

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6340437号
(P6340437)

(45) 発行日 平成30年6月6日 (2018.6.6)

(24) 登録日 平成30年5月18日 (2018.5.18)

(51) Int. Cl.

F I

C O 8 G 77/54 (2006.01)
D O 6 M 15/643 (2006.01)C O 8 G 77/54
D O 6 M 15/643

請求項の数 20 (全 53 頁)

(21) 出願番号 特願2016-568000 (P2016-568000)
 (86) (22) 出願日 平成27年5月20日 (2015.5.20)
 (65) 公表番号 特表2017-518410 (P2017-518410A)
 (43) 公表日 平成29年7月6日 (2017.7.6)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2015/031768
 (87) 国際公開番号 W02015/179513
 (87) 国際公開日 平成27年11月26日 (2015.11.26)
 審査請求日 平成28年11月16日 (2016.11.16)
 (31) 優先権主張番号 62/001, 415
 (32) 優先日 平成26年5月21日 (2014.5.21)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)
 (31) 優先権主張番号 62/001, 421
 (32) 優先日 平成26年5月21日 (2014.5.21)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(73) 特許権者 590001418
 ダウ シリコーンズ コーポレーション
 アメリカ合衆国 48686-0994
 ミシガン州 ミッドランド ウェスト サ
 ルツバーグ ロード 2200
 (74) 代理人 100108453
 弁理士 村山 靖彦
 (74) 代理人 100110364
 弁理士 実広 信哉
 (74) 代理人 100133400
 弁理士 阿部 達彦
 (72) 発明者 チェン・フェン
 アメリカ合衆国・ミシガン・48640・
 ミッドランド・リンデン・ドライブ・43
 08

最終頁に続く

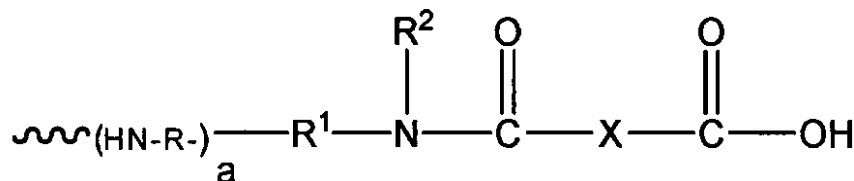
(54) 【発明の名称】 架橋アミノシロキサンポリマー及び生成方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

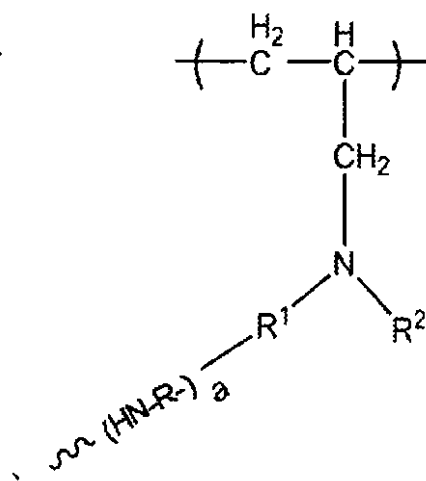
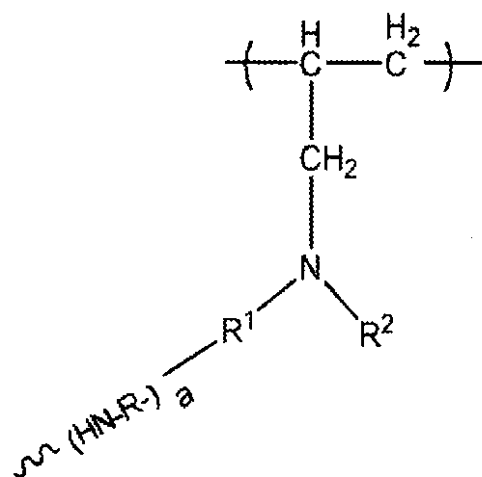
第1のシロキサン骨格と、第2のシロキサン骨格と、前記第1のシロキサン骨格のケイ素原子と前記第2のシロキサン骨格のケイ素原子とを架橋する少なくとも1つの分子内構造と、を含む架橋アミノシロキサンポリマーであって、前記分子内構造が化学構造：

【化 1】



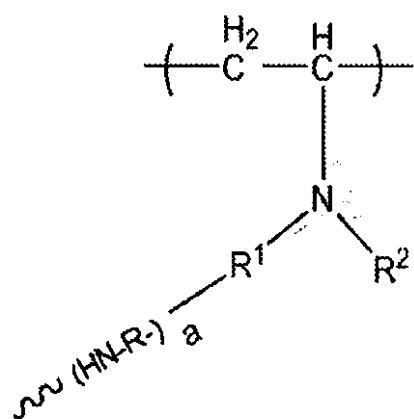
[式中、X は下記の基：

【化 2】



10

、又は



20

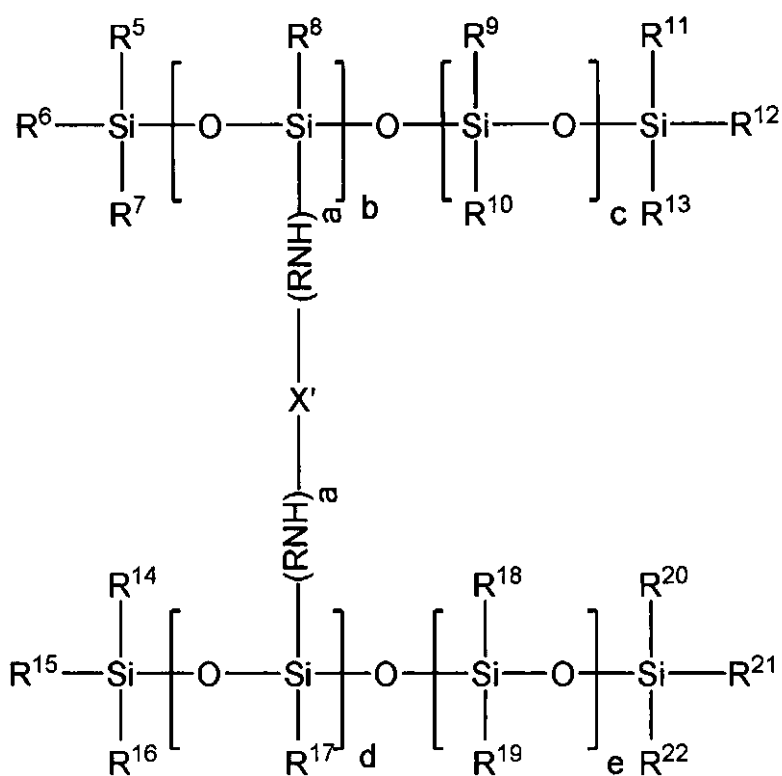
（式中、それぞれのRは独立して炭素数1～10の炭化水素基であり、それぞれのR¹は独立して炭素数1～10の炭化水素基であり、それぞれのR²は独立して水素原子、OH、炭素数1～12の炭化水素基、フェニル基、R'（OR''）_m、又はR'OHであり、R'及びR''のそれぞれは独立してアルキル基であり、かつ「m」は1～3であり、かつ、「a」は0又は1である）から選択される]を有する、架橋アミノシロキサンポリマー。

30

【請求項 2】

化学構造：

【化 3】

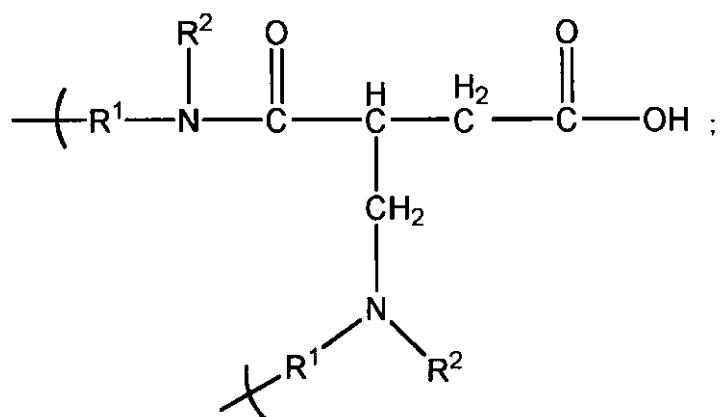


10

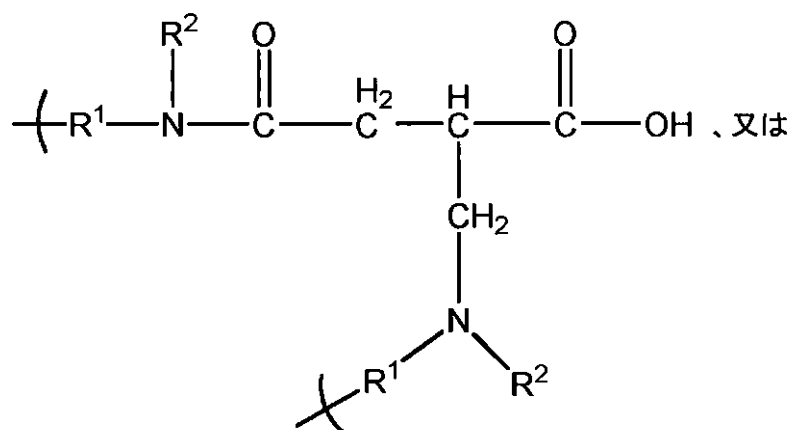
20

〔式中、X' は下記の基：

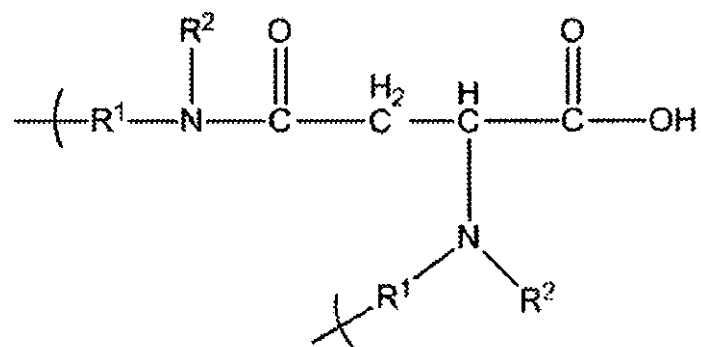
【化 4】



10



20



30

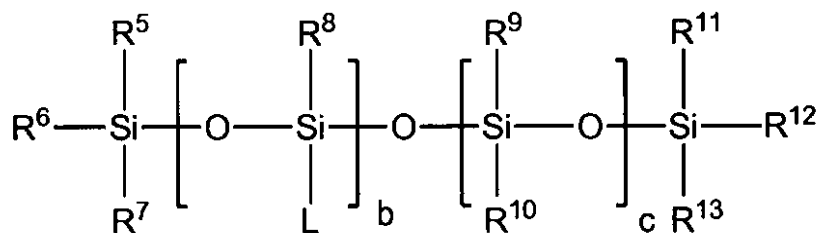
(式中、R、R¹、R²及び「a」のそれぞれは前記のとおりであり、R⁵～R²²のそれぞれは独立して水素原子、炭素数1～12の炭化水素基、炭素数2～30のアルケニル基、炭素数6～12の芳香族基、R'^(OR'')_m、又はポリアルキレンオキシ基であり、R'、R''、及び「m」のそれぞれは前記のとおりであり、「b」及び「d」のそれぞれは独立して1～100であり、かつ「c」及び「e」のそれぞれは独立して1～3,000である)から選択される]を有する、請求項1に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

40

【請求項3】

前記第1のシロキサン骨格が、化学構造：

【化 5】



10

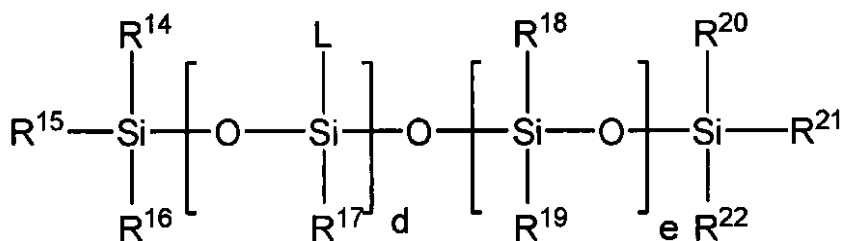
〔式中、 $\text{R}^5 \sim \text{R}^{13}$ のそれぞれは独立して水素原子、炭素数1～12の炭化水素基、炭素数2～30のアルケニル基、炭素数6～12の芳香族基、 $\text{R}'(\text{OR}'')_m$ 、又はポリアルキレンオキシ基であり、 R' 及び R'' のそれぞれは独立してアルキル基であり、かつ「 m 」は1～3であり、「 b 」は1～100であり、「 c 」は1～3,000であり、かつ「 L 」は前記分子内構造である〕を有する、請求項1に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

【請求項 4】

前記第2のシロキサン骨格が、化学構造：

【化 6】

20



30

〔式中、 $\text{R}^{14} \sim \text{R}^{22}$ のそれぞれは独立して水素原子、炭素数1～12の炭化水素基、炭素数2～30のアルケニル基、炭素数6～12の芳香族基、 $\text{R}'(\text{OR}'')_m$ 、又はポリアルキレンオキシ基であり、 R' 及び R'' のそれぞれは独立してアルキル基であり、かつ「 m 」は1～3であり、「 d 」は1～100であり、「 e 」は1～3,000であり、かつ「 L 」は前記分子内構造である〕を有する、請求項1に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

【請求項 5】

アミノ基を有するポリオルガノシロキサンと、

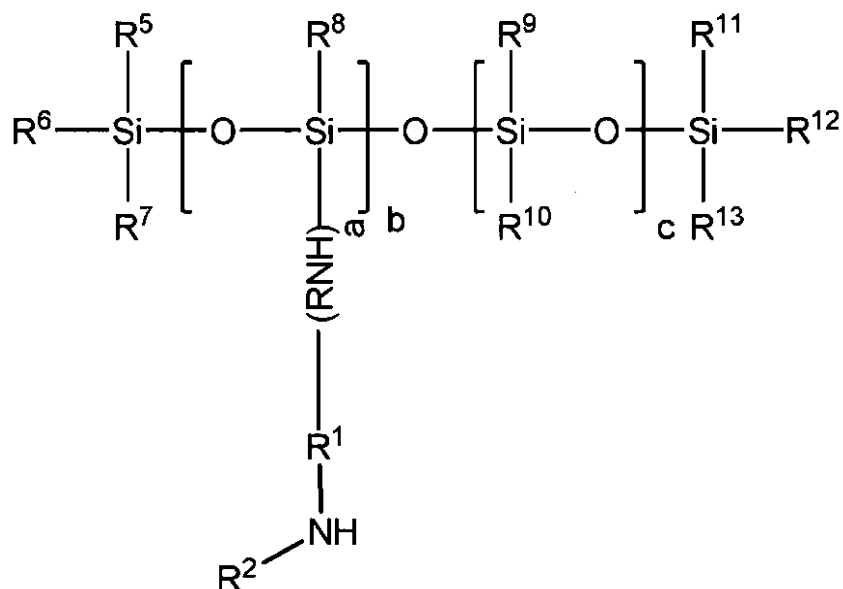
、不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンと、の反応生成物を含む、請求項1に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

40

【請求項 6】

アミノ基を有する前記ポリオルガノシロキサンが、化学式：

【化 7】



10

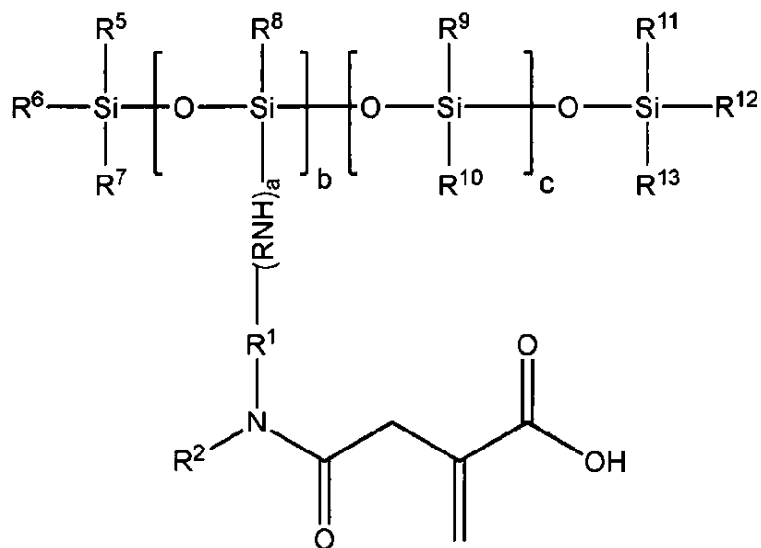
〔式中、 R 、 R^1 、 R^2 及び「a」のそれぞれは前記のとおりであり、 $R^5 \sim R^{13}$ のそれぞれは独立して水素原子、炭素数 1 ~ 12 の炭化水素基、炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、炭素数 6 ~ 12 の芳香族基、 $R'(OR'')$ _m、又はポリアルキレンオキシ基であり、 R' 、 R'' 、及び「m」のそれぞれは前記のとおりであり、「b」は 1 ~ 100 であり、かつ「c」は 1 ~ 3, 000 である〕を有する、請求項 5 に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

20

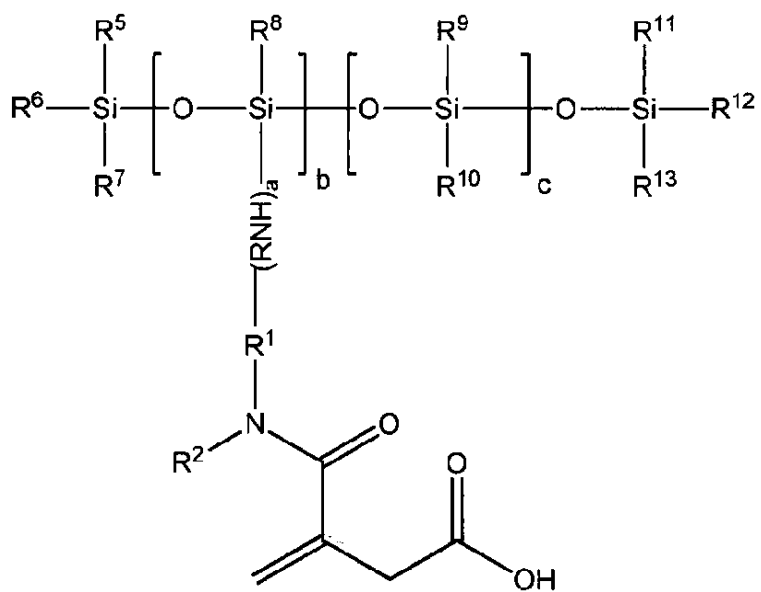
【請求項 7】

、 - 不飽和カルボン酸アミド基を有する前記ポリオルガノシロキサンが、下記の化学式：

【化 8】



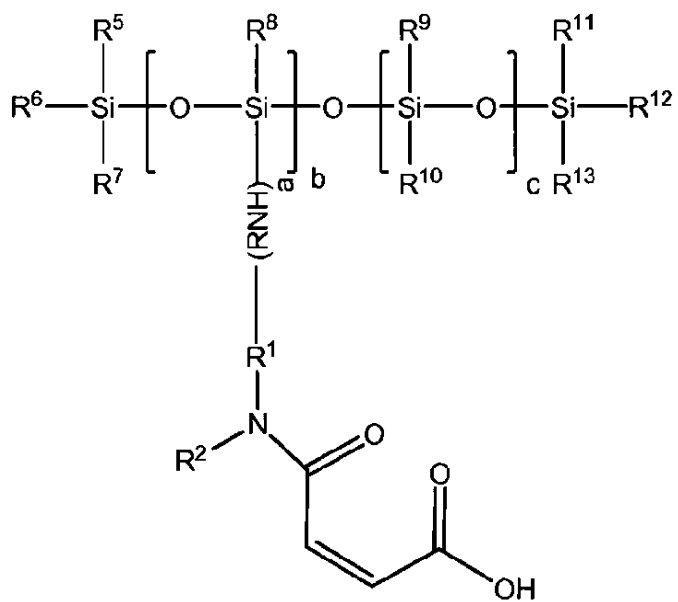
10



20

30

、又は



40

〔式中、R、R¹、R²、「a」、「b」、及び「c」のそれぞれは前

50

記のとおりである」の 1 つを有する、請求項 5 に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

【請求項 8】

、 - 不飽和カルボン酸アミド基を有する前記ポリオルガノシロキサンが、アミノ基を有する第 2 のポリオルガノシロキサンと、無水マレイン酸及び / 又は無水イタコン酸と、の反応生成物である、請求項 7 に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

【請求項 9】

前記無水マレイン酸及び / 又は前記無水イタコン酸の量が、前記第 2 のオルガノポリシロキサンの前記アミノ基の 1 モル当たり $0.01 \sim 0.33$ モルである、請求項 8 に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

10

【請求項 10】

i) R は独立して炭素数 1 ~ 6 の炭化水素基であり、
ii) 「a」は 1 であり、又は
iii) i) 及び ii) の両方である、請求項 1 に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

【請求項 11】

化粧料組成物、布地処理組成物、繊維処理組成物、ヘアケア組成物、及び繊維ケア組成物から選択される、請求項 1 に記載の架橋アミノシロキサンポリマーを含む組成物。

【請求項 12】

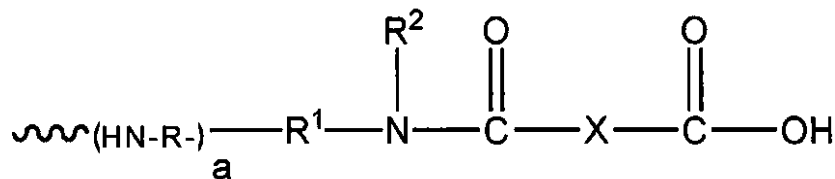
架橋アミノシロキサンポリマーを生成する方法であって、
アミノ基を有するポリオルガノシロキサンを提供する工程と、
無水マレイン酸及び / 又は無水イタコン酸と、を提供する工程と、
前記無水マレイン酸及び / 又は前記無水イタコン酸と、アミノ基を有する前記ポリオルガノシロキサンとを混合して前記架橋アミノシロキサンポリマーを生成する工程と、を含み、

20

前記架橋アミノシロキサンポリマーが、第 1 のシロキサン骨格と、第 2 のシロキサン骨格と、前記第 1 のシロキサン骨格のケイ素原子と前記第 2 のシロキサン骨格のケイ素原子とを架橋する少なくとも 1 つの分子内構造と、を含み、前記分子内構造が化学構造：

