



王扇珍,宣晓蕊,余述燕,等. 泛醇-肉碱超分子低共熔物的制备及其护肤性能研究[J]. 轻工学报,2026,41(4):122-133.
WANG S Z,XUAN X R,YU S Y,et al. Preparation and skincare properties of panthenol-carnitine supramolecular deep eutectic mixture[J]. Journal of Light Industry,2026,41(4):122-133.
DOI:10.12187/2026.04.012

泛醇-肉碱超分子低共熔物的制备及其护肤性能研究

王扇珍¹,宣晓蕊¹,余述燕²,任钰婷²,郭大业²,樊凯奇²

1. 杭州沫润化妆品有限公司,浙江 杭州 311215;
2. 郑州轻工业大学 材料与化学工程学院,河南 郑州 450001

摘要:【目的】改善传统泛醇制剂黏腻感强、肤感不佳的问题,提升其护肤功效与应用性能。【方法】采用超分子技术对泛醇进行改性,以左旋肉碱为氢键受体,与 D-泛醇构建超分子低共熔物——超分子泛醇;利用傅里叶变换红外光谱仪、核磁共振仪、差示量热仪对其结构进行表征,通过理论计算揭示分子间相互作用机制,利用流变仪测试体系剪切应力及黏度变化;结合转录组学分析与配方应用研究,明确其护肤性能。【结果】成功制备超分子泛醇,其结构由多重氢键与静电作用协同维持;该体系黏度显著降低且剪切稀化行为明显;所得超分子泛醇可上调胶原蛋白合成及细胞能量代谢相关基因表达,同时抑制炎症因子表达;将其应用于精华液配方后,产品黏腻感明显改善,同时兼具保湿、皮肤屏障修护、舒缓抗炎、抗皱、紧致肌肤等多重护肤功效。【结论】基于超分子技术的改策策略可显著改善传统泛醇制剂肤感,所得超分子泛醇在功能性护肤成分开发方面具有良好的应用潜力。

关键词:D-泛醇;左旋肉碱;超分子低共熔物;护肤性能

中图分类号:TS974.1;TQ658.2 **文献标识码:**A **文章编号:**2096-1553(2026)04-0122-12

0 引言

D-泛醇(D-panthenol)作为维生素 B5(泛酸)的醇类衍生物,具有与维生素 B5 相当的生物活性,并在水溶液中表现出更好的稳定性^[1]。自 1944 年被首次应用于皮肤护理以来,D-泛醇已经成为全球护肤品配方中的核心成分^[2]。得益于 D-泛醇较小的相对分子质量(205 Da)和良好的皮肤渗透性,局部

使用时可被皮肤迅速吸收并转化为泛酸,进而参与脂肪酸和鞘脂的合成,促进角质细胞能量代谢,发挥修护皮肤屏障的功能^[3]。同时,D-泛醇还可与皮肤角质层中的脂质与蛋白残基相互作用,有效束缚水分,提升皮肤含水量,发挥保湿作用^[4-5]。此外,多项研究^[6-7]证明,D-泛醇能影响人成纤维细胞的增殖、迁移、黏附等过程,加速表皮再生,在组织修复和皮肤伤口愈合中起关键作用。因此,D-泛醇具

收稿日期:2025-12-31;修回日期:2026-03-16;出版日期:2026-08-15

基金项目:河南省科技攻关项目(252102310461);河南省校企协同创新项目(26AXQXT113)

作者简介:王扇珍(1985—),男,山西省潞城市人,杭州沫润化妆品有限公司工程师,主要研究方向为功能性护肤品的开发与护肤机制。E-mail:wangsz@hangcos.com.cn

通信作者:余述燕(1985—),女,安徽省金寨县人,郑州轻工业大学副教授,博士,主要研究方向为化妆品原料改性技术。E-mail:2014023@zzuli.edu.cn

有保湿、抗炎、屏障修护、促进再生及愈合等功效,被广泛应用于医药、化妆品等领域^[8-10]。然而,传统泛醇制剂受其多元醇结构影响,常表现出较高黏性,并产生强烈的黏腻肤感,影响消费者接受度。因此,如何在不改变化学结构并保持生理活性的前提下改善泛醇制剂使用肤感,成为进一步拓展泛醇应用性能的关键。

低共熔物(Deep Eutectic Solvent, DES)是由两种或多种组分通过氢键等非共价分子间相互作用自组装形成的低共熔混合物^[11]。这种独特的超分子形成机制,不仅使体系的熔点显著低于各单一组分,还能有效改善活性成分的物理化学性质,例如提高溶解度、优化润湿性和流变性,并增强体系稳定性^[12-14]。李明键等^[15]于2022年制备了一系列基于氨基酸-枸橼酸的DES,发现该类DES对皮肤具有较好的亲和力和渗透性;周湖武等^[16]于2025年利用扁桃酸和甜菜碱形成的DES,有效解决了木瓜蛋白酶和菠萝蛋白酶的储存稳定性难题。作为一种新兴的超分子组装策略,相较于环糊精、脂质体或微胶囊等物理改性方法,DES具有制备工艺简便、可设计性强的优点;相较于结构衍生等化学改性策略,DES又可在不改变原料化学结构的基础上,保持甚至增强生物活性,因而逐渐成为化妆品领域理想的原料改性技术之一^[17-18]。

左旋肉碱(L-carnitine)是一种天然存在于生物体内的季铵盐类化合物,其分子中含有一OH、—COOH等强氢键位点,常被用作DES的氢键受体^[19-20]。相较于胆碱、甜菜碱等常见氢键受体,左旋肉碱不仅具备良好的生物相容性、保湿性及护肤品应用安全性,其季铵盐正离子中心与—COO⁻基团的协同作用还可能与泛醇形成更稳定的多重氢键和静电相互作用,在降低泛醇体系黏度、改善黏腻肤感方面表现出更优效果;同时,左旋肉碱自身具有保湿、抗氧化、抗炎等功效^[21],有望与泛醇协同发挥护肤功效,这使其成为化妆品相关DES体系中颇具潜力的组分。

基于DES的技术优势及左旋肉碱的特性,本研究拟以左旋肉碱为氢键受体,D-泛醇为氢键供体,以DES形式制备超分子泛醇,解决泛醇高浓度使用

时的黏腻肤感问题,并进一步研究超分子泛醇的结构特征、分子间相互作用方式、流变性能及其在抗皱、抗炎方面的护肤机制与应用效果,以期功能性护肤成分的开发与应用提供新思路。

1 材料与方法

1.1 主要材料与试剂

D-泛醇(化妆品级,≥98.5%),帝斯曼营养产品有限公司;左旋肉碱(食品级,≥98.0%),上海美焱生物科技有限公司;1,3-丁二醇(化妆品级,≥99.5%),山东海科新源材料科技股份有限公司;琥珀酸二乙氧基乙酯(化妆品级,≥99.0%),禾大化学品(上海)有限公司;甘油葡萄糖苷(化妆品级,≥98.0%),青岛中科蓝智生物科技发展有限公司;1,2-己二醇(化妆品级,≥99.5%),对羟基苯乙酮(化妆品级,≥99.5%),江苏新瀚新材料股份有限公司;黄原胶(化妆品级,≥91.0%),帝斯曼润邦(内蒙古)生物科技有限公司;人原代真皮成纤维细胞、胰蛋白酶-EDTA消化液(胰蛋白酶质量分数0.05%)、磷酸盐(PBS)缓冲液,Lifeline细胞科技公司;CCK试剂,日本同仁化学研究所;TRIzol试剂,赛默飞世尔科技公司。

