응시키는 것에 의해, 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물을 얻을 수 있다. 또, 이 경우, 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물은, 아다만틸이, 링커 구조를 통해 실록산 고분자 화합물의 주쇄를 구성하는 Si 원자에 결합한 구조를 갖고 있다. 축합제로는, 예컨대, 1-히드록시벤조트리아졸(HOBT; 도쿄 화성 공업 주식회사, H0468, Cas: 80029-43-2) 및 N,N'-디시클로헥실카르보디이미드(DCC; 나카라이테스크 주식회사, 11913-52, Cas: 538-75-0)를 들 수 있다.
- [0256] <고분자 화합물의 제조: 호스트기 및 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물>
- [0257] 호스트기 및 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물은, 예컨대, 상기 방법에 의해 제조된 호스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물, 및 상기 방법에 의해 제조된 게스트기를 갖는 실록산 고분자 화합물을 중합시켜 블록 공중합체를 형성함으로써 얻을 수 있다.

[0258] <고분자 화합물의 제조: 호스트기 및/또는 게스트기를 가지며 또한 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물의 제조>

[0259] 호스트기 및/또는 게스트기를 가지며 또한 실록산 결합을 갖는 고분자 화합물은, 예컨대, 하기의 식 (5)로 표시되는 모노머와 식 (6)으로 표시되는 모노머를 중합 반응시켜 제조할 수도 있다. 중합 반응의 양식은 특별히 한정되지 않고, 공지된 방법을 이용할 수 있다.



[0260]



[0261]

[0262] 상기 식 (5) 및 식 (6)에서의 각 기호에 관해서는, 전술한 식 (2) 및 식 (3)에서의 각 기호에 관한 설명을 참조할 수 있다. 또, R^E는 말단기를 나타낸다. R^E에 관해서도 전술한 기재를 참조할 수 있다.

[0263] (가교)

[0264] 본 개시에 관한 화장료의 하나의 실시양태에서는, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물의 적어도 어느 하나, 또는 호스트기 및 게스트기를 갖는 고분자 화합물이 가교되어 있다. 가교는, 호스트-게스트 상호 작용 이외의, 예컨대 공유 결합에 의한 가교(예컨대 실록산 가교)일 수 있다.

[0265] 예컨대, 호스트기를 갖는 고분자 화합물은, 가교되는 것에 의해 호스트체를 형성할 수 있고, 또한/또는, 게스트기를 갖는 고분자 화합물은, 가교되는 것에 의해 게스트체를 형성할 수 있다.

[0266] 고분자 화합물을 가교하는 방법 및 가교제로는, 고분자 화합물의 종류에 따라서 공지된 것을 사용할 수 있다. 가교는, 예컨대, 광조사에 의해 형성될 수 있다. 가교제로는, 예컨대, N,N'-메틸렌비스아크릴아미드(MBAAm) 및 에틸렌글리콜디메타크릴레이트(EDMA)를 들 수 있다.

[0267] <<화장료의 제조>>

[0268] 본 개시에 관한 화장료는, 예컨대, 호스트기를 갖는 고분자 화합물과, 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 각각 개별로 제조하고, 얻어진 호스트기를 갖는 고분자 화합물과, 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 각각 혼합함으로써 조제할 수 있다. 호스트기를 갖는 고분자 화합물과, 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 혼합함에 있어서는, 예컨대, 양자 모두 고체 상태로 혼합할 수 있고, 한쪽 혹은 양쪽이 액체 상태로 혼합해도 좋고, 또는 한쪽 혹은 양자를 용액으로 한 상태로 혼합할 수 있다. 한쪽의 고분자 화합물의 용액에, 다른쪽의 고분자 화합물을 고체 상태로 첨가하는 방법이어도 좋다.

[0269] 호스트기를 갖는 고분자 화합물과 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 혼합시키는 조건은, 특별히 한정되지 않는

다. 예컨대, 혼합시의 온도, 혼합 시간, 혼합 수단 등은 적절한 조건으로 행할 수 있다.