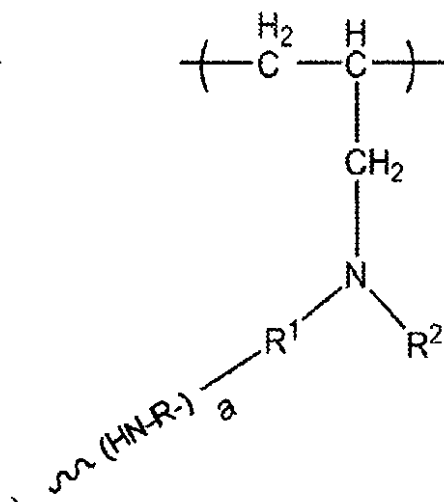
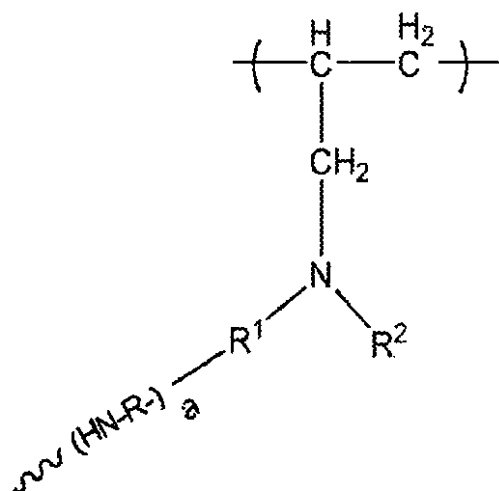
【化 9】

30

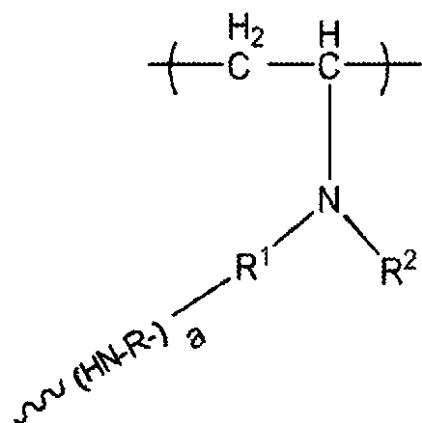


[式中、X は下記の基：

【化 10】



、又は



(式中、それぞれのRは独立して炭素数1～10の炭化水素基であり、それぞれのR¹は独立して炭素数1～10の炭化水素基であり、それぞれのR²は独立して水素原子、OH、炭素数1～12の炭化水素基、フェニル基、R' (OR'')_m、又はR'OHであり、R'及びR''のそれぞれは独立してアルキル基であり、かつ「m」は1～3であり、かつ、「a」は0又は1である)から選択される]を有する、方法。

【請求項13】

アミノ基を有する前記ポリオルガノシロキサンと、前記無水マレイン酸及び/又は前記無水イタコン酸とを、-20 から 100 までの温度に加熱する工程を更に含む、請求項12に記載の方法。

【請求項14】

前記無水マレイン酸及び/又は前記無水イタコン酸を提供する工程が、前記ポリオルガノシロキサンのアミノ基1モル当たり0.01～0.33モルの前記無水マレイン酸及び/又は前記無水イタコン酸を提供する工程として更に規定される、請求項12に記載の方法。

【請求項15】

前記無水マレイン酸及び/又は前記無水イタコン酸が、アミノ基を有する前記ポリオルガノシロキサンと反応し、- 不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンを生成する、請求項12に記載の方法。

【請求項16】

前記第2のシロキサン骨格が、化学構造：

10

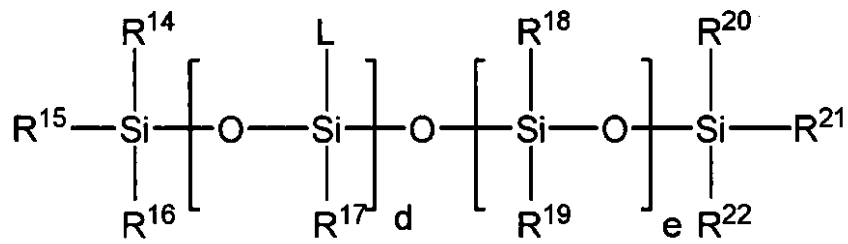
20

30

40

50

【化 1 1】



10

〔式中、 $\text{R}^{14} \sim \text{R}^{22}$ のそれぞれは独立して水素原子、炭素数1～12の炭化水素基、炭素数2～30のアルケニル基、炭素数6～12の芳香族基、 $\text{R}'(\text{OR}'')_m$ 、又はポリアルキレンオキシ基であり、 R' 及び R'' のそれぞれは独立してアルキル基であり、かつ「 m 」は1～3であり、「 d 」は1～100であり、「 e 」は1～3,000であり、かつ「 L 」は前記分子内構造である〕を有する、請求項3に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

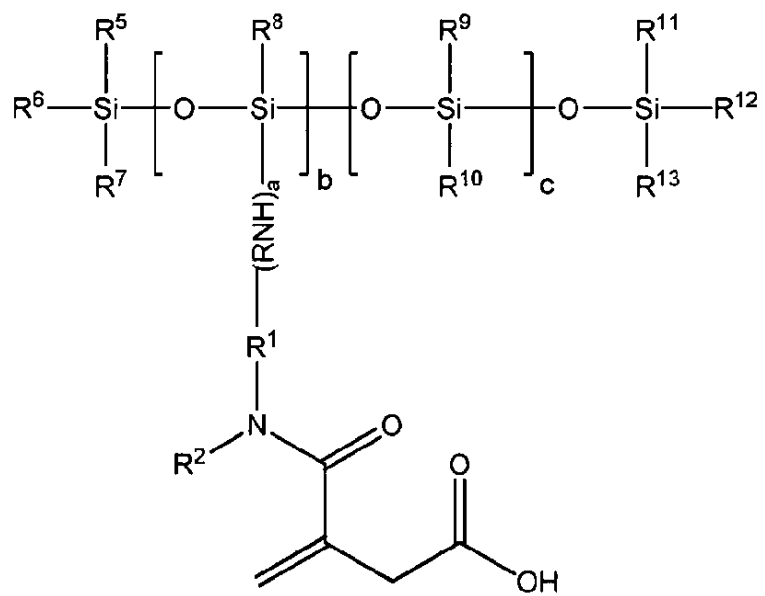
【請求項 17】

、 - 不飽和カルボン酸アミド基を有する前記ポリオルガノシロキサンが、下記の化学式：

20

$$\begin{array}{c} \text{R}^6 - \text{Si} \left(\begin{array}{l} \text{R}^5 \\ | \\ \text{R}^7 \end{array} \right) \left[\text{O} - \text{Si} \left(\begin{array}{l} \text{R}^8 \\ | \\ (\text{RNH})^{\text{a}} \end{array} \right) \right]_b \left[\text{O} - \text{Si} \left(\begin{array}{l} \text{R}^9 \\ | \\ \text{R}^{10} \end{array} \right) \right]_c \text{O} - \text{Si} \left(\begin{array}{l} \text{R}^{11} \\ | \\ \text{R}^{13} \end{array} \right) - \text{R}^{12} \\ | \\ \text{R}^1 \\ | \\ \text{N} \left(\text{R}^2 \right) - \text{C}(=\text{O}) - \text{CH}_2 - \text{C}(=\text{CH}_2) - \text{COOH} \end{array}$$

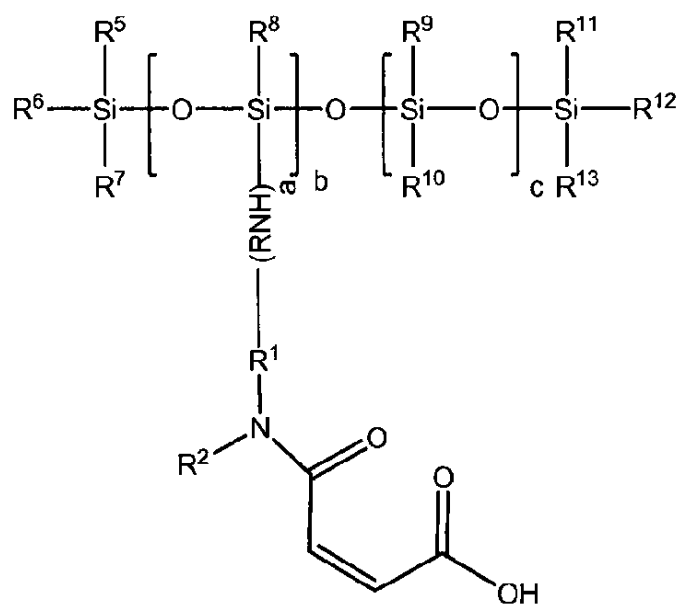
10



20

30

、又は



40

記のとおりである」の1つを有する、請求項6に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

【請求項18】

、 - 不飽和カルボン酸アミド基を有する前記ポリオルガノシロキサンが、アミノ基を有する第2のポリオルガノシロキサンと、無水マレイン酸及び/又は無水イタコン酸と、の反応生成物である、請求項17に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

【請求項19】

前記無水マレイン酸及び/又は前記無水イタコン酸が、前記第2のオルガノポリシロキサンの前記アミノ基の1モル当たり $0.01 \sim 0.33$ モルの量で反応する、請求項18に記載の架橋アミノシロキサンポリマー。

10

【請求項20】

前記無水マレイン酸及び/又は前記無水イタコン酸を提供する工程が、前記ポリオルガノシロキサンのアミノ基1モル当たり $0.01 \sim 0.33$ モルの前記無水マレイン酸及び/又は前記無水イタコン酸を提供する工程として更に規定される、請求項13に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本出願は、それぞれ2014年5月21日に出願された米国特許出願第62/001,427号、同第62/001,421号及び同第62/001,415号の優先権及びすべての利益を主張するものであり、これら出願の内容は本願明細書において参照により援用される。

20

【0002】

本開示は一般に、特有の化学式を有する分子内構造を含む、架橋アミノシロキサンポリマーに関する。本開示はまた、架橋アミノシロキサンポリマーを生成する方法を提供する。

【背景技術】

【0003】

毛髪を特定の形状で保持したいという要望が広くある。これを達成する2つの方法は、毛髪の永続的な化学的変更又は一時的な変更である。一時的な変更は、水又はシャンプーによって取り除くことができるものである。これは、一般的には、洗髪及び/又はコンディショニング後、並びに乾燥及び/又は整髪前に、湿った毛髪に組成物を適用するという方法によって達成されてきた。整髪効果をもたらす目的で使用される物質は樹脂又はゴムで、これらはムース、ゲル、ローション、又はスプレーの形態で販売されている。

30

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

しかしながら、これらの物質は、毛髪を櫛で解く際に困難を増し、毛髪の感触を低下させる傾向があり、扱いにくいこともある。したがって、改善の余地がある。

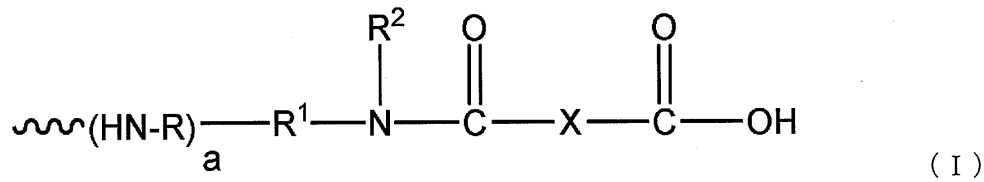
【課題を解決するための手段】

40

【0005】

本開示は、第1のシロキサン骨格と、第2のシロキサン骨格と、少なくとも1つの分子内構造を含む、架橋アミノシロキサンポリマーを提供する。この分子内構造は、第1のシロキサン骨格のケイ素原子と第2のシロキサン骨格のケイ素原子とを架橋している。この分子内構造は、化学構造：

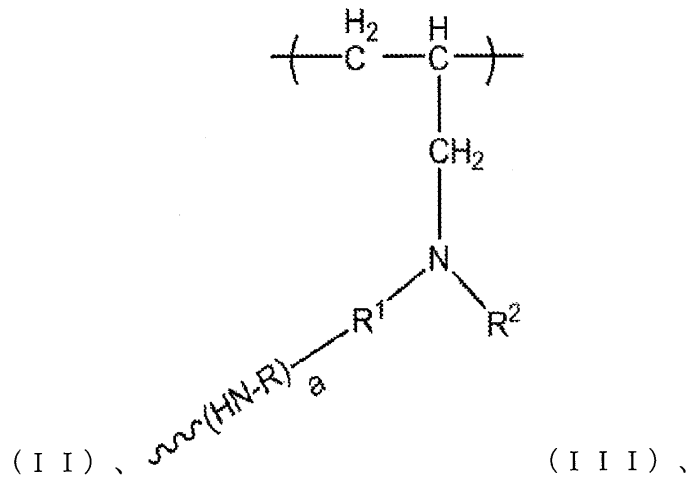
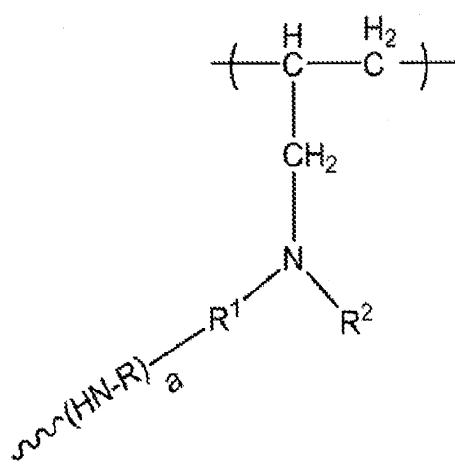
【化 1】



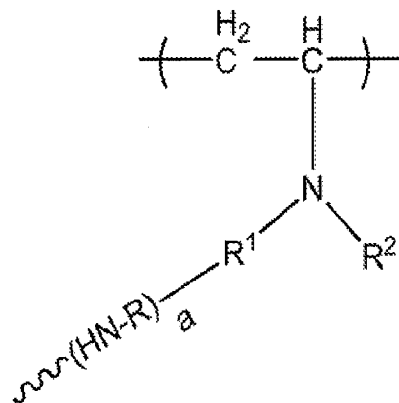
を有する。

構造 (I) において、X は下記の基：

【化 2】



又は



から選択される。

基 (I I)、(I I I)、及び (I V) において、それぞれの R は独立して炭素数 1 ~ 10 の炭化水素基である。それぞれの R¹ は独立して炭素数 1 ~ 10 の炭化水素基である。それぞれの R² は独立して水素原子、OH、炭素数 1 ~ 12 の炭化水素基、フェニル基、R' (OR'')_m、又は R' OH である。R' 及び R'' のそれぞれは独立してアルキル基であり、「m」は 1 ~ 3 である。更に、「a」は 0 又は 1 である。本開示はまた、このアミノシロキサンポリマーを生成する方法を提供する。

【0006】

本開示の他の利点は容易に理解され则认为られ、下記の発明を実施するための形態を参照し、添付の図面と併せて考慮することによってより良く理解される。

【図面の簡単な説明】

【0007】

10

20

30

40

50

【図 1】実施例 1 A（下方の線）及び実施例 1 B（上方の線）の NMR スペクトログラフである。

【図 2】実施例 2 に関する周波数変調のプロット図である。

【図 3】実施例 2 に関する温度変調のプロット図である。

【図 4】実施例 3 に関する周波数変調のプロット図である。

【図 5】実施例 4 に関する周波数変調のプロット図である。

【発明を実施するための形態】

【0008】

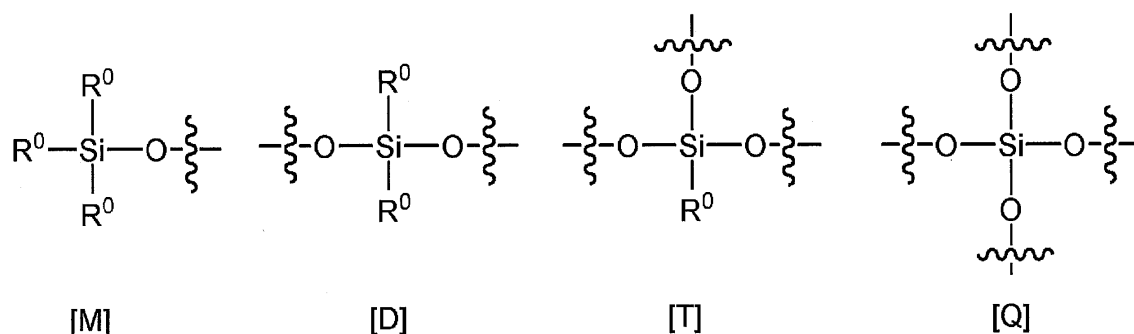
本開示は、架橋アミノシロキサンポリマーを提供する。この架橋アミノシロキサンポリマーは、以後アミノシロキサンポリマーと記述することもある。このアミノシロキサンポリマーは、第 1 のシロキサン骨格と、第 2 のシロキサン骨格と、少なくとも 1 つの分子内構造を含む。この分子内構造は、第 1 のシロキサン骨格のケイ素原子と第 2 のシロキサン骨格のケイ素原子とを架橋している。用語「架橋」とは、第 1 のシロキサン骨格と第 2 のシロキサン骨格が、少なくとも 1 箇所で、分子内構造によって結合していることをいう。典型的には、本アミノシロキサンポリマーは、第 1 及び第 2 のシロキサン骨格の架橋又は結合点を 2 つ以上（すなわち、第 1 及び第 2 のシロキサン骨格の間で伸張する 1 つ以上の分子内構造）を有する。様々な実施形態において、本アミノシロキサンポリマーは、第 1 と第 2 のシロキサン骨格との間に、2 ~ 100、5 ~ 100、5 ~ 95、10 ~ 90、15 ~ 85、20 ~ 80、25 ~ 75、30 ~ 70、35 ~ 65、40 ~ 60、45 ~ 55、若しくは 50 ~ 55、あるいは 1、2、3、4、5、6、7、8、9、若しくは 10 個の結合点（又は架橋）を含む。すべての値及びこれらの値の間の範囲もまた、様々な非限定的実施形態において明示的に企図される。

第 1 及び第 2 のシロキサン骨格：

【0009】

第 1 及び第 2 のシロキサン骨格は、それぞれが少なくとも 1 つのケイ素原子を有する限り、特に限定されるものではない。それぞれが独立して任意の M、D、T、及び Q 単位を含んでよい。記号 M、D、T、及び Q は、ポリオルガノシロキサンの構造単位の官能性を表す。M は、1 官能性単位 $R^0_3SiO_{1/2}$ を表す。D は、2 官能性単位 $R^0_2SiO_{2/2}$ を表す。T は、3 官能性単位 $R^0SiO_{3/2}$ を表す。Q は、4 官能性単位 $SiO_{4/2}$ を表す。これらの単位の一般的構造式を下記に示す。

【化 3】

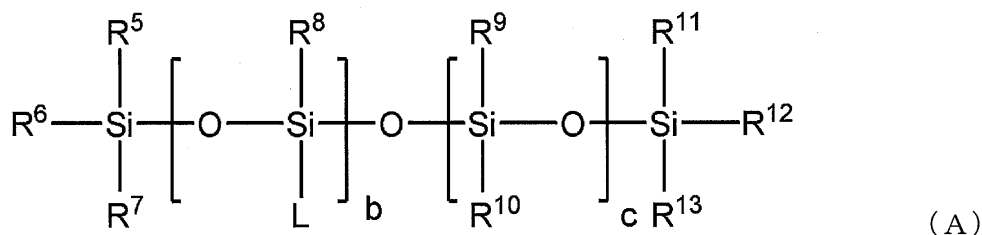


これらの構造 / 化学式において、 R^0 は任意の炭化水素基、芳香族基、脂肪族基、アルキル基、アルケニル基、又はアルキニル基であってよい。同様に、シロキサン骨格は分子量又は粘度について特に限定されず、液体、ゴム、ゲル、等であってよい。

【0010】

様々な実施形態において、第 1 のシロキサン骨格は化学構造：

【化 4】



を有する。

構造 (A) において、 $\text{R}^5 \sim \text{R}^{13}$ のそれぞれは独立して水素原子、炭素数 1 ~ 12 の炭化水素基、炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、炭素数 6 ~ 12 の芳香族基、 R' (OR'')_m、又はポリアルキレンオキシ基である。 R' 及び R'' のそれぞれは独立してアルキル基であり、「m」は 1 ~ 3 である。一実施形態において、 R'' はメチルである。さらに、「b」は 1 ~ 100 かつ「c」は 1 ~ 3, 000 である。「L」は分子内構造である。

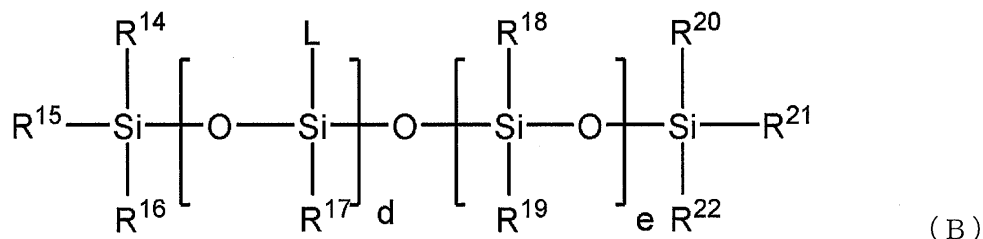
【0011】

様々な実施形態において、「m」は 1、2、又は 3 である。ある実施形態において、「b」は 1 ~ 100、5 ~ 95、10 ~ 90、15 ~ 85、20 ~ 80、25 ~ 75、30 ~ 70、35 ~ 65、40 ~ 60、45 ~ 55、又は 50 ~ 55 であってよい。ある実施形態において、「c」は 1 ~ 3, 000、1 ~ 2, 500、1 ~ 2, 000、1 ~ 1, 500、1 ~ 1, 000、1 ~ 500、若しくは 1 ~ 100、あるいは 200 ~ 600、250 ~ 550、300 ~ 500、350 ~ 450、若しくは 400 ~ 450 であってよい。すべての値及びこれらの間の値の範囲、並びにこれらの値のすべての組合せもまた、本願明細書において、様々な非限定的実施形態において明示的に企図される。