1.2 主要仪器与设备

SB-5200DTD型超声波仪,宁波新芝生物科技股份有限公司;AVANCE NEO 400型核磁共振仪、TENSOR II型傅里叶变换红外光谱仪,德国Bruker公司;Discovery HR-20型流变仪、Q20型差示扫描量热仪,美国TA公司;Spark 20M型多功能酶标仪,瑞士Tecan公司;CorneometerCM825型角质层水分含量测试探头、TewameterTMHex型经皮水分流失率和水分蒸发热损失测试探头、Mexameter MX18型皮肤黑色素和血红素测试探头、Cutometer MPA580型皮肤弹性测试仪,德国Courage&Khazaka公司;VISIA7型皮肤分析系统,美国CANFIELD公司。

1.3 实验方法

1.3.1 超分子泛醇制备 参考文献[22-23]的方法,将D-泛醇与左旋肉碱按照物质的量比3:1投入反应瓶中,室温搅拌混合均匀后,缓慢升温至80℃,保温搅拌至形成均匀透明液体,将液体分成

4份,分别置于室温、4℃、-20℃和50℃条件下储存60d,观察其稳定性。

1.3.2 红外光谱和核磁共振氢谱测定 采用KBr压片法,利用傅里叶变换红外光谱仪分别采集D-泛醇、左旋肉碱及超分子泛醇的红外光谱图,扫描范围为4000~400 cm⁻¹;以DMSO-d₆为溶剂,使用核磁共振仪采集上述样品的¹H NMR谱。

1.3.3 热分析曲线绘制 采用差示量热仪对D-泛醇、左旋肉碱、物理混合物及超分子泛醇进行测试,分析各样品的热行为差异。准确称量约5mg样品于铝制坩埚内压制密封,以空坩埚作为空白参照,在N₂氛围下,以10℃/min的速率从-30℃升温至230℃,绘制样品的热分析曲线。

1.3.4 D-泛醇和左旋肉碱相互作用机制研究 使用CREST程序对D-泛醇、左旋肉碱及超分子泛醇进行构象搜索,然后在DFT水平对构象做结构优化和高精度单点能计算,绘制结构稳定的分子范德华表面静电势分布图,分析D-泛醇与左旋肉碱之间的相互作用。

1.3.5 肤感评价 以志愿者试用评分的方式评价D-泛醇超分子化前后的使用肤感差异。招募30名志愿者,干性、油性和中性皮肤分别为8人、10人和12人,依次在单侧手背采用手指轻拍法和顺时针旋涂法对7%(若无特指,百分数均指质量分数)D-泛醇溶液与8.75%超分子泛醇溶液(等效D-泛醇质量分数为7%)进行肤感测评。评价指标包括:手指轻拍后提起时的拉力大小、顺时针旋涂时的摩擦力大小和皮肤表面残留感。评分标准为:拉力大小(0分=不黏腻,无拉力感;5分=黏腻,拉力感强);摩擦力大小(0分=不黏腻,无摩擦力;5分=黏腻,摩擦力大);残留感(0分=不黏腻,无残留;5分=黏腻,残留感强),所有志愿者评分结果取平均值。

1.3.6 流变特性测定 在25℃条件下,采用静态流变学方法研究D-泛醇、超分子泛醇的黏度和剪切应力的变化情况。实验在流动扫描模式下进行,使用直径为25mm的平行板测量系统,板间间隙设定为1mm,平衡时间为60s,剪切速率范围为1~1000 s⁻¹,并以对数规律递增。

1.3.7 超分子泛醇护肤机制研究 利用体外培养

的人原代真皮成纤维细胞建立细胞模型,用适宜质量分数的超分子泛醇样品处理细胞,提取成纤维细胞总RNA进行转录组测序及基础数据分析,探究样品的护肤功效及深层机制。

1)样品灭菌处理。鉴于超分子泛醇为液体活性原料,采用常规高温高压灭菌可能会破坏其生物活性,故本实验采用0.22 μm微孔滤膜过滤除菌法对样品进行灭菌处理。

2)人原代真皮成纤维细胞活性测试。人原代真皮成纤维细胞在5%(体积分数)CO₂、37℃的培养条件下,利用成纤维细胞培养基扩增培养,当细胞生长至80%~90%汇合度时,经胰蛋白酶-EDTA消化后接种于96孔板。细胞贴壁培养48h后,加入不同质量分数的超分子泛醇样品处理细胞($n=3$)。处理48h后,每孔加入CCK-8试剂并孵育1h,随后用多功能酶标仪在450nm处测定OD。通过计算加入超分子泛醇的样品组(FC)和未加超分子泛醇的空白对照组(CNT)平均OD的比值,获得相对细胞活性,并据此判断样品的细胞毒性作用。

$$\text{相对细胞活性} = \frac{\text{样品组 OD}}{\text{空白对照组 OD}} \times 100\%$$

3)人原代真皮成纤维细胞的转录组测序及RNA样品质检。当体外培养的成纤维细胞生长至80%~90%汇合度时,经胰蛋白酶-EDTA消化后接种于12孔板。细胞贴壁培养48h后,用适宜质量分数的超分子泛醇样品处理细胞($n=3$)。24h后,吸去上清液,向每孔加入TRIzol试剂,充分吹打消化裂解细胞,将裂解液转入-80℃深低温保存备用。总RNA抽提质检合格后进行文库构建,采用Lumina HiSeq测序平台的双端测序模式对样本进行高通量测序。

1.3.8 超分子泛醇精华液制备及护肤效果评价 为探究改性后泛醇的应用效果,设计研制了一款以超分子泛醇为功效成分的护肤精华液,并采用人体功效评价方法,对该产品的护肤效果进行评价。

1)超分子泛醇精华液制备。配方:去离子水(84.9%)、丁二醇(5%)、超分子泛醇(5%)、琥珀酸二乙氧基乙酯(2.5%)、甘油葡萄糖苷(1%)、1,2-己二醇(1%)、对羟基苯乙酮(0.5%)和黄原胶(0.1%)。

工艺:将适量黄原胶分散于去离子水中,加热至 80 ℃ 保温 20 min,降温至 45 ℃ 待用;将适量对羟基苯乙酮和 1,2-己二醇分散于丁二醇中,于 60 ℃ 溶解至无颗粒后加入上述水溶液,搅拌均匀;再依次加入适量的超分子泛醇、琥珀酸二乙氧基乙酯和甘油葡糖苷,搅拌条件下冷却至室温即可。

2)护肤效果评价。通过对比满足入选标准的 33 名受试者单次及连续使用精华液 4 周前后皮肤角质层含水量、经表皮水分散失量、皮肤红斑指数、皮肤弹性、皮肤紧致度、红区面积、皱纹面积、下颌线外侧角度、下半面宽度等指标的变化情况,评价产品护肤效果。其中,下颌线外侧角度采用 VISIA7 皮肤分析系统拍摄标准侧脸照,以耳垂与下颌角连线、下颌角与下巴尖连线为基准测量夹角;下半面宽度采用 VISIA7 皮肤分析系统拍摄标准正脸照,测量双侧下颌角之间的直线距离;皮肤弹性和紧致度采用皮肤弹性测试仪,探头为 SU4,测试模式为 R1,每次测试 5 次,结果取平均值。

受试者入选标准:乳酸刺痛实验阳性(总分≥3 分),皮肤泛红等级≥1 级,眼角皱纹 2~4 级、眼底细纹 2~5 级,左、右两侧脸颊紧致度均值均>6 或皮肤弹性均值均≤0.65,自认为皮肤干燥、粗糙,且年龄范围在 25~50 岁的符合实验要求的中国健康女性受试者。

