# 超分子技术及其在化妆品领域的应用研究

黄春艳[1]，王璞[2]，徐志文[2]，熊青安[1]，余述燕[1*]
(1.郑州轻工业大学 材料与化学工程学院，河南郑州，450001；
2. 上海友仁生物科技有限公司，上海，200030 )
DOI:10.61369/CDCST.2026030016

**摘　　要：**超分子化学依托分子间非共价键相互作用实现分子有序组装与功能调控，为化妆品行业活性成分水溶性差、化学稳定性低、透皮吸收效率不足及皮肤刺激性高等共性技术难题提供了创新解决路径。针对上述挑战，基于不同的分子识别与自组装模式，已开发出多种超分子技术。从应用逻辑来看，这些技术可划分为三个递进层级：原料级改性、递送级改性及绿色智能开发。在此框架下，本文系统综述了广泛应用于化妆品领域的四种典型的超分子平台：超分子共晶、超分子溶剂、超分子包合、超分子载体；重点阐述其作用原理、制备策略、表征方法及在化妆品领域的应用进展，梳理当前技术转化面临的挑战，并展望未来发展趋势，以期为化妆品行业中超分子技术的创新应用与高效落地提供理论支撑与技术参考。


余述燕

**关　键　词：**超分子；化妆品；制备策略；表征方法

**第一作者简介：**黄春艳，主要从事化妆品原料改性研究。
**通讯作者简介：**余述燕，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。Email：2014023@zzuli.edu.cn。

众多化妆品功效成分（多酚、维生素、酸类、天然植物提取物等）在实际配方应用中，存在水溶性差、易氧化分解、透皮吸收效率低、局部刺激性较强等问题，直接限制其功效表达与产品安全性提升。传统乳化、包埋、微胶囊化等技术可在一定程度上改善上述缺陷，但难以同步实现高生物相容性、高稳定性与高效透皮递送的协同目标。

超分子化学于1978 年由 Lehn 正式提出，核心在于分子间通过氢键、范德华力、静电引力、亲疏水作用、π-π堆积或偶极 -偶极作用等非共价键相互识别、自发组装，形成具有特定结构与功能的有序分子聚集体[1]。凭借精准分子识别、可控自组装与刺激响应等独特优势，超分子技术可在分子水平对功效成分进行高效富集、结构修饰、性能调控与靶向递送，成为突破传统化妆品原料应用瓶颈、推动产品向高效化、温和化、智能化与绿色化升级的关键技术之一。

基于不同的分子识别与自组装模式，目前已发展出多种超分子技术用于解决化妆品活性成分的配方瓶颈问题。从应用逻辑来看，这些技术可归纳为三个递进层次：原料级改性、制剂级递送及绿色智能化发展。其中，超分子共晶、超分子溶剂、超分子包合物及超分子载体是研究较为集中、具有代表性的四种技术形式，它们从不同分子作用机制出发，针对性地改善活性成分的溶解性、稳定性、皮肤刺激性及透皮递送效率，已在活性成分提取、原料应用改性、功效成分递送体系构建及绿色制备工艺开发中展现出重要应用价值[2]。具体而言，超分子共晶与超分子包合物侧重于原料层面的性质改善——前者优化活性成分的固态溶解性与热稳定性，后者降低刺激性并提高光稳定性；超分子低共熔溶剂（DESs）兼具绿色高效萃取与智能溶剂设计的潜力；两亲分子组装的超分子载体则聚焦缓释透皮递送，近年已可构建 pH、温度或酶响应型按需释放体系。需要指出的是，四类体系在绿色与智能属性上的表现并不均衡，其中超分子溶剂绿色属性最为突出，载体则是智能递送系统设计中最活跃的领域。本文围绕上述四种代表性超分子技术，系统梳理其作用原理、制备策略、表征方法与应用研究进展，以期为超分子技术在化妆品领域的进一步研究与应用提供系统参考。

## 1 超分子技术的原理及制备方法

超分子化学为实现功能分子的有序组装与性能提升提供了强大的理论依据与工具库。基于其独特的分子识别与自组装能力，一系列先进的超分子技术应运而生，为破解传统化妆品原料的应用瓶颈开辟了全新路径。基于引言中概述的三级框架，下文将详细阐述各体系的核心机制、制

基金项目：河南省校企协同创新项目 (26AXQXT113 )，郑州轻工业大学博士科研基金项目 (2014BSJJ009)。



中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 99　2026/9/29 15:32:40

备过程及代表性化妆品应用，并辅以横向性能对比，以体现各体系的优势与局限性。

### 1.1 超分子共晶

超分子共晶技术是指将两种或多种固体活性成分在分子水平上以非共价键结合，形成具有固定化学计量比和新晶体结构的三维超分子网络的技术。其聚焦于通过分子间作用（尤其是氢键）形成新的固体材料，以改善原料本身的理化性质，本质是功能成分（API）与共晶形成物（CCF）之间通过分子识别，形成氢键等相互作用，构建热力学更稳定的新晶相，它不是简单的物理混合或普通共晶，而是基于分子设计和识别的精准调控（如图1所示）。张立国[3]等人在超临界$CO_2$微通道反应器中通过氢键作用将维生素C与烟酰胺结合，制备了维生素C-烟酰胺超分子共晶，不仅保留了二者的美白功效，还显著提升了维生素C的热稳定性和透皮吸收率，共晶原料的24 h经皮渗透量为物理混合物的2.17倍（以Vc计）和1.34倍（以烟酰胺计），DPPH自由基清除$IC_{50}$为0.034%，实现了两种活性成分的协同增效与一体化递送。