【0012】

様々な実施形態において、第 2 のシロキサン骨格は化学構造：

【化 5】



を有する。

構造 (B) において、 $\text{R}^{14} \sim \text{R}^{22}$ のそれぞれは独立して水素原子、炭素数 1 ~ 12 の炭化水素基、炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、炭素数 6 ~ 12 の芳香族基、 R' (OR'')_m、又はポリアルキレンオキシ基である。 R' 及び R'' のそれぞれは独立してアルキル基であり、「m」は 1 ~ 3 である。一実施形態において、 R'' はメチルである。さらに、「d」は 1 ~ 100 かつ「e」は 1 ~ 3, 000 である。「L」は分子内構造である。第 1 及び第 2 のシロキサン骨格は、互いに同一又は異なることができる。

【0013】

様々な実施形態において、「m」は 1、2、又は 3 である。ある実施形態において、「d」は 1 ~ 100、5 ~ 95、10 ~ 90、15 ~ 85、20 ~ 80、25 ~ 75、30 ~ 70、35 ~ 65、40 ~ 60、45 ~ 55、又は 50 ~ 55 であってよい。ある実施形態において、「e」は 1 ~ 3, 000、1 ~ 2, 500、1 ~ 2, 000、1 ~ 1, 500、1 ~ 1, 000、1 ~ 500、若しくは 1 ~ 100、あるいは 200 ~ 600、250 ~ 550、300 ~ 500、350 ~ 450、若しくは 400 ~ 450 であってよい。すべての値及びこれらの間の値の範囲、並びにこれらの値のすべての組合せもまた、本

願明細書において、様々な非限定的実施形態において明示的に企図される。

【0014】

様々な実施形態において、 $R^5 \sim R^{13}$ 及び/又は $R^{14} \sim R^{22}$ (まとめて「 $R^5 \sim R^{22}$ 」と称す)の少なくとも1つ又はそれぞれは、独立して水素原子である。あるいは、 $R^5 \sim R^{13}$ 及び/又は $R^{14} \sim R^{22}$ の少なくとも1つ又はそれぞれは、独立して炭素数1～12の炭化水素基、例えばメチル基、エチル基、又はプロピル基等の、最大で12個の炭素原子を有する任意の炭化水素基であってよい。より具体的には、炭化水素基は、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、若しくは12個の炭素原子又はこれらの間の任意の範囲の値を有してもよい。炭化水素は、飽和炭化水素、炭素原子間に1つ以上の二重結合若しくは三重結合を有する不飽和炭化水素、水素原子が結合した炭素環を1つ以上有するシクロアルカン、又は芳香族炭化水素であってよい。ある実施形態において、 $R^5 \sim R^{22}$ の少なくとも1つはメチル基である。

10

【0015】

他の実施形態において、 $R^5 \sim R^{13}$ 及び/又は $R^{14} \sim R^{22}$ の少なくとも1つ又はそれぞれは、独立して炭素数2～30のアルケニル基であり、並びに任意の数の炭素原子又は2～30個の炭素原子を有してもよく、あるいは、独立して炭素数2～12のアルケニル基であり、並びに任意の数の炭素原子又は2と12との間の範囲の炭素原子を有してもよい。更なる実施形態において、 $R^5 \sim R^{13}$ 及び/又は $R^{14} \sim R^{22}$ の少なくとも1つ又はそれぞれは、独立して炭素数6～12の芳香族基であり、並びに任意の数の炭素原子又は6～12個の炭素原子を有してもよい。ある実施形態において、 $R^5 \sim R^{22}$ の少なくとも1つはフェニル基である。

20

【0016】

更に他の実施形態において、 $R^5 \sim R^{13}$ 及び/又は $R^{14} \sim R^{22}$ の少なくとも1つ又はそれぞれは、独立して $R' (OR'')_m$ であってよく、ここで R' 及び R'' は独立してアルキル基であり、かつ「 m 」は1～3である。このアルキル基は、例えば、メチル基、エチル基、又はプロピル基等の、最大で12個の炭素原子を有する任意の炭化水素基であってよいが、これらに限定されない。更なる実施形態において、 $R^5 \sim R^{22}$ の少なくとも1つは $R' OH$ であり、ここで R' はアルキル基である。好適なアルキル基の例は、上述した。

【0017】

更に他の実施形態において、 $R^5 \sim R^{13}$ 及び/又は $R^{14} \sim R^{22}$ の少なくとも1つ又はそれぞれは、独立してポリアルキレンオキシ基であってよい。ポリアルキレンオキシ基はまた、エチレンオキシド(EO)基、プロピレンオキシド(PO)基、ブチレンオキシド(BO)基等、又はこれらの組合せなどの、アルキレンオキシド(AO)基として記述されることがある。更に他の実施形態において、利用可能な好適なAO基の例としては、EO基、PO基、BO基、アミレンオキシド基、これらの混合物、AO-テトラヒドロフランの混合物、エピハロヒドリン、アラキレンスチレン、並びにこれらの混合物が挙げられるが、これらに限定されるものではない。これらの化合物の構造は、当該技術分野において既知である。第1及び第2のシロキサン骨格の前述の基のすべての組合せが、本願明細書において、様々な非限定的実施形態において明示的に企図される。

30

40

【0018】

$R^5 \sim R^{13}$ の任意の1つ以上が、 $R^{14} \sim R^{22}$ の任意の1つ以上に置換され得ることが企図される。他の非限定的実施形態において、 $R^5 \sim R^{13}$ の任意の1つ以上が、 $R^{14} \sim R^{22}$ の任意の1つ以上と同一であってよい。更なる非限定的実施形態において、本願明細書に示した $R^5 \sim R^{13}$ の任意の1つ以上及び/又は $R^{14} \sim R^{22}$ の任意の1つ以上が、任意の位置で置換され得る。

分子内構造：

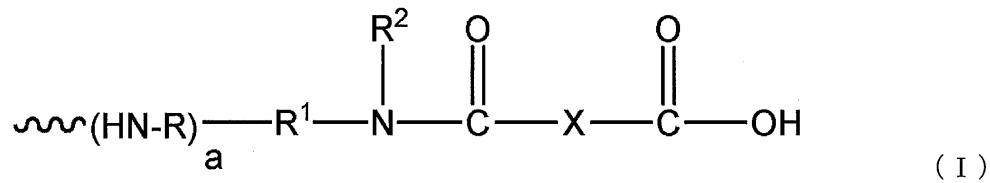
【0019】

本アミノシロキサンポリマーは、上述のとおり、第1のシロキサン骨格のケイ素原子と第2のシロキサン骨格のケイ素原子とを架橋する、少なくとも1つの分子内構造を含む。

50

この分子内構造は、化学構造：

【化 6】

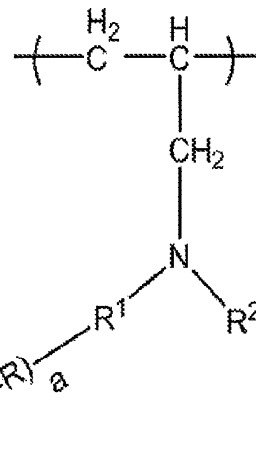
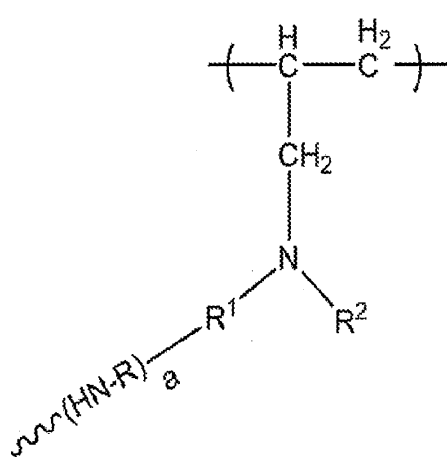


を有する。

10

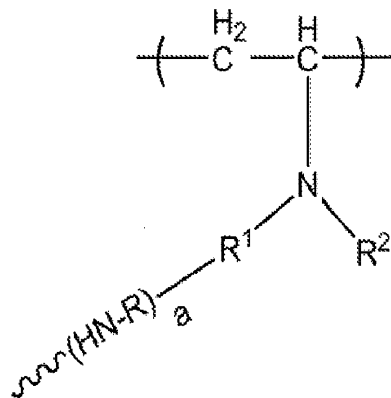
構造 (I) において、X は下記の基：

【化 7】



(I I)、(I I I)、

又は



(I V)

から選択される。

基 (I I)、(I I I)、及び (I V) において、それぞれの R は独立して炭素数 1 ~ 10 の炭化水素基である。それぞれの R¹ は独立して炭素数 1 ~ 10 の炭化水素基である。それぞれの R² は独立して水素原子、OH、炭素数 1 ~ 12 の炭化水素基、フェニル基、R' (OR'')_m、又は R' OH である。R' 及び R'' のそれぞれは独立してアルキル基であり、「m」は 1 ~ 3 である。更に、「a」は 0 又は 1 である。

【0020】

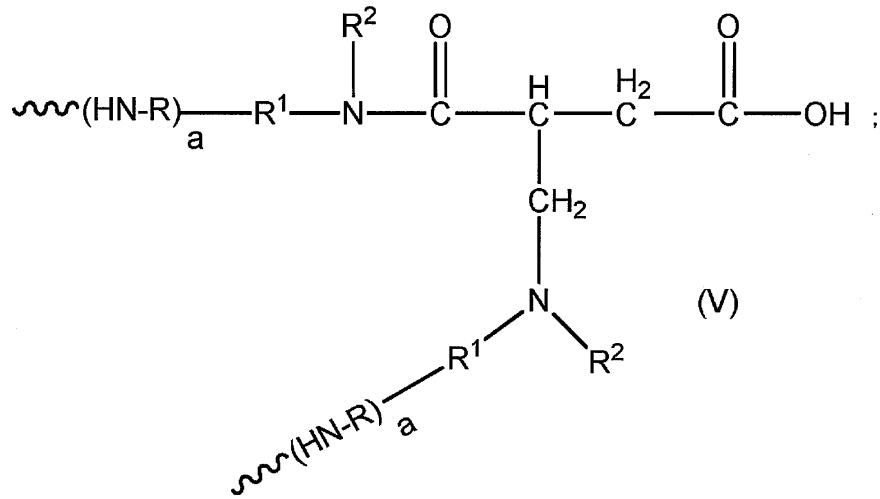
より具体的には、様々な実施形態において、分子内構造は下記の化学構造：

40

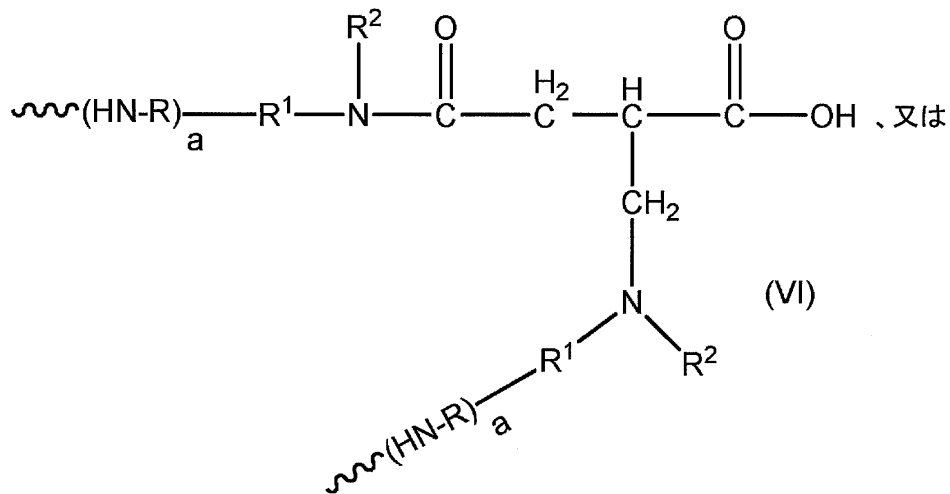
30

20

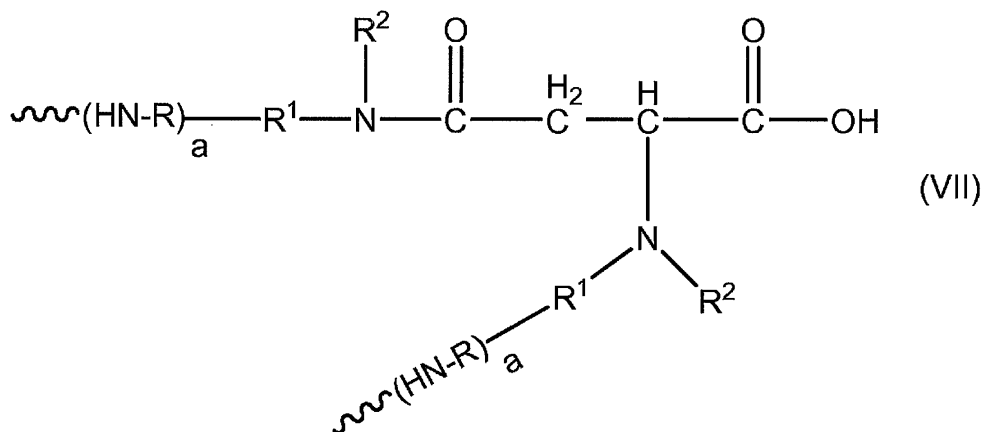
【化 8】



10



20



30

40

を有してもよい。

基(V)、(VI)、及び(VII)において、R、R¹、R²、及び「a」は、上述のとおりである。

【0021】

様々な実施形態において、それぞれのRは、独立して炭素数1～10の炭化水素基であり、上述のとおり、例えば、メチル基、エチル基、若しくはプロピル基、又は最大で10個の炭素数を有する任意の炭化水素基である。Rは、1、2、3、4、5、6、7、8、9、若しくは10個の炭素原子又はこれらの間の任意の範囲の値を有してもよい。ある実施形態において、Rの少なくとも1つ又はそれぞれが、独立して炭素数1～6の炭化水素

50

基である。更に、「a」は0又は1であり、(HN-R)は任意選択、すなわち、「a」が0の場合、(R-NH)は存在しない。一実施形態において、「a」は1である。他の一実施形態において、「a」は0である。

【0022】

様々な実施形態において、それぞれのRは、独立して炭素数1～10の炭化水素基であり、上述のとおり、例えば、メチレン基、エチレン基、若しくはプロピレン基、又は最大で10個の炭素数を有する任意の炭化水素基である。Rは、1、2、3、4、5、6、7、8、9、若しくは10個の炭素原子又はこれらの間の任意の範囲の値を有してもよい。ある実施形態において、Rの少なくとも1つ又はそれぞれが、独立して炭素数1～6の炭化水素基である。更に、「a」は0又は1であり、(HN-R)は任意選択、すなわち、

10

【0023】

様々な実施形態において、R²の少なくとも1つ又は両方が水素原子である。更なる実施形態において、R²の少なくとも1つ又は両方がOHである。他の実施形態において、R²の少なくとも1つ又は両方が独立して、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、若しくは12個の炭素原子又はこれらの間の任意の範囲の値を有してもよい、炭素数1～12の炭化水素基である。炭化水素基は上述のとおりであり得る。ある実施形態において、R²の少なくとも1つ又はそれぞれが、独立して炭素数1～6の炭化水素基である。更に他の実施形態において、R²の少なくとも1つ又は両方がフェニル基である。他の実施形態において、R²の少なくとも1つ又は両方が、独立してR'(OR'')^mである。R'及びR''のそれぞれは、独立して、上述のとおりか、又は異なるアルキル基であり得る。更に、「m」は1、2又は3である。更に他の実施形態において、R²の少なくとも1つ又は両方が、独立してR'OHである。R'は独立して、上述のとおりか、又は異なるアルキル基であり得る。

20

反応生成物：

【0024】

一実施形態において、本アミノシロキサンポリマーは、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンと無水マレイン酸及び/又は無水イタコン酸との反応生成物を包含するか、又は同反応生成物である。無水マレイン酸及び無水イタコン酸のそれぞれもまた、概してアルケニル環式無水物と称されることがある。他の一実施形態において、本アミノシロキサンポリマーは、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンと、
 - 不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンの反応生成物を包含するか、又は同反応生成物である。この
 - 不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンは、それ自体が、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンと無水マレイン酸及び/又は無水イタコン酸との反応の結果生成し得る。アミノ基を有するポリオルガノシロキサンと無水マレイン酸及び/又は無水イタコン酸との反応により本アミノシロキサンポリマーが生成されるが、その際、
 - 不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンが中間体として生成され得、それ自体が、出発物質であるアミノ基を有するポリオルガノシロキサンの別の分子と反応する。

30

40

アミノ基を有するポリオルガノシロキサン：

【0025】

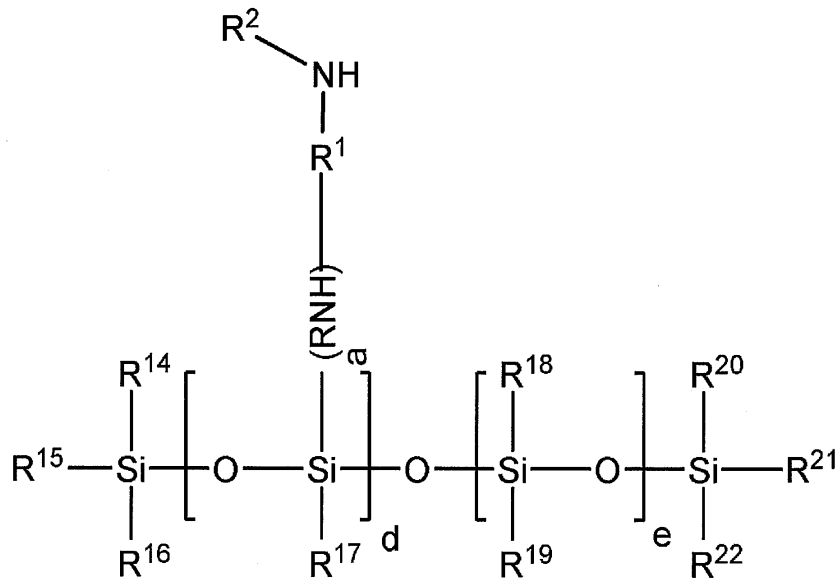
アミノ基を有するポリオルガノシロキサンは、当該技術分野において任意のものであってよい。例えば、ポリオルガノシロキサンは、上述のとおり、任意のM、D、T、及びQ単位を包含し得る。

【0026】

様々な実施形態において、ポリオルガノシロキサンは、下記の化学式：

$$\begin{array}{c} \text{R}^6 - \text{Si} \begin{array}{c} \text{R}^5 \\ | \\ \text{R}^7 \end{array} \left[\text{O} - \text{Si} \begin{array}{c} \text{R}^8 \\ | \\ \text{(NH)} \\ | \\ \text{(R)} \\ | \\ \text{R}^1 \\ | \\ \text{NH} \\ | \\ \text{R}^2 \end{array} \right]_a \text{O} - \left[\text{Si} \begin{array}{c} \text{R}^9 \\ | \\ \text{R}^{10} \end{array} - \text{O} \right]_c - \text{Si} \begin{array}{c} \text{R}^{11} \\ | \\ \text{R}^{13} \end{array} - \text{R}^{12} \\ \text{b} \end{array}$$

及び／又は



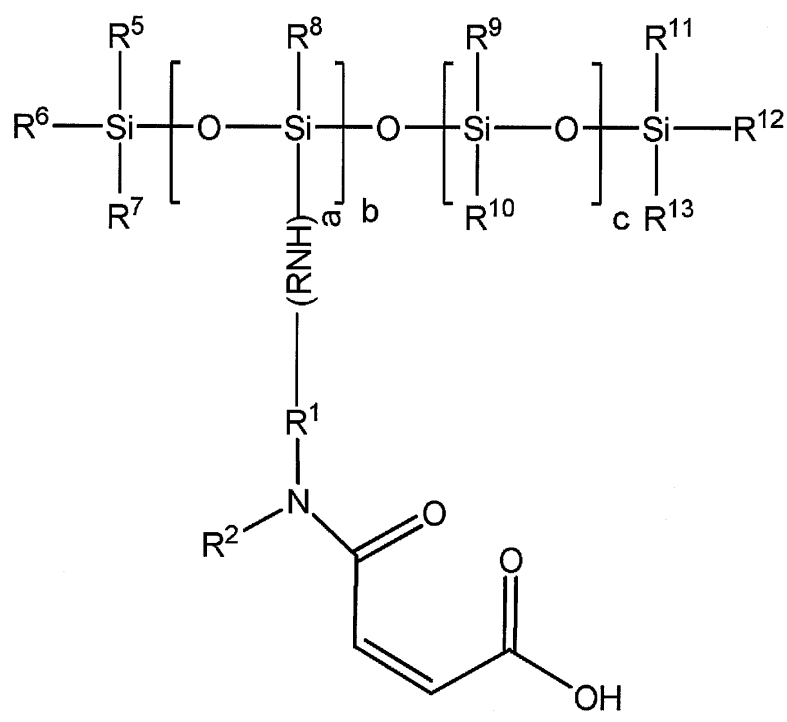
(I X)

構造 (V I I I) 及び (I X) において、 R 、 R^1 、 R^2 、 $R^5 \sim R^{22}$ 、「a」、「b」、「c」、「d」、及び「e」のそれぞれは、上述のとおりである。混合物又は組合せもまた使用され得る。

、 - 不飽和カルボン酸アミド基 (, -unsaturated carboxy acid amide group) を有するポリオルガノシロキサンは、特に限定されるものではない。、 - 不飽和は、アミド基 (amide group) に対してであってもよく、又はカルボン酸基 (carboxylic acid group) に対してであってもよい。一実施形態において、このポリオルガノシロキサンは、、 - 不飽和カルボン酸アミド基 (, -unsaturated carboxylic acid amide group) を有するものとして記述される。

様々な実施形態において、 R^1 - 不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンは、化学式：

【化 1 0】



を有する。

構造 (X) において、R、R¹、R²、R⁵ ~ R¹³、「a」、「b」、及び「c」のそれぞれは、上述のとおりである。

【0029】

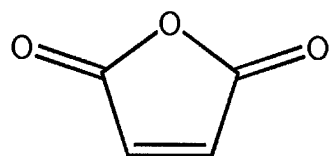
他の実施形態において、
- 不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンは、アミノ基を有する第2のポリオルガノシロキサンと無水マレイン酸との反応生成物である。アミノ基を有する第2のポリオルガノシロキサンは、上述のポリオルガノシロキサンと同一のもの又は異なるものであってよい。他の実施形態において、アミノ基を
有する第2のポリオルガノシロキサンは、上述の構造式を有する。