3)评价效果数据分析。应用 Excel 2019 软件,对各测量值进行描述性统计,包括均值、标准差、中

值、最小值、最大值等。应用 SPSS 24 分析软件,比较不同时间点的测量值与基础值,采用 Shapiro-WilkTest 进行数据差值正态分布的显著性检验。 P (双侧) >0.05 ,则呈正态分布,进行配对样本 t 检验,显著性差异水平 α 取 0.05。若 P (双侧) <0.05 ,则呈非正态分布,进行 Wilcoxon 符号秩检验,显著性差异水平 α 取 0.05。显著性标注方法为:n. s. 表示无统计学差异;* ($P\leq0.05$) 表示有统计学差异;** ($P<0.01$) 表示有显著性差异;*** ($P\leq0.001$) 表示有极显著性差异。

2 结果与讨论

2.1 超分子泛醇的形成与表征结果分析

图 1 为不同储存条件下各样品的外观对比图。由图 1 可知,所得超分子泛醇分别于室温、4 ℃、-20 ℃ 和 50 ℃ 储存 90 d 后,仍保持均匀透明,未出现固体析出或明显外观变化;而 D-泛醇与左旋肉碱在室温下的物理混合物呈白色泥状,外观差异显著,初步提示超分子泛醇制备成功。此外,选取 5 名志愿者参照 1.3.5 所述肤感评价方法,对储存 90 d 的超分子泛醇样品与新鲜制备样品进行对比评测,结果显示:新鲜样品在拉力、摩擦力、残留感 3 项指标的评分分别为 2.5、3.2 和 2.8,储存 90 d 的样品对应评分为 2.7、3.1 和 2.7,二者无明显差异,表明所制超分子泛醇具备良好的物理稳定性与肤感稳定性,为其后续产业化应用奠定了重要基础。

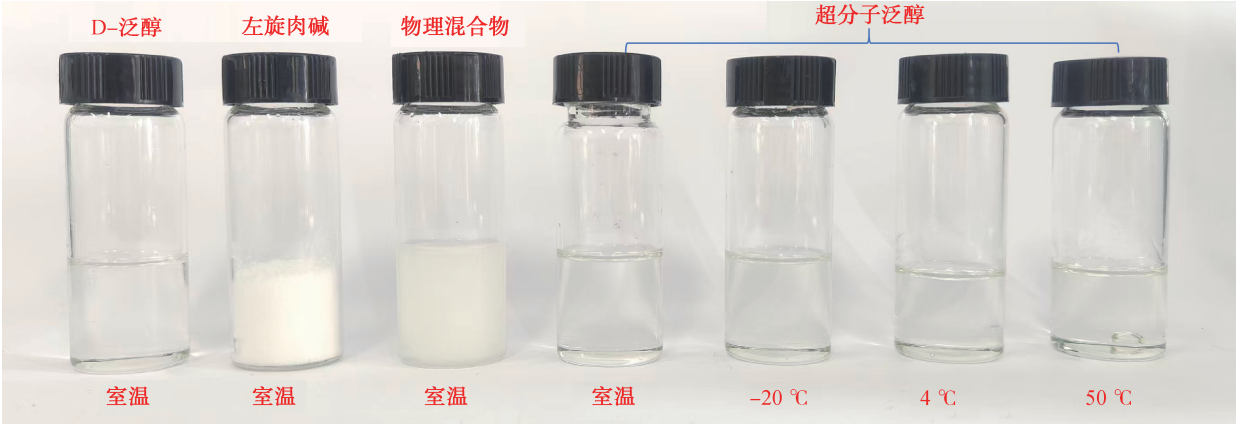


图 1 不同储存条件下各样品的外观对比图

Fig. 1 Appearance comparison of various samples under different storage conditions

图2为样品的红外光谱图。由图2可知,左旋肉碱的—OH峰位于 3460 cm^{-1} 处,峰形窄而尖锐,而超分子泛醇与D-泛醇的—OH峰均出现在 3600 cm^{-1} 附近,且峰形明显宽化。—OH峰的宽化效应是—OH参与复杂分子间氢键网络的典型光谱响应,间接佐证了左旋肉碱与D-泛醇之间存在分子间氢键作用。另外,二者—OH峰宽化程度相当,但超分子泛醇的—OH峰存在轻微蓝移,其原因可能是左旋肉碱与D-泛醇形成的分子间氢键并未完全破坏D-泛醇自身原有的氢键缔合状态,二者氢键网络呈现共存状态^[24]。左旋肉碱分子中C=O的伸缩振动峰(1700 cm^{-1})在超分子泛醇中红移至 1678 cm^{-1} ,该现象可归因于DES形成过程中分子间氢键的增强作用,导致C=O电子云密度和振动频率降低。进一步分析发现,D-泛醇在 1663 cm^{-1} 处的特征吸收峰(N—H剪式振动峰)在超分子泛醇中显著位移至 1630 cm^{-1} ,此红移现象源于D-泛醇分子中N—H键参与氢键网络构建后,其键力常数发生改变,进而引起振动频率升高^[25]。此外,超分子泛醇谱图中无新特征峰出现,表明D-泛醇与左旋肉碱之间没有形成新的化学键。上述光谱位移特征为阐明DES体系中供体-受体分子间的相互作用机制提供了关键依据。

图3为样品的 ^1H NMR谱。由图3可知,D-泛醇的—CH—OH信号峰由 5.37×10^{-6} 偏移至 5.69×10^{-6} ,其碳链末端—CH₂—OH信号峰则从 4.54×10^{-6} 移动至 4.70×10^{-6} 。这些特征峰的明显位移表明D-泛醇与左旋肉碱间存在分子间相互作用,进一步证实了超分子泛醇制备成功。

图4为样品的DSC曲线。由图4可知,左旋肉碱的DSC曲线在 $68\text{ }^{\circ}\text{C}$ 和 $207\text{ }^{\circ}\text{C}$ 处出现2个明显的吸热峰。依据热分析原理及物质相变规律, $68\text{ }^{\circ}\text{C}$ 处的弱吸热峰可归因于结晶水的脱除或晶型转变;而 $207\text{ }^{\circ}\text{C}$ 处的强吸热峰则对应左旋肉碱晶体由固态向液态转变的熔融过程。相比之下,D-泛醇的DSC曲线整体较为平缓,仅在近 $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的高温区呈现缓慢下降趋势。二者的物理混合物DSC曲线未出现新的特征峰,表明其组分间仅为简单的物理分散,未发生相互作用。超分子泛醇的DSC曲线呈现出显

著差异,其在 $191\text{ }^{\circ}\text{C}$ 处出现一个尖锐的单熔融峰。该峰既不同于左旋肉碱 $207\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的熔融峰,也与D-泛醇及物理混合物的热转变特征峰明显不同。这有力地证明了体系中D-泛醇与左旋肉碱分子间通过