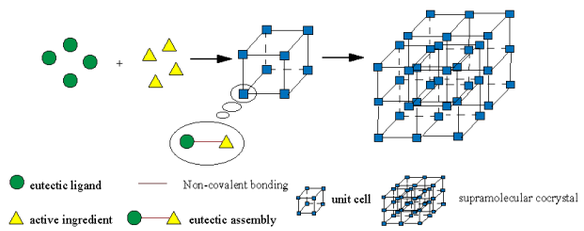



图1 超分子共晶形成示意图

超分子共晶的制备可分为固态与溶液两大路径[4]：(1)固态结晶法主要包括机械研磨法与熔融法。其中，机械研磨法(包括引入微量溶剂的液体辅助研磨法)是将两种物质按照一定的比例混合，采用机械研磨的方法，通过机械力高效诱导分子定向排列与固相反应；熔融法是将API与CCF以一定化学计量比混合，加热使其融化，在降温的过程中析出晶体。(2)溶液结晶法依赖于溶剂介质，其中最常用的混悬结晶法则是将过量API和CCF加入溶剂中，在溶剂的介导下，促进共晶的成核和生长，得到粉末样品[5]。

### 1.2 超分子溶剂

超分子溶剂（Supramolecular Solvents, SUPRAS）是依靠分子间氢键、范德华力等非共价键自组装形成的均一液态超分子体系（如图2所示）。在化妆品领域所应用的超分子溶剂主要以低共熔溶剂（Deep Eutectic Solvents, DES）为典型代表，依据组成与功能可进一步分为萃取型低共熔溶剂[6]和功能型低共熔溶剂两大类[7]。

萃取型低共熔溶剂以氯化胆碱或甜菜碱等季铵盐作为氢键受体，以尿素、多元醇或有机酸等作为氢键供体，按特定化学计量比自组装形成室温稳定的透明液体，主要作为绿色萃取介质，用于天然植物原料中黄酮、多糖或皂苷等活性成分的高效富集，相较于水提或有机溶剂等传统提取方式，具有绿色低毒、可降解和提取效率高等优势[8]。2025年García等人采用脯氨酸-甘油-水三元天然DES萃取咖啡渣中绿原酸和咖啡酸等多酚类抗氧化活性物。DES体系总酚提取量可达128.3 mg/g，是70%乙醇提取量（39.7 mg/g）的3.23倍；体外抗氧化测试显示DES提取物对DPPH自由基的$EC_{50}$低至1.12 μg/mL，显著优于乙醇和甲醇提取物。值得一提的是该DES体系未表现出细胞刺激性，提取液可无需进行DES溶剂的脱除，可直接用于护肤乳霜的配制[9]。

功能型低共熔溶剂是将功效活性物直接作为氢键供体或氢键受体参与组装，与匹配组分形成稳定液态超分子体系，能够将难溶、刺激性强、稳定性差或固态的活性成分转化为温和、高溶、高渗透的液体形式。2026年，王扇珍等人针对传统泛醇制剂黏腻感强、肤感不佳的问题，利用肉碱为氢键受体，与D-泛醇构建常温下为均匀透明液体的超分子低共熔物。该技术可显著改善传统泛醇制剂肤感，所得超分子泛醇-肉碱低共熔物具备明确的抗皱与抗炎活性[10]。

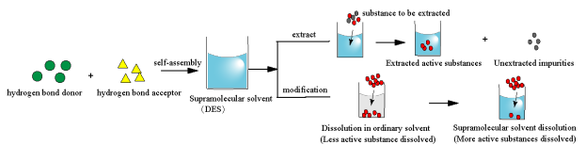



图2 超分子溶剂的形成及应用

超分子溶剂可通过多种温和策略实现制备，常用方法包括加热搅拌法、室温搅拌法、机械研磨法、超声辅助法及冷冻干燥法等[11]，其中加热搅拌法是制备低共熔溶剂最常用的手段，将氢键供体与氢键受体按比例混合后在温和条件下搅拌至体系澄清透明，冷却后即可获得稳定的超分子溶剂，其余方法可针对热敏性体系或快速组装需求选用，进一步拓展了超分子溶剂在化妆品领域的制备适用性与应用场景。

### 1.3 超分子包合

超分子包合技术基于主客体化学，在主客体包合作用中，主体通常为具有空腔结构的分子，如环糊精，客体为可以进入主体空腔中的功效成分等分子[12]。利用主体分子



中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 100 2026/9/29 15:32:40

的空腔选择性包合客体分子，形成分子水平的包合物，以改善客体的性质（如稳定性、溶解度和刺激性等问题）（如图3所示）。其选择性体现在要求客体分子的几何形状、尺寸、极性等与主体分子空腔的尺寸和性质相匹配[13]。白藜芦醇（Resveratrol,RES）因其卓越的抗氧化、抗炎和抗肿瘤等生物活性而受到广泛关注。然而，其低水溶性和低稳定性限制了实际应用。为解决这一问题，李世德采用环糊精(Cyclodextrin,CD)及其衍生物作为载体，系统研究了超分子包合技术在提高白藜芦醇的溶解度、稳定性和缓释性能的应用潜力[14]。

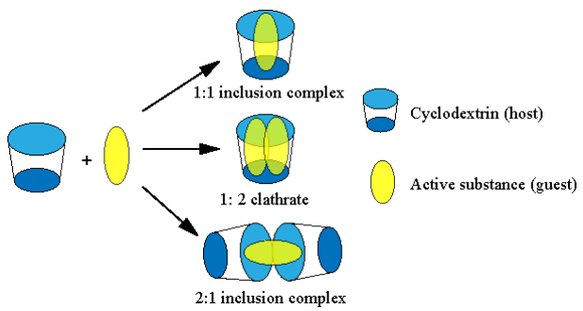



图3 超分子包合物的形成示意图

超分子包合物的制备是实现其功能的基础，其制备方法主要有研磨法与共溶共沉淀法[15]。前者是在不使用溶剂或使用极少量溶剂的条件下，通过机械力使主客体发生包合；后者是将主客体溶于一种或分别溶于不同溶剂中再混合，使混合后的混合液在适宜温度下通过搅拌、超声辅助等方式促进包合，最终通过冷却、蒸发、加入沉淀剂、冷冻干燥等方式诱导包合物析出。如Sowmiapratha等在研究肉桂酸酯/β-环糊精包合物时采用的方法就是将β-环糊精水溶液与肉桂酸酯衍生物的乙醇溶液混合，经长时间搅拌促进包合后，加入丙酮（沉淀剂）诱导沉淀，最终获得固体包合物[16]。有时也可以将客体分子加入主体分子的饱和水溶液中，这一特殊情况下又叫饱和水溶液法。