30

【0030】

無水マレイン酸は下記の式及び構造：

【化 1 1】



無水マレイン酸

化学式: C₄H₂O₃

(X I)

を有する。

無水マレイン酸の対称性のため、典型的には、下記の反応スキームに示すように、前述の反応において1つの主生成物のみが生成される。

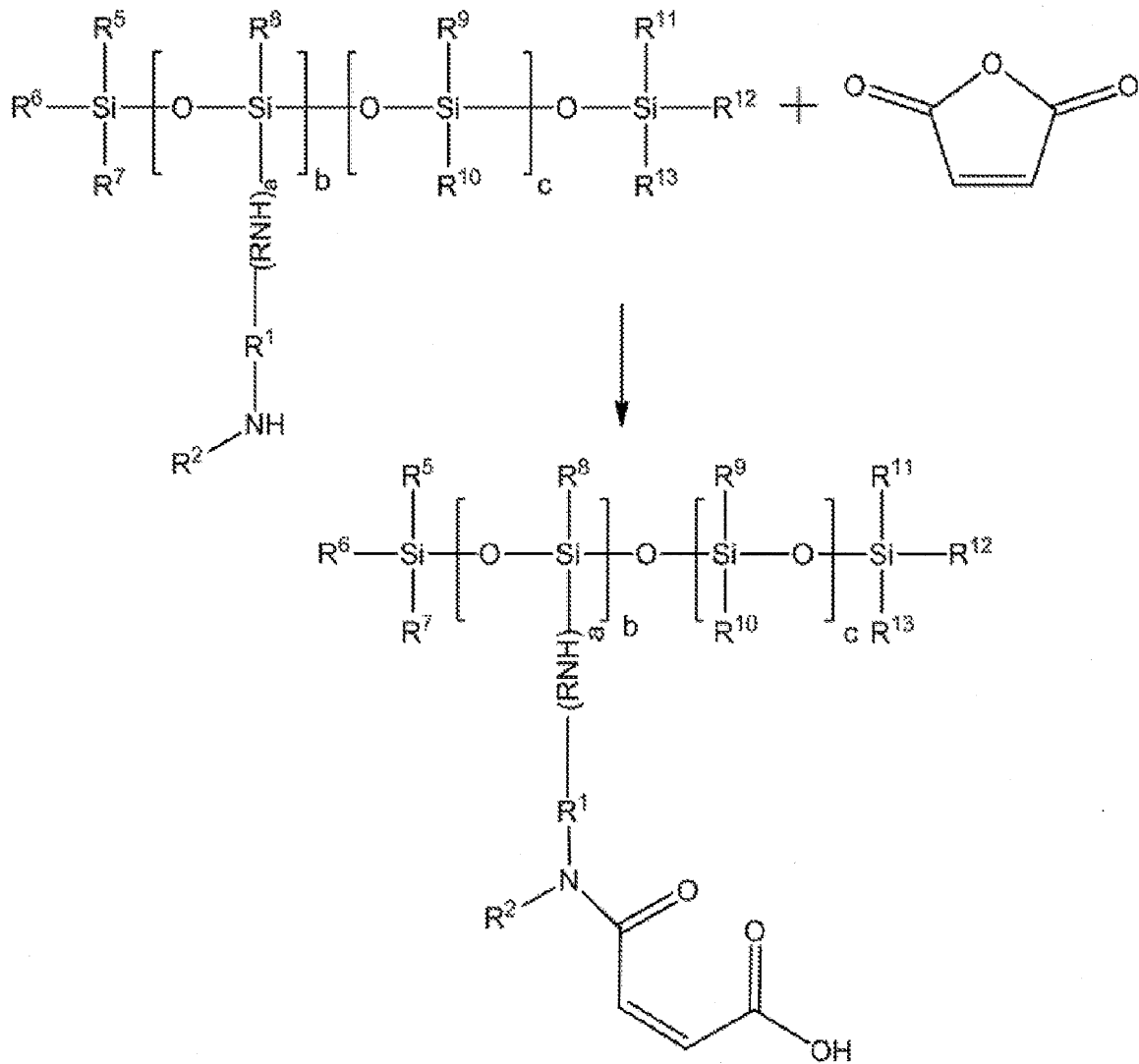
10

20

30

40

【化 1 2】



この反応スキームにおいて、 R 、 R^1 、 R^2 、 $R^5 \sim R^{13}$ 、「 a 」、「 b 」、及び「 c 」のそれぞれは、上述のとおりである。

【0031】

他の実施形態において、 --- - 不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンは、アミノ基を有する第2のポリオルガノシロキサンと無水イタコン酸との反応生成物である。アミノ基を有する第2のポリオルガノシロキサンは、上述のポリオルガノシロキサンと同一のもの又は異なるものであってよい。他の実施形態において、アミノ基を有する第2のポリオルガノシロキサンは、上述の構造式を有する。

【0032】

無水イタコン酸は下記の式及び構造：

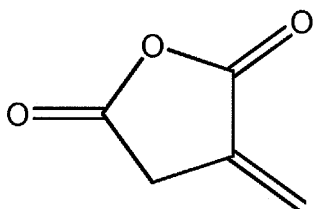
10

20

30

40

【化 1 3】



無水イタコン酸

化学式: $C_5H_4O_3$

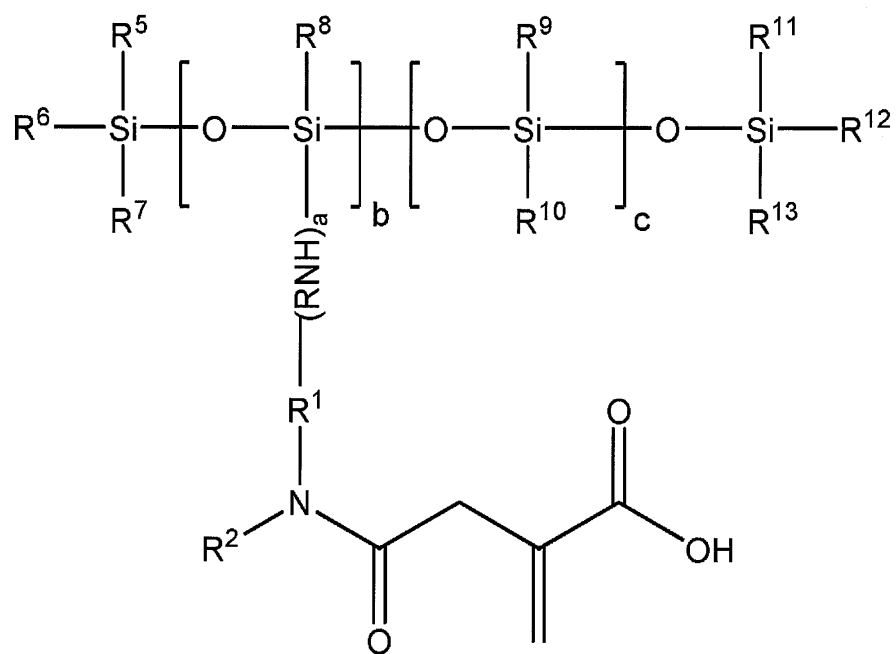
(X I I)

10

を有する。

非対称の無水イタコン酸を使用する際、下記の非限定的な実施例に示すように、様々な主生成物が生成され得る。したがって、 α,β -不飽和カルボン酸アミド基を有するポリオルガノシロキサンは、下記の構造を有し、下記の反応スキームを用いて生成され得る。

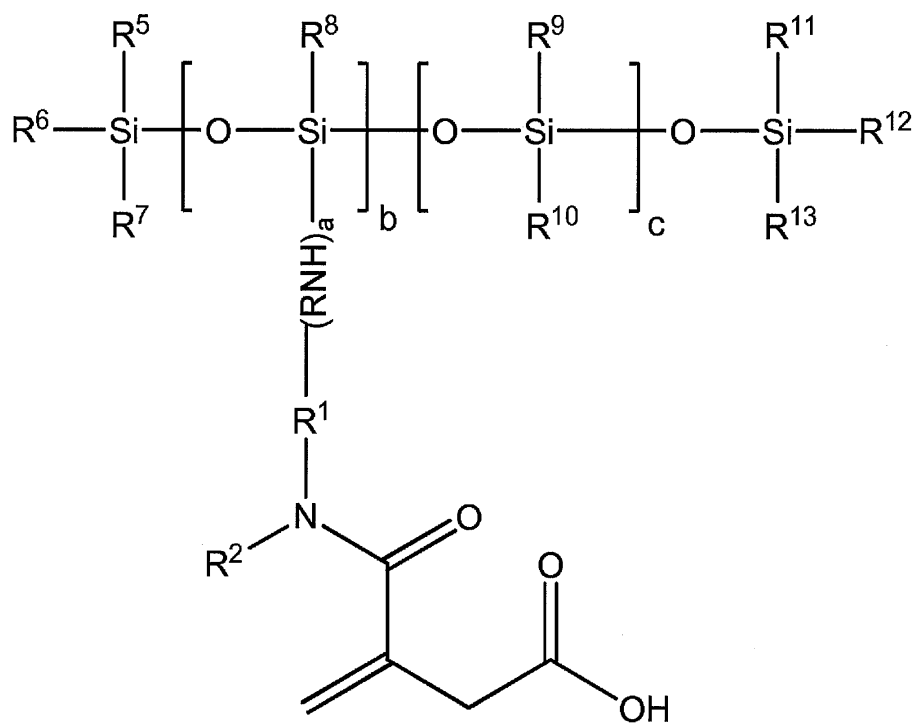
【化 1 4】



10

(X I I I)

20

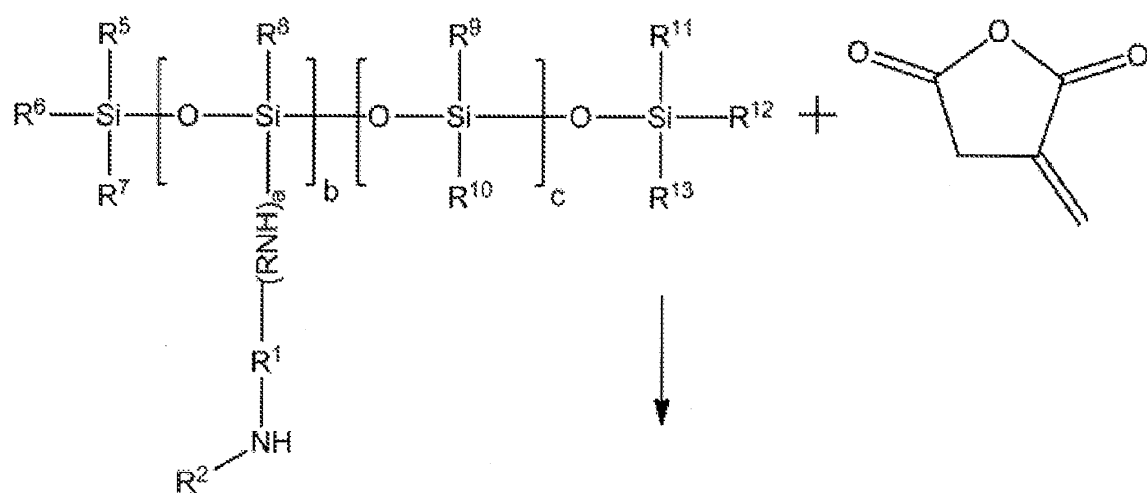


30

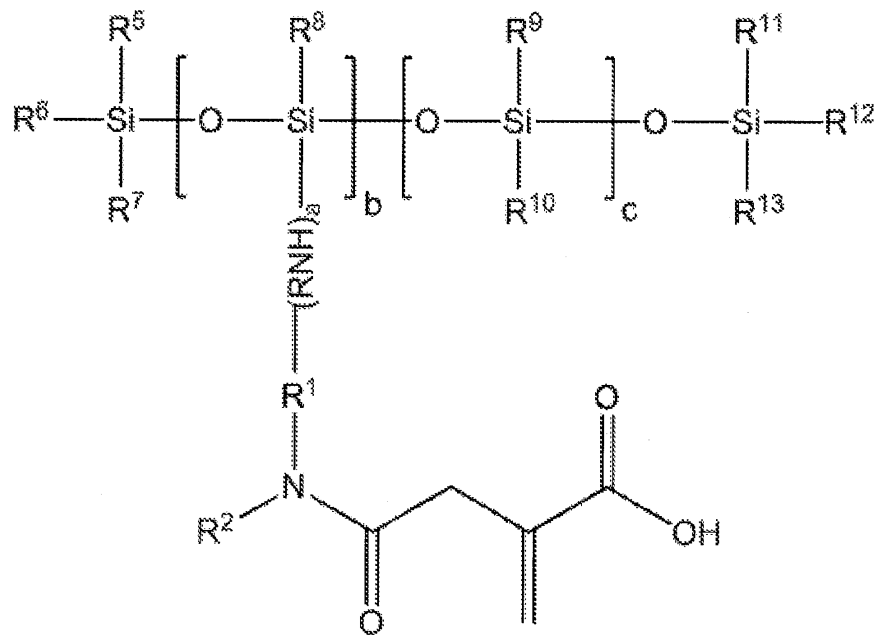
(X I V)

40

【化 1 5】



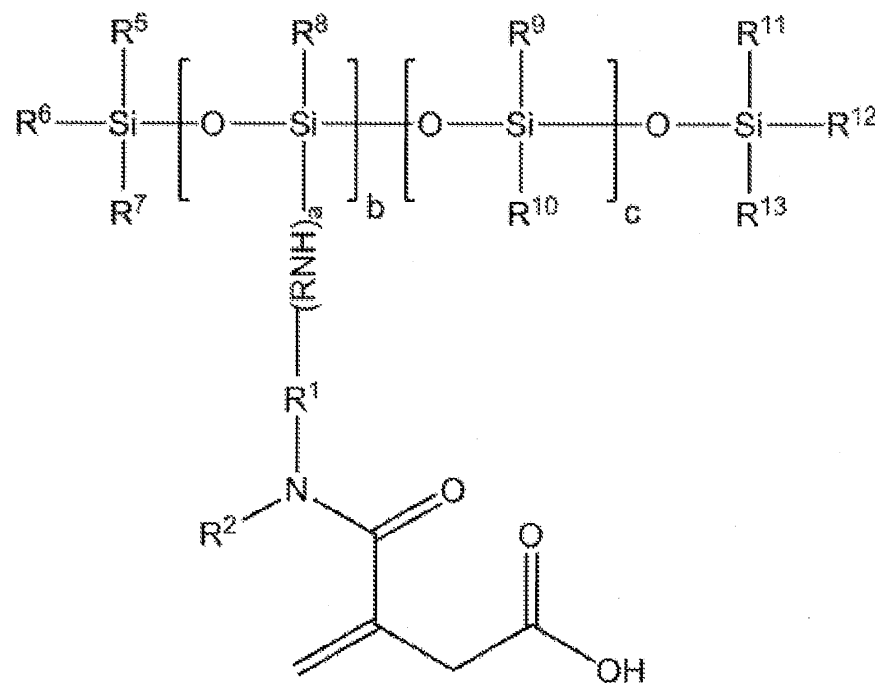
【化 1 6】



10



20



30

40

この反応スキームにおいて、 R 、 R^1 、 R^2 、 $R^5 \sim R^{13}$ 、「a」、「b」、及び「c」のそれぞれは、上述のとおりである。

【0033】

上述の基、構造、式、及び／又は反応スキームのそれぞれにおいて、シス又はトランス異性体／部分が図示されている場合もあるが、他の異性体／部分もまた企図される（図示せず）。更に、酸性又は塩基性の構成要素が図示されている場合もあるが、これらは配位する場合があります、すなわち、本開示の目的のために企図される塩の形態（図示せず）となり得る。例えば、酸性基が周囲のアミンに配位し、酸イオンの塩を生成することがある。

【0034】

50

更に他の実施形態において、無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸は、第2のオルガノポリシロキサンのアミノ基の1モル当たり約0.01～0.5、0.1～0.4、又は0.01～0.33モルの量、又は任意の値若しくはこれらの間の値の範囲で反応する。

架橋アミノシロキサンポリマー：

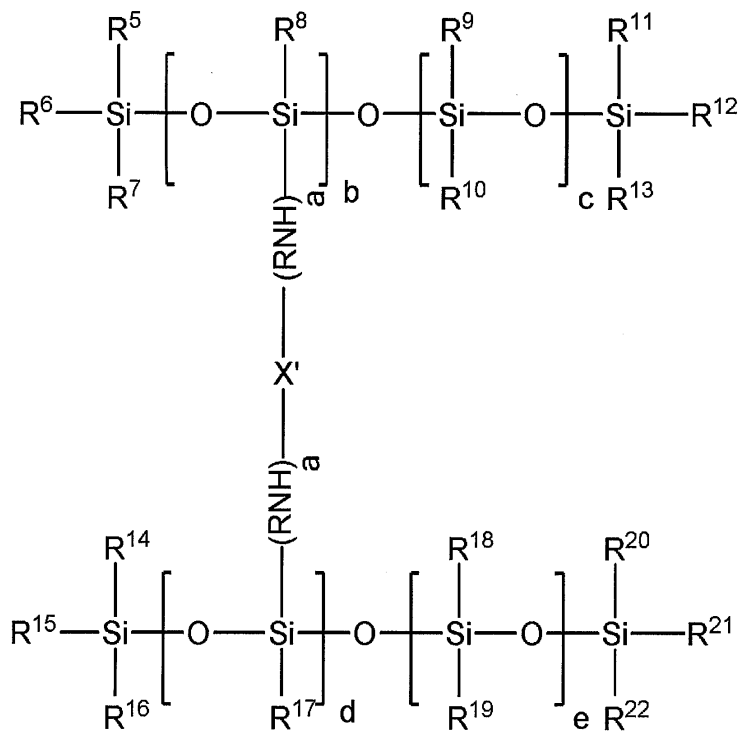
【0035】

本アミノシロキサンポリマー自体は、本願明細書の様々な実施形態に記載のものを除き、特に限定されるものではない。例えば、本アミノシロキサンポリマーの重量又は数平均分子量は特に限定されない。種々の実施形態において、本アミノシロキサンポリマーは、約310～300,000、10,000～100,000、又は15,000～60,000g/molの重量平均分子量を有する。同様に、本アミノシロキサンポリマーの第1及び第2のシロキサン骨格の重合度(「Dp」)も特に限定されない。様々な実施形態において、Dpは約1～3,000、100～1,000、又は200～600である。更にまた、シロキサン骨格の「b」と「c」との比、及び／又は「d」と「e」との比は、特に限定されない。様々な実施形態において、この比は約0.01～1、0.01～0.5、又は0.01～0.2である。更に、本アミノシロキサンポリマーの粘度も特に限定されない。様々な実施形態において、Brookfield粘度計を使用して25℃で測定した粘度は約10～100,000、100～10,000、又は500～5,000cPである。

【0036】

様々な実施形態において、架橋アミノシロキサンは化学構造：

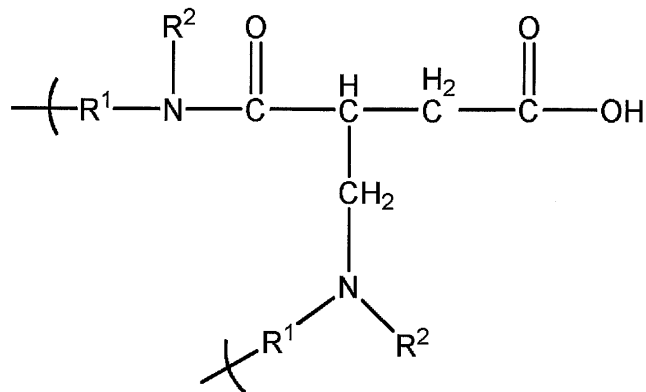
【化17】



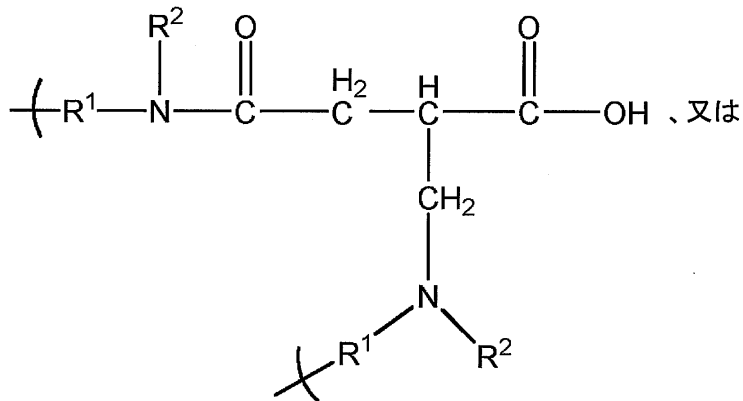
を有する。

構造(XV)において、X'は下記の3つの基：

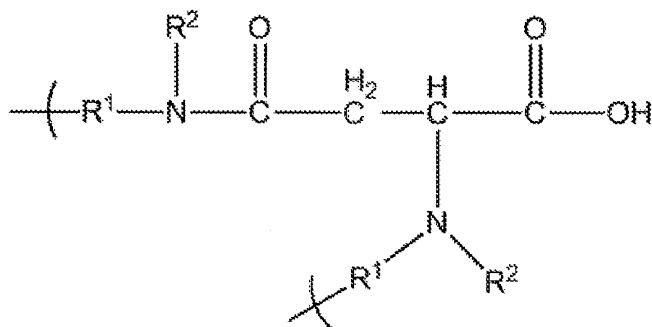
【化 18】



10



20



30

から選択される。

更に、 R 、 R^1 、 R^2 、 $\text{R}^5 \sim \text{R}^{22}$ 、「a」、「b」、「c」、「d」、及び「e」のそれぞれは、上述のとおりである。

アミノシロキサンポリマーを生成する方法：

【0037】

本開示はまた、本架橋アミノシロキサンポリマーを生成する方法を提供する。この方法は、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンを提供する工程と、無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸を提供し、無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸と、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンとを結合させて本架橋アミノシロキサンポリマーを生成する工程と、を含む。