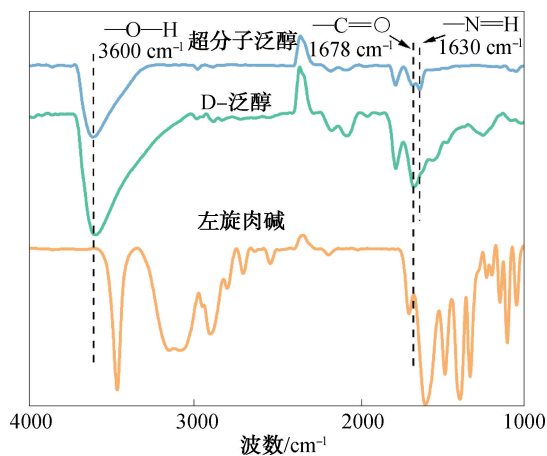


图2 样品的红外光谱图

Fig. 2 FT-IR spectra of various samples

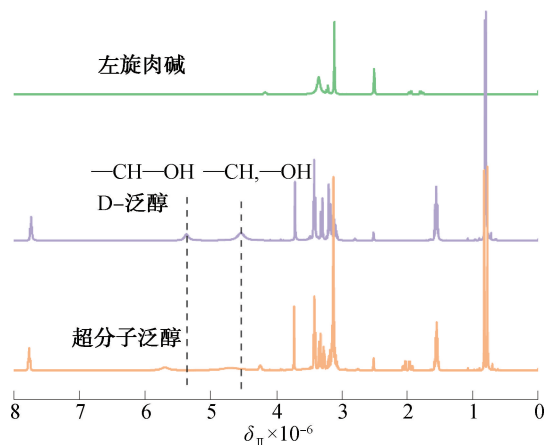


图3 样品的 ^1H NMR谱

Fig. 3 ^1H NMR spectra of various samples

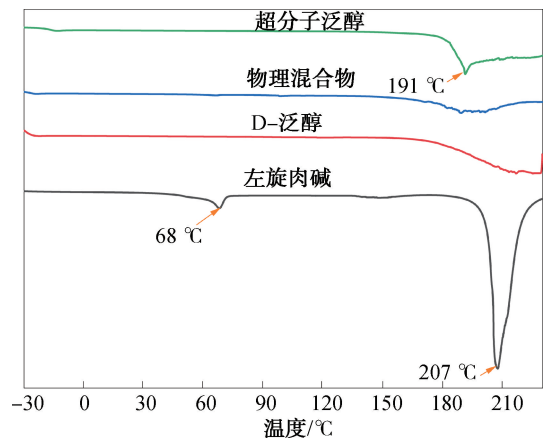


图4 样品的DSC曲线

Fig. 4 DSC curves of various samples

氢键等非共价键相互作用,成功形成了超分子泛醇这一新物相,从而改变了原体系的热转变行为。

2.2 D-泛醇与左旋肉碱相互作用分析

通过量子化学方法,从热力学和结构 2 个层面分析 D-泛醇与左旋肉碱之间的相互作用。图 5 为泛醇与左旋肉碱相互作用构象示意图。由图 5 可知,在 M06-2X/6-311++G(d,p)//6-31+G(d,p)水平下计算得到泛醇与左旋肉碱的结合自由能为 -21.3 kcal/mol,说明二者之间有较强的相互作用,且形成过程为自发的放热过程。进一步对超分子泛醇表面静电势力及分子间相互作用进行分析,结果见图 6。由图 6 可知,泛醇的多个—OH 与左旋肉碱的—COO⁻之间形成了多重氢键结构,同时肉碱的季铵盐正离子中心与泛醇链末端的羰基氧原子之间也存在强烈的静电吸引,这表明泛醇与左旋肉碱可以通过形成多重氢键与静电相互作用自发结合为 DES,由此可以推测二者可在化妆品应用中发挥协同增效作用。

2.3 超分子泛醇流变特性及肤感评价结果分析

图 7 为超分子泛醇的流变特性曲线。由图 7a)可知,D-泛醇与超分子泛醇的剪切应力均随剪切速率的升高呈先增大后缓慢减小的趋势。由图 7b)可知,D-泛醇与超分子泛醇的黏度均随剪切速率的升高显著降低,这表明二者都具有假塑性流体特征和良好的触变性。随着剪切速率的升高,D-泛醇的分子结构破坏程度增加,分子间相互作用减弱,表现出剪切稀化,体系黏度降低。此外,与 D-泛醇相比,当剪切速率趋近于 0 时,超分子泛醇的黏度大幅降低,这可能是由于 D-泛醇与左旋肉碱之间形成了分子间氢键,破坏了 D-泛醇自身的氢键网络,从而使

其黏度明显降低。上述结果表明,D-泛醇与左旋肉碱形成 DES 后,其流体性状发生了显著变化,这可能有助于改善高浓度应用下的黏腻感,并拓展其在化妆品中的应用范围和上限浓度。

肤感评价结果显示,7% D-泛醇溶液在拉力、摩擦力和残留感 3 项指标的评分分别为 3.5、3.8 和 4.3;8.75%超分子泛醇溶液的对应评分为 2.3、3.0 和 2.9,表明超分子化处理有助于减轻体系的黏腻感、涂抹摩擦感和皮肤残留感,从而改善整体使用肤感。上述结果与流变特性结果较一致,即超分子泛醇黏度更低及剪切稀化行为更明显,从主观评价与客观数据两方面共同证实了超分子化处理可通过改善体系的流变性能和涂展性,提升超分子泛醇高浓度体系的使用肤感。

2.4 超分子泛醇的护肤功效及作用机制分析

图 8 为不同质量分数超分子泛醇样品的细胞毒性测试结果。由图 8 可知,当样品质量分数≥1.0%时,表现出明显的细胞毒性;而当质量分数≤0.5%时,样品不仅无细胞毒性,还对人原代真皮成纤维细胞的增殖具有促进作用。考虑到后续转录组测序需要有效刺激浓度以诱导显著的基因表达变化,本研究选取安全窗口内的中间数值 0.25%作为转录组测序的处理质量分数。

使用 0.25%超分子泛醇样品处理人原代真皮成纤维细胞,分别收集样品组和空白对照组的细胞裂解液用于总 RNA 抽提,RNA 质量检测结果显示,两组 RNA 纯度均达 A 级,琼脂糖凝胶电泳主带清晰,无色素、蛋白质、糖类等杂质污染,且 RNA 总量均大于 1 μg,满足标准文库构建的基本要求^[26]。测序数据质量控制结果表明,所有样品的 Q30 均大于 85%,测序数据质量可靠。

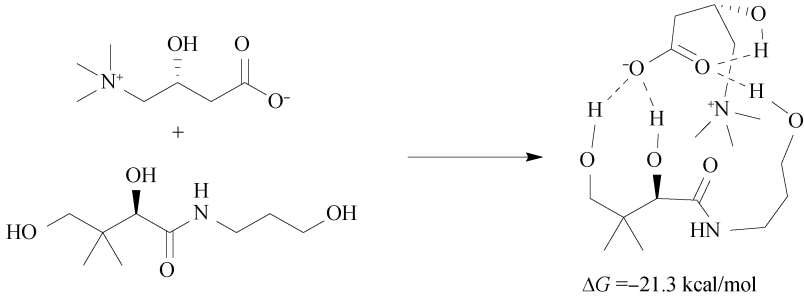


图 5 泛醇与左旋肉碱相互作用构象示意图

Fig. 5 Schematic diagram of the interaction conformation between D-panthenol and L-carnitine

采用 DESeq2 软件对空白对照组和样品组的基因表达数据进行差异分析,以 $P<0.05$ 为筛选标准,共鉴定出 4879 个差异表达基因。图 9 为样品组与空白对照组差异表达基因的聚类热图、火山图和散点图。由图 9 可知,与空白对照组相比,样品组共有 2510 个基因表达显著下调,2369 个基因表达显著上调。超分子泛醇可显著促进多种功能相关基因的表达,包括 19 个细胞 ATP 能量相关基因,6 个伤口愈合相关基因,6 个胶原蛋白相关基因,2 个细胞自噬相关基因,6 个脂质合成相关基因,2 个生长因子相关基因和 3 个抗氧化相关基因;同时,对 11 种炎症因子的表达具有不同程度的抑制作用,上述结果表明超分子泛醇具有抗皱和抗炎活性。

为进一步阐明超分子泛醇调控细胞功能的分子机制,对差异表达基因进行 GO 功能富集及 KEGG 通路富集分析,并按功能类别进行归类,结果见图 10 和图 11。由图 10 可知,超分子泛醇主要影响的