### 1.4 超分子载体

在超分子包合过程中，一个或少数几个主体分子即可实现对相应数量客体分子的包合；而在超分子载体体系中，通常需要大量两亲性分子通过自组装形成纳米或微米尺度的宏观结构，才能实现其载体功能（如图4所示）。在化妆品领域，脂质体、囊泡、凝胶和微乳液等是常见的经典载体类型[17]。

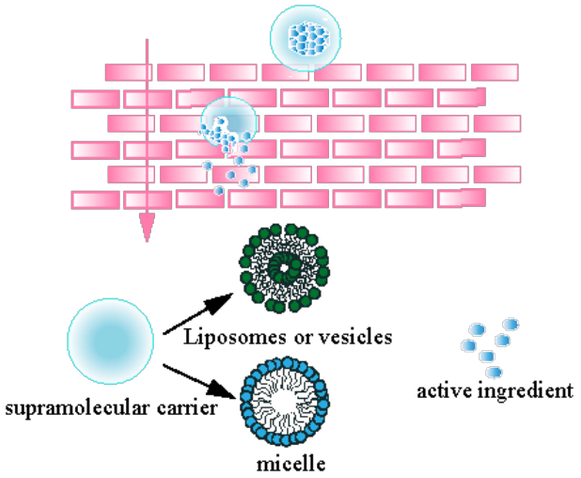



图4 超分子载体技术示意图

其中，脂质体是由磷脂与胆固醇分子在水中自组装形成的、具有完整封闭双分子层结构的球形囊泡。其制备方法(如薄膜分散法、高压均质法)虽多，但核心步骤均围绕诱导分子组装展开[18]：首先将脂质成分溶于有机溶剂形成均匀溶液，随后去除溶剂形成脂质薄膜；接着薄膜在水相中水合分散，使分子自发重排并包封活性成分；最后进行纯化与表征。与之结构相似的囊泡，其区别主要在于组装单元为表面活性剂分子而非磷脂等分子[19]。微乳液则是一种由油、水、表面活性剂(及助表面活性剂)在适当比例下自发形成的热力学稳定体系。其粒径通常在10~1000nm之间，可呈现水包油(O/W)、油包水(W/O)或双连续(BC)结构，具有各向同性、低黏度与透明等特点[20]。同样，当两亲性聚合物在水相中浓度超过临界胶束浓度时，大量聚合物分子会通过疏水链段向内聚集、亲水链段向外伸展的方式，自组装形成结构明确的聚合物胶束。以上这些由大量分子有序组装形成的宏观结构，是实现高效包载与递送功能的基础。

此外，代表性超分子载体——超分子凝胶，通常由小分子凝胶因子通过非共价作用自组装形成三维网络结构。该结构内部具有大量空腔，能够固定大量水分子或有机分子，从而使整个体系呈现果冻状半固体形态，兼具结构稳定性与良好的包封能力[21]。凝胶化是一个自发的协同过程，其制备方法可以有：a)超声辅助法，如Ma等[22]利用超声辅助抗溶剂沉淀法制备了Breviscapine超分子凝胶；b)加热冷却法[23]：常见的制备工艺为将低分子量的凝胶剂分散到适当的溶剂中，加热使其完全溶解，然后缓慢冷却至室温形成凝胶。

研究者利用这些超分子载体技术，针对活性成分的固



中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 101 2026/9/29 15:32:41

有缺陷进行结构设计，实现功效保留与性能提升的一体化。例如，采用脂质体载体技术包封 Pequi 油（巴西果仁油），既保留了其保湿、抗衰老功效，又显著提升了稳定性和控释能力，应用于冻干脂质体凝胶配方后，该配方表现出更优的皮肤保湿性与屏障功能 [24]。将阴离子表面活性剂油酸钠与多糖羧甲基纤维素钠混合，通过分子间自组装形成复合囊泡，既保留了脂肪酸囊泡生物相容性好、成本低、易自组装的优点，又显著拓宽了 pH 稳定范围至接近生理环境，实现了烟酰胺的高效包封与缓释 [25]。以 PPG-13-癸基十四醇聚醚 -24 为核心构建微乳液体系（两亲分子自组装形成纳米分散结构），既保留了四氢姜黄素的抗氧化、美白功效，又显著提升了其水溶性与透皮滞留量（8 h 皮内滞留量为传统脂质体的 2.32 倍），实现了难溶活性成分的增溶、保护与促渗一体化设计 [26]。此外，利用碳水化合物基凝胶因子自组装构建的超分子油凝胶体系，既保留了维生素 E 的活性，又实现了 pH 响应性控释，完成了活性成分与智能递送载体的功能集成 [27]。

