(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0018898
(43) 공개일자 2014년02월13일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 319/06 (2006.01) *C07D 405/14* (2006.01)
A61K 8/49 (2006.01) *A61P 17/14* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(21) 출원번호 10-2013-7023973
(22) 출원일자(국제) 2012년01월16일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2013년09월10일
(86) 국제출원번호 PCT/EP2012/000155
(87) 국제공개번호 WO 2012/107158
국제공개일자 2012년08월16일
(30) 우선권주장
10 2011 010 841.6 2011년02월10일 독일(DE)

(71) 출원인
메르크 파텐트 게엠베하
독일 64293 다름스타트 프랑크푸르터 스트라세 250
(72) 발명자
루돌프 토마스
독일 64291 다름슈타트 린덴벡 45
뷔흘레 필립
독일 64291 다름슈타트 메쎌러 슈트라쎄 72
로쓰코프 랄프
독일 64839 뮌슈터 트라우테나우어슈트라쎄 12
(74) 대리인
특허법인코리아나

전체 청구항 수 : 총 16 항

(54) 발명의 명칭 **1,3-디옥산-5-온 화합물**

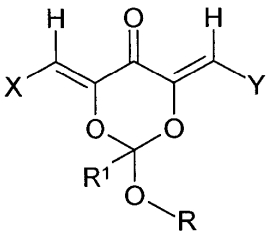
(57) 요 약

본 발명은 특정 1,3-디옥산-5-온 화합물, 이의 제조 방법, 및 유기 전계발광 소자 (OLED) 또는 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC) 를 위한 형광성 방사체 또는 염료로서의 용도, 및 상응하는 전자 소자에 관한 것이다.

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 I 의 화합물 및 이의 염, 호변이성체, 입체이성체, 및 이의 모든 비율로의 혼합물 및/또는 용매화물:



I

[식 중,

R 은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

R^1 은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

X 및 Y 각각은, 서로 독립적으로, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기, 또는 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 및/또는 헤테로아릴기의 군을 나타내고, 상기 군에서 아릴 및/또는 헤테로아릴기는 각각, 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, 공액된 이중 결합, C 원자 또는 화학식 $(CHR^4)_n$-$(Het)_o$-$(CHR^4)_p$ 의 단위에 의해 단일 또는 다수로 연결되고,

R^2 는 각 경우에서, 각 경우 서로 독립적으로, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH_2, NH알킬, $N(알킬)_2$, $N(아릴)_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, $N(시클로알킬)_2$, CN, NO_2, $Si(알킬)_3$, $B(OR^3)_2$, $C(O)R^3$, $P(O)(R^3)_2$, $S(O)R^3$, $S(O)_2R^3$, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고,

R^3 은 각 경우에서, 서로 독립적으로, H, D, OH, 알킬, 아릴, 시클로알킬, O-알킬, O-아릴 또는 O-시클로알킬을 나타내고,

R^4 는 각 경우에서, 각 경우 서로 독립적으로, H, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH_2, NH알킬, $N(알킬)_2$, $N(아릴)_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, $N(시클로알킬)_2$, CN, NO_2, $Si(알킬)_3$, $B(OR^3)_2$, $C(O)R^3$, $C(O)_2R^3$, $P(O)(R^3)_2$, $S(O)R^3$, $S(O)_2R^3$, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고,

알킬은 할로겐으로 부분 또는 완전 치환될 수 있는 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

시클로알킬은 탄소수 3 내지 7 의 시클릭 포화 또는 부분 불포화 시클로알킬기를 나타내고,

아릴은 알킬, O-알킬, $N(알킬)_2$ 또는 Hal 로 일치환 또는 다치환될 수 있는 탄소수 6 내지 10 의 아릴기를 나타내고,

Hal 은 F, Cl, Br 또는 I 를 나타내고,

Het 은 O, S, -N=N-, NH 또는 NR^2 를 나타내고,

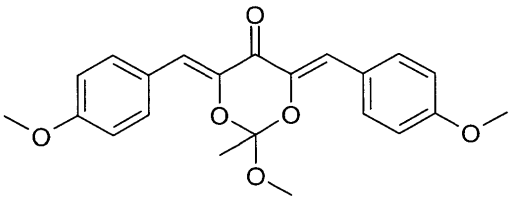
n 은 0 내지 5 의 정수를 나타내고,

o 는 0 또는 1 을 나타내고,

p 는 0 내지 5 의 정수를 나타내고,

n+o+p 는 적어도 숫자 1 을 나타냄],

단 하기 화합물은 배재함,



.

청구항 2

제 1 항에 있어서, R^1 이 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화학식 I 의 화합물.

청구항 3

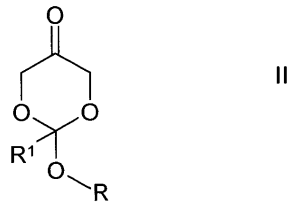
제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, R 이 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화학식 I 의 화합물.