- [0270] 본 개시에 관한 화장료의 하나의 실시양태에서는, 화장료가 실온에 있어서 페이스트상이다. 화장료에 함유되는 고분자 화합물로서, 실온에 있어서 페이스트상인 것을 선택함으로써, 페이스트상의 화장료를 얻을 수 있다. 혹은, 고분자 화합물을 용매에 용해시키는 것에 의해, 액체상의 화장료를 얻어도 좋다. 실온에 있어서 액체상 또는 페이스트상인 화장료는, 성막이 비교적 용이하다는 점에서 특히 바람직하다.
- [0271] 실온에 있어서 액체상인 고분자 화합물은, 예컨대, 폴리오르가노실록산을 주쇄에 갖는 고분자 화합물, 특히는 디메틸폴리실록산을 들 수 있다.
- [0272] 화장료의 제조시에 고분자 화합물을 용해시키는 용매는, 특별히 한정되지 않지만, 예컨대, 실리콘 오일, 탄화수소 유제를 들 수 있다. 실리콘 오일로는, 옥타메틸시클로테트라실록산, 데카메틸시클로펜타실록산, 도데카메틸시클로헥사실록산, 디메틸폴리실록산, 카프릴릴메티콘에서 선택되는 1종 또는 2종 이상이 바람직하고, 데카메틸시클로펜타실록산, 디메틸폴리실록산에서 선택되는 1종 또는 2종 이상이 보다 바람직하고, 중합도 10 이하의 디메틸폴리실록산이 더욱 바람직하다. 탄화수소 유제로는, 톨루엔 및 이소도데칸을 들 수 있고, 이소도데칸이 바람직하다.
- [0273] 본 개시에 관한 화장료에 포함되는 고분자 화합물은, 호스트-게스트 상호 작용에 의해 서로 결합하고 있어도 좋고, 호스트-게스트 상호 작용에 의해 서로 결합하지 않아도 좋다.
- [0274] 화장료는, 막형으로 형성할 수 있다. 화장료가 막형이면, 피부 등의 위에 적용되는 화장 도막으로서 사용할 수 있다. 화장료가 막형인 경우의 두께는 특별히 제한되지 않고, 용도에 따라서 적절한 두께로 설정할 수 있다. 예컨대, 화장료는, 1 nm~1 cm로 조절할 수 있고, 성막성이 양호하다는 점에서는 1 μm~100 μm로 조절할 수 있다.
- [0275] (성형)
- [0276] 화장료를 화장 도막으로서 성형하는 방법은 특별히 한정되지 않는다. 예컨대, 고분자 화합물의 용액 또는 분산액을 조제하고, 이 용액 또는 분산액을 도포함으로써, 화장료를 화장 도막으로 형성할 수 있다.
- [0277] 화장료의 제조 방법은, 예컨대, 하기의 공정을 포함할 수 있다:
- [0278] 호스트기를 갖는 고분자 화합물을 용매에 용해시켜 호스트 용액을 제작하는 것, 및
- [0279] 이 호스트 용액에 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 가하는 것에 의해 화장료 A를 제작하는 것.
- [0280] 상기 방법에 있어서, 대체적으로는, 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 용매에 용해시켜 게스트 용액을 제작하고, 또한 이 게스트 용액에 호스트기를 갖는 고분자 화합물을 가하는 것에 의해, 화장료 A를 제작해도 좋다.
- [0281] 전술한 바와 같이 하여 제조된 화장료 A를 화장 도막으로 하는 공정은, 예컨대, 하기의 조작을 포함할 수 있다:
- [0282] 화장료 A를 손가락으로 대상물에 도포하고 또한 건조시켜 화장 도막을 형성하는 것.
- [0283] 본 개시의 다른 실시양태에서는, 화장료의 제조 방법은, 예컨대 하기의 공정을 포함할 수 있다:
- [0284] 페이스트상 또는 액체상의 호스트기를 갖는 고분자 화합물과, 페이스트상 또는 액체상의 게스트기를 갖는 고분자 화합물을 혼합하여 화장료 B를 작성하는 것.
- [0285] 전술한 바와 같이 하여 제조된 화장료 B를 화장 도막으로 하는 공정은, 예컨대 하기의 조작을 포함할 수 있다:
- [0286] 상기 화장료 B를 대상물에 도포하여 화장 도막을 형성하는 것.
- [0287] 한편, 상기 화장료 B의 제조 방법에 있어서, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 또는 게스트기를 갖는 고분자 화합물의 어느 하나가, 페이스트상 또는 액체상이어도 좋다.
- [0288] <<용매>>
- [0289] 본 개시에 관한 화장료는, 전술한 성분 이외에, 용매를 더 함유할 수 있다. 용매를 더 갖고 있는 것에 의해, 피부 등에 대한 도포성이 특히 우수한 화장료를 제공할 수 있다.
- [0290] 본 개시에 관한 화장료에 함유될 수 있는 용매로는, 특별히 한정되지 않지만, 예컨대, 물, 알코올류, 실리콘류, 탄화수소 화합물, 에스테르 화합물, 에테르류 및 왁스를 들 수 있다.

- [0291] 알코올류로는, 글리세린, 부틸렌글리콜(BG), 프로필렌글리콜(PG), 디프로필렌글리콜(DPG), 폴리에틸렌글리콜(PEG), 에탄올 및 올레일알코올을 들 수 있다.
- [0292] 실리콘류로는, 도데카메틸시클로헥사실록산, 옥타메틸시클로테트라실록산, 데카메틸시클로펜타실록산, 디메틸폴리실록산, 카프틸메티콘, 메틸폴리실록산, 메틸페닐폴리실록산, 시클로펜타실록산, 아미노에틸아미노프로필메틸실록산·디메틸실록산 공중합체, 아미노프로필디메티콘, 메틸트리메티콘, 트리스(트리메틸실릴)메틸실란, 테트라키스(트리메틸실릴)실란, 아모디메티콘, 시클로메티콘, 페닐트리메티콘을 들 수 있다. 이들 중에서도, 데카메틸시클로펜타실록산, 디메틸폴리실록산에서 선택되는 1종 또는 2종 이상이 보다 바람직하고, 중합도 10 이하의 디메틸폴리실록산이 더욱 바람직하다.
- [0293] 탄화수소 화합물로는, 수첨 폴리이소부텐, 바셀린, 미네랄 오일, 스쿠알렌, 파라핀, 이소파라핀, 벤조산알킬, 폴리이소부텐, 이소도데칸, 이소트리데칸, 이소헥사데칸 경질 이소파라핀을 들 수 있고, 이소도데칸이 바람직하다.
- [0294] 에스테르 화합물로는, 팔미트산이소프로필, 팔미트산에틸헥실, 미리스트산이소프로필, 미리스트산옥틸도데실을 들 수 있다.
- [0295] 에테르류로는, 에틸퍼플루오로부틸에테르를 들 수 있다.
- [0296] 본 개시에 관한 화장료가 용매를 더 갖는 경우, 용매는 휘발성인 것이 특히 바람직하다. 본 개시에 관한 화장료가 휘발성의 용매를 함유하는 경우에는, 화장료를 피부 등에 적용했을 때에 용매가 휘발함으로써 화장료가 막형이 되기 때문에, 용이하게 화장 도막을 형성할 수 있다.
- [0297] 휘발성의 용매로는, 상기 알코올류 외에, 디메틸폴리실록산, 메틸트리메티콘, 옥타메틸시클로테트라실록산, 데카메틸시클로펜타실록산, 도데카메틸시클로헥사실록산, 트리스(트리메틸실릴)메틸실란, 테트라키스(트리메틸실릴)실란 등의 실리콘류, 이소도데칸, 이소트리데칸, 이소헥사데칸, 경질 이소파라핀, 수첨 폴리이소부텐 등의 탄화수소 화합물, 에틸퍼플루오로부틸에테르 등의 에테르류를 들 수 있다.
- [0298] <<그 밖의 첨가물>>
- [0299] 본 개시에 관한 화장료는, 본 발명의 효과를 손상하지 않을 정도로, 전술한 성분 이외의 각 주성분을 함유할 수 있고, 예컨대, 저급 알코올, 고급 알코올, 구형 분말, 피막 형성제, 청량제, 유성 성분, 계면 활성제, 수성 성분, 수용성 고분자, 자외선 흡수제, 보습제, 갈색 방지제, 산화 방지제, 소포제, 미용 성분, 방부제, 금속 이온 밀봉제, 혈행 촉진제, 각종 추출액, 무기 안료, 유기 안료, 광물, 유기 염료 등의 색제, 색소, 증점제, pH 조정제, 냉감제, 제한제, 살균제, 피부 부활제, 향료 등을, 각종 효과를 부여하기 위해 적절하게 함유할 수 있다.
- [0300] 저급 알코올은, 사용성 조정제, 방부 조제로서 화장료에 있어서 범용된다. 저급 알코올로는, 예컨대, 에탄올 및 이소프로필알코올을 들 수 있다.
- [0301] 구형 분말로는, 구형 무수규산 등의 무기 분말, 구형 폴리메틸메타크릴레이트, 구형 셀룰로오스, 구형 나일론, 구형 폴리에틸렌, 구형 실리콘 파우더를 들 수 있다.
- [0302] 피막 형성제를 추가적으로 포함하는 경우, 피막 형성제로는, 폴리비닐알코올, 폴리비닐피롤리돈, 폴리아세트산 비닐, 폴리아크릴산알킬 등의 라텍스류, 텍스트린, 알킬셀룰로오스나 니트로셀룰로오스 등의 셀룰로오스 유도체 등을 들 수 있다.
- [0303] 청량제로는, 멘톨 유도체, 캠퍼 유도체, 정유류를 들 수 있다.
- [0304] 실시예
- [0305] 이하, 본 개시에 관한 발명을, 실시예에 의해 구체적으로 설명한다.
- [0306] <<측정법>>
- [0307] 하기에 나타내는 측정 및 평가는 이하의 방법으로 행했다.
- [0308] <¹H-NMR>
- [0309] 핵자기 공명(NMR) 스펙트럼을, 기기로서 니혼덴시 ECA500을 이용하여 기록했다. 측정은 25℃에서 행했다. 중수 소화 클로로포름을 용매로서 사용했다. NMR 화학 시프트는, 7.26 ppm(클로로포름)에서의 잔존 용매 피크에 대한