## 2 超分子体系的表征

超分子体系是一种新的多组分复合物，其不同于简单的物理混合物，因此结构鉴定是其研发过程中不可或缺的一步。从化妆品配方实践的角度来看，超分子体系的表征可分为两个阶段：第一阶段为原料级的常规固态表征，包括 X 射线衍射技术（XRD）、热分析技术、显微技术和光谱技术等 [28]，用于确认超分子组装体的形成；第二阶段延伸至配方级评价，重点关注活性成分在水基或乳基基质中的分散均匀性、加速储存条件下的长期理化稳定性，以及与配方其他组分的相容性。这些问题在实际化妆品产品开发中至关重要，但在现有文献中受到的系统性关注相对有限。本章首先综述超分子化妆品体系中常用的表征工具，继而讨论面向化妆品应用场景的配方级评价方法。

### 2.1 X 射线衍射技术

X 射线衍射技术主要包括 X 射线单晶衍射技术（X-ray single crystal diffraction， XRSD）和 X 射线粉末衍射技术（X-ray powder diffraction，XRPD）。前者常常作为表征超分子复合物结构最权威的方法，可以确定晶体的分子组成、晶胞参数以及空间结构等信息 [29]。而后者 XRPD 是判定有无新晶体的重要依据。晶体的每种物相都包含一组独一无二的衍射谱，与原化合物相比，共晶体的 XPRD 峰形会产生明显的的偏移，并伴随着生成一个或几个新的强衍射峰，从而证明形成了新的物相。需要指出的是，XRD 主要适用于原料粉体阶段的表征。在实际化妆品配方（多为水基或乳基体系）中，超分子组装体能否维持其晶体完整性，还需结合复杂基质中的稳定性数据加以综合判断；对于包合物及载体体系而言，活性成分在成品中的分散状态而非其晶型本身，才是决定实际功效与货架期表现的关键 [30]。

### 2.2 热分析技术

热分析技术是研究超分子体系热性质与结构特征的有效手段，主要包括热失重分析（TG）和差示扫描量热法（DSC），二者常在动态温度程序下联用，以全面评估物质的热行为及其结构变化 [15]。TG 通过记录样品质量随温度的变化，揭示其分解过程、转晶温度及热稳定性，适用于判断共晶、包合物等超分子体系的组成与稳定性 [31]；DSC 则通过测量样品与参比物之间的能量差，精准分析相变、熔融、结晶及包合过程中伴随的热效应，具有高灵敏度、宽温区与高分辨率的特点，能够有效区分物理混合物与超分子复合物，并识别溶剂分子存在与否、晶型转变等关键信息 [32]。DSC-TG 联用技术可同步获取样品的质量变化与热力学特性，通过对应分析 TG 测试曲线和 DSC 测试曲线，能够准确归属不同温度区间内的物理化学过程（如分解、熔融、氧化等），并排除因样品质量、升温速率等因素引起的干扰，从而为超分子共晶、包合体系的结构鉴定、热稳定性评估及化妆品配方中的相容性设计提供可靠的实验依据 [33]。DSC-TG 获得的热稳定性数据还可为化妆品加工温度窗口的确定提供参考——化妆品乳化与混合操作通常在 80℃以下进行。对于包合物体系，DSC 还可用于评价配方中其他组分与活性成分对环糊精空腔的竞争包合作用 [34]。

### 2.3 显微技术

主要包括光学显微镜（Optical Microscopy，OM）、扫描电子显微镜（scanning elect rons microscopy，SEM），通过获得的形貌分析物体的几何形状和大小，组织结果及分布，表面状况等 [35]。光学显微镜可以观察晶体的形貌和对晶体的粒度进行测量 [36]。SEM 不仅可以观察晶体的形状，而且可以观察到晶体的表观形貌。超分子复合物作为不同于单一组分的新晶体，其形貌、几何形状及大小常常会发生较明显的变化 [37]。除了用于原料形貌分析外，显微镜技术——尤其是偏光显微镜，已被应用于监测活性成分在化妆品成品配方中的析晶或聚集行为，这是产品货架期内物理稳定性的关键评价指标之一。例如，在防晒配方研究中，偏光显微镜被用于观察阿伏苯宗在乳化体系中的结晶行为，直接评估配方稳定性 [30]。



中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 102 2026/9/29 15:32:41

### 2.4 光谱技术

紫外-可见吸收光谱是探究分子水平聚集行为的有效工具，并用于判断多组分体系是发生共组装还是自组装[13]。在自组装体系中，光谱通常表现为各组分光谱的简单叠加；而在共组装体系中，因分子间相互作用引起的能级变化会导致吸收光谱发生显著改变[38]。荧光光谱则通过监测能量转移效应来揭示分子间的近距离接触，从而为共组装过程提供辅助证明。傅里叶变换红外光谱（FT-IR）能够直观地研究分子间作用力（如氢键），并通过新峰的出现或特征峰的位移对共组装体系进行定性与定量分析[39]。对于红外光谱不敏感的对称性基团（如N=N、C-C），拉曼光谱可作为补充手段，通过检测化学键振动能级变化引起的拉曼峰偏移来解析分子结构，通过拉曼光谱定性分析物质分子结构的依据在于物质分子化学键的不同，这将会使得分子的振动形式发生变化，振动能级间的能量亦会发生变化，会反映在拉曼峰的偏移上。此外，核磁共振光谱中分子在从自由状态到组装成纤维网络的过程中，其共振信号会减弱甚至消失，为自组装过程提供了独特的监测视角[40]。例如，核磁共振光谱能够直观地揭示包合物的几何构型、客体在空腔中的具体位置以及主客体相互作用的动态过程，也可用于实时观测凝胶化动力学过程[41]。多种光谱技术的联用构成了一个强大的分析体系，能够从不同维度共同揭示超分子组装体的结构信息、相互作用本质及动态形成过程[42]。需要指出的是，FT-IR和NMR虽能在分子层面有效揭示分子间相互作用，但无法直接预测超分子体系在复杂配方环境中的行为。近年来的研究已开始将光谱表征与密度泛函理论（DFT）等计算方法相结合，以更好地理解超分子组装体在水基或乳基体系中的结构稳定性。例如，Sowmiapratha等[16]在对肉桂酸衍生物/β-环糊精包合物的研究中，同时采用了实验光谱（FT-IR、1H NMR、UV-Vis）和DFT计算来表征包合物结构，并确定其结合常数；Wang等[43]在对咖啡酸-苦参碱超分子共晶的研究中，也结合了DFT计算、分子对接和分子动力学模拟来系统研究该超分子体系的结构-活性关系。这些研究表明，光谱与计算方法的联用为理解超分子体系在真实配方中的行为提供了更可靠的理论基础。