청구항 4

제 1 항 내지 제 3 항 중 어느 한 항에 있어서, X 및 Y 각각은, 서로 독립적으로, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 18 개의 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기를 나타내는 것을 특징으로 하는 화학식 I 의 화합물.

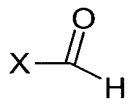
청구항 5

화학식 II 의 화합물을 하기 화학식 IIIa 및/또는 IIIb 의 화합물과 반응시키는 것을 특징으로 하는 제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 화학식 I 의 화합물의 제조 방법:

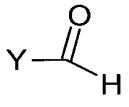


II

[식 중, R 및 R^1 은 제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 나타낸 의미를 가짐],



IIIa



IIIb

[식 중, X 및 Y 는 제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 나타낸 의미를 가짐].

청구항 6

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화학식 I 의 화합물과 중합체, 올리고머 또는 덴드리머와의 연결 부위가 화학식 I 의 화합물의 하나 이상의 라디칼 R^2 의 위치에 있는 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 함유하는 공액된, 부분 공액된 또는 비공액된 중합체, 올리고머 또는 덴드리머.

청구항 7

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 제제.

청구항 8

제 7 항에 있어서, 화장, 약학, 피부과용 제제 또는 가정용품에 적합한 하나 이상의 담체를 포함하는 제제.

청구항 9

제 7 항에 있어서, 호스트 물질, 매트릭스 물질, 전자-수송 물질, 전자-주입 물질, 정공-수송 물질, 정공-주입 물질, 전자-차단 물질, 정공-차단 물질, 엑시톤-차단 물질 및/또는 방사체의 군으로부터 선택되는 하나 이상의 더욱 유기적으로 관능적인 물질을 포함하는 제제.

청구항 10

하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 화장, 약학, 피부과용 제제 또는 가정용품에 적합한 하나 이상의 담체 및 임의로 보조제 및/또는 충전제와 혼합, 특히 분산 및/또는 유화 및/또는 용해시키는 제 8 항에 따른 제제의 제조 방법.

청구항 11

염료로서의 제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 화학식 I 의 화합물의 용도.

청구항 12

빛에 의한 광노화로부터 피부 및 모발을 보호하기 위한, 제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 화학식 I 의 화합물의 용도.

청구항 13

전자 소자에서의 제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 화학식 I 의 화합물의 용도.

청구항 14

제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 전자 소자.

청구항 15

제 14 항에 있어서, 유기 전계발광 소자, 유기 집적 회로, 유기 전계효과 트랜지스터, 유기박막 트랜지스터, 유기 발광 트랜지스터, 유기 태양 전지, 유기 광 검출기, 유기 광수용기, 유기 전계-켄치 소자, 발광 전기-화학 전지 또는 유기 레이저 다이오드인 전자 소자.

청구항 16

제 15 항에 있어서, 제 1 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 따른 하나 이상의 화학식 I 의 화합물이 형광성 방사체로서 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광 소자.

명 세 서

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 특정 1,3-디옥산-5-온 화합물, 이의 제조 방법, 및 유기 전계발광 소자 (OLED) 또는 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC) 를 위한 형광성 방사체 또는 염료로서의 용도, 및 상응하는 전자 소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 다수의 염료는 현재 예를 들어, 피부, 모발, 손톱 또는 직물과 같은 매트릭스의 염색용으로 알려져 있다. 직접 염료는, 예를 들어, 매트릭스로 옮겨지고/지거나 매트릭스와 화학적 공유결합을 형성할 수 있다. 다른

염색 공정에서, 염료의 용해성 전구체는 염색 공정 동안 매트릭스 상의 염료로 전환될 수 있다. 또한, 예를 들어, 분산 염색의 경우, 약간 용해성 또는 불용성인 염료는 상기 유형의 분산액으로 매트릭스를 처리하는 동안 매트릭스로 분산되고 가능하게는 매트릭스와 공유 결합을 형성할 수 있다. 따라서 매트릭스의 염색은 상이한 방식으로 일어나고 결합 특징 및 또한 색상 결과에 대해 상이한 결과를 제공할 수 있다.

[0003] 여러 염료가 2010년 8월 9일 규정 (BGBl. I p. 1146) 에 의해 마지막으로 보정되어, 식품 또는 화장 조성물의 염색용으로 승인되었다. 상기 용도로 승인된 친유성 염료의 수는 매우 제한적이다. 2 개의 염료 C.I. 75300 (E100, 커큐민) 및 C.I. 40800 (E160a, 베타-카로틴) 이 예로서 언급될 수 있다. 상기 염료 둘다 만족스럽지 못한 안정성의 결함이 있고, 예를 들어, UV 또는 가시광선, pH 의 변화, 열 또는 산화에 의해 분해될 수 있다.

[0004] 특히 합성 염료의 사용시, 추가적으로 인간 영역의 적용에서 내성이 낮을 수수 있다.