40

【0038】

この反応は、下記の反応スキームによって実施され得るが、これに限定されるものではない。

反応スキーム1：

アミノ基を有するポリオルガノシロキサン+無水イタコン酸

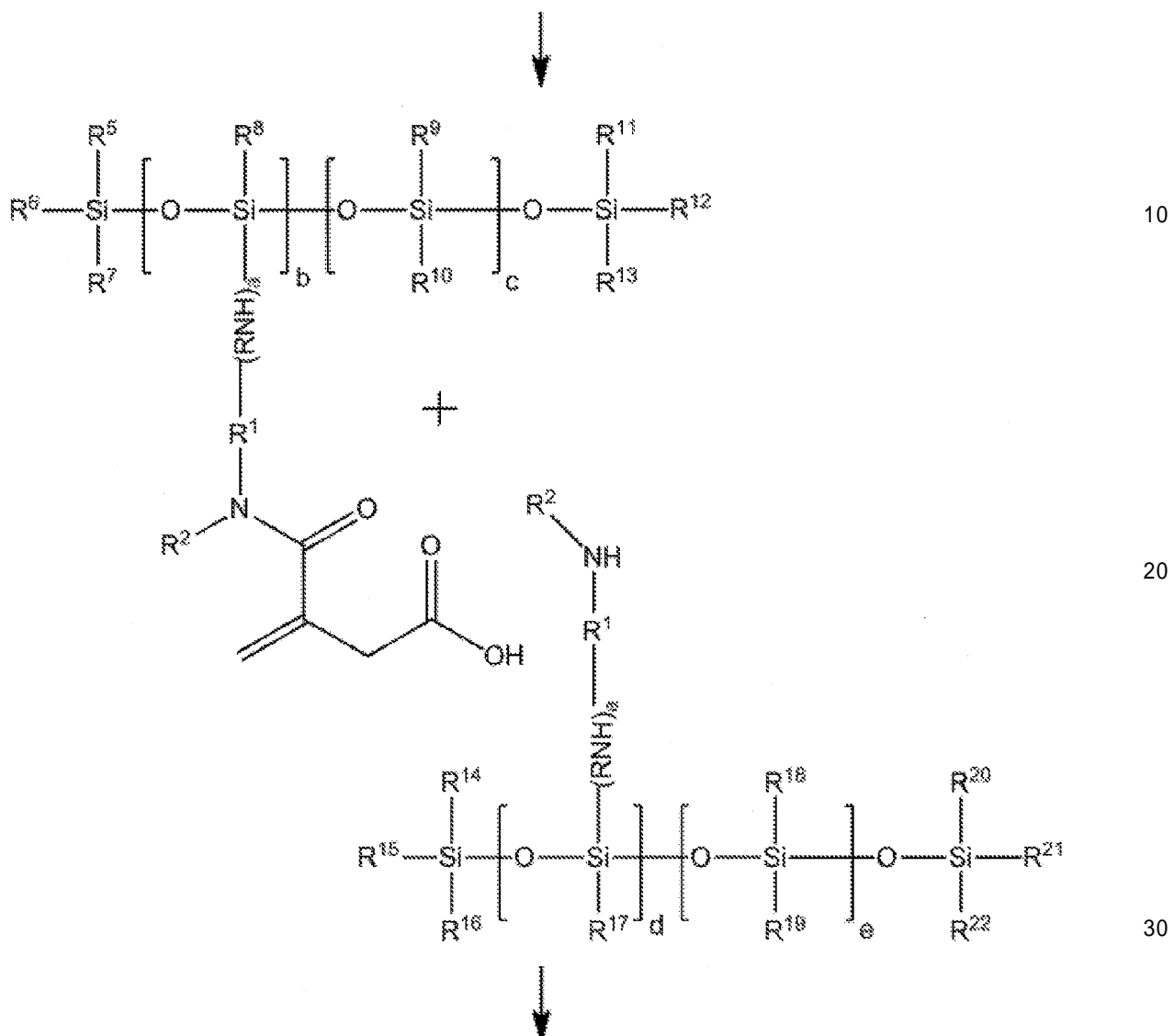




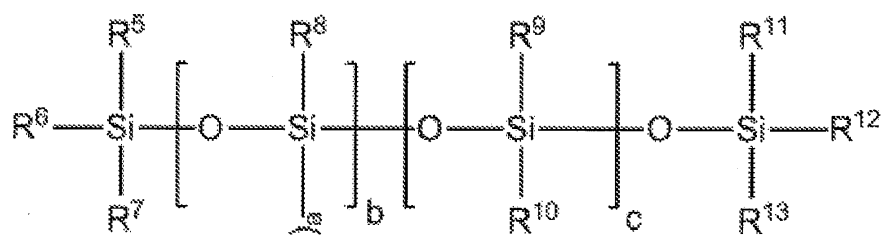
反応スキーム 2 :

【化 2 1】

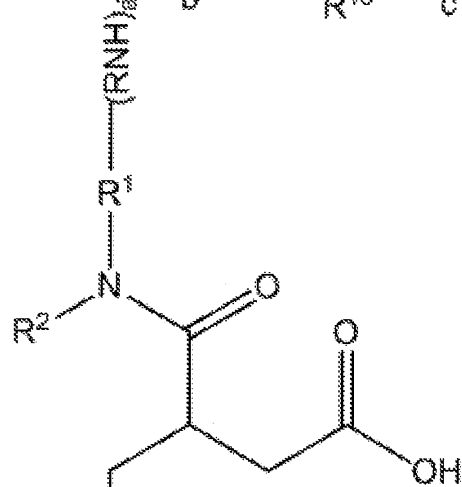
アミノ基を有するポリオルガノシロキサン+無水イタコン酸



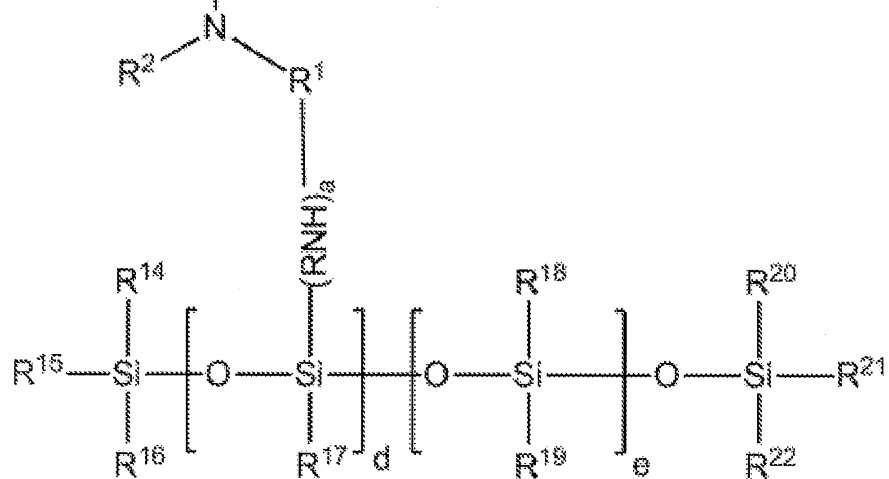
【化 2 2】



10



20



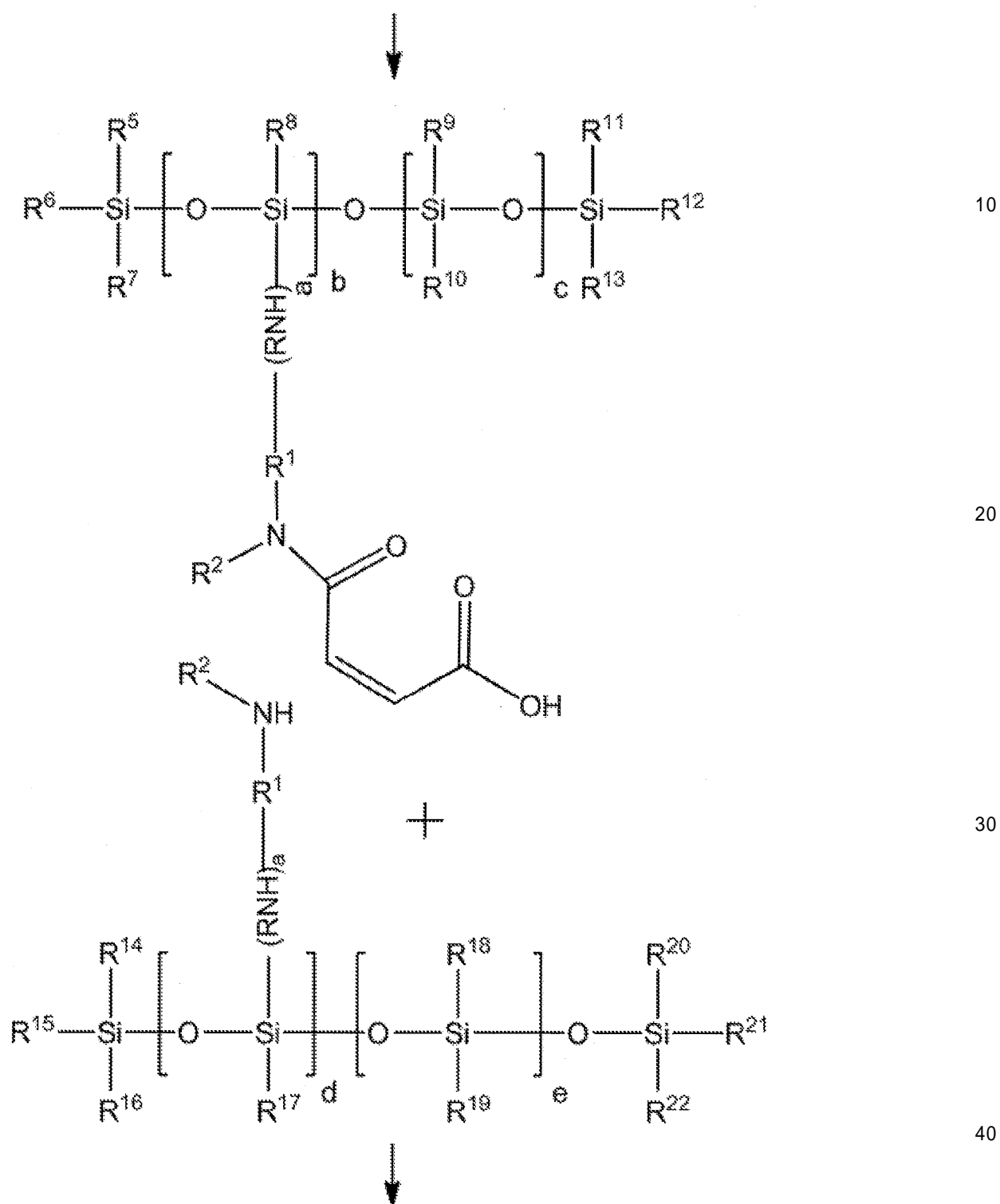
30

R、R¹、R²、R⁵～R²²、「a」、「b」、「c」、「d」、及び「e」のそれぞれは、上述のとおりである。

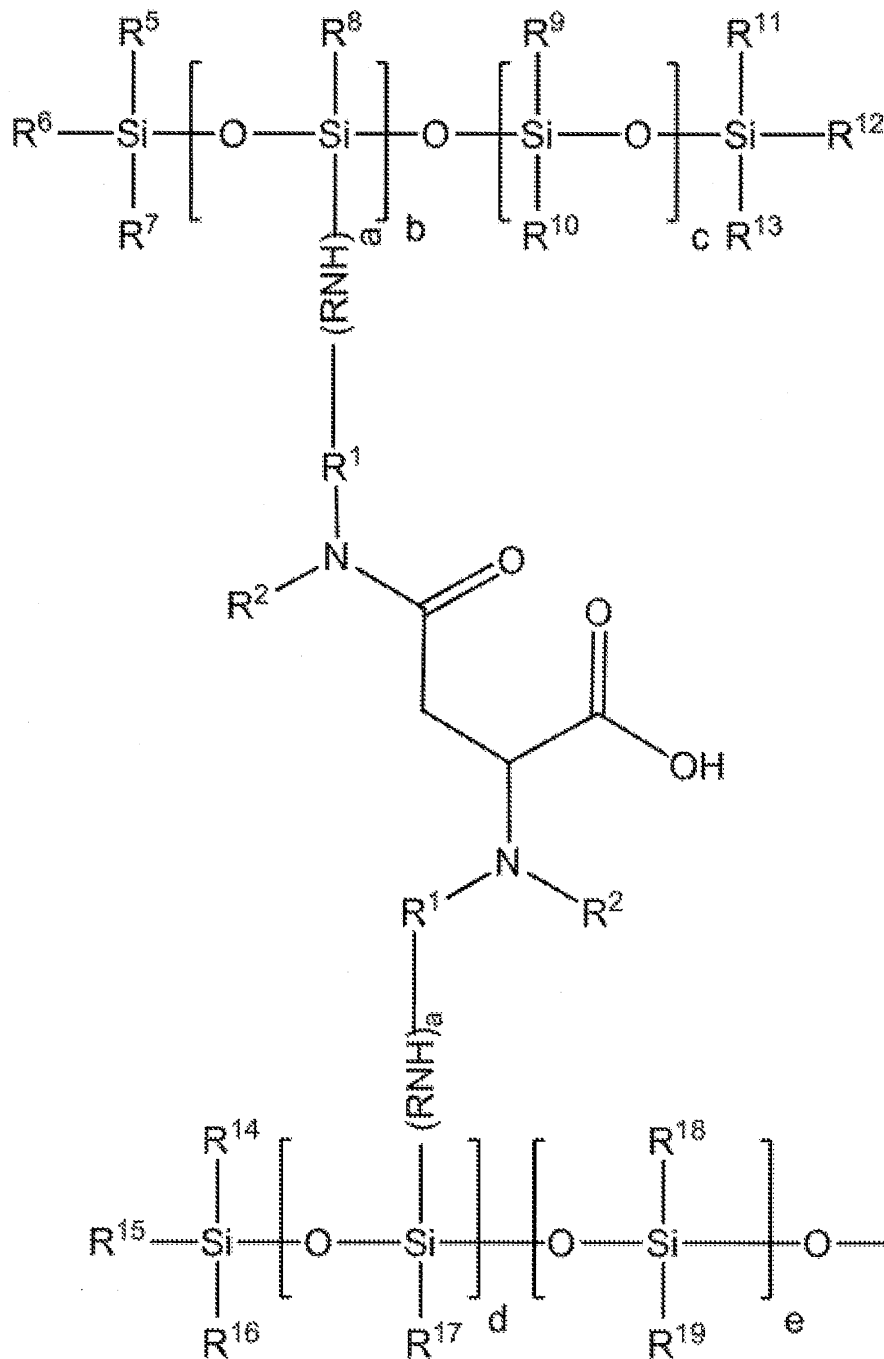
反応スキーム 3：

【化 2 3】

アミノ基を有するポリオルガノシロキサン+無水マレイン酸



【化 2 4】



10

20

30

R、R¹、R²、R⁵～R²²、「a」、「b」、「c」、「d」、及び「e」のそれぞれは上述のとおりである。

40

【0039】

上述の基、構造、式、及び／又は反応スキームのそれぞれにおいて、シス又はトランス異性体／部分が図示されている場合もあるが、他の異性体／部分もまた企図される（図示せず）。更に、酸性又は塩基性の構成要素が図示されている場合もあるが、これらは配位する場合があり、すなわち、本開示の目的のために企図される塩の形態（図示せず）となり得る。例えば、酸性基が周囲のアミンに配位し、酸イオンの塩を生成することがある。

【0040】

提供の工程のそれぞれは、当該技術分野において既知の任意の方法によって更に規定されてもよい。例えば、前述の構成要素は容器、反応器等で提供され得るが、当業者には理

50

解されるとおり、バッチ又は連続的に、並びに、任意の適切な温度、圧力、速度、及び／又は量で提供されてもよい。

【0041】

一実施形態において、無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸を提供する工程は、無水イタコン酸の非存在下で無水マレイン酸を提供する工程として更に規定される。他の一実施形態において、無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸を提供する工程は、無水マレイン酸の非存在下で無水イタコン酸を提供する工程として更に規定される。

【0042】

無水マレイン酸が使用されるとき、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンとは、アミノ基1モル当たり約0.01~0.5、0.01~0.45、又は0.1~0.4モルの量で典型的に反応する。更に、無水イタコン酸が使用されるとき、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンとは、アミノ基1モル当たり約0.01~0.5、0.01~0.45、又は0.1~0.4モルの量で典型的に反応する。更に、無水マレイン酸及び無水イタコン酸の両方が使用される場合、使用される無水マレイン酸及び無水イタコン酸の総量は、アミノ基1モル当たり典型的には約0.01~0.5、0.01~0.45、又は0.1~0.4モルである。しかしながら、本開示は、これらの量に限定されない。すべての値及び上述の値の間の値の範囲もまた、本願明細書の様々な非限定的実施形態において明示的に企図される。

【0043】

他の実施形態において、この方法は、アミノ基を有するポリオルガノシロキサンと、無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸とを、約-20~100、0~100、20~100、40~100、60~100、65~95、70~90、75~85、又は80~85の温度に加熱する工程を更に含む。ある具体的な実施形態において、加熱する工程は、約40~90の温度を含む。更に他の実施形態において、無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸を提供する工程は、ポリオルガノシロキサンのアミノ基1モル当たり約0.01~0.5、0.01~0.45、0.1~0.4、又は0.01~0.33モルの無水マレイン酸及び／又は無水イタコン酸を提供する工程として、更に規定される。すべての値及び上述の値の間の値の範囲もまた、本願明細書の様々な非限定的実施形態において明示的に企図される。

追加の実施形態：

【0044】

様々な実施形態において、本アミノシロキサンポリマーはゲルである。他の実施形態において、本アミノシロキサンポリマーはエラストマーである。更に他の実施形態において、本アミノシロキサンポリマーは固体である。本開示はまた、本アミノシロキサンポリマーを含むフィルムを提供する。このフィルムは、任意の寸法の長さ、幅、及び厚みであってよい。典型的には、このフィルムは本アミノシロキサンポリマーを使用して形成される。例えば、本アミノシロキサンポリマーを基材上に注ぎ、その後乾燥してフィルムを形成してもよい。基材は当該技術分野において任意であり、プラスチック、木材、ガラス、ポリマー、金属、ヒトの皮膚、ヒトの毛髪、布地、織物等を含む。

【0045】

他の実施形態において、本開示は、化粧品成分としての本アミノシロキサンポリマー又はフィルムの使用を提供する。あるいは、本開示は、布地処理剤としての本アミノシロキサンポリマー又はフィルムの使用を提供する。あるいは、本開示は、繊維処理剤又は組成物としての本アミノシロキサンポリマー又はフィルムの使用を提供する。更に、本開示は、本アミノシロキサンポリマー又はフィルムを含む化粧品組成物を提供する。本開示はまた、本アミノシロキサンポリマー又はフィルムを含むヘアケア組成物を提供する。本開示はまた、本アミノシロキサンポリマー又はフィルムを含む布地処理組成物を提供する。本開示は、本アミノシロキサンポリマー又はフィルムを含む繊維処理組成物を更に提供する。

【0046】

本開示のフィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは、例えば、毛髪、皮膚、粘膜又は歯等へのパーソナルケア用途等の、多くの用途において有用となり得る。これらの用途の多くにおいて、本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは滑性であり、スキンクリーム、スキンケアローション、保湿剤、アクネ又は皺取り等の美顔用品、身体用及び顔用洗浄剤、バスオイル、香料、芳香剤、コロソ、匂い袋、日焼け止め、プレシェーブ及びアフターシェーブローション、シェービングソープ及び剃毛用泡の特性を改善する。本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは同様に、ヘアシャンプー、ヘアコンディショナー、ヘアスプレー、ムース、パーマネント剤、脱毛剤、及びキューティクルコートに使用することができ、例えば、整髪及びコンディショニングにおいて効果をもたらす。化粧品において、本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは、メイクアップ用化粧品、カラー化粧品、ファンデーション、ほお紅、口紅、アイライナー、マスカラ、油脂除去剤、カラー化粧品除去剤、及びパウダー中の色素用の均染剤及び展着剤として機能し得る。本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーはまた、ビタミン、有機日焼け止め、セラミド、医薬品等の油性及び水溶性物質のための送達系として有用であり得る。スティック、ゲル、ローション、エアロゾル及びロールオンに配合される場合、本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは、乾燥した滑らかな取り出しを付与することができる。本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーはまた、蒸着ポリマー、界面活性剤、洗剤、抗菌剤、フケ防止剤、起泡力増進剤、タンパク質、保湿剤、懸濁化剤、乳白剤、香料、着色剤、植物抽出物、ポリマー等の、他の従来のケア成分と混合されてもよい。一実施形態において、本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは、化粧品組成物、布地処理組成物、ヘアケア組成物、繊維ケア組成物、及びこれらの組合せの群から選択される、水系組成物に含まれる。本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは、パーソナルケア製品中に、その約0.01～50重量%、又は0.1～25重量%の量で使用されてよい。

【0047】

本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーはまた、織物繊維処理、革の滑沢化、布地の柔軟化、剥離剤、水系コーティング、（特に原油パイプラインにおける）オイルの引き摺りの軽減、滑沢化、セルロース材料切断の円滑化等、シリコンが従来使用されてきた多くの他の領域において、多くの他の利用にとって有用であり得る。本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーはまた、オイルの引き摺りを軽減する目的でも使用できる。本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーはまた、抗菌用途、防腐剤、防臭剤、創傷被覆材、及び歯磨剤において、並びに有機合成反応における触媒として使用することができる。更に、本フィルム及び／又はアミノシロキサンポリマーは、フィルター及び太陽電池にも使用できる。

【0048】

本開示はまた、パーソナルケア組成物を提供する。これは、パーソナルケア製品組成物として記述されることもある。本パーソナルケア組成物は、本アミノシロキサンポリマーを含む。本パーソナルケア組成物は、クリーム、ゲル、粉末、ペースト、又は注ぎやすい液体の形態であってよい。一般に、かかる組成物は、室温で固体の材料が組成物中に存在しない場合、単純なプロペラミキサー、Brookfield逆回転ミキサー、又は均質化ミキサーを使用して、室温で調製することができる。特別な装置又は加工条件は、典型的には必要ない。製造する形態の種類に応じて調製方法は異なるだろうが、こうした方法は当技術分野において公知である。

【0049】

本パーソナルケア組成物は、塗布される身体部分に対して機能的なものであってよく、美容的なもの、治療的なもの、又はこれらのある程度組み合わせたものであってよい。このような製品の従来の例として、発汗抑制剤及び体臭防止剤、スキンケアクリーム、スキンケアローション、保湿剤、アクネ又は皺取り等の美顔用品、身体用及び顔用洗浄剤、バスオイル、香水、コロソ、匂い袋、日焼け止め、プレシェーブ及びアフターシェーブローション、シェービングソープ、及び剃毛用泡、ヘアシャンプー、ヘアコンディショナー