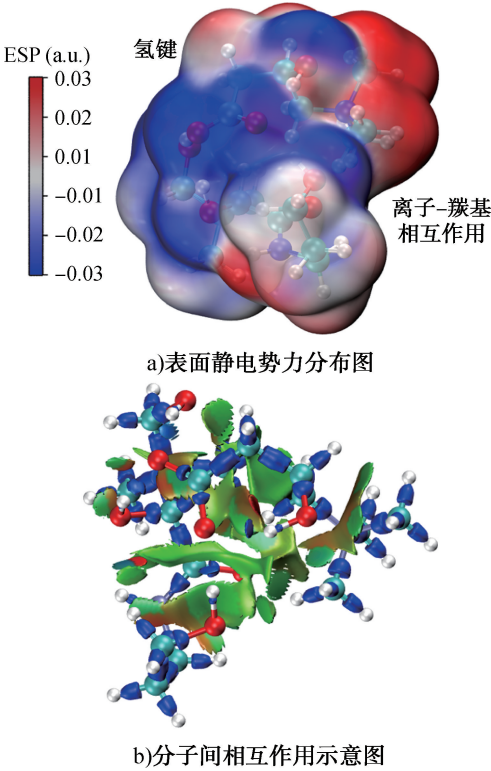


图 6 超分子泛醇表面静电势力分布图及分子间相互作用示意图

Fig. 6 Surface electrostatic potential distribution and schematic illustration intermolecular interaction of supramolecular panthenol

生物学过程是细胞器组织,核心作用的细胞组分为细胞内结构,关键调控的分子功能为蛋白质结合;差异表达基因主要定位于细胞内,尤其集中于细胞质、细胞器和细胞骨架相关结构。由图 11 可知,KEGG 通路富集分析中显著性较高的通路有 20 条,超分子泛醇主要通过 DNA 损伤修复、信号转导、细胞结构

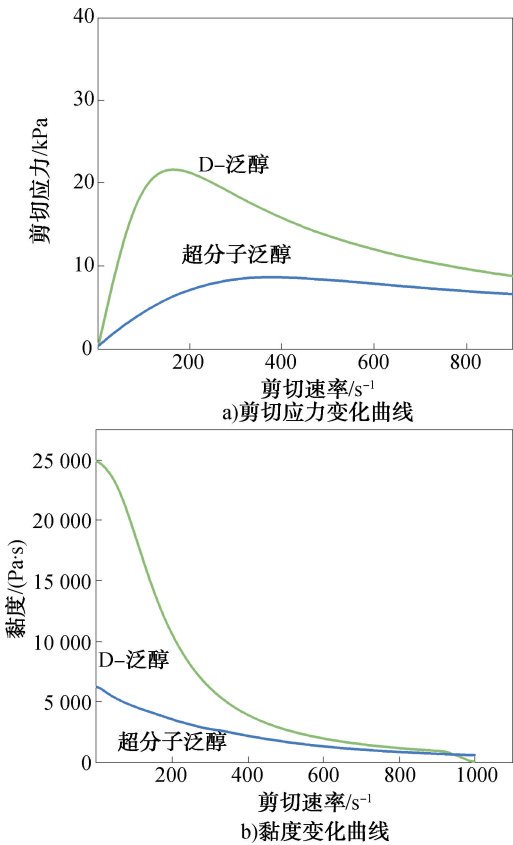


图 7 超分子泛醇的流变特性曲线

Fig. 7 Rheological property curves of supramolecular panthenol

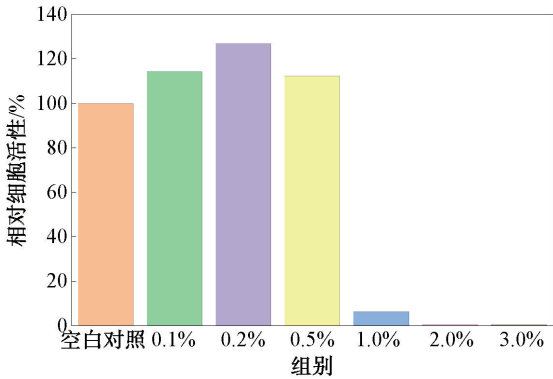


图 8 不同质量分数超分子泛醇样品的细胞毒性测试结果

Fig. 8 Cytotoxicity of supramolecular panthenol on human primary dermal fibroblasts at various concentrations

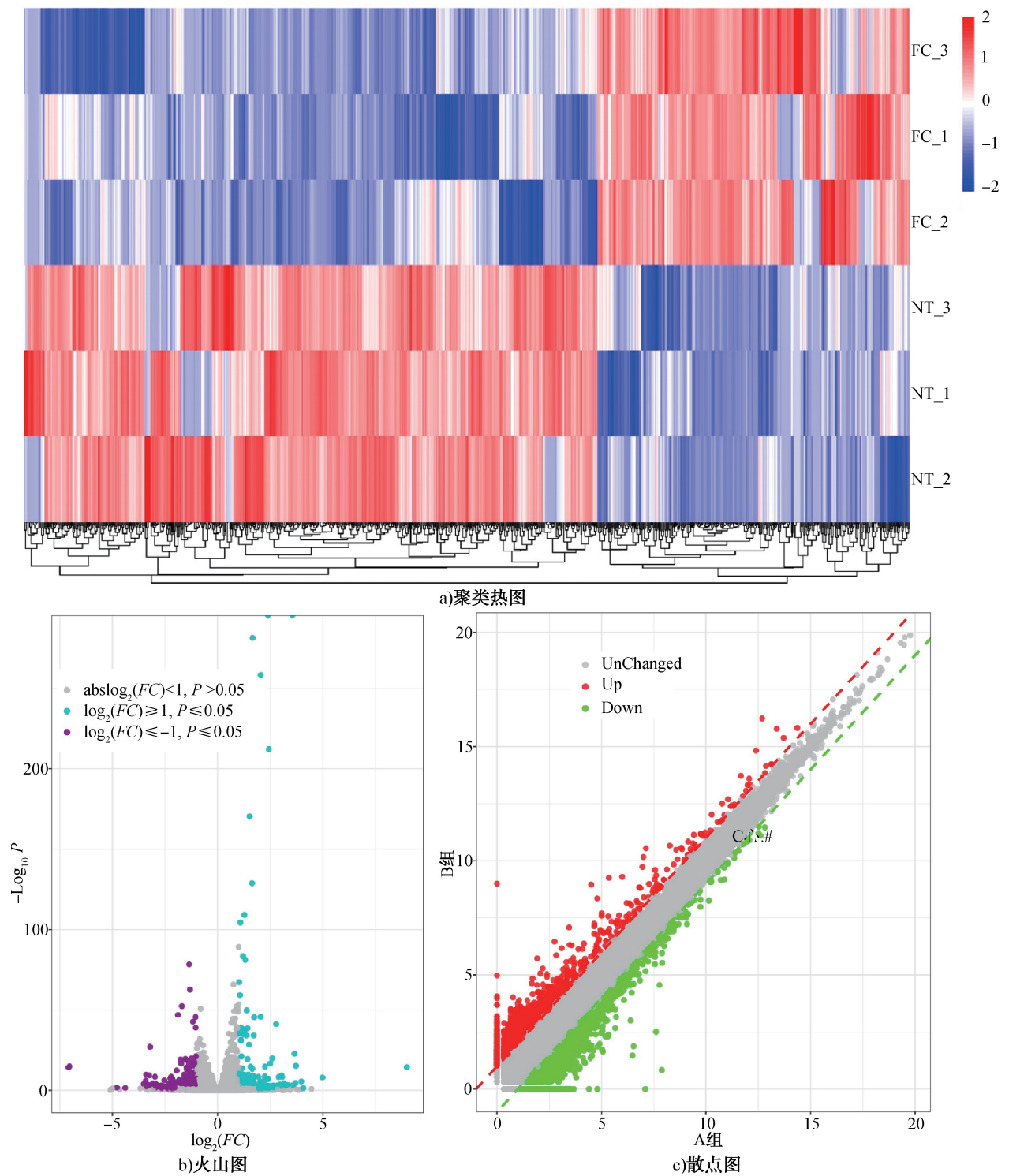


图 9 样品组与空白对照组差异表达基因的聚类热图、火山图和散点图
Fig. 9 Cluster heatmap, volcano plot, and scatter plot of differentially expressed genes between the sample group and the blank control group