### 2.5 面向化妆品应用的配方级评价

除上述固态表征方法外，超分子体系在实际化妆品配方中的评价还需针对水基或乳基基质的特点采用专门的方法。

分散均匀性与粒径分布方面，动态光散射（DLS）及显微镜观察常用于评估超分子组装体在配方基质中是否均匀分散[44]。活性成分的聚集或结晶通常表现为可见颗粒或浊度变化，直接影响产品质量及消费者接受度。

长期理化稳定性方面，加速稳定性试验（高温、低温、冻融循环及光照）结合高效液相色谱（HPLC）跟踪活性物含量变化，是评价超分子化妆品体系货架期表现的必要手段。对于包合物，不同储存条件下主客体结构的稳定性决定了其对不稳定活性成分的保护效果。例如，环糊精-四氢姜黄素包合物经生物矿化杂化微球包埋后，在不同温度下储存四周仍保持90%的初始浓度，展示了超分子包合与配方级稳定化策略相结合的可行性[45]。

与制剂组分的相容性方面，超分子体系的加入可能影响乳液或凝胶的流变特性与微观结构。加入前后的流变学测量与粒径分析可揭示其与乳化剂、增稠剂或防腐剂的潜在不相容性。环糊精体系的研究表明，某些活性物的包合可能与配方中其他组分竞争环糊精空腔，影响体系的整体稳定性。例如，PEG改性硅油/α-环糊精超分子复合物对W/O乳液的稳定化作用已通过流变学测量及界面层黏度分析得到表征，证实超分子复合物在油水界面的形成可显著增强乳液的高温稳定性[46]。

需要承认的是，上述配方级评价方法大多借鉴自常规化妆品稳定性测试方案，而非专门针对超分子体系开发。建立面向超分子化妆品配方的专用评价框架仍是一个有待解决的开阔性问题，值得进一步研究。

## 3 超分子技术在化妆品领域的应用方向

在化妆品领域，超分子技术价值主要体现在三个递进层面，这些层面与产品开发链条相契合：一是原料级改性（解决活性成分的溶解性、稳定性及刺激性等问题）；二是配方级递送（提升化妆品基质中的分散均匀性、皮肤渗透能力及控释性能等）；三是绿色智能开发（推动产品向智能化、绿色化方向转型升级）。

### 3.1 原料级改性

超分子技术在化妆品原料性能改善方面展现出强大的应用潜力，为解决多种活性成分在配方中面临的溶解性低、稳定性差、生物利用度不足等共性难题提供了创新路径。例如，经超临界微通道组装制得的维生素C-烟酰胺共晶可有效延缓加速储存条件下的氧化降解[3]；甜菜碱-壬二酸共晶可提高水溶性，同时降低敏感肌应用中的表皮刺激性[47]；通过悬浮结晶法制备的橙皮苷-胡椒碱共晶可使橙皮苷溶解度提升数十倍，可消除透明精华液配方中的浑浊现象[48]。超分子低共熔溶剂（DESs）提供了另一种改性策



中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 103 2026/9/29 15:32:41

略，即无需外加有机溶剂即可将不溶性或刺激性固体活性物转化为均质液态原料。L-肉碱与D-泛醇复配可构建室温透明低共熔混合物，消除传统泛醇制剂的黏腻肤感[11]；脯氨酸基DES体系可保护木瓜蛋白酶和菠萝蛋白酶免受热变性，储存一个月后仍保留85%以上的酶活性[49]。环糊精基包合物被广泛用于优化疏水性小分子的光稳定性并降低其皮肤刺激性。羟丙基-β-环糊精可使白藜芦醇在长时间紫外照射下维持约90%的抗氧化活性[14]；漆黄素-β-环糊精包合物可使水溶性提升超过120倍[50]；肉桂酸酯衍生物的β-环糊精包封可显著缓解皮肤刺痛及红斑反应[16]。由两亲分子组装形成的超分子载体可形成隔离的纳米/微米结构，使亲脂性活性物免受光照和氧化。羟基酪醇脂质体在储存28天后仍保持91.1%的抗氧化活性[20]；碳水化合物基油凝胶剂可防止维生素E的氧化酸败[25]。这些研究共同表明，超分子技术已成为推动化妆品原料向高效、稳定、绿色方向升级的关键工具之一。

### 3.2 配方级递送

除原料改性外，超分子技术在使活性成分到达其皮肤靶点并发挥预期生物效应方面同样发挥着重要作用[17]。这一功能的实现依赖于配方体系设计，而非原料性质本身。

超分子共晶可实现多种活性成分的同步协同递送，从而增强护肤效果。维生素C-烟酰胺共晶具有双通路抑制黑色素作用，透皮渗透能力显著高于物理混合物[3]；苦参碱-水杨酸共晶兼具抗菌与去角质协同功效，其抗痤疮丙酸杆菌能力为水杨酸单用时的三倍[47]。环糊精包合物可延长小分子活性物在皮肤中的驻留时间并实现缓释。大环环糊精（CD26）包封可显著提高α-生育酚的皮内滞留量[51]，青藤碱-环糊精复合物可缓慢释放抗炎物质，缓解酸性敏感皮肤的泛红反应[12]。超分子载体平台是智能递送系统设计中最活跃的领域。四氢姜黄素微乳液的皮内滞留量为常规脂质体的2.32倍[26]，商业化PHYTOSOME多酚复合物可大幅提高植物活性物的生物利用度[52]，双重超分子体系可将EGCG皮肤渗透性提升3.51倍，同时保留其抗氧化与抗炎活性[53]。这些系统性研究共同表明，超分子技术已成为实现化妆品核心功效强化与功能集成的重要赋能路径。