、染毛剤、縮毛矯正剤、ヘアスプレー、ムース、ジェル、パーマメント剤、脱毛剤、並びにキューティクルコート、化粧品、カラー化粧品、ファンデーション、コンシーラー、ほお紅、口紅、アイライナー、マスカラ、油脂除去剤、カラー化粧品除去剤、並びにパウダー、予防用及び／又は治療用であってよい抗アクネ剤、口腔衛生剤、抗生剤、治癒促進剤、及び栄養剤等を含む薬用クリーム、ペースト又はスプレーが挙げられるが、これらに限定されない。概して、本パーソナルケア組成物は、液体、リンス、ローション、クリーム、ペースト、ゲル、発泡体、ムース、軟膏、スプレー、エアロゾル、石鹸、スティック、軟固形、固体ゲル、及びゲルを含むがこれらに限定されない、いずれかの従来の形態での適用を可能にする担体と共に配合してもよい。好適な担体は、当技術分野において理解される。

10

【0050】

本パーソナルケア組成物は、様々なパーソナル、家庭、及びヘルスケア用途に使用できる。特に、本開示のアミノシロキサンポリマー及び／又はパーソナルケア組成物は、米国特許第6,051,216号、同第5,919,441号、同第5,981,680号、WO2004/060271及びWO2004/060101に記載のパーソナルケア製品において、WO2004/060276に記載の日焼け止め剤組成物において、WO03/105801に記載のフィルム生成樹脂をも含有する化粧料組成物において、米国特許出願公開第2003/0235553号、同第2003/0072730号及び同第2003/0170188号、並びに欧州特許第1,266,647号、同第1,266,648号、及び同第1,266,653号、並びにWO03/105789、WO2004/000247及びWO03/106614に記載の化粧料組成物において、WO2004/054523に記載のものへの添加剤として、米国特許出願公開第2004/0180032号に記載の長持ちする化粧料組成物において、並びに／又はWO2004/054524に記載の透明又は半透明なケア及び／又はメイクアップ組成物において使用することができ、これらのすべては、本願明細書の様々な非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。

20

【0051】

本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーは、人体、例えば皮膚若しくは毛髪に対してアプリケーター、ブラシ等を用いて塗布するか、手で塗布する、注ぐ、及び／又は、場合により組成物を体面上若しくは体内に擦り込むか若しくはマッサージする等の、標準的な方法によって使用できる。例えば、洗浄、拭き取り、及びピーリング等のカラー化粧品の除去方法も公知の標準的な方法である。皮膚に使用する場合は、本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーを、従来の方式で、例えば皮膚のコンディショニング用に用いてよい。本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーの有効量を皮膚に適用してよい。かかる有効量は、概して約1~3mg/cm²である。皮膚への適用は、典型的には、本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーを皮膚内に作用させることを含む。皮膚に適用するためのこの方法は、皮膚を有効量の本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーに接触させる工程と、次いで本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーを皮膚に擦り込む工程とを典型的に含む。これらの工程は、所望の効果を達成するために所望に応じて何度でも繰り返すことができる。

30

40

【0052】

本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーを毛髪に使用する際は、毛髪をコンディショニングするための従来の方式を用いてよい。本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーの有効量を毛髪に適用してよい。かかる有効量は概して約1~50、又は1~20gである。毛髪への適用は、毛髪のほとんど又はすべてを本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーと接触させ、本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーを毛髪に作用させることを典型的に含む。毛髪をコンディショニングするためのこの方法は、有効量の本パーソナルケア組成物及び／又はアミノシロキサンポリマーを毛髪に適用する工程と、次いで本パーソナルケア組

50

成物及び／又はアミノシロキサンポリマーを毛髪に作用させる工程とを典型的に含む。これらの工程は、所望のコンディショニング効果を達成するために所望に応じて何度でも繰り返すことができる。

【 0 0 5 3 】

本パーソナルケア組成物、化粧料組成物、布地処理組成物、ヘアケア組成物、フィルム及び／若しくはアミノシロキサンポリマー、又は上述の任意の他の組成物に配合してよい添加剤の非限定的な例としては、追加のシリコン、抗酸化剤、洗浄剤、着色剤、追加のコンディショニング剤、付着剤 (deposition agents)、電解質、軟化剤及び油類、剥離剤、発泡促進剤、芳香剤、湿潤剤、保湿剤、殺シラミ薬、pH調整剤、色素、防腐剤、殺生物剤、他の溶剤、安定剤、日焼け防止剤、懸濁化剤、なめし剤、他の界面活性剤、増粘剤、ビタミン類、植物成分、蠟類、レオロジー改質剤、フケ防止剤、抗アクネ剤、虫歯予防薬、及び創傷治癒促進剤が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【 0 0 5 4 】

シャンプー若しくは洗浄剤等の本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー及び／又は上述の任意の他の組成物は、少なくとも1つのアニオン性洗浄界面活性剤を含んでよい。これは、シャンプーの処方に典型的に使用される、公知のアニオン性洗浄界面活性剤のいずれかであってよい。これらのアニオン性洗浄界面活性剤は、シャンプー組成物中で洗浄剤及び発泡剤として機能することができる。アニオン性洗浄界面活性剤の例としては、次が挙げられる：アルカリ金属スルホリシネート (sulfuric acid)；ヤシ油酸類のスルホン化モノグリセリド等の脂肪酸のスルホン化グリセリルエステル；オレイリセチアネートナトリウム (sodium oleylisethionate) 等のスルホン化一価アルコールエステルの塩；オレイルメチルタウリドのナトリウム塩等のアミノスルホン酸のアミド；スルホン酸パルミトニトリル等の脂肪酸ニトリルのスルホン化物； α -ナフタレンモノスルホン酸ナトリウム等のスルホン化芳香族炭化水素；ナフタレンスルホン酸とホルムアルデヒドとの縮合物；オクタヒドロアントラセンスルホン酸ナトリウム；ラウリル硫酸ナトリウム、ラウリル硫酸アンモニウム又はラウリル硫酸トリエタノールアミン等のアルキル硫酸アルカリ金属塩；ラウリルエーテル硫酸ナトリウム、ラウリルエーテル硫酸アンモニウム、アルキルアリアルエーテル硫酸ナトリウム、及びアルキルアリアルエーテル硫酸アンモニウム等の、8個以上の炭素原子のアルキル基を有する硫酸エーテル；8個以上の炭素原子のアルキル基を1つ以上有するアルキルアリアルスルホン酸；例えば、ヘキシルベンゼンスルホン酸ナトリウム塩、オクチルベンゼンスルホン酸ナトリウム塩、デシルベンゼンスルホン酸ナトリウム塩、ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム塩、セチルベンゼンスルホン酸ナトリウム塩、及びミリスチルベンゼンスルホン酸ナトリウム塩等のアルキルベンゼンスルホン酸アルカリ金属塩； $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_2\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_2\text{SO}_3\text{H}$ 、 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_2\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_3\text{SO}_3\text{H}$ 、 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_2\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_4\text{SO}_3\text{H}$ 、 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{CH}_2\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_5\text{SO}_3\text{H}$ 、及び $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{CH}_2\text{O}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_6\text{SO}_3\text{H}$ を包含するポリオキシエチレンアルキルエーテルの硫酸エステル；並びにアルキルナフチルスルホン酸のナトリウム塩、カリウム塩、及びアミン塩。典型的に、洗浄界面活性剤は、ラウリル硫酸ナトリウム、ラウリル硫酸アンモニウム、ラウリル硫酸トリエタノールアミン、ラウリルエーテル硫酸ナトリウム、及びラウリルエーテル硫酸アンモニウムから選択される。アニオン性洗浄界面活性剤は、シャンプー組成物中に、シャンプー組成物の総重量の約5～50、又は5～25重量%で存在し得る。

【 0 0 5 5 】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー及び／又は上述の任意の他の組成物は、少なくとも1つのカチオン性沈着補助剤、典型的にはカチオン沈着ポリマーを含んでよい。カチオン性沈着補助剤は、約0.001～5、0.01～1、又は0.02～0.5重量%で典型的に存在する。カチオン沈着ポリマーは、ホモポリマーであっても、2つ以上の種類のモノマーから生成されてもよい。カチオン沈着ポリマーの分子量は、典型的には約5,000～10,000、10,000以上(10,000)

、又は100,000~2,000,000である。カチオン沈着ポリマーは、第四級アンモニウム若しくはプロトン化アミノ基、又はこれらの組合せ等のカチオン性窒素含有基を典型的に有する。カチオン電荷密度は、少なくとも0.1 meq/g、典型的には0.8超(>0.8)、又はさらに高い必要があることが分かっている。カチオン電荷密度は、4 meq/gを超えるべきではなく、それは典型的には3未満(<3)、より典型的には2 meq/g未満(<2 meq/g)である。電荷密度はケルダール法を用いて測定することができ、使用における所望のpH、概して約3~9又は4~8において、上述の限度内である。任意及びすべての値又は上述の値の間の範囲の値もまた使用され得ることが、企図される。カチオン性窒素含有基は、カチオン沈着ポリマーの全モノマー単位の画分上に置換基として典型的に存在する。したがって、カチオン沈着ポリマーがホモポリマーでない場合、それは、スパーサ非カチオン性モノマー単位を含むことができる。かかるカチオン沈着ポリマーは、CTFA Cosmetic Ingredient Directory, 3rd editionに記載されており、この記載は、本願明細書の1つ以上の非限定の実施形態において参照により明示的に援用される。好適なカチオン性沈着補助剤としては、例えば、水溶性スパーサモノマーと、カチオン性アミン又は第四級アンモニウム官能性を有するビニルモノマーのコポリマー、例えば、(メタ)アクリルアミド、アルキル及びジアルキル(メタ)アクリルアミド、アルキル(メタ)アクリレート、ビニルカプロラクトン、並びにビニルピロリジンが挙げられる。アルキル及びジアルキル置換モノマーは、典型的には炭素数1~7のアルキル基、更に典型的には炭素数1~3のアルキル基を有する。他の好適なスパーサとしては、ビニルエステル、ビニルアルコール、無水マレイン酸、プロピレングリコール、及びエチレングリコールが挙げられる。カチオン性アミンは、組成物の特定の種及びpHに応じて、第一級、第二級、又は第三級アミンであり得る。概して、第二級及び第三級アミン、特に第三級が典型的である。アミン置換ビニルモノマー及びアミンは、アミン形態で重合され、次いで、四級化によってアンモニウムに変換され得る。好適なカチオン性アミノ及び第四級アンモニウムモノマーとしては、例えば、ジアルキルアミノアルキルアクリレート、ジアルキルアミノアルキルメタクリレート、モノアルキルアミノアルキルアクリレート、モノアルキルアミノアルキルメタクリレート、トリアルキルメタクリルオキシアルキルアンモニウム塩、トリアルキルアクリルオキシアルキルアンモニウム塩、ジアリル第四級アンモニウム塩で置換されたビニル化合物、並びにピリジニウム、イミダゾリウム、及び四級化ピロリジン等の環状カチオン性窒素含有環を有するビニル第四級アンモニウムモノマー、例えば、アルキルビニルイミダゾリウム、及び四級化ピロリジン、例えば、アルキルビニルイミダゾリウム、アルキルビニルピリジニウム、アルキルビニルピロリジン塩が挙げられる。これらのモノマーのアルキル部分は、典型的には低級アルキルで、炭素数が1~7のアルキル、より典型的には炭素数1及び2のアルキル等である。本願明細書で用いるのに好適なアミン置換ビニルモノマーとしては、ジアルキルアミノアルキルアクリレート、ジアルキルアミノアルキルメタクリレート、ジアルキルアミノアルキルアクリルアミド、及びジアルキルアミノアルキルメタクリルアミドが挙げられ、アルキル基は典型的には炭素数1~7のヒドロカルビル、より典型的には炭素数1~3のアルキルである。カチオン性沈着補助剤は、アミン及び/若しくは第四級アンモニウム置換モノマー並びに/又は相溶性スパーサモノマー由来のモノマー単位の組合せを含むことができる。好適なカチオン性沈着補助剤としては、例えば：1 - ビニル - 2 - ピロリジン及び1 - ビニル - 3 - メチルイミダゾリウム塩(例えば、塩化物)のコポリマー(当業界では、the Cosmetic, Toiletry, and Fragrance Association, 「CTFA」により、Polyquaternium - 16と称される)、例えば、BASF Wyandotte Corp. (Parlissippany, N. J., USA)より商標名LUVIQUAT(例えばLUVIQUAT FC 370)で市販されているもの等；1 - ビニル - 2 - ピロリジン及びジメチルアミノエチルメタクリレートのコポリマー(当業界では、CTFAによってPolyquaternium - 11と称される)、例えば、Gar Corporation (Wayne, N. J., USA)より商標名GAFQUAT(例えばGAFQUAT 7

10

20

30

40

50

55N)で市販されているもの等；カチオン性ジアリル第四級アンモニウム含有ポリマー、例えば、ジメチルジアリルアンモニウムクロライドホモポリマー並びにアクリルアミド及びジメチルジアリルアンモニウムクロライドのコポリマー、当業界（CTFA）でそれぞれPolyquaternium 6及びPolyquaternium 7と称されるもの；米国特許第4,009,256号に記載の、3～5個の炭素原子を有する不飽和カルボン酸のホモポリマー及びコポリマーのアミノアルキルエステルの鉍酸塩；並びに英国出願第9403156.4号（WO95/22311）に記載のカチオン性ポリアクリルアミドが挙げられる。これらはそれぞれ、本願明細書の1つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。使用され得る他のカチオン性沈着補助剤としては、カチオン性セルロース誘導体及びカチオン性デンプン誘導体等の多糖類ポリマーが挙げられる。本開示の組成物での使用に好適なカチオン性多糖類ポリマー材料としては、式： $A-O(R-N^+R_1R_2R_3X^-)$ のものが挙げられ、式中、Aは、デンプン又はセルロース無水グルコース残基等の無水グルコース残基であり、Rは、アルキレンオキシアルキレン、ポリオキシアルキレン、若しくはヒドロキシアルキレン基、又はそれらの組合せであり、R₁、R₂及びR₃は独立して、アルキル、アリール、アルキルアリール、アリールアルキル、アルコキシアルキル、又はアルコキシアリール基であり、各基は、最大で18個の炭素原子を含有し、各カチオン部分に対する炭素原子の総数（すなわち、R₁、R₂、R₃中の炭素原子の合計）は、典型的には約20個以下であり、Xはアニオン性対イオンである。カチオン性セルロースは、Amerchol Corp.（Edison, NJ, USA）より、ポリマーiR（商標）及びLR（商標）の一連のポリマーで、当業界（CTFA）でPolyquaternium 10と称される、トリメチルアンモニウム置換エポキシドと反応させられたヒドロキシエチルセルロースの塩として市販されている。別の種類のカチオン性セルロースとしては、当業界（CTFA）においてPolyquaternium 24と称される、ラウリルジメチルアンモニウム置換エポキシドと反応させられたヒドロキシエチルセルロースのポリマー第四級アンモニウム塩が挙げられる。これらの材料は、商標名Polymer LM-200でAmerchol Corp.（Edison, NJ, USA）より入手できる。使用され得る他のカチオン性沈着補助剤としては、グアーヒドロキシプロピル塩化トリモニウム等のカチオン性グアーガム誘導体が挙げられる（Celanese Corp.より一連のJaguar商標で市販されている）。他の材料としては、第四級窒素含有セルロースエーテル（例えば米国特許第3,962,418号に記載）、及びエーテル化セルロース及びデンプンのコポリマー（例えば米国特許第3,958,581号に記載）が挙げられる。これらはそれぞれ、本願明細書の1つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。

【0056】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー及び/又は上述の任意の他の組成物は、発泡促進剤を含んでよい。発泡促進剤は、泡の崩壊を遅延する泡安定剤とは対照的に、界面活性剤の一定のモル濃度で、系から利用可能な泡の量を増加させる薬剤である。泡の形成は、発泡促進効果がある量の発泡促進剤を、水性媒体に添加することによって提供される。発泡促進剤は、脂肪酸アルカノールアミド及びアミンオキシドからなる群から典型的には選択される。脂肪酸アルカノールアミドは、イソステアリン酸ジエタノールアミド、ラウリン酸ジエタノールアミド、カプリン酸ジエタノールアミド、ヤシ脂肪酸ジエタノールアミド、リノール酸ジエタノールアミド、ミリスチン酸ジエタノールアミド、オレイン酸ジエタノールアミド、ステアリン酸ジエタノールアミド、ヤシ脂肪酸モノエタノールアミド、オレイン酸モノイソプロパノールアミド、及びラウリン酸モノイソプロパノールアミドによって例示される。アミンオキシドは、N-ココジメチルアミンオキシド、N-ラウリルジメチルアミンオキシド、N-ミリスチルジメチルアミンオキシド、N-ステアリルジメチルアミンオキシド、N-コカミドプロピルジメチルアミンオキシド、N-タローアミドプロピルジメチルアミンオキシド、ビス（2-ヒドロキシエチル）C₁₂-C₁₅アルコキシプロピルアミンオキシドによって例示される。典型的には、発泡促進剤は、ラウリン酸ジエタノールアミド、N-ラウリルジメチルアミンオキシド、

ヤシ酸ジエタノールアミド、ミリスチン酸ジエタノールアミド、及びオレイン酸ジエタノールアミドからなる群から選択される。発泡促進剤は、シャンプー組成物中に、シャンプー組成物の総重量の約1~15、又は2~10重量%で典型的に存在する。組成物は、起泡性能を改善するために、ポリアルキレングリコールを更に含んでもよい。シャンプー組成物中のポリアルキレングリコールの濃度は、シャンプー組成物の約0.01~5、0.05~3、又は0.1~2重量%である。任意のポリアルキレングリコールは、一般式 $H(OCH_2CHR)_n-OH$ を特徴とし、式中、Rは、H、メチル、及びこれらの組合せから選択される。RがHであるとき、これらの材料は、エチレンオキシドのポリマーであり、それらはまた、ポリエチレンオキシド、ポリオキシエチレン、及びポリエチレングリコールとしても既知である。Rがメチルであるとき、これらの材料は、プロピレンオキシドのポリマーであり、それらはまた、ポリプロピレンオキシド、ポリオキシプロピレン、及びポリプロピレングリコールとしても既知である。Rがメチルであるとき、得られるポリマーの種々の位置異性体も存在し得ることも理解される。上述の構造において、「n」は1,500~25,000、2,500~20,000、又は3,500~15,000の平均値を有する。本願明細書で有用なポリエチレングリコールは、RがHかつ「n」が平均値2,000のPEG-2M(PEG-2Mは、Polyox WSR9N-10としても既知であり、Union CarbideよりPEG-2,000として入手可能)、RがHかつ「n」が平均値5,000のPEG-5M(PEG-5Mは、Polyox WSRO N-35及びPolyox WSRS N-80としても既知であり、両者ともUnion Carbideより、PEG-5,000及びPolyethylene Glycol 300,000として入手可能)、RがHかつ「n」が平均値7,000のPEG-7M(PEG-7Mは、Polyox WSRO N-750としても既知であり、Union Carbideから入手可能)、RがHかつ「n」が平均値9,000のPEG-9M(PEG-9Mは、Polyox WSRS N-3333としても既知であり、Union Carbideから入手可能)、並びに、RがHかつ「n」が平均値14,000のPEG-14M(PEG-14Mは、Polyox WSRO N-3000としても既知であり、Union Carbideから入手可能)である。他の有用なポリマーとしては、ポリプロピレングリコール及び混合ポリエチレン/ポリプロピレングリコールが挙げられる。

【0057】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物は、シリコンコンディショニング剤、又は他の非水溶性材料を懸濁するのに有効な濃度で、本パーソナルケア組成物中に分散した形態で、懸濁化剤を含有する。かかる濃度は、本パーソナルケア組成物の約0.1~10、又は0.3~5.0重量%であり得る。懸濁化剤としては、アシル誘導体、長鎖アミノオキシド、及びこれらの組合せとして分類され得る結晶性懸濁化剤が挙げられ、それらの濃度は、シャンプー組成物の約0.1~5.0、又は0.5~3.0重量%である。これらの懸濁化剤は、米国特許第4,741,855号に記載されており、この記載は、本願明細書の1つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。これらの典型的な懸濁化剤としては、16~22個の炭素原子を典型的に有する脂肪酸のエチレングリコールエステルが挙げられる。より典型的なのはモノステアレート及びジステアレートの両方のエチレングリコールステアレートであるが、7%未満(<7%)のモノステアレートを含有するジステアレートが特に典型的である。他の好適な懸濁化剤としては、典型的には16~22個の炭素原子、より典型的には16~18個の炭素原子を有する脂肪酸のアルカノールアミドが挙げられ、その典型例としては、ステアリン酸モノエタノールアミド、ステアリン酸ジエタノールアミド、ステアリン酸モノイソプロパノールアミド及びステアリン酸モノエタノールアミドステアレートが挙げられる。他の長鎖アシル誘導体としては、長鎖脂肪酸の長鎖エステル(例えばステアリン酸ステアリル、パルミチン酸セチル、等)、グリセリルエステル(例えば、ジステアリン酸グリセリル)及び長鎖アルカノールアミドの長鎖エステル(例えば、ステアリン酸ステアルアミドジエタノールアミド、ステアリン酸ステアルアミドモ