여 ppm(파트 퍼 밀리언)으로 기록했다.

[0310]

<IR>

[0311]

푸리에 변환 적외 스펙트럼을, 니혼분코 FT/IR 6100 스펙트럼 미터에 의해, 500 cm^{-1} ~4000 cm^{-1} 의 범위에서 측정했다.

[0312]

<MALDI-TOF MAS>

[0313]

MALDI-TOF MS 스펙트럼은, 기기로서 Bruker autoflex maX LRF를 이용하여 측정했다.

[0314]

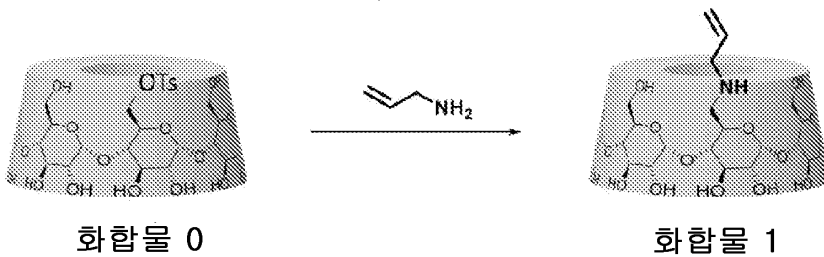
<원소 분석>

[0315]

원소 분석은, 차동 열전도도법에 기초하여, 원소 분석 장치(야나코 제조, CHN 코더)를 이용하여 행했다.

[0316]

<<화합물의 제조>>



[0317]

<제조예 1: 화합물 1의 제조>

[0319]

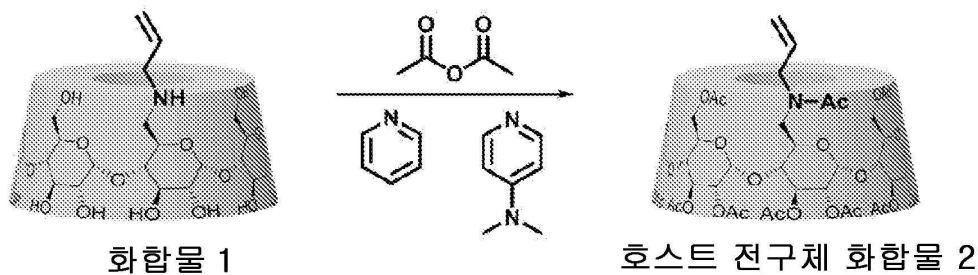
하기의 방법에 따라서 화합물 1을 제조했다:

[0320]

화합물 0(β 시클로덱스트린-OTs; C-6 monotosylate d- β -CD)을, Tetrahedron Letters, Vol.25, No.31, 3331-3334, 1984에 기재된 방법에 따라서 제조했다. 30.0 g(23.28 mmol)의 화합물 0을, 300 g(5.25 mol)의 알릴아민에 용해한 후에 밤새 환류했다. 그리고, 이 반응 용액을 증발기로 감압 건조하여 건고물을 얻었다. 얻어진 건고물을, 600 mL의 아세토니트릴에 가하여 용해시켰다. 그리고, 용액 중의 침전을 흡인 여과로 회수하고, 600 mL의 아세토니트릴에 가하여 용해시켰다. 그리고, 용액 중의 침전을 흡인 여과로 회수하고, 100 $^{\circ}$ C의 진공 오븐에서 밤새 감압 건조하여 화합물 1을 얻었다.

[0321]

MALDI-TOFMS, $^1\text{H-NMR}$ 및 원소 분석에 의해, 얻어진 화합물 1의 합성을 확인했다.