### 3.3 绿色智能开发

超分子技术正驱动化妆品行业向智能化与绿色可持续方向转型，其核心在于通过分子水平的精准设计，实现产品功能与环境效益的协同提升。在绿色化方面，超分子溶剂(SUPRAS)技术尤为突出，它能够以辛酸、癸酸等生物来源的两亲分子自组装形成绿色、高效且可回收的萃取系统，成功应用于从火棘果、橄榄加工废液等天然原料中定向提取羟基酪醇、类胡萝卜素等高价值活性成分，不仅大幅减少了化学溶剂的使用与废弃物排放，也保障了提取物的天然性与高效能，契合纯净美妆的可持续发展理念。在智能化前沿，超分子技术通过构建刺激响应型载体实现了活性成分的精准控释：例如，Ziyi等[54]基于葫芦脲与蒽修饰纤维素的主客体相互作用，构建的具备“双重智能控释”的超分子水凝胶微胶囊体系，既可响应竞争性分子触发快速释放，也可通过紫外光照诱导蒽二聚化，将动态非共价网络转化为共价结构，从而主动“锁紧”囊壁，延缓大分子活性物的渗透速率。且基于表面活性剂自组装的超分子策略同样展现出卓越的多重响应能力。如Hao等[55]利用环境友好的硬脂酸钠与十六烷基三甲基溴化铵构建的温度/pH/$CO_2$三响应水凝胶体系在生理温度范围内具有灵敏的热响应性，其凝胶-溶胶转变可随体温变化被精准触发。同时，体系能响应皮肤表面pH变化或空气中$CO_2$，实现粘度和结构的可逆调控，零剪切粘度变化可达七个数量级。分子动力学模拟表明，温度升高或pH/$CO_2$引起的质子化作用会削弱表面活性剂间的静电与疏水作用，导致层状晶核破裂，从而引发凝胶瓦解。这些研究共同表明，超分子化学为化妆品活性物的精准递送提供了多样化解决方案，超分子技术已成为推动化妆品实现“绿色制造”与“智能功能”深度融合的关键创新路径。

## 4 总结与展望

本综述系统总结了化妆品领域中四种代表性超分子体系的研究进展，即：超分子共晶、超分子溶剂、超分子包合物及超分子载体。这些超分子体系通过分子识别以及由氢键、范德华力、π-π堆积等非共价相互作用驱动的可控自组装过程，能够有效提升活性成分的溶解度、化学稳定性及经皮渗透性，其应用范围广泛，可涵盖原料改性、配方级递送及绿色智能开发等多个方面。

尽管超分子化学领域已取得诸多令人振奋的实验室研究成果，但其在大规模工业转化过程中仍面临多重实际挑战，包括规模化生产、长期制剂稳定性以及监管认可等问题。未来的研究工作应优先解决这些转化瓶颈，同时着力开发具备刺激响应性释放能力的智能递送系统，并构建符合绿色化学原则的可持续生产工艺。超分子化学与纳米技术、合成生物学及人工智能的持续深度融合，有望进一步加速超分子化妆品技术的商业化进程，并拓展下一代护肤品的设计空间。总体而言，超分子化学正有望成为未来高性能、智能化及可持续化妆品研发的核心赋能平台。



中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 104 2026/9/29 15:32:41

## 参考文献


[1]Lehn J M. Cryptates: the chemistry of macropolycyclic inclusion complexes[J]. Accounts of Chemical Research, 1978, 11(2): 49−57.

[2]周玉凤 . 超分子材料改性有机聚合物整体柱的制备及应用研究 [D]. 吉林大学 ,2017.

[3]哈尔滨敷尔佳科技股份有限公司,深圳杉海创新技术有限公司 . 一种超分子VC烟酰胺共晶及其制备方法与应用 :CN202310617091.2[P]. 2025−03−21.

[4]庞博文 . 基于共结晶和低共熔溶剂载药策略提高壬二酸溶解度和渗透性的研究 [D]. 天津理工大学 ,2024.

[5]谢一丹 , 夏树伟 . 三亚苯超分子共晶的制备及其分子间作用的研究 [J]. 中国海洋大学学报 ( 自然科学版 ),2025,55(5):113−117.

[6]王春 , 翟俊峰 , 黄雪梅 , 等 . 基于超分子溶剂分散液液微萃取技术测定食品接触材料中8种邻苯二甲酸酯的迁移量 [J]. 质谱学报 ,2019,40(1):21−31.

[7]Celia S, Ana B, Soledad R. Tailoring composition and nanostructures in supramolecular solvents: Impact on the extraction efficiency of polyphenols from vegetal biomass[J]. Separation and Purification Technology,2022:292.

[8]贺博洋 , 吴金金 , 姜晴宇 , 等 . 超分子溶剂提取的火棘果提取液体外抗衰老及美白活性研究 [J]. 山东化工 ,2025,54(5):14−18.

[9]Costa C, Marques M, Martins A M, et al. Upcycling spent coffee grounds into bioactive extracts using new natural deep eutectic systems for sustainable topical formulations [J].ACS Sustainable Chem. Eng. 2025, 13:915.

[10]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护肤性能研究 [J/OL]. 轻工学报 ,1−24[2026−06−06].https://link.cnki.net/urlid/41.1437.TS.20260421.1317.002.