10

20

30

40

50

ノエタノールアミド)が挙げられる。上に列挙した典型的な材料に加え、長鎖アシル誘導体、長鎖カルボン酸のエチレングリコールエステル、長鎖アミノオキシド、及び長鎖カルボン酸のアルカノールアミドが、懸濁化剤として使用されてもよい。例えば、炭素数8～22の鎖を有する長鎖ヒドロカルビルを有する懸濁化剤が使用され得ることが企図される。懸濁化剤としての使用に好適な他の長鎖アシル誘導体としては、N,N-ジヒドロカルビルアミド安息香酸及びその可溶性塩(例えば、Na、K)、特に、このファミリーのN,N-ジ(水素添加)C16、C18及びタローアミド安息香酸種が挙げられ、これらは、Stepan Company(Northfield, Ill, USA)より市販されている。懸濁化剤としての使用に好適な長鎖アミノオキシドの例としては、アルキル(炭素数16～22)ジメチルアミノオキシド、例えば、ステアリルジメチルアミノオキシドが挙げられる。他の好適な懸濁化剤としては、シャンプー組成物の約0.3～3、又は0.4～1.2重量%の範囲の濃度のキサンタンガムが挙げられる。キサンタンガムの懸濁化剤としての使用は、例えば米国特許第4,788,006号に記載されており、この記載は、本願明細書の1つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。長鎖アシル誘導体及びキサンタンガムの組合せもまた、シャンプー組成物中の懸濁化剤として使用され得る。かかる組合せは、米国特許第4,704,272号に記載されており、この記載は、本願明細書の1つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。他の好適な懸濁化剤としては、カルボキシビニルポリマーが挙げられる。これらのポリマーのうち典型的なのは、米国特許第2,798,053号に記載のポリアリルスクロースと架橋されるアクリル酸のコポリマーであり、この記載は、本願明細書の1つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。これらのポリマーの例としては、B.F. Goodrich Companyより入手可能なCarbopol 934、940、941、及び956が挙げられる。他の好適な懸濁化剤としては、16個以上(16)の炭素原子を有する脂肪アルキル部分を有する第一級アミンが挙げられ、その例としては、パルミタミン又はステアラミンが挙げられ、並びにそれぞれ12個以上(12)の炭素原子を有する2つの脂肪アルキル部分を有する第二級アミンが挙げられ、その例としては、ジパルミトイルアミン又はジ(水素添加タロー)アミンが挙げられる。更に他の好適な懸濁化剤としては、ジ(水素添加タロー)フタル酸アミド、及び架橋無水マレイン酸-メチルビニルエーテルコポリマーが挙げられる。組成物にゲル状粘性を付与することができるもの、例えば、水溶性又はコロイド状水溶性ポリマー、例えば、セルロースエーテル(例えば、メチルセルロース、ヒドロキシブチルメチルセルロース、ヒドロキシプロピルセルロース、ヒドロキシプロピルメチルセルロース、ヒドロキシエチルエチルセルロース及びヒドロキシエチルセルロース)、グアーガム、ポリビニルアルコール、ポリビニルピロリドン、ヒドロキシプロピルグアーガム、デンプン及びデンプン誘導体、並びに他の増粘剤、粘度調整剤、ゲル化剤等を含む、他の好適な懸濁化剤がシャンプー組成物中で使用され得る。

【0058】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物は、1つ以上の水溶性軟化剤を含んでよく、かかる水性軟化剤は、プロピレングリコール及びブチレングリコール等の低分子量脂肪族ジオール；グリセリン及びソルビトール等のポリオール；並びにポリエチレングリコール200等のポリオキシエチレンポリマーを含み得るが、これらに限定されない。使用される水溶性軟化剤(複数を含む)の特定の種類及び量は、組成物の所望の美的特性に応じて変わり、当業者によって容易に決定される。

【0059】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー及び/又は上述の任意の他の組成物は、上述の担体流体から独立した、1つ以上の油を含んでよい。本願明細書で使用される用語「油」とは、実質的に水に不溶な任意の材料のことである。好適な油としては、これらに限定されないが、ヤシ油等の天然油；鉱物油及び水素添加ポリイソブテン等の炭化水素；オクチルドデカノール等の脂肪族アルコール；炭素数12～15のアル

10

20

30

40

50

キル安息香酸塩等のエステル；ジペラルゴン酸プロピレン等のジエステル；並びにトリオクタン酸グリセリル等のトリエステル、並びにシリコン、特にシクロメチコン及びジメチコン及びこれらの組合せが挙げられる。好適な低粘度油は、25℃で約5～100 mPa sの粘度を有し、概して構造 $\text{RCO}-\text{OR}'$ を有するエステルであり、式中、 RCO はカルボン酸ラジカルを表し、 OR' はアルコール残基である。これらの低粘度油の例としては、イソノナン酸イソトリデシル、ジヘプタン酸PEG-4、ネオペンタン酸イソステアリル、ネオペンタン酸トリデシル、オクタン酸セチル、パルミチン酸セチル、リシノール酸セチル、ステアリン酸セチル、ミリスチン酸セチル、ココ-ジカプリレート/カプレート、イソステアリン酸デシル、オレイン酸イソデシル、ネオペンタン酸イソデシル、ネオペンタン酸イソヘキシル、パルミチン酸オクチル、リンゴ酸ジオクチル、オクタン酸トリデシル、ミリスチン酸ミリスチル、オクトドデカノール、若しくはオクチルドデカノールの組合せ、アセチル化ラノリンアルコール、酢酸セチル、イソドデカノール、ポリグリセリル-3-ジイソステアレート、又はこれらの混合物が挙げられる。高粘度表面油は、約200～1,000,000、又は100,000～250,000 mPa sの粘度を概して有する。表面油としては、ヒマシ油、ラノリン及びラノリン誘導体、クエン酸トリスセチル、セスキオレイン酸ソルピタン、C10～C18トリグリセリド、カプリル酸/カプリン酸/トリグリセリド、ヤシ油、トウモロコシ油、綿実油、トリアセチルヒドロキシステアリン酸グリセリル、トリアセチルリシノール酸グリセリル、トリオクタン酸グリセリル、水素化ヒマシ油、亜麻仁油、ミンク油、オリーブ油、パーム油、イリッペ脂、菜種油、大豆油、ヒマワリ種子油、タロー、トリカプリン、トリヒドロキシステアリン、トリスステアリン、トリラウリン、トリリノレイン、トリミリスチン、トリオレイン、トリパルミチン、トリスステアリン、クルミ油、コムギ胚芽油、コレステロール、又はこれらの組合せが挙げられる。油相中の低粘度油対高粘度油について提案される比は、それぞれ約1：15～15：1、又は1：10～10：1である。本開示の典型的な処方

10

20

【0060】

流動パラフィン又は流動石油等の鉱油、ペルヒドロスクアレン又はアララ油等の動物油、あるいはまた、スイートアーモンド油、カロフィルム油、パーム油、ヒマシ油、アボカド油、ホホバ油、オリーブ油、又は穀物胚芽油等の植物油が使用され得る。例えば、ラノリン酸、オレイン酸、ラウリン酸、ステアリン酸又はミリスチン酸のエステル；オレイルアルコール、リノレイル若しくはリノレニルアルコール、イソステアリルアルコール若しくはオクチルドデカノール等のアルコール；又はアルコール若しくはポリアルコールのアセチルグリセリド、オクタノエート、デカノエート若しくはリシノレエートを使用することも可能である。あるいは、硬化ヒマシ油、硬化パーム油、硬化ヤシ油、若しくは水素添加タロー等の、25℃で固体となる硬化油；モノ-、ジ-、トリ-若しくはスクログリセリド；ラノリン；又は25℃で固体となる脂肪酸エステルを用いることが可能である。

30

【0061】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー及び/又は上述の任意の他の組成物は、各種ワックスを含んでよい。ワックスは、大気圧で35～120℃の融点を一般的に有する。このカテゴリー内のワックスとしては、合成ワックス、セレシン、パラフィン、オゾケライト、イリッペ脂、ミツロウ、カルナウバ、微結晶、ラノリン、ラノリン誘導体、カンデリラ、カカオバター、シェラックワックス、鯨ろう、ぬかワックス、カボックワックス、サトウキビワックス、モンタンワックス、鯨ワックス、ヤマモモワックス、又はこれらの組合せが挙げられる。一実施形態において、本パーソナルケア組成物は、約10～30%のワックスの組合せを含む。非シリコン脂質として用いることができるワックスの内、ミツロウ等の動物性ワックス；カルナウバロウ、キャンデリラロウ、オーリキュリーロウ若しくはモクロウ若しくはコルク繊維若しくはサトウキビワックス等の植物性ワックス；ミネラルワックス、例えばパラフィン若しくはリグナイトワックス若しくは微結晶ワックス若しくはオゾケライト；ポリエチレンワックス、及びFischer-Tropsch合成によって得られるワックスを含む合成ワックスを挙げることが

40

50

できる。シリコーンワックスの内、ポリメチルシロキサンアルキル、アルコキシ及び／又はエステルを挙げることができる。

【 0 0 6 2 】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー及び／又は上述の任意の他の組成物は、各種粉末を含んでよい。粉末は、一般的には、約 0 . 0 2 ~ 5 0 ミクロンの粒度を有する乾燥した粒子状物質と定義することができる。粉末は、有色又は無色（例えば、白）であってもよい。好適な粉末としては、オキシ塩化ビスマス、雲母チタン、ヒュームドシリカ、球状シリカビーズ、ポリメチルメタクリレートビーズ、微粉化テフロン（登録商標）、窒化ホウ素、アクリレートポリマー、ケイ酸アルミニウム、オクテニルコハク酸アルミニウムデンプン、ベントナイト、ケイ酸カルシウム、セルロース、白亜、トウモロコシデンプン、珪藻土、フラー土、グリセリルデンプン、ヘクトライト、水和シリカ、カオリン、ケイ酸マグネシウムアルミニウム、炭酸マグネシウム、水酸化マグネシウム、酸化マグネシウム、ケイ酸マグネシウム、三ケイ酸マグネシウム、マルトデキストリン、モンモリロナイト、微結晶セルロース、米デンプン、シリカ、タルク、雲母、二酸化チタン、ラウリン酸亜鉛、ミリスチン酸亜鉛、ネオデカン酸亜鉛、ロジン酸亜鉛、ステアリン酸亜鉛、ポリエチレン、アルミナ、アタパルジャイト、炭酸カルシウム、ケイ酸カルシウム、デキストラン、カオリン、ナイロン、シリル化シリカ、シルクパウダー、セリサイト、大豆粉、酸化スズ、水酸化チタン、リン酸三マグネシウム、クルミ殻粉末、又はこれらの組合せが挙げられる。上記粉末は、レシチン、アミノ酸、鉱油、シリコーン油、又は各種の他の薬剤の単独又は併用によって表面処理してもよく、これによって粉末表面をコーティングし、粒子を本質的に疎水性にする。

【 0 0 6 3 】

上記粉末はまた、有機及び／又は無機顔料を含むか、あるいは有機及び／又は無機顔料であってもよい。有機顔料は、概して、D & C 及び F D & C ブルー、ブラウン、グリーン、オレンジ、レッド、イエロー、等と命名された、アゾ、インジゴイド、トリフェニルメタン、アントラキノン、及びキサンチン染料を含む各種芳香族型である。無機顔料は、概して、レーキ又は酸化鉄と称される、認定された着色添加剤の不溶性金属塩からなる。カーボンブラック、酸化クロム、酸化鉄、ウルトラマリン、ピロリン酸マンガン、アイアンブルー、及び二酸化チタン等の粉末着色剤、一般的に着色顔料との併用で用いられる真珠光沢剤、又は通常着色顔料との併用で用いられ、化粧品業界において一般的に用いられるいくつかの有機染料を組成物に添加することができる。概して、これらの着色剤は、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び／又は上述の任意の他の組成物の重量に対して 0 ~ 2 0 重量 % の量で存在することができる。

【 0 0 6 4 】

粉末無機又は有機賦形剤もまた、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び／又は上述の任意の他の組成物の重量に対し、概して 0 ~ 4 0 重量 % の量で添加することができる。これらの粉末賦形剤は、タルク、雲母、カオリン、酸化亜鉛又は酸化チタン、炭酸カルシウム、炭酸マグネシウム、シリカ、球状二酸化チタン、ガラスビーズ、セラミックビーズ、8 ~ 2 2 個の炭素原子を有するカルボン酸から誘導される金属石鹸、非発泡合成ポリマー粉末、発泡粉末、及び殻物デンプン等の、架橋又は非架橋であり得る天然有機化合物由来の粉末から選択することができる。賦形剤は、典型的には組成物の総重量の約 0 ~ 3 5、又は 5 ~ 1 5 % の割合で存在してよい。特に、タルク、雲母、シリカ、カオリン、ナイロン粉末（特に O R G A S O L ）、ポリエチレン粉末、テフロン（登録商標）、デンプン、窒化ホウ素、E X P A N C E L (N o b e l I n d u s t r i e) 等のコポリマーマイクロスフェア、ポリトラップ及びシリコーン樹脂マイクロビーズ（例えば東芝の T O S P E A R L ）を挙げることができる。

【 0 0 6 5 】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー及び／又は上述の任意の他の組成物は、日焼け止め剤を含んでよい。日焼け止め剤は 2 9 0 ~ 3 2 0 ナノメートル（U V - B 領域）の紫外線を典型的に吸収し、これには、これらに限定されるものでは

ないが、パラ - アミノ安息香酸誘導体及び桂皮酸エステル、例えばメトキシ桂皮酸オクチル等があり、並びに、ベンゾフェノン及びブチルメトキシジベンゾイルメタン等の、320 ~ 400 ナノメートル (UV - A 領域) の範囲の紫外線を吸収するものがある。日焼け止め剤のいくつかの追加例としては、p - メトキシ桂皮酸 2 - エトキシエチル；アントラニル酸メンチル；サリチル酸ホモメンチル；p - アミノ安息香酸グリセリル；p - アミノ安息香酸イソブチル；p - ジメチルアミノ安息香酸イソアミル；2 - ヒドロキシ - 4 - メトキシベンゾフェノンスルホン酸；2, 2' - ジヒドロキシ - 4 - メトキシベンゾフェノン；2 - ヒドロキシ - 4 - メトキシベンゾフェノン；安息香酸エチルの 4 - モノ及び 4 - ビス (3 - ヒドロキシ - プロピル) アミノ異性体；並びに p - ジメチルアミノ安息香酸 2 - エチルヘキシルがある。様々な実施形態において、日焼け止め剤は欧州特許出願 E P - A - 678, 292 号に記載のものであり、この記載は、本願明細書の 1 つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。様々な実施形態において、日焼け止め剤は、少なくとも 1 つのカルボン酸又はさらに良好にはスルホン酸基を含む。この酸ラジカルは、遊離型又は部分的若しくは完全に中和型であり得る。酸官能基を含有する 1 つ以上の親水性日焼け止め剤を用いることが可能である。少なくとも 1 つの SO_3H 基を含有する酸性日焼け止め剤の例としては、3 - ベンジリジン - 2 - カンファースルホン酸誘導体を特に挙げることができる。特に典型的な化合物はベンゼン - 1, 4 - [ジ (3 - メチリデンカンファー - 10 - スルホン酸)] である。この日焼け止め剤は広帯域日焼け止め剤で、280 ~ 400 nm の波長の紫外線を吸収することができ、吸収極大は 320 ~ 400 nm、特に 345 nm である。この日焼け止め剤は酸性型、又はトリエタノールアミン、水酸化ナトリウム及び水酸化カリウムから選択される塩基によって塩化されて使用される。さらに、この日焼け止め剤はシス又はトランス型で存在することができる。この日焼け止め剤は商標名 Mexoryl SX として既知である。他の具体例としては、4 - (3 - メチリデンカンファー) ベンゼンスルホン酸、3 - ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、2 - メチル - 5 - (3 - メチリデンカンファー) ベンゼンスルホン酸、2 - クロロ - 5 - (3 - メチリデンカンファー) ベンゼンスルホン酸、3 - (4 - メチル) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、(3 - t - ブチル - 2 - ヒドロキシ - 5 - メチル) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、(3 - t - ブチル - 2 - ヒドロキシ - 5 - メトキシ) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、(3, 5 - ジ - tert - ブチル - 4 - ヒドロキシ) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、2 - メトキシ - 5 - (3 - メチリデンカンファー) ベンゼンスルホン酸、3 - (4, 5 - メチレンジオキシ) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、3 - (4 - メトキシ) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、3 - (4, 5 - ジメトキシ) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、3 - (4 - n - ブトキシ) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、3 - (4 - n - ブトキシ - 5 - メトキシ) ベンジリデンカンファー - 10 - スルホン酸、2 - [4 - (カンファーメチリデン) フェニル] ベンズイミダゾール - 5 - スルホン酸がある。好適な化合物については、米国特許第 4, 585, 597 号、並びに仏国特許 FR 2, 236, 515 号、同 2, 282, 426 号、同 2, 645, 148 号、同 2, 430, 938 号及び同 2, 592, 380 号に記載されており、これらの記載はそれぞれ、本願明細書の 1 つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。スルホン酸基を含有する日焼け止め剤は、ベンゾフェノンのスルホン酸誘導体、又は UV - B 照射領域で優れた光防護性能を有し、Merck より商標名「Eusolex 232」で販売されている 2 - フェニルベンズイミダゾール - 5 - スルホン酸、ベンゼン - 1, 4 - ジ (ベンズイミダゾール - 2 - イル - 5 - スルホン酸)、ベンゼン - 1, 4 - ジ (ベンズオキサゾール - 2 - イル - 5 - スルホン酸) とすることもできる。親水性日焼け止め剤は本開示の最終組成物中に、本パーソナルケア組成物の総重量に対して約 0.1 ~ 20 重量%、又は 0.2 ~ 10 重量% とすることができる含有量で存在することができる。

【0066】

付加的な親油性日焼け止め剤を使用することができ、例えば、ジベンゾイルメタンから

誘導されたもの、特に、高い固有の吸収力を効果的に有する 4 - t e r t - ブチル - 4 ' - メトキシジベンゾイルメタン等がある。これらのジベンゾイルメタン誘導体はそれ自体が、UV - A に有効な日焼け止め剤として周知の製品であり、特に仏国特許出願 F R - A - 2 , 3 2 6 , 4 0 5 号及び同 F R - A - 2 , 4 4 0 , 9 3 3 号、並びに欧州特許出願 E P - A - 0 , 1 1 4 , 6 0 7 号に記載されている。これらの記載はそれぞれ、本願明細書の 1 つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。4 - (t e r t - ブチル) - 4 ' - メトキシジベンゾイルメタンは、G i v a u d a n より商標名「P a r s o l 1 7 8 9」で現在販売されている。本発明の典型的な別のジベンゾイルメタン誘導体は 4 - イソプロピルジベンゾイルメタンであり、この日焼け止め剤は M e r c k より「E u s o l e x 8 0 2 0」という名前で販売されている。同様に、UV - B 領域での有効性について既知の液体親油性日焼け止め剤、オクトクリレンが市販され、特に、B A S F より「U v i n u l N 5 3 9」で販売されている。本開示に用いることができる別の親油性（又は脂溶性）日焼け止め剤としては、p - メチルベンジリデンカンファアを挙げることもできる。これは UV - B 吸収剤としても知られ、特に M e r c k より商標名「E u s o l e x 6 3 0 0」で販売されている。親油性日焼け止め剤は、本開示の組成物中に、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び / 又は上述の任意の他の組成物の総重量の約 0 . 5 ~ 3 0 %、又は 0 . 5 ~ 2 0 % とすることができる含有量で存在することができる。親油性又は親水性有機日焼け止め剤の他の例については、欧州特許出願 E P - A - 0 , 4 8 7 , 4 0 4 号に記載されており、この記載は、本願明細書の 1 つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。本開示による化粧品及び / 又は皮膚科用組成物はまた、被覆若しくは非被覆酸化金属の顔料あるいはナノ顔料（平均一次粒径：概して 5 ~ 1 0 0 n m、典型的には 1 0 ~ 5 0 n m）を含むことができる。ナノ顔料は、例えば、酸化チタン（アモルファス又はルチル及び / 又はアナターゼ型の結晶）、酸化鉄、酸化亜鉛、酸化ジルコニウム又は酸化セリウム等のナノ顔料であり、これらはすべてそれ自体が周知の光防護剤であり、（反射及び / 又は散乱）紫外線を物理的に遮断することによって作用する。標準的なコーティング剤としては、更に、アルミナ及び / 又はステアリン酸アルミニウム、並びにシリコーンがある。かかる被覆又は非被覆酸化金属ナノ顔料は、特に欧州特許出願 E P - A - 0 , 5 1 8 , 7 7 2 号及び同 E P - A - 0 , 5 1 8 , 7 7 3 号に記載されており、これらの記載内容のそれぞれは、本願明細書の 1 つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。

【 0 0 6 7 】

増粘剤を使用し、前述の任意の組成物に対して好都合な粘度をもたらすことができる。例えば、2 5 で約 5 0 0 ~ 2 5 , 0 0 0 又は 3 , 0 0 0 ~ 7 , 0 0 0 m m ² / s の粘度を得ることができる。好適な増粘剤の例としては、アルギン酸ナトリウム、アラビアゴム、ポリオキシエチレン、グアーガム、ヒドロキシプロピルグアーガム、ラウレス - 4 若しくはポリエチレングリコール 4 0 0 等のエトキシ化アルコール、メチルセルロース、メチルヒドロキシプロピルセルロース、ヒドロキシプロピルセルロース、ポリプロピルヒドロキシエチルセルロースによって例示されるセルロース誘導体、ヒドロキシエチルアミロース及びデンプンアミロースによって例示されるデンプン及びデンプン誘導体、ローカストビーンガム、塩化ナトリウム及び塩化アンモニウムによって例示される電解質、並びにフルクトース及びグルコース等の糖類、並びに P E G - 1 2 0 メチルグルコースジオレート等の糖類の誘導体、又はこれらの 2 つ以上の組合せが挙げられる。あるいは、増粘剤は、セルロース誘導体、糖誘導体、及び電解質から、又はセルロース誘導体と任意の電解質、及びデンプン誘導体と任意の電解質の組み合わせによって例示される上記増粘剤の 2 つ以上の組合せから選択される。増粘剤は、シャンプー組成物に使用されて存在する場合、2 5 で約 5 0 0 ~ 2 5 , 0 0 0 m m ² / s の粘度をもたらす得る。あるいは、増粘剤は、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び / 又は上述の任意の他の組成物の総重量に対して 0 . 0 5 ~ 1 0、又は 0 . 0 5 ~ 5 重量 % の量で存在し得る。

【 0 0 6 8 】

安定剤もまた使用することができる。好適な水相安定剤は、単独又は組合せで、1つ以上の電解質、ポリオール、エチルアルコール等のアルコール、及び親水コロイドを含むことができる。典型的な電解質は、アルカリ金属塩及びアルカリ土類塩、特に、ナトリウム、カリウム、カルシウム、及びマグネシウムの塩化物塩、ホウ酸塩、クエン酸塩、及び硫酸塩、並びにアルミニウムクロロハイドレート、及びポリ電解質、特にヒアルロン酸及びヒアルロン酸ナトリウムである。安定剤が電解質であるか、又は電解質を含むとき、その量は、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物の約0.1~5、又は0.5~3重量%となる。親水コロイドは、キサンタンガム又はビーガム等のガム、及びカルボキシメチルセルロース等の増粘剤を含む。グリセリン、グリコール、及びソルビトール等のポリオールもまた使用することができる。代替のポリオールは、グリセリン、プロピレングリコール、ソルビトール、及びブチレングリコールである。大量のポリオールが使用される場合、電解質を添加する必要はない。しかしながら、電解質、ポリオール及び水相を安定化させる親水コロイド、例えば、硫酸マグネシウム、ブチレングリコール及びキサンタンガムの組合せを使用するのが典型的である。