[0322]

<제조예 2: 호스트기 전구체 화합물 2>

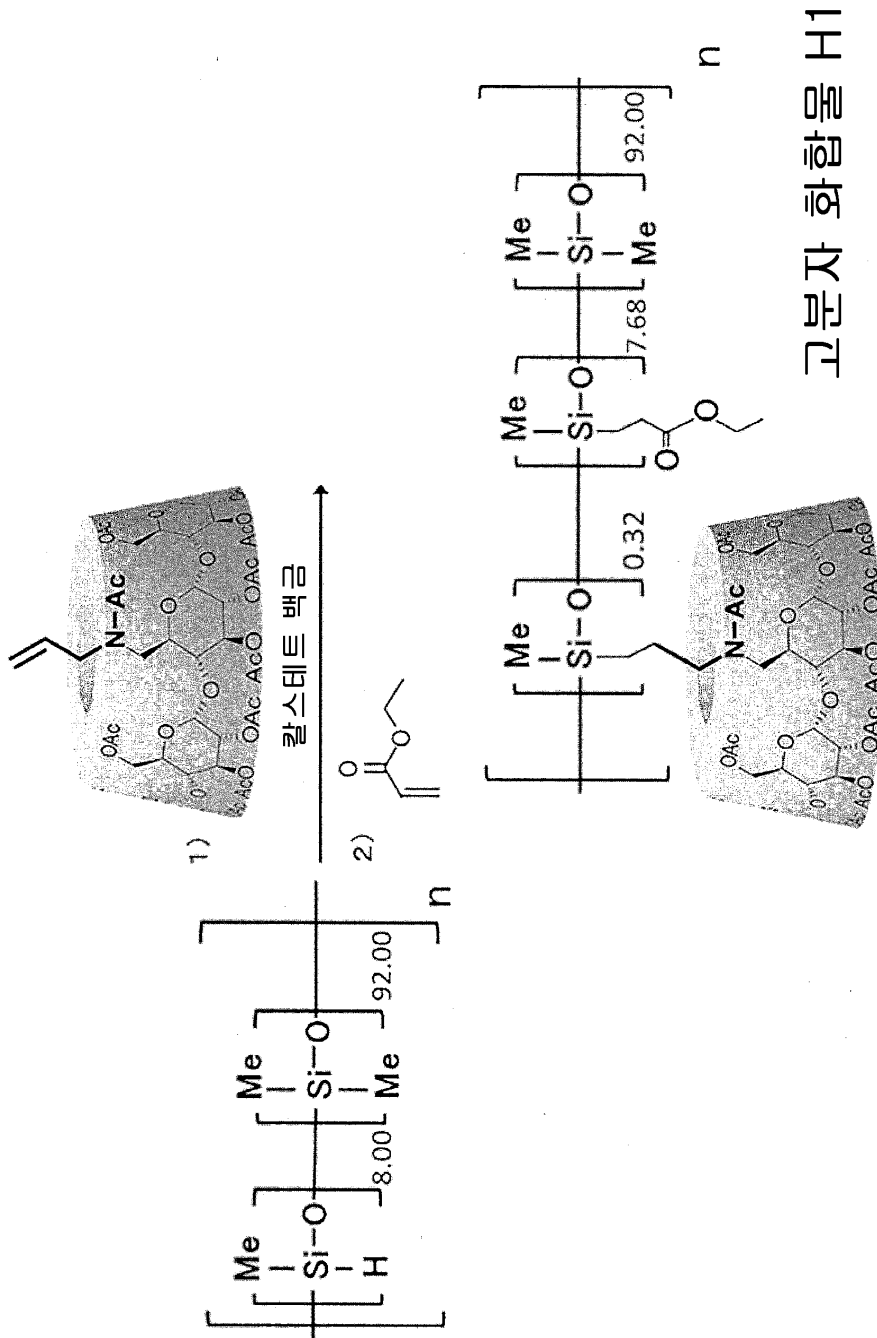
[0324]

하기의 방법에 따라서, 호스트 전구체 화합물 2를 제조했다:

[0325]

상기 방법으로 얻어진 화합물 1을 20 g(17.0 mmol) 준비하고, 여기에 300 mL(300 g, 3.8 mol)의 건조 피리딘, 및 170 mL(184 g, 1.8 mol)의 무수아세트산을 가하여, 70 $^{\circ}$ C에서 밤새 교반했다. 그리고, 반응 용액을 빙랭하면서 메탄올 60 mL를 적하했다. 그리고, 반응 용액을 증발기로 감압 건조하여 건고물을 얻었다. 얻어진 건고물을 100 mL의 아세톤에 용해하고 물 2 L에 적하했다. 그리고, 용액 중의 침전을 흡인 여과로 회수하고, 또한 100 mL의 아세톤에 용해하여 얻어진 용액을 물 1.5 L에 적하했다. 그리고, 용액 중의 침전을 흡인 여과로 회수하고, 70 $^{\circ}$ C의 진공 오븐에서 1일 감압 건조하여, 호스트 전구체 화합물 2를 얻었다.

[0326] MALDI-TOFMS, ¹H-NMR 및 원소 분석에 의해, 호스트 전구체 화합물 2의 합성을 확인했다.