[11]Morteza M, Rouhollah K, Saeed B, et al.Optimization of supramolecular solvent microextraction prior tographite furnace atomic absorption spectrometry for total seleniumdetermination in food and environmental samples[J].Journal of Molecular Liquids,2017,232:243−250.

[12]孔唯一 , 李荣婷 , 袁焕祥 . 纳米包埋技术在化妆品功效原料制剂中的应用 [C]// 中国抗衰老促进会化妆品产业分会 ,CBE 杭州国际美容博览会 , 中国科教电影电视协会教育委员会 , 北京国妆科创自然科学研究院 . 第二届中国抗衰老化妆品学术论坛论文集 . 北京工商大学轻工科学与工程学院 , 杭州智元研究院 ,2024:19−23.

[13]周嵘 .4−(N,N− 二甲氨基 )− 苯甲酸 −2'− 乙基己基酯与环糊精超分子体系研究 [D]. 西北师范大学 ,2007.

[14]李世德 . 白藜芦醇 / 环糊精包合物的制备及其应用研究 [D]. 广东工业大学 ,2025.

[15]姜兴粲 , 李冰 , 张继瑜 . 环糊精包合物超分子体系的制备与表征研究进展 [J]. 动物医学进展 ,2021,42(3):96−101.

[16]Sowmiapratha P, Esakkimuthu S, Kannan V, et al.Synthesis, computational, and spectral investigation of cinnamatederivatives/B−cyclodextrin inclusion complexes studies forbiological applications[J].Journal of Molecular Structure,2025,1327:140970.

[17]黄佳 , 马晓钰 , 鲁朝刚 , 等 . 超分子技术在化妆品中的应用与展望 [J]. 日用化学品科学 ,2025,48(2):84−88.

[18]王晗宁 , 蒋丽刚 , 毕永贤 , 等 . 化妆品载体技术及其最新研究进展 [J]. 香料香精化妆品 ,2018,(5):79−84.

[19]刘曦 , 武娟霞 , 王迷娟 , 等 . 化妆品递送系统研究进展 —— 药物新剂型与新技术在化妆品中的应用 [J]. 香料香精化妆品 ,2021,(6):99−105.

[20]王漪 , 李丽 , 邵浩凡 , 等 . 分子组装技术在化妆品天然功效原料改性方面的应用研究进展 ( 英文 )[J]. 化学通报 ( 中英文 ),2025,88(9):974−982.

[21]杨佩 , 唐嘉雯 , 李雪竹 . 化妆品新型载体技术的应用进展 [J]. 日用化学品科学 ,2021,44(2):34−39.

[22]Ma Y,Wang J,Dong Z,et al. A novel organogel of breviscapine via supramolecular self−assembly in DCM[J]. Journal of Molecular Liquids,2024,397.

[23]王毓江 , 唐黎明 , 于建 . 基于低分子量凝胶因子的超分子水凝胶 : 从结构到功能 [J]. 化学进展 ,2009,21(6):1312−1324.

[24]Letícia K, Patrícia M. B. G. M C, Wanderley P. O. Development and Efficacy Evaluation of Innovative Cosmetic Formulations with Caryocar brasiliense Fruit Pulp Oil Encapsulated in Freeze−Dried Liposomes[J]. Pharmaceutics,2024,16(5):595.

[25]郭向男 . 油酸 ( 钠 )−− 羧甲基纤维素钠复合囊泡的制备及其在包封烟酰胺中的应用 [D]. 江苏 : 扬州大学 ,2021.

[26]高成龙 . 四氢姜黄素微乳液的制备及性能表征 [J]. 上海轻工业 ,2025(4):110−112.

[27]Fragal E. H., Metilli L., Pignon F., et al. A scalable and eco−friendly carbohydrate−based oleogelator for vitamin E controlled delivery[J]. RSC Advances,2025,3(4):2023.

[28]旷春桃 , 李湘洲 , 韩艳利 , 等 . 山苍子油与 β− 环糊精的超分子作用及其理化性质 [J]. 现代食品科技 ,2014,30(9):13−19.

[29]马乐伟 , 杜崴 , 赵春顺 . 药物晶型定量分析方法的研究进展 [J]. 药学学报 , 2011,46(8):896−903.

[30]Goral O, Zukowska G Z, Zero E, et al. Understanding avobenzone crystallization in sunscreen formulations: Role of metal oxide−driven nucleation and stabilization strategies[J]. Crystals, 2024,14(7):663.

[31]Buanz A., Parkinson G., Gaisford S. Characterization of Carbamazepine−Nicatinamide Cocrystal Polymorphs with Rapid Heating DSC and XRPD[J]. Cryst. Growth Des.,2011,11(4):1177−1181.

[32]Arenas−García J.I., Herrera−Ruiz D., Mondragón−Vásquez K., et al. Co−Crystals of Active Pharmaceutical Ingredients − Acetazolamide[J]. Cryst. Growth Des., 2010,10(8):3732−3742.

[33]Sanphui P., Mishra M.K., Ramamurty U., et al. Tuning Mechanical Properties of Pharmaceutical Crystals with Multicomponent Crystals: Voriconazole as a Case Study[J]. Mol. Pharm.,2015,12(3):889−897.

[34]饶义琴 , 李姝璇 , 李彭宇 , 等 . 提高环糊精包合物中药物渗透性的竞争剂体外筛选方法的建立 [J]. 药学学报 ,2019,54(1):61−65.

[35]Chadha K., Karan M., Bhalla Y., et al. Cocrystals of Hesperetin: Structural, Pharmacokinetic, and Pharmacodynamic Evaluation[J]. Cryst. Growth. Des., 2017,17(5):2386−2405.

[36]马坤 . 药物共晶的筛选技术及热力学研究进展 [J]. 药学进展 ,2010,34(12): 529−534.