10

【0069】

前述の組成物のいずれかはまた、制汗剤及び防臭剤であるか、又はこれらを含んでよい。これらは、例えば、塩化アルミニウム、アルミニウムジルコニウムテトラクロロハイドレックスGLY、アルミニウムジルコニウムテトラクロロハイドレックスPEG、アルミニウムクロロハイドレックス、アルミニウムジルコニウムテトラクロロハイドレックスP 20 G、アルミニウムクロロハイドレックスPEG、アルミニウムジルコニウムトリクロロハイドレート、アルミニウムクロロハイドレックスPG、アルミニウムジルコニウムトリクロロハイドレックスGLY、ヘキサクロロフェン、塩化ベンザルコニウム、アルミニウムセスキクロロハイドレート、重炭酸ナトリウム、アルミニウムセスキクロロハイドレックスPEG、クロロフィリン-銅錯体、トリクロサン、アルミニウムジルコニウムオクタクロロハイドレート、及びリシノール酸亜鉛等である。

20

【0070】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物は、二酸化炭素、窒素、亜酸化窒素等の噴射ガス、ブタン、イソブタン、又はプロパン等の揮発性炭化水素、並びにジクロロジフルオロメタン及びジクロロテトラ 30 フルオロエタン若しくはジメチルエーテル等の塩素化若しくはフッ素化炭化水素と組み合わせてエアロゾルとすることができる。

30

【0071】

本アミノシロキサンポリマー以外のシリコンもまた、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物中に含んでよい。例えば、こうしたシリコンとしては、シリコン流体、ガム、樹脂、エラストマー；シリコンポリエーテル等のシリコン界面活性剤及び乳化剤、アミノ官能性シリコン等の有機官能性シリコン、並びにアルキルメチルシロキサンが挙げられる。アルキルメチルシロキサンが本組成物に含まれてもよい。これらのシロキサンポリマーは、式 $\text{Me}_3\text{SiO}[\text{Me}_2\text{SiO}]_y[\text{MeRSiO}]_z\text{SiMe}_3$ を典型的に有し、式中、Rは6~ 40 30個の炭素原子を含有する炭化水素基であり、Meはメチルを表し、かつDp(すなわち、「y」及び「z」の合計)は3~50である。揮発性及び液体種のアシルメチルシロキサンの両方を、本組成物中で使用することができる。

40

【0072】

シリコンガムもまた、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物中に含んでよい。好適な非限定的なガムとしては、25で1,000,000mm²/s(センチストーク)超(>1,000,000mm²/s(cen 50 tistoke))、あるいは25で5,000,000mm²/s(センチストーク)超(>5,000,000mm²/s(cen tistoke))の粘度を有する不溶性ポリジオルガノシロキサンが挙げられる。これらのシリコンガムは、それらの処理を促進させるのに好適な溶媒に既に分

50

散された組成物として、典型的に販売されている。超高粘度シリコンもまた、任意の成分として含むことができる。これらの超高粘度シリコンは、 25 で 500 万 mm^2/s (センチストーク) 超 (>5 million mm^2/s (centistoke))、 25 で最大 2000 万 mm^2/s (センチストーク) の運動粘度を典型的に有す。この種の組成物は、例えば米国特許第 $6,013,682$ 号に記載されており、この記載は、本願明細書の 1 つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。

【0073】

シリコン樹脂もまた、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物中に含んでよい。これらの樹脂は、概して、高度に架橋されたポリマーシロキサンである。架橋は、三官能性及び/又は四官能性シランを、製造中に使用される単官能性シラン及び/又は二官能性シランモノマーと共に、組み込むことによって典型的に得られる。好適なシリコン樹脂を得るために必要な架橋の程度は、シリコン樹脂の製造中に組み込まれるシランモノマー単位の特性に応じて異なる。概して、十分なレベルの三官能性及び四官能性シロキサンモノマー単位を有し、したがって剛性又は硬質皮膜まで乾燥させるのに十分なレベルの架橋を有するいずれのシリコンも、使用することができる。本明細書での適用に好適な市販のシリコン樹脂は、概して、低粘度揮発性又は不揮発性シリコン流体中で硬化されていない形態で供給される。シリコン樹脂は、硬化樹脂構造としてもよりも、むしろそれらの硬化されていない形態で、本開示の組成物中に組み込まれ得る。

【0074】

シリコンカルピノール流体を、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物中に含んでよい。これらの材料は、一般的には置換ヒドロカルビル官能性シロキサン流体又は樹脂として記載することができ、いくつかは $W003/101412$ (A2) 号に記載されている。この記載は、本願明細書の 1 つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。

【0075】

水溶性又は水分散性シリコン樹脂もまた、本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物中に含んでよい。これらはまたポリアルキレンオキシドシリコンコポリマー、シリコンポリ(オキシアルキレン)コポリマー、シリコングリコールコポリマー、又はシリコン界面活性剤としても既知である。これらは、直線熊手型若しくはグラフト型物質、又は ABA 型であることができ、 B はシロキサンポリマーブロックであり、 A はポリ(オキシアルキレン)基である。このポリ(オキシアルキレン)基は、ポリエチレンオキシド、ポリプロピレンオキシド、又はポリエチレンオキシド/ポリプロピレンオキシド基の混合体からなることができる。ブチレンオキシド又はフェニレンオキシド等の他のオキシドもまた可能である。

【0076】

本パーソナルケア組成物、フィルム、アミノシロキサンポリマー、及び/又は上述の任意の他の組成物のいずれもまた、(i) 有機化合物、(ii) ケイ素原子を含有する化合物、(iii) 有機化合物の混合物、(iv) ケイ素原子を含有する化合物の混合物、又は(v) 有機化合物とケイ素原子を含有する化合物との混合物等の、他の材料を溶解、懸濁するため、又は他の材料の物理的特性を変化させるために、工業規模で使用される、溶剤を含んでよい。

【0077】

概して、有機化合物は、芳香族炭化水素、脂肪族炭化水素、アルコール、アルデヒド、ケトン、アミン、エステル、エーテル、グリコール、グリコールエーテル、アルキルハロゲン化物、又は芳香族ハロゲン化物である。いくつかの一般的な有機溶剤の代表例は、メタノール、エタノール、1-プロパノール、シクロヘキサノール、ベンジルアルコール、2-オクタノール、エチレングリコール、プロピレングリコール、及びグリセロール等のアルコール；ペンタン、シクロヘキサン、ヘプタン、 $VM\&P$ 溶剤、及びミネラルスピリット等の脂肪族炭化水素；クロロホルム、四塩化炭素、パークロロエチレン、塩化エチル

、及びクロロベンゼン等のアルキルハロゲン化物；イソプロピルアミン、シクロヘキシルアミン、エタノールアミン、及びジエタノールアミン等のアミン；ベンゼン、トルエン、エチルベンゼン、及びキシレン等の芳香族炭化水素；酢酸エチル、酢酸イソプロピル、アセト酢酸エチル、酢酸アミル、イソ酪酸イソブチル、及び酢酸ベンジル等のエステル；エチルエーテル、n-ブチルエーテル、テトラヒドロフラン、及び1,4-ジオキサン等のエーテル；エチレングリコールモノメチルエーテル、エチレングリコールモノメチルエーテルアセテート、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、及びプロピレングリコールモノフェニルエーテル等のグリコールエーテル；アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、ジアセトンアルコール、メチルアミルケトン、及びジイソブチルケトン等のケトン；鉱物油、ガソリン、ナフサ、灯油、軽油、重油、及び原油等の石油系炭化水素；スピンドルオイル及びタービンオイル等の潤滑油；並びにトウモロコシ油、大豆油、オリブ油、菜種油、綿実油、イワシ油、ニシン油、及び鯨油等の脂肪油である。

10

【0078】

アセトニトリル、ニトロメタン、ジメチルホルムアミド、プロピレンオキシド、リン酸トリオクチル、ブチロラクトン、フルフラール、松根油、テレピン油、及びm-クレオソール等の、「他の」種々の有機溶剤もまた使用することができる。

【0079】

溶媒はまた、揮発性の着香料を含んでもよく、これには、冬緑油；ペパーミント油；スベアミント油；メントール；バニラ；桂皮油；丁子油；ベイ油；アニス油；ユーカリ油；タイム油；ニオイヒバ油；ナツメグ油；セージ油；カシヤ油；ココア；カンゾウ；高級フルクトースコーンシロップ；レモン、オレンジ、ライム、及びグレープフルーツ等の柑橘油；リンゴ、ナシ、モモ、ブドウ、イチゴ、キイチゴ、サクランボ、プラム、パイナップル、及びアンズ等の果実エッセンス；並びに、酢酸シンナミル、桂皮アルデヒド、ギ酸オイゲニル、p-メチルアニソール、アセトアルデヒド、ベンズアルデヒド、アニスアルデヒド、シト랄、ネラール、デカナール、バニリン、トリルアルデヒド、2,6-ジメチルオクタナール、及び2-エチルブチルアルデヒド等のアルデヒド及びエステルを含む他の有用な着香料が含まれる。

20

【0080】

更に、溶剤はまた、天然物及び香油等の揮発性の芳香剤を含んでよい。天然物及び香油のいくつかの代表例は、アンバーグリース、ベンゾイン、シベット、クローブ、葉油、ジャスミン、マテ、ミモザ、ジャコウ、ミルラ、オリス、ビャクダン油、及びベチバー油；サリチル酸アミル、アミルシンナミックアルデヒド、酢酸ベンジル、シトロネロール、クマリン、ゲラニオール、酢酸イソボルニル、アンブレット、及び酢酸テルピニル等の芳香性化合物；並びに、フローラルブーケ系、オリエンタル系、シブル系、ウッディー系、シトラス系、カヌー系、レザー系、スパイス系、ハーブ系等の種々の古典系の香油である。

30

【0081】

本開示の目的のために使用され得る他の構成成分は、PCT/US15/024905及びPCT/US15/024886に記載されており、これらの記載のそれぞれは、本願明細書の1つ以上の非限定的実施形態において参照により明示的に援用される。下記の実施例は、本発明を説明するものであり、本発明を限定するものではない。

40

実施例1A：架橋アミノシロキサンポリマーの0.33モル比での生成

【0082】

8オンスの反応槽に以下の成分、5Dpペンダントアミノプロピルシロキサン2.57g及び無水マレイン酸0.44gをd-クロロホルム3.00gと共に投入した。この反応混合物を55℃の水浴中で5時間加温し、粘稠な、わずかに黄色の液体を生成した。図1の下側に示したプロトンNMRスペクトルにおいて、アミノシロキサンのマイケル付加に伴うsp³プロトンは4.52ppmに認められず、6.91ppmのsp²プロトンの存在が認められる。

実施例1B：架橋アミノシロキサンポリマーの0.21モル比での生成

【0083】

50

8 オンスの反応槽に以下の成分、5 D p ペンダントアミノプロピルシロキサン 1.79 g 及び無水マレイン酸 0.21 g を投入した。この反応混合物を更に高い反応温度 70 に 2.5 時間加温した。反応生成物は、粘稠な、わずかに黄色の液体である。図 1 の上側に示したプロトン NMR スペクトルにおいて、アミノシロキサンのマイケル付加に伴う $s p^3$ プロトンの出現が 4.52 ppm に認められ、(同一炭素からの) $s p^2$ プロトンの部分的な消失が 6.91 ppm に認められる。

実施例 2：架橋アミノシロキサンポリマーの 0.25 モル比での生成

【0084】

8 オンスの反応槽に以下の成分、ペンダントアミノプロピルシロキサン (MD₉₄ D^A₆ M；式中「A」はアミノプロピル基である) 49.09 g 及び無水マレイン酸 0.91 g を投入した。この反応混合物を恒温槽中 70 で 2.5 時間加温した。反応生成物は硬く、視覚的には澄明で、感知可能なアミン臭のない、広範囲に架橋したゲルである。周波数変調実験の結果 (図 2 に示した) は、貯蔵弾性率 (G') と損失弾性率 (G'') との比較により、架橋アミノシロキサンポリマーについては、 G' の方が G'' よりも高いことから、架橋結合の証拠を示している。温度走査実験の結果 (図 3 に示した) は、貯蔵弾性率 (G') と損失弾性率 (G'') との比較により、架橋アミノシロキサンポリマーについては、 G' の方が G'' よりも高いことから、架橋結合の証拠を示している。

実施例 3：架橋アミノシロキサンポリマーの 0.33 モル比での生成

【0085】

8 オンスの反応槽に以下の成分、ペンダントアミノプロピルシロキサン (MD₉₄ D^A₆ M) 48.80 g 及び無水マレイン酸 1.22 g を投入した。この反応混合物を恒温槽中 70 で 2.5 時間加温した。反応生成物は硬く、視覚的には澄明で、感知可能なアミン臭のない、広範囲に架橋したゲルである。周波数変調実験の結果 (図 4 に示した) は、貯蔵弾性率 (G') と損失弾性率 (G'') との比較により、架橋結合の証拠を強く示している。

実施例 4：架橋アミノシロキサンポリマーの 0.23 モル比での生成

【0086】

8 オンスの反応槽に以下の成分、無水イタコン酸 1.26 g 及び 100 D p ペンダントアミノプロピルシロキサン 58.74 g を投入した。この反応混合物を 80 の水浴中で 5 時間加熱し、ゲルを生成した。図 5 に示した周波数走査において、貯蔵弾性率 (G') の方が損失弾性率 (G'') より高いことから、生成物は架橋していることが確認される。

【0087】

様々な非限定的実施形態において、本開示は 1 つ以上のエマルジョン、化合物、反応物質、方法工程、又は PCT/US 15/20640 (代理人明細書番号: DC 11937 PCT 1 を有する) の開示内容の任意の他の部分を含み、本願明細書において、その全体を、これらの非限定的実施形態において明示的に援用される。

【0088】

本願明細書で使用される用語「含む」(comprising又はcomprise)は、これらの広い意味で、「含む」(including、include)、「実質的に...からなる」(consist(ing) essentially of)、及び「...からなる」(consist(ing) of)を包含する。説明的な実例を列挙するための「例えば」(for example)、「等」(e.g.)、「等の」(such as)、及び「を含む」(including)の使用によって、列挙された例だけに限定するものではない。したがって、「例えば」(for example)又は「等の」(such as)は、「例えば...だが、...に限定されない」(for example, but not limited to)又は「...等の...だが、...に限定されない」(such as, but not limited to)という意味であり、他の同様又は同等の例を包含する。本願明細書で使用される用語「約」(about)は、機器分析によって測定された数値のわずかな変動、又は試料の取扱いの結果による数値のわずかな変動を、合理的に包含又は記述するためのものである。このようなわずかな変動は、数値の $\pm 0 \sim 10$ 、 $\pm 0 \sim 5$ 、又は $\pm 0 \sim 2.5\%$ であり得る。更に、用語「約」(about)は、数値の範囲が関係する場合は、両方の数値に適用される。また、用

語「約」(about)は、明示的に言及されない場合でも、数値に適用される。概して、本願明細書で使用される、値の範囲における波線「 \sim 」(a hyphen “-” or dash “-”)は、「まで」(to)又は「(. . . から) . . . まで (含めて) 」(through) ; 「 $>$ 」は「を超える」(above)又は「より大きい」(greater-than) ; 「 \geq 」は「少なくとも」(at least)又は「以上」(greater-than or equal to) ; 「 $<$ 」は「より小さい」(below)又は「未満」(less-than) ; 並びに、「 \leq 」は「最大」(at most)又は「以下」(less-than or equal to)である。前述の特許出願、特許、及び/又は特許出願公開のそれぞれは、個別に、その全体が、本願明細書において参照により1つ以上の非限定的実施形態において明示的に

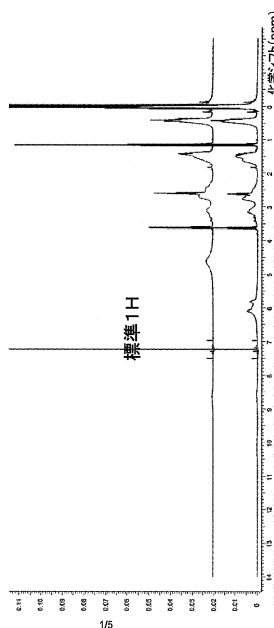
援用される。変動が本開示の範囲内にある限り、上述の値のうちの1つ以上が、 $\pm 5\%$ 、 $\pm 10\%$ 、 $\pm 15\%$ 、 $\pm 20\%$ 、 $\pm 25\%$ 等の範囲で変動してもよい。マーカッシュ群の各要素からは、他のすべての要素から独立して予期せぬ結果を得られる可能性がある。各要素は、それぞれ個々に及び/又は組合せにおいて依存し得るものであり、特許請求の範囲内において具体的な実施形態に適切な裏付けを与える。独立請求項、並びに単一及び複数の従属の両方の従属請求項の全ての組合せの主題が、本願明細書に明示的に企図される。任意及びすべての値又は上述の値の間の範囲の値もまた使用され得ることが、企図される。更に、すべての化学、すべての化合物、及び上述の概念、並びに上述のすべての下付き及び上付きの値は、様々な非限定的実施形態において明示的に企図される。本開示は、説明の文言を含めて限定なものではなく、例示的なものである。本発明は上記の記載事実

に照らして多くの修正及び変更が可能であり、また本発明は本願に具体的に記載したものと異なる形で実施することが可能である。

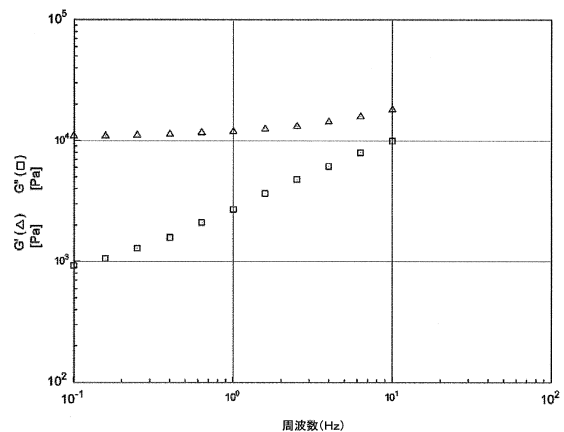
10

20

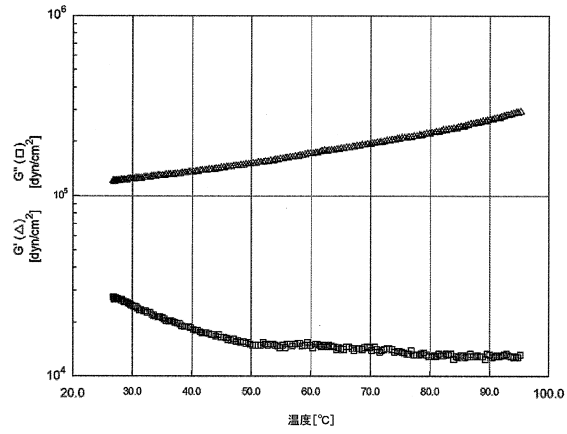
【図1】



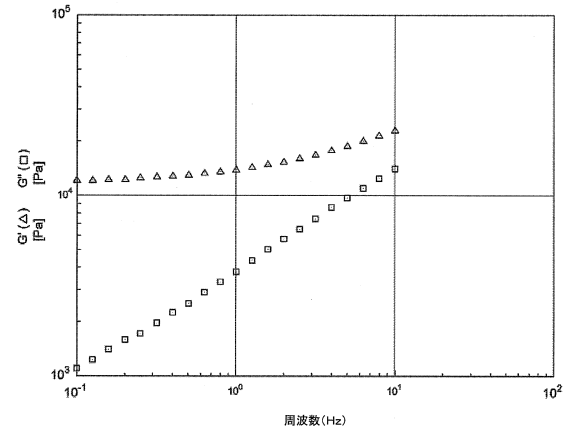
【図2】



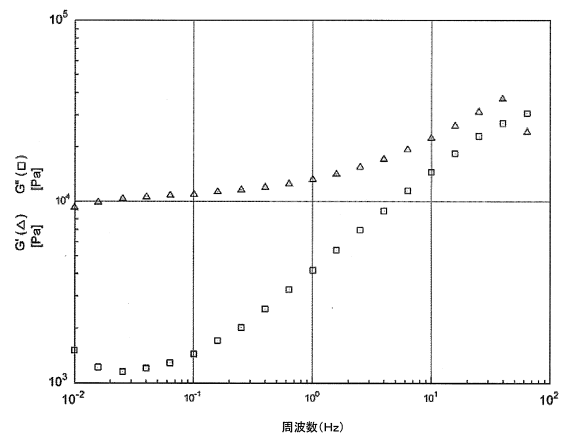
【 図 3 】



【 図 4 】



【 図 5 】



フロントページの続き

(31)優先権主張番号 62/001,427

(32)優先日 平成26年5月21日(2014.5.21)

(33)優先権主張国 米国(US)

早期審査対象出願

(72)発明者 パトリック・ジェイ・フライフォグル

アメリカ合衆国・ミシガン・48640・ミッドランド・ウエスト・ジャスティン・コート・100

(72)発明者 ベタニー・ケイ・ジョンソン

アメリカ合衆国・ミシガン・48642・ミッドランド・イースト・チャペル・レーン・518

(72)発明者 ジ・リ

アメリカ合衆国・ミシガン・48642・ミッドランド・パインヘイヴン・サークル・4

(72)発明者 キマイ・ティ・グエン

アメリカ合衆国・ミシガン・48642・ミッドランド・セレナ・ストリート・2113

(72)発明者 ライアン・クリストファー・トーマス

アメリカ合衆国・ミシガン・48623・フリーランド・サマー・リッジ・ドライブ・8575

審査官 安田 周史

(56)参考文献 特開2012-126648(JP,A)

特表2003-513129(JP,A)

特開2000-186149(JP,A)

特開平05-320348(JP,A)

特開平08-127657(JP,A)