调控与自噬等关键机制发挥作用,其中非同源末端连接通路、同源重组通路和溶酶体通路的富集程度最显著。已知同源重组和非同源末端连接是细胞修复 DNA 双链断裂的 2 个核心通路,而 DNA

损伤修复能力的提升可从根本上改善皮肤炎症,延缓皮肤衰老^[27]。由以上结果可推断,超分子泛醇可通过基因组调控途径发挥其潜在的抗炎及抗敏功效。

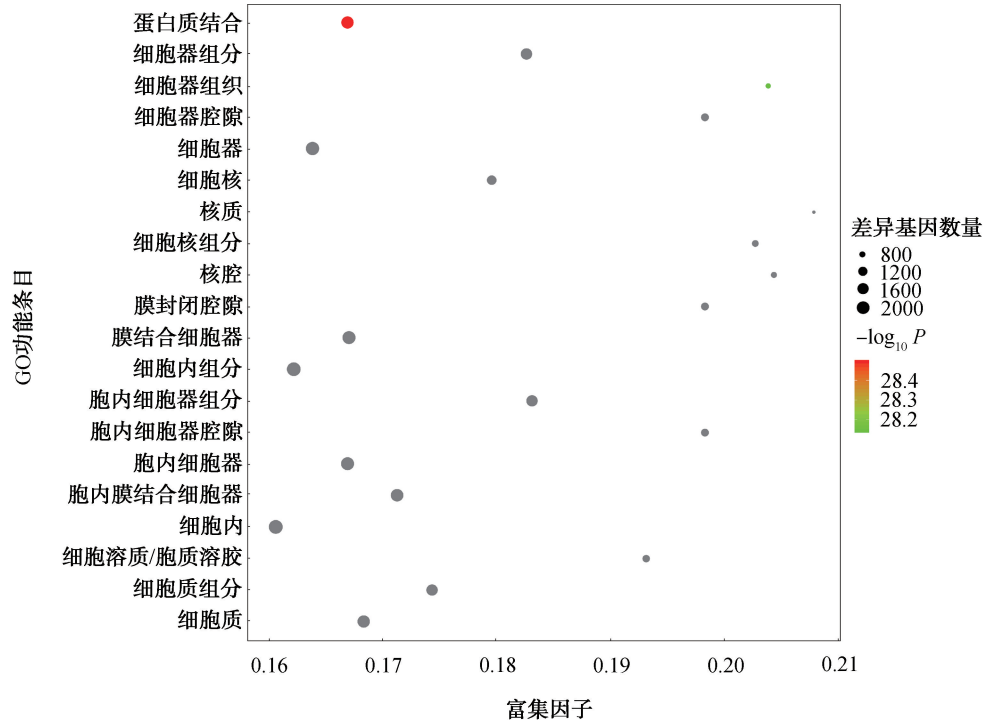


图 10 超分子泛醇 GO 功能富集图

Fig. 10 GO functional annotation enrichment analysis of supramolecular panthenol

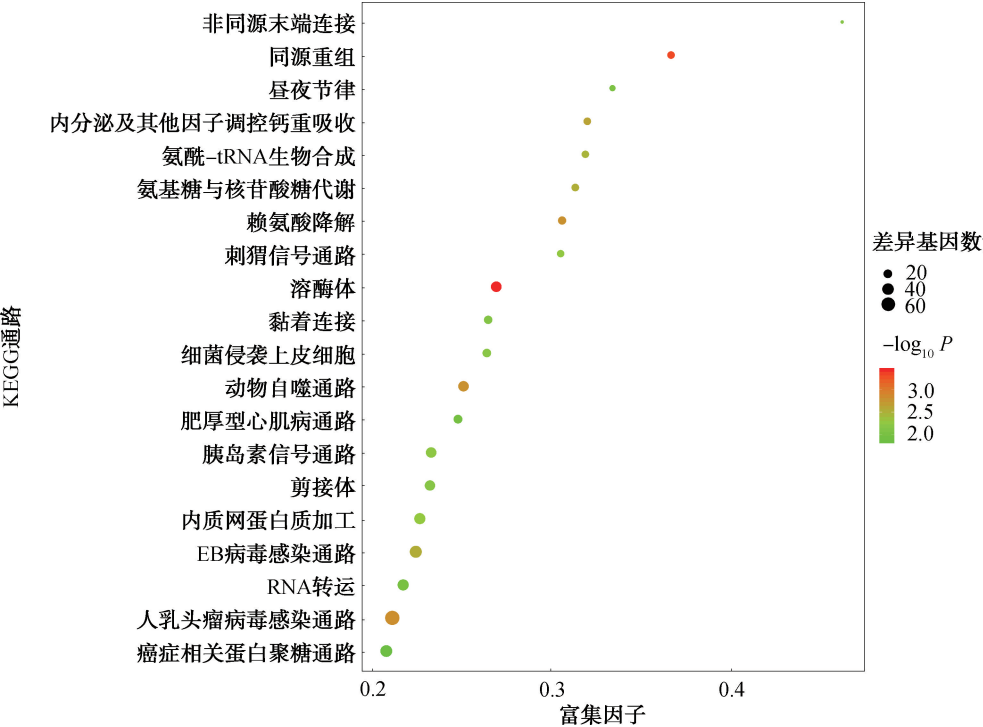


图 11 超分子泛醇 KEGG 通路富集图

Fig. 11 KEGG pathway enrichment analysis of supramolecular panthenol

2.5 超分子泛醇精华液的护肤效果评价

人体试用结果显示,33 名受试者在整个试用周期内均未出现与测试产品相关的皮肤不良反应,表明该精华液具有良好的皮肤安全性。图 12 为使用

超分子泛醇精华液前后受试者皮肤相关指标变化情况。由图 12 可知,与使用前(BL)相比,连续使用测试产品 4 周(W4)后,受试者脸颊部位多项皮肤指标均得到显著改善:角质层含水量显著提升了