中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 105 2026/9/29 15:32:41

[37]Nugrahani I., Sukmadjaja A., Soewandhi S., et al. The Antibiotic Potency of Amoxicillin−Clavulanate Co−Crystal[J]. Int. J. Pharmacol., 2007, 3(6): 475−481.

[38]Das A, Ghosh S.A generalized supramolecular strategy for self−sorled assembly between donor and acceptor gelators[J].Chem Commun,2011,47(31):8922−8924.

[39]Xing P, Chu X, Li S, et al.Switchable and orthogonal self−assemblies of anisotropic fibers[J].New J Chem,2013,37(12):3949−3955.

[40]Karabacak M., Karagöz D., Kurt M. Experimental (FT−IR and FT−Raman spectra) and Theoretical (ab initio HF, DFT) Study of 2−chloro−5−methylaniline[J]. J. Mol. Struct, 2009, 920(1): 480−480.

[41]刘小娟.沙库必曲缬沙坦钠超分子复合物共结晶过程的研究 [D].华南理工大学,2020.

[42]郝骏强,张智欣,李雨恒,等.超分子溶剂的制备与表征及其萃取牛奶中磺胺类抗生素的性能分析 [J].分析化学,2025,53(6):976−986.

[43]Wang ZY, Liu TQ, Lu BB, et al. Supramolecular interactions: A simple and effective strategy to enhance the stability and skincare benefits of caffeic acid[J]. Journal of Molecular Structure, 2025, 1348: 143558.

[44]Kamo H, Mori T, Yoshida K. Coacervate of a commercial non−sulfate shampoo: Preliminary studies of their structure via turbidity, dynamic light scattering, ζ−potential, fluorescence, rheology, small−angle X−ray scattering and microscopy measurements[J]. Applied Cosmetic Science and Technology, 2025, 1(2): 233−244.

[45]Hwang ET, Lee S, Kim JS, et al. Highly stable and fine−textured hybrid microspheres for entrapment of cosmetic active ingredients[J]. ACS Omega, 2020, 5(45): 29577−29584.

[46]Toyoda N, Sawada H, Yamamoto K. W/O emulsions stabilized by supramolecular complexes oriented at the oil−water interface[J]. Journal of Society of Cosmetic Chemists of Japan, 2024, 58(2): 129−138.

[47]Mi W, Zhenyuan W, Jichuan Z, et al.A matrine−based supramolecular ionic salt that enhances the watersolubility, transdermal delivery, and bioactivity of salicylic acid[J].Chemical Engineering Journal,2023,468:143480.

[48]董柴玲.又一前沿技术站上风口,中国原料加速崛起 [J].中国化妆品,2023,(4):68−69.

[49]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/OL].香料香精化妆品,1−11[2025−10−06].

[50]毛善勇,李向阳,李刚.漆黄素与环糊精的相互作用研究 [J].河南工业大学学报 (自然科学版),2019,40(3):86−89.

[51]Khanittha K, Bodee N, Kuakarun K, et al.Encapsulation of a−tocopherol in large−ring cyclodextrin containing26 α−D−glucopyranose units: A molecular dynamics study[J].Journal of Molecular Liquids,2021,339:116802.

[52]Ajay S, Mona S, Mohan S M R, et al.Supramolecular phospholipids−polyphenolics interactions: ThePHYTOSOME® strategy to improve the bioavailability of phytochemicals[J]. Fitoterapia,2010,81:306−314.

[53]Beibei L, Yuanyuan F, Youting L, et al.Preparation of dual supramolecular EGCG−carboxymethyl chitosan:Structure, antioxidant and anti−inflammatory properties[J].International Journal of Biological Macromolecules,2025,294:139523.

[54]Ziyi Y, Jing Z, Roger J. C, et al.Supramolecular hydrogel microcapsules viacucurbit[8]uril host−guest interactions withtriggered and UV−controlled molecularpermeability[J]. ChemicalScience,2015,6:4929.

[55]Hao L S,Yuan C, Zhong H L, et al.Triple−stimuli−responsive hydrogels based on an aqueous mixed sodiumstearate and cetyltrimethylammonium bromide system[J].Journal of Molecular Liquids,2022,364:120010.

# Supramolecular Technology and its Application Research in the Field of Cosmetics

Huang Chun-yan[1], Wang Pu[2], Xu Zhi-wen[2], Xiong Qing-an[1], Yu Shu-yan[1]*

(1.School of Materials and Chemical Engineering, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou, Henan 450001;
2.Shanghai Youren Biotechnology Co., Ltd., Shanghai 200030, China)

**Abstract:** Supramolecular chemistry realizes the ordered assembly and functional regulation of molecules through non-covalent intermolecular interactions. It provides an innovative solution to the common technical bottlenecks in the cosmetics industry, such as poor water solubility, low chemical stability, insufficient transdermal absorption efficiency and high skin irritation of active ingredients. To address these challenges, a variety of supramolecular technologies have been developed based on differentiated molecular recognition and self-assembly modes. From the perspective of application logic, these technologies can be categorized into three progressive levels: raw material modification, formulation-level delivery, and green intelligent development. Within this framework, this review systematically summarizes four representative supramolecular platforms widely employed in cosmetics, namely supramolecular cocrystals, supramolecular solvents, supramolecular inclusion complexes, and supramolecular carriers. The action mechanisms, preparation strategies, characterization methods and application progress in the cosmetics field are emphatically expounded. The challenges in current technological transformation are summarized, and the future development trends are prospected. It is expected to provide theoretical support and technical reference for the innovative application and efficient implementation of supramolecular technology in the cosmetics industry.

**Keywords:** **supramolecular chemistry; cosmetics; preparation strategies; characterization methods**



中国日化科技26年2期第3卷第3期.indd 106 2026/9/29 15:32:41