[0327]

[0328] <제조예 3: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H1의 제조>

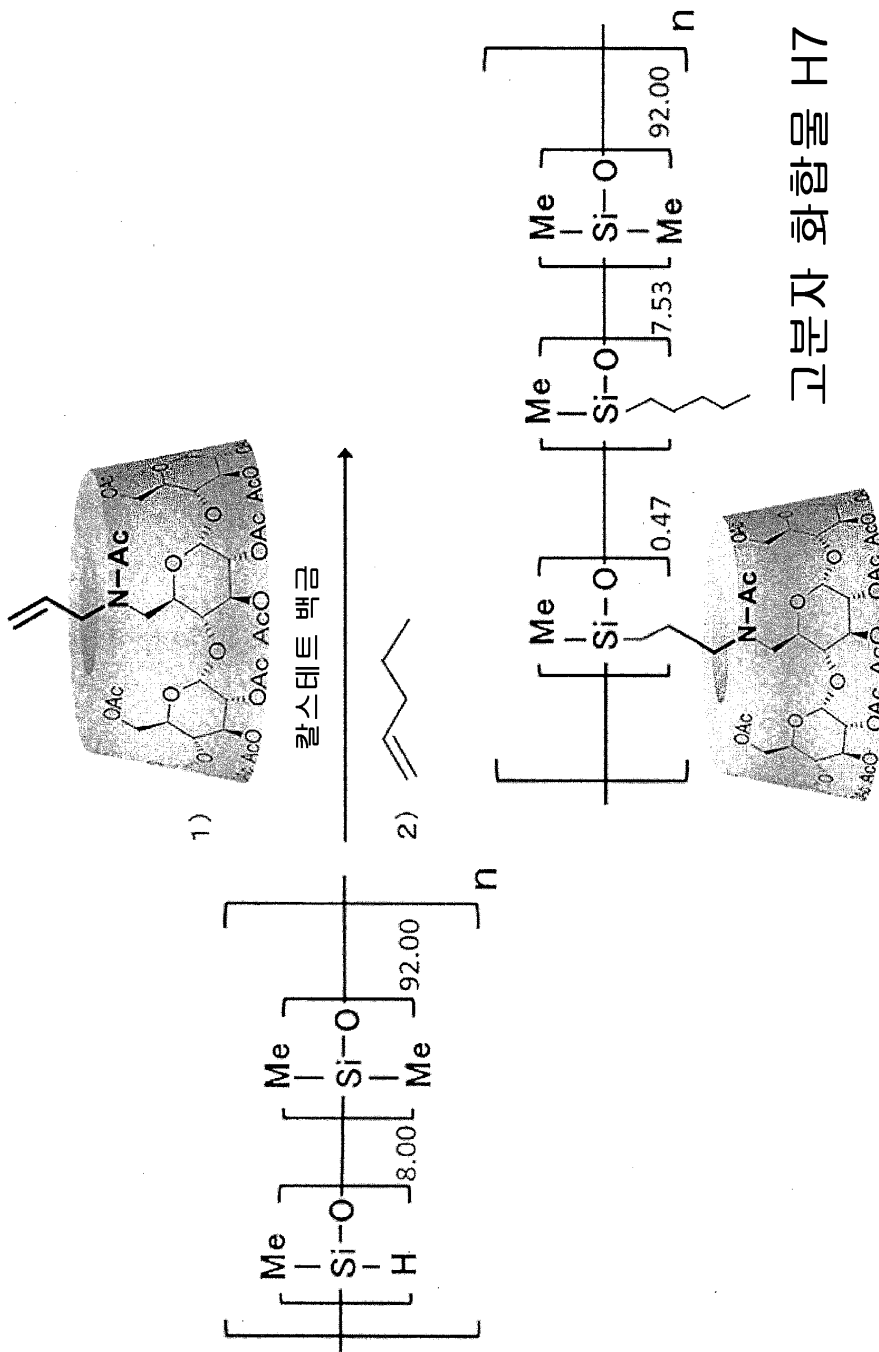
[0329] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H1을 하기의 방법으로 제조했다:

[0330] 1.8 g(0.9 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2를 톨루엔 400 ml에 녹여 질소 치환하고, 105℃에서 교반했다. 거기에, 12.0 g(14.4 mmol)의 메틸 하이드로젠 폴리실록산(methyl hydrogen polysiloxane; 동점도 20 mm²/s, 유효 수소량 7.5 mol%) 및 165 μL의 칼스테트 백금 용액을 400 mL 톨루엔에 용해시킨 용액을, 1시간에 걸쳐 적하에 의해 가했다. 한편, 칼스테트 백금 용액은, 백금(0)-1,3-디비닐테트라메틸디실록산 콤플렉스(Platinum(0)-1,3-Divinyltetramethyldisiloxane Complex(19.0%-21.5% as Pt), TCI 제조, P2075, Cas: 68478-92-2 제품 코드: P2075)를 이용하여 조정했다. 사용한 Pt의 중량은 28.5 mg이었다. 적하 종료로부터 4시간후에, 4.8 g(48 mmol)의 아크릴산에틸(Etylacrylate; 도쿄 화성 공업 주식회사 제조, Cas: 140-88-5)을 주사기로 가했다. 얻어진 반응액 중 10 g을 이소도데칸(마루카졸 R, 마루젠 석유 화학 주식회사) 114 ml에 녹였다. 녹지 않고 남은 미반응 CD(0.499 g)을, 아세트산에틸에 대한 추출에 의해 제거하여, 이소도데칸에 용해한, 호스트기를 갖는 고분자 화

합물 H1을 얻었다.