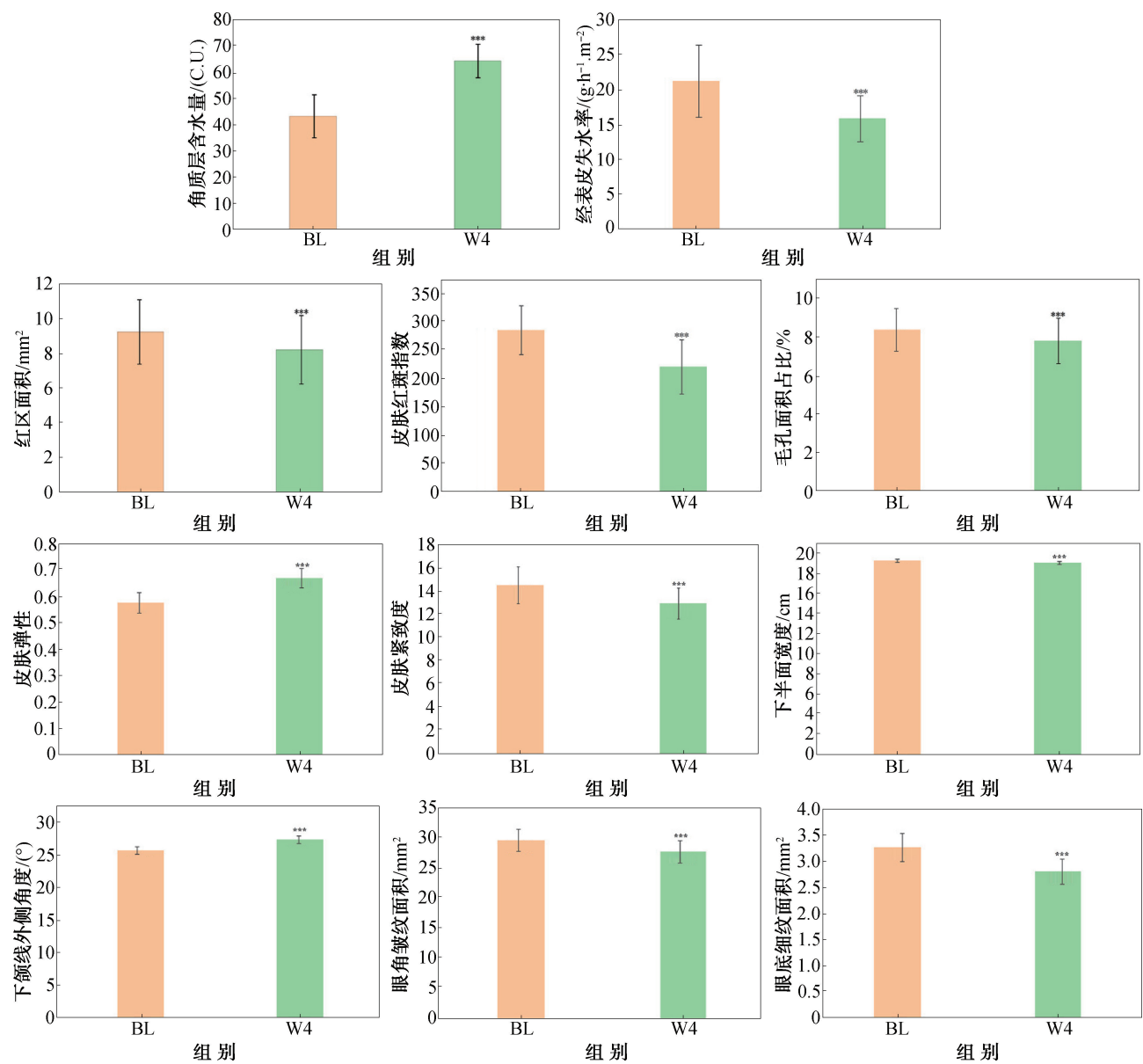


图 12 使用超分子泛醇精华液前后受试者皮肤相关指标变化情况

Fig. 12 Changes in skin-related parameters of subjects before and after the use of supramolecular panthenol essence

48.74%,经表皮失水率显著降低了 25.43%,皮肤红斑指数显著下降了 22.75%;皮肤弹性升高了 16.17%,皮肤紧致度降低了 11.74%;此外,红区面积减少了 11.06%,毛孔面积占比降低了 6.84%,眼角皱纹面积及眼底细纹面积分别下降了 6.50%和 14.14%;下颌线外侧角度扩大了 6.43%,下半面宽度缩小了 1.05%。上述结果表明,超分子泛醇精华液具有一定的保湿、修护、舒缓、抗皱及紧致功效。

3 结论

本研究以左旋肉碱为氢键受体、D-泛醇为氢键供体,构建了泛醇-肉碱超分子 DES 体系。结构表

征和热行为分析结果表明,2 种组分间通过较强的非共价相互作用形成了具有特征熔融行为的超分子结构,其形成机制经理论计算验证为多重氢键与静电吸引驱动的自发组装过程。超分子化处理显著改善了 D-泛醇的流变性能,体系黏度明显降低并呈现典型的剪切稀化行为,结合肤感评价结果,超分子处理能够显著改善 D-泛醇的黏腻肤感。细胞实验结合转录组学分析结果显示,超分子泛醇在 0.25%质量分数下对人原代真皮成纤维细胞具有增殖促进作用,可上调胶原合成与细胞能量代谢相关基因的表达,并对炎症因子表现出较为显著的抑制作用。人体功效评价结果显示,连续使用超分子泛

醇精华液4周后,受试者皮肤含水量显著提升,经表皮水分流失率降低,皮肤弹性、皱纹及红斑相关指标均得到不同程度改善,证实了超分子泛醇精华液具有一定的保湿、修护、舒缓、抗皱及紧致作用。

综上,本研究通过超分子 DES 策略有效改善了传统泛醇制剂的肤感缺陷,并对超分子泛醇的护肤机制进行了初步探究,为泛醇在化妆品中的高效应用提供了可行的技术方案。后续研究可引入角质形成细胞,从表皮-真皮双维度完善皮肤屏障修护的作用机制论证,还可探究该超分子体系在不同化妆品配方中的应用适配性,为其产业化应用提供更全面的实验数据支持。

参考文献:

- [1] KULIKOV A U, ZINCHENKO A A. Development and validation of reversed phase high performance liquid chromatography method for determination of dexpanthenol in pharmaceutical formulations[J]. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2007, 43(3): 983-988.
- [2] PROKSCH E, DE BONY R, TRAPP S, et al. Topical use of dexpanthenol: a 70th anniversary article[J]. *Journal of Dermatological Treatment*, 2017, 28(8): 766-773.
- [3] EBNER F, HELLER A, RIPPKE F, et al. Topical use of dexpanthenol in skin disorders[J]. *American Journal of Clinical Dermatology*, 2002, 3(6): 427-433.
- [4] WOLLENBERG A. Basic emollients for the management of xerosis cutis: biophysical properties, clinical evidence, and practical considerations[J]. *International Journal of Dermatology*, 2025, 64(S1): 3-4.
- [5] 钱进, 邓慧, 李华真, 等. 化妆品中保湿剂的拮抗与增效作用探究[J]. *广东化工*, 2022, 49(19): 49-54, 22.
- [6] QIAN J, DENG H, LI H Z, et al. Research on antagonistic and synergistic effects of moisturizers in cosmetics[J]. *Guangdong Chemical Industry*, 2022, 49(19): 49-54, 22.
- [6] PETROVIĆ J D, CAREVIĆ MILČEVIĆ T A, GLAMOČLIJA J M, et al. Mixture containing 5% polysaccharide extract of *Ceriporus squamosus* (huds.) quélet, 5% dexpanthenol, and 0.2% hyaluronic acid shows *in vitro* and *in vivo* wound healing properties[J]. *Pharmaceuticals*, 2025, 18(3): 416.
- [7] 朱佳. 含 β -葡聚糖和泛醇的喷雾剂对小鼠 AEW 模型修复皮肤屏障、缓解炎症及瘙痒的作用[D]. 北京: 北京协和医学院, 2022.
- [7] ZHU J. Effects of sprays containing β -glucan and panthenol on repairing skin barrier, alleviating inflammation and pruritus in an AEW-induced mouse model [D]. Beijing: Peking Union Medical College Hospital, 2022.
- [8] HUTH S, MARQUARDT Y, HUTH L, et al. Molecular insights into the effects of laser-induced optical breakdown (LIOB) after 1064 nm picosecond laser irradiation using a novel melanocyte-containing 3D skin model[J]. *Lasers in Medical Science*, 2025, 40(1): 223.
- [9] TAN C, PENG K, LIM T, et al. The combination of allantoin, bisabolol, D-panthenol and dipotassium glycyrrhizinate mitigates UVB-induced PGE2 synthesis by keratinocytes [J]. *International Journal of Cosmetic Science*, 2024, 46(5): 691-701.
- [10] PAVLAČKOVÁ J, EGNER P, SEDLÁČEK T, et al. *In vivo* efficacy and properties of semisolid formulations containing panthenol[J]. *Journal of Cosmetic Dermatology*, 2019, 18(1): 346-354.
- [11] 蔡雅琴. “丹皮酚-薄荷脑”低共熔物纳米乳凝胶的制备与评价[D]. 银川: 宁夏医科大学, 2017.
- [11] CAI Y Q. Preparation and evaluation of nanoemulsion-loaded gel based on paeonol-menthol eutectic mixture [D]. Yin Chuan: Ningxia Medical University, 2017.
- [12] BAI D, WANG Z Y, XIAO Y, et al. Transdermal delivery of elastin peptide assisted by betaine-based deep eutectic solvent to ameliorate skin photoaging [J]. *Biomaterials Advances*, 2024, 163: 213965.
- [13] CZYRSKI G S, FRESE HJORT M K, RADES T, et al. Comparing effects of terpene-based deep eutectic solvent and solid microneedles on skin permeation of drugs with varying lipophilicity[J]. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 2024, 205: 114576.
- [14] KAPRE S, PALAKURTHI S S, JAIN A, et al. DES-igning the future of drug delivery: a journey from fundamentals to drug delivery applications[J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2024, 400: 124517.
- [15] 李明键, 赵志远, 郑璐遥, 等. ILs/DES 在经皮药物递送中的应用研究进展[J]. *中国医药工业杂志*, 2022, 53(4): 454-463.
- [15] LI M J, ZHAO Z Y, ZHENG L Y, et al. Research progress in application of ILs/DES in transdermal drug delivery [J]. *Chinese Journal of Pharmaceuticals*, 2022, 53(4): 454-463.
- [16] 周湖武, 唐莉凤, 周紫燕, 等. 一种超分子酸酶组合物的开发及其去角质功效评价[J]. *香料香精化妆品*, 2025(5): 72-77.
- [16] ZHOU H W, TANG L F, ZHOU Z Y, et al. Development of a supramolecular acid-enzyme composition and evaluation of its exfoliation efficacy[J]. *Flavour Fragrance Cosmetics*, 2025(5): 72-77.
- [17] NAVA-OCAMPO M F, AL FUHAID L, SANTANA A, et al. Structural properties and stability of the Betaine-Urea natural deep eutectic solvent [J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2021, 343: 117655.
- [18] 文静, 牛俊淞, 吴玉珍, 等. 冰片-薄荷脑低共熔物载川芎嗪纳米乳凝胶制备[J]. *中成药*, 2025, 47(8): 2522-2529.
- [18] WEN J, NIU J S, WU Y Z, et al. Preparation of borneol-menthol eutectic mixture-loaded nanoemulsion gel of

- tetramethylpyrazine [J]. Chinese Traditional Patent Medicine, 2025, 47(8): 2522–2529.
- [19] HUBER V, HIOE J, TOURAUD D, et al. Uncovering the curcumin solubilization ability of selected natural deep eutectic solvents based on quaternary ammonium compounds [J]. Journal of Molecular Liquids, 2022, 361: 119661.
- [20] WANG D Y, ZHANG M, LAW C L, et al. Natural deep eutectic solvents for the extraction of lentinan from shiitake mushroom; COSMO-RS screening and ANN-GA optimizing conditions [J]. Food Chemistry, 2024, 430: 136990.
- [21] PEIRANO R I, HAMANN T, DUSING H J, et al. Topically applied L-carnitine effectively reduces sebum secretion in human skin [J]. Journal of Cosmetic Dermatology, 2012, 11: 30–36.
- [22] HOU Y C, ZHANG B Z, GAO M J, et al. Densities, viscosities and specific heat capacities of deep eutectic solvents composed of ethanediol + betaine and ethanediol + L-carnitine for absorbing SO₂ [J]. The Journal of Chemical Thermodynamics, 2023, 179: 106999.
- [23] MEHRABI F, GHAEDI M, ALIPANAHPOUR DIL E. DL-carnitine-based green hydrophobic deep eutectic solvent for the enrichment of bisphenol A in mineral water based on ultrasound-assisted liquid-phase microextraction [J]. Talanta, 2024, 266: 125045.
- [24] 叶玉玺, 丁晓茜, 池华睿, 等. 疏水性低共熔溶剂氢键交互作用调控及萃取铜性能 [J]. 化工进展, 2022, 41(S1): 397–406.
- YE Y X, DING X X, CHI H R, et al. Hydrophobic deep eutectic solvent hydrogen bond interaction regulation and extraction performance of copper [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2022, 41(S1): 397–406.
- [25] NASEEM Z, SHEHZAD R A, IHSAN A, et al. Theoretical investigation of supramolecular hydrogen-bonded choline chloride-based deep eutectic solvents using density functional theory [J]. Chemical Physics Letters, 2021, 769: 138427.
- [26] 崔凯, 吴伟伟, 刁其玉. 转录组测序技术的研究和应用进展 [J]. 生物技术通报, 2019, 35(7): 1–9.
- CUI K, WU W W, DIAO Q Y. Application and research progress on transcriptomics [J]. Biotechnology Bulletin, 2019, 35(7): 1–9.
- [27] CAMP B, STEGEMANN-KONISZEWSKI S, SCHREIBER J. Infection-associated mechanisms of neuro-inflammation and neuro-immune crosstalk in chronic respiratory diseases [J]. International Journal of Molecular Sciences, 2021, 22: 5699.

Preparation and skincare properties of panthenol-carnitine supramolecular deep eutectic mixture

WANG Shanzhen¹, XUAN Xiaorui¹, YU Shuyan², REN Yuting², GUO Daye², FAN Kaiqi²

1. Hangzhou Morun Cosmetics Co., Ltd., Hangzhou 311215, China;

2. College of Materials and Chemical Engineering, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou 450001, China

Abstract: [Objective] This study aimed to alleviate the marked greasiness and poor skin feel of conventional panthenol formulations and to enhance their skincare efficacy and application performance. **[Methods]** A supramolecular modification strategy was employed to modify panthenol. Using L-carnitine as the hydrogen bond acceptor, a supramolecular deep eutectic solvent (DES), designated as supramolecular panthenol, was constructed with D-panthenol. Its structure was characterized by Fourier transform infrared spectroscopy (FT-IR), proton nuclear magnetic resonance spectroscopy (¹H NMR), and differential scanning calorimetry (DSC). Theoretical calculations were performed to elucidate the intermolecular interaction mechanism, and rheological tests were conducted to evaluate the shear stress and viscosity changes of the system. Transcriptomic analysis and formulation application studies were further carried out to clarify its skincare performance. **[Results]** The supramolecular panthenol was successfully prepared, and its structure was synergistically maintained by multiple hydrogen bonds and electrostatic interactions. The system exhibited significantly reduced viscosity and pronounced shear-thinning behavior. The supramolecular panthenol upregulated the expression of genes involved in collagen synthesis and cellular energy metabolism while inhibiting the expression of inflammatory factors. When formulated into an essence product, it markedly reduced greasiness and delivered multiple skincare benefits, including moisturization, skin barrier repair, soothing and anti-inflammatory effects, anti-wrinkle efficacy, and skin firming. **[Conclusion]** The supramolecular modification strategy can significantly improve the skin feel of conventional panthenol preparations, and the result ing supramolecular panthenol holds considerable promise for the development of functional skincare ingredients.

Key words: D-panthenol; L-carnitine; supramolecular deep eutectic mixture; skincare property

[责任编辑: 王晓波]