- [0331] 얻어진 고분자 화합물 H1에 관해, $^1\text{H-NMR}$ 에 의한 분석, 및 IR 스펙트럼에 의한 분석을 행하여, 목적물이 얻어진 것을 확인했다.
- [0332] 얻어진 고분자 화합물 H1에 관해, $^1\text{H-NMR}$ 에 의해 측정된 호스트기 도입률은 0.32 mol%였다.
- [0333] <제조예 4: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H2의 제조>
- [0334] 0.6 g(0.3 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2, 4.0 g(4.8 mmol)의 메틸 하이드로젠 폴리실록산, 및 55 μL 의 칼스테트 백금 용액을 사용한 것 외에는, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H1의 제조와 동일하게 하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H2를 제조했다.
- [0335] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H2에 관해, $^1\text{H-NMR}$ 에 의해 측정된 호스트기 도입률은 0.31 mol%였다.
- [0336] <제조예 5: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H3의 제조>
- [0337] 4.0 g(4.8 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2, 4.0 g(4.8 mmol)의 메틸 하이드로젠 폴리실록산, 및 55 μL 의 칼스테트 백금 용액을 사용하고, 용매량을 조정하여 주쇄 실리콘 농도를 34.3 mmol로 한 것 외에는, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H1의 제조와 동일하게 하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H3을 제조했다.
- [0338] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H3에 관해, $^1\text{H-NMR}$ 에 의해 측정된 호스트기 도입률은 0.20 mol%였다.
- [0339] <제조예 6: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H4의 제조>
- [0340] 2.4 g(1.2 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2, 16.0 g(19.2 mmol)의 메틸 하이드로젠 폴리실록산, 및 220 μL 의 칼스테트 백금 용액을 사용한 것 외에는, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H1의 제조와 동일하게 하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H4를 제조했다.
- [0341] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H4에 관해, $^1\text{H-NMR}$ 에 의해 측정된 호스트기 도입률은 0.37 mol%였다.
- [0342] <제조예 7: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H5의 제조>
- [0343] 0.6 g(0.3 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2, 2.0 g(2.4 mmol)의 메틸 하이드로젠 폴리실록산, 및 55 μL 의 칼스테트 백금 용액을 사용한 것 외에는, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H1의 제조와 동일하게 하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H5를 제조했다.
- [0344] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H5에 관해, $^1\text{H-NMR}$ 에 의해 측정된 호스트기 도입률은 1.0 mol%였다.
- [0345] <제조예 8: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H6의 제조>
- [0346] 0.6 g(0.3 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2, 4.0 g(4.8 mmol)의 메틸 하이드로젠 폴리실록산, 및 55 μL 의 칼스테트 백금 용액을 사용한 것 외에는, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H1의 제조와 동일하게 하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H6을 제조했다.

[0347] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H6에 관해, ¹H-NMR에 의해 측정된 호스트기 도입률은 0.5 mol%였다.



[0348] <제조예 9: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H7의 제조>

[0349] 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H7을 하기의 방법으로 제조했다:

[0350] 1.8 g(0.9 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2를 톨루엔 900 ml에 녹여 질소 치환하고, 105°C에서 교반했다. 거기에, 12.0 g(11.48 mmol)의 메틸 하이드로젠 폴리실록산 및 165.0 μL의 칼스테트 백금 용액을 250 mL의 톨루엔에 용해시킨 용액을, 30분에 걸쳐 적하에 의해 가했다. 또, 칼스테트 백금 용액은, 백금(0)-1,3-디비닐테트라메틸디실록산 콤플렉스(Platinum(0)-1,3-Divinyltetramethyldisiloxane Complex(19.0%-21.5% asPt), TCI 제조, P2075, Cas: 68478-92-2 제품 코드: P2075)를 이용하여 조정했다. 사용한 Pt의 중량은 28.2 mg이며, 반응 용액 중의 시약 농도는 [Pt]=0.09 mM이었다. 적하 종료로부터 4시간후에, 2.0 g(29.0 mmol)의 1-펜텐(도쿄 화학공업사 제조)을 가했다. 밤새 환류를 행하고, 증발기에 의해 톨루엔을 증류 제거한 후 헥산에 용해하고, 원심 분리기에 의해 침전물을 제거하여, 헥산에 용해한 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H7을 얻었다.

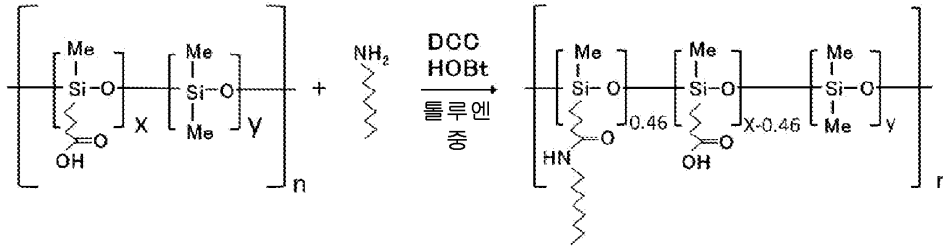
[0352] 얻어진 고분자 화합물 H7에 관해, ¹H-NMR에 의한 분석 및 IR 스펙트럼에 의한 분석을 행하여, 목적물이 얻어진 것을 확인했다.

[0353] 얻어진 고분자 화합물 H7에 관해, ¹H-NMR에 의해 측정된 호스트기 도입률은 0.47 mol%였다.

[0354] <제조예 10: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H8의 제조>

[0355] 3.6 g(1.8 mmol)의 호스트 전구체 화합물 2의 호스트 전구체 화합물을 사용한 것 외에는, 상기 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H7의 제조와 동일하게 하여, 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H8을 제조했다. 고분자 화합물 H8의 호스트기 도입률은 0.63 mol%였다.

[0356] <제조예 11: 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G1의 제조>



고분자 화합물 G1

[0357]

[0358] [식 중, x 및 y는 0 이상의 정수이며, x+y=100이다.]

[0359] 고분자 화합물 G1을 하기의 방법으로 제조했다:

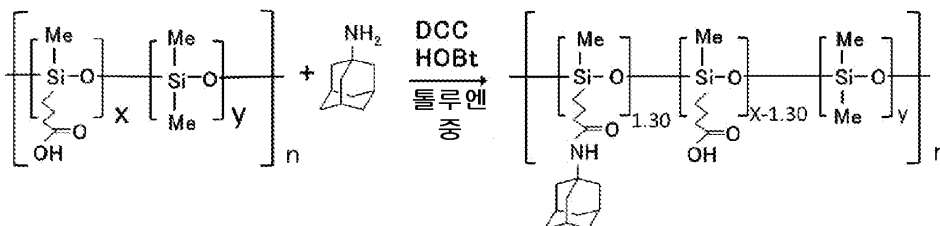
[0360] 10.0 g(1.3 mol)의 측쇄형 카르복실 변성 실리콘 오일(신에츠 실리콘사 제조, X-22-3701E, 카르복실기 당량 =4,000 g/mol)을 100 mL의 톨루엔에 용해시켜 용액 1을 얻었다. 그리고, 이 용액 1에, 68.24 mg(0.5 mol)의 HOBt를 가하여 용액 2를 얻었다. 그리고, 톨루엔 50 mL에 용해시킨 104.19 mg(0.5 mol)의 DCC를 이 용액 2에 가하여 용액 3을 얻었다. 그리고, 65.26 mg(0.5 mmol)의 N-옥틸아민(나카라이테스크(주), 25512-72, Cas: 111-86-4)을 50 mL의 톨루엔에 분산시키고, 용액 3에 가하여 용액 4를 얻었다. 이 용액 4를 밤새 교반하여, 투명한 상등액과 백색의 침전을 얻었다. 이 백색 침전을 여과에 의해 제거하여 투명한 여액을 얻었다. 이 투명한 여액을 포화 중조수로 세정하고, 또한 무수 황산나트륨으로 탈수했다. 증발기로 톨루엔을 제거하여 무색 투명한 오일을 얻었다. 이 무색 투명한 오일을 85°C에서 밤새 진공 건조시켜, 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G1을 얻었다.

[0361] 얻어진 고분자 화합물 G1에 관해, ¹H-NMR 스펙트럼(500 MHz) 계측에 의해 분석을 행했다.

[0362] 얻어진 고분자 화합물 G1에 관해, ¹H-NMR에 의해 측정된 게스트기 도입률은 0.46 mol%였다.

[0363] <제조예 12: 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G1'의 제조>

[0364] 제조예 11과 동일한 방법으로 고분자 화합물 G1'를 얻었다. 고분자 화합물 G1'에서의 게스트기 도입률은 0.51 mol%였다.



고분자 화합물 G2

[0365]

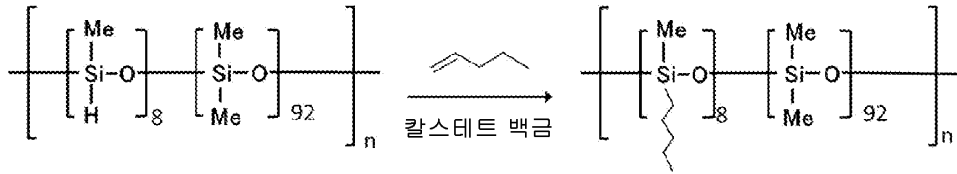
[0366] [식중, x 및 y는 0 이상의 정수이며, x+y=100이다.]

[0367] <제조예 13: 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G2의 제조>

[0368] 10000 mg(1.3 mol)의 측쇄형 카르복실 변성 실리콘 오일, 및 N-옥틸아민 대신에 95.7 mg(0.63 mmol)의 1-아다만틸아민(후지 필름 와코 케미컬사 제조)을 이용한 것 외에는, 상기 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G1의 제조와 동일하게 하여, 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G2를 제조했다.

[0369] 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G2에 관해, ¹H-NMR에 의해 측정된 게스트기 도입률은 1.3 mol%였다.

[0370] <제조예 14: 고분자 화합물 A2의 제조>



고분자 화합물 A2

[0371]

[0372] 메틸 하이드로젠 폴리실록산 및 칼스테트 백금 용액, 및 1-펜텐(도쿄 화성 공업사 제조)을 이용하여, 고분자 화합물 A2를 제조했다.

[0373] <제조예 15: 호스트기를 갖는 고분자 화합물 CH-4의 제조>

[0374] Macromolecules 2019, 52(7), 2659-2668에 기재된 방법에 따라서, 폴리에틸아크릴레이트 주쇄를 가지며, 또한 호스트기로서 γ-시클로텍스트린을 갖는 고분자 화합물 CH-4를 제조했다. 또, 얻어지는 고분자 화합물 중에 있어서 호스트기를 갖는 유닛이 1.0 mol%가 되도록 제조했다.

[0375] <<실시에 1>>

[0376] 전술한 제조예 7과 같이 제조한 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H5와, 전술한 제조예 11과 같이 제조한 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G1을, 이소도데칸에 용해시키고, 또한 하기의 표 1에 나타내는 추가의 화합물을, 표 1에 나타나 있는 양으로 첨가함으로써, 실시에 1에 관한 화장료를 제조했다.

[0377] 폴리메틸실록산 주쇄를 갖는 고분자 화합물 H5 및 고분자 화합물 G1은, 용매로서 사용한 이소도데칸에 대하여 양호한 용해성을 나타냈다.

[0378] 실시에 1에 관한 화장료를 손가락으로 볼에 도포하여 화장 도막을 형성했다. 그리고, 하기의 항목에 관해 평가했다:

[0379] (a) 당김감

[0380] (b) 밀착감

[0381] (c) 탄력감

[0382] (d) 화장 유지력

[0383] <당김감>

[0384] 당김감은, 하기의 3단계 기준에 의해 평가 판정했다:

[0385] (판정): (평가 기준)

[0386] ○: 당김감이 없다.

[0387] △: 약간 당김감이 있다.

[0388] ×: 당김감이 있다.

[0389] <밀착감>

[0390] 밀착감은 하기의 3단계 기준에 의해 평가 판정했다:

- [0391] (판정): (평가 기준)
- [0392] ◎: 밀착감이 특히 우수하다
- [0393] ○: 밀착감이 있다
- [0394] ×: 밀착감이 없다
- [0395] <탄력감>
- [0396] 탄력감은 하기의 3단계 기준에 의해 평가 판정했다:
- [0397] (판정): (평가 기준)
- [0398] ○: 탄력감이 있다.
- [0399] △: 약간 탄력감이 있다.
- [0400] ×: 탄력감이 없다.
- [0401] <화장 유지력>
- [0402] 화장 유지력의 양호함에 관해서는, 하기의 3단계 기준에 의해 평가 판정했다:
- [0403] (판정): (평가 기준)
- [0404] ○: 우수하다
- [0405] △: 보통
- [0406] ×: 나쁘다
- [0407] 실시예 1에 관해 행한 평가 결과를 표 2에 나타낸다.
- [0408] <<실시예 2>>
- [0409] 전술한 제조에 7과 같이 제조한 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H5와, 전술한 제조에 13과 같이 제조한 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G2를, 이소도데칸에 용해시키고, 또한 하기의 표 1에 나타난 추가의 화합물을, 표 1에 나타나 있는 양으로 첨가함으로써, 실시예 2에 관한 화장료를 제조했다.
- [0410] 폴리메틸실록산 주쇄 고분자 화합물 H5와 고분자 화합물 G2는, 용매로서 사용한 이소도데칸에 대하여 양호한 용해성을 나타냈다.
- [0411] 실시예 2에 관한 화장료에 관해, 실시예 1과 동일하게 하여 사용감을 평가했다. 결과를 표 2에 나타낸다.
- [0412] <<실시예 3>>
- [0413] 전술한 제조에 9와 같이 제조한 호스트기를 갖는 고분자 화합물 H7과, 전술한 제조에 11과 같이 제조한 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G1을, 이소도데칸에 용해시키고, 또한 하기의 표 1에 나타난 추가의 화합물을, 표 1에 나타나 있는 양으로 첨가함으로써, 실시예 3에 관한 화장료를 제조했다.
- [0414] 폴리메틸실록산 주쇄 고분자 화합물 H7 및 고분자 화합물 G1은, 용매로서 사용한 이소도데칸에 대하여 양호한 용해성을 나타냈다.
- [0415] 실시예 3에 관한 화장료에 관해, 실시예 1과 동일하게 하여 사용감을 평가했다. 결과를 표 2에 나타낸다.
- [0416] <<비교예 1>>
- [0417] 고분자 화합물 H5 및 고분자 화합물 G1의 이소도데칸 용액 대신에 트리메틸실록시규산(MOMENTIVE사 제조, SR1000)을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일하게 하여, 비교예 1에 관한 화장료를 제조했다.
- [0418] 비교예 1에 관한 화장료에 관해, 실시예 1과 동일하게 하여 사용감을 평가했다. 결과를 표 2에 나타낸다.
- [0419] <<비교예 2>>
- [0420] 고분자 화합물 H5 및 고분자 화합물 G1의 이소도데칸 용액 대신에 실리콘 레진(실록산 가교물, Silform Flexible Resin(상품명)(MOMENTIVE사 제조)을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일하게 하여 비교예 2에 관한 화

장료를 제조했다.

[0421]

비교예 2에 관한 화장료에 관해, 실시예 1과 동일하게 하여 사용감을 평가했다. 결과를 표 2에 나타낸다.

표 1

성분	실시예 1	실시예 2	실시예 3	비교예 1	비교예 2
	부량 중량	부량 중량	부량 중량	부량 중량	부량 중량
고분자 화합물 H5 및 고분자 화합물 G1의 이소도데칸 용액	5	-	-	-	-
고분자 화합물 H5 및 고분자 화합물 G2의 이소도데칸 용액	-	5	-	-	-
고분자 화합물 H7 및 고분자 화합물 G1의 이소도데칸 용액	-	-	5	-	-
트리메틸살록시규산	-	-	-	1	-
실리콘 레진(Silform Flexible Resin)	-	-	-	-	1
데카메틸펜타실록산	25	25	25	29	29
PPG-17	1	1	1	1	1
PEG-9 폴리디메틸실록시에틸디메티콘	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
메톡시계피산에틸헥실	10	10	10	10	10
옥토크릴렌	3	3	3	3	3
토코페롤	적량	적량	적량	적량	적량
미리스테인산이소프로필	5	5	5	5	5
비스에틸헥실옥시페놀메톡시페닐트리아진	1	1	1	1	1
디에틸아미노히드록시벤조일벤조산헥실	2	2	2	2	2
소수화 처리 산화티탄	2	2	2	2	2
소수화 처리 산화아연	10	10	10	10	10
실리카	2	2	2	2	2
탈크	7	7	7	7	7
메타크릴산에틸 크로스 폴리머	5	5	5	5	5
물	잔여	잔여	잔여	잔여	잔여
합계	90	90	90	90	90

[0422]

표 2

	호스트기를 갖는 고분자 화합물			게스트기를 갖는 고분자 화합물	당 김 감	밀 착 감	탄 력 감	화 장 유 지 력
	식별 번호	Si 원자에 결합한 에스테르기	Si 원자에 결합한 펜틸기	식별번호				
실시예 1	H5	있음	-	G1	○	○	○	△
실시예 2	H5	있음	-	G2	○	○	○	△
실시예 3	H7	-	있음	G1	○	◎	○	○
비교예 1	-			-	×	×	○	×
비교예 2	-			실리콘 레진	△	×	○	×

[0423]

[0424]

《실시예 4》

[0425]

전술한 제조예 15에 관한 호스트기를 갖는 고분자 화합물 CH-4와, 전술한 비교예 2에서 이용한 것과 동일한 실록산 가교물을 이용하여, 실시예 1과 동일하게 하여 화장료의 제조 및 평가를 행했다. 결과를 하기의 표 3에 나타낸다.

[0426]

《실시예 5》

[0427]

전술한 제조예 15에 관한 호스트기를 갖는 고분자 화합물 CH-4와, 전술한 제조예 13에 관한 게스트기를 갖는 고분자 화합물 G2를 이용하여, 실시예 1과 동일하게 하여 화장료의 제조 및 평가를 행했다. 결과를 하기의 표 3에 나타낸다.

표 3

	호스트기를 갖는 고분자 화합물		게스트기를 갖는 고분자 화합물		당 김 감	밀 착 감	탄 력 감	화 장 유 지 력
	식별 번호 등	실록산 결합	식별 번호 등	실록산 결합				
실시예 4	CH-4	없음	실리콘 레진	있음	○	○	○	△
실시예 5	CH-4	없음	G2	있음	△	○	○	△
비교예 1	-		-		×	×	○	×
비교예 2	-		실리콘 레진	있음	△	×	○	×

[0428]