[0005] 따라서, 그 중에서도, 용인된, 특히 피부-용인되면서, 염색될 기질에 대한 높은 직접성을 가지며, 고도의 빛, 열, pH 및 산화 안정성에 의해 색이 구별되는 염료의 요구가 지속적으로 있어왔다.

발명의 내용

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

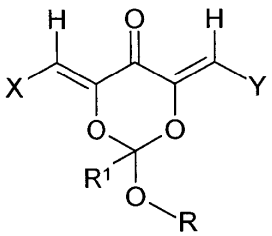
[0006] 따라서, 본 발명은 매우 광범위한 기질의 염색을 위한 개선된 특성을 갖는 대안적인 염료를 제공하거나 가시 광선에 의한 광노화로부터 피부 및 모발을 보호할 수 있는 대안적인 화합물을 제조하는 문제에 관련된다.

[0007] 상기 문제는 본 발명에 따른 독립항의 요지에 의해 해결된다. 유리한 구현예가 종속항의 요지이다.

[0008] 놀랍게도, 하술되는 화학식 I 의 1,3-디옥산-5-온 화합물이 원하는 특성 프로파일을 갖는 염료인 것을 밝혀내었다. 게다가 하술되는 화학식 I 의 화합물이 또한 전자 소자, 특히 유기 전계발광 소자 (OLED) 또는 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC) 에 사용하는데 적합한 형광성 방사체인 것을 밝혀내었다.

[0009] 게다가 하술되는 화학식 I 의 화합물이 빛에 의한 광노화로부터 피부 및 모발의 보호, 특히 가시 광선에 의해 초래되는 광노화로부터의 보호에 이용될 수 있음을 밝혀내었다.

[0010] 따라서 본 발명은 하기 화학식 I 의 화합물 및 이의 염, 호변이성체, 입체이성체, 및 이의 모든 비율로의 혼합물 및/또는 용매화물에 관한 것이다:



I

[0011]

[0012] [식 중,

[0013] R 은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

[0014] R^1 은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

[0015] X 및 Y 각각은, 서로 독립적으로, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기, 또는 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 및/또는 헤테로아릴기의 군을 나타내고, 상기 군에서 아릴 및/또는 헤테로아릴기는 각각, 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, 공액된 이중 결합, C 원자 또는 화학식 $(CHR^4)_n$-$(Het)_o$-$(CHR^4)_p$ 의 단위에 의해 단일 또는 다수로 연결되고,

[0016] R^2 는 각 경우에서 각 경우 서로 독립적으로, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH_2, NH알킬, $N(알킬)_2$, $N(아릴)_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, $N(시클로알킬)_2$, CN, NO_2, Si(알

킬)$_3$, B(OR^3)$_2$, C(O)R^3, P(O)(R^3)$_2$, S(O)R^3, S(O)$_2$R^3, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고,

[0017] R^3 은 각 경우에서, 서로 독립적으로, H, D, OH, 알킬, 아릴, 시클로알킬, O-알킬, O-아릴 또는 O-시클로알킬을 나타내고,

[0018] R^4 는 각 경우에서, 각 경우 서로 독립적으로, H, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH$_2$, NH알킬, N(알킬)$_2$, N(아릴)$_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, N(시클로알킬)$_2$, CN, NO$_2$, Si(알킬)$_3$, B(OR^3)$_2$, C(O)R^3, C(O)$_2$R^3, P(O)(R^3)$_2$, S(O)R^3, S(O)$_2$R^3, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고,

[0019] 알킬은 할로겐으로 부분 또는 완전 치환될 수 있는 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

[0020] 시클로알킬은 탄소수 3 내지 7 의 시클릭 포화 또는 부분 불포화 시클로알킬기를 나타내고,

[0021] 아릴은 알킬, O-알킬, N(알킬)$_2$ 또는 Hal 로 일치환 또는 다치환될 수 있는 탄소수 6 내지 10 의 아릴기를 나타내고,

[0022] Hal 은 F, Cl, Br 또는 I 를 나타내고,

[0023] Het 은 O, S, -N=N-, NH 또는 NR^2 를 나타내고,

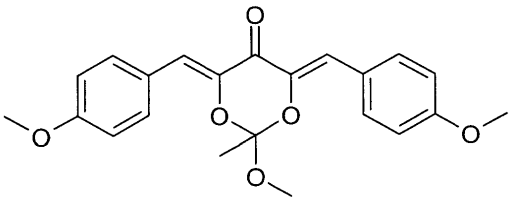
[0024] n 은 0 내지 5 의 정수를 나타내고,

[0025] o 는 0 또는 1 을 나타내고,

[0026] p 는 0 내지 5 의 정수를 나타내고,

[0027] n+o+p 는 적어도 숫자 1 을 나타냄],

[0028] 단 하기 화합물은 배재함,

[0029] 

[0030] 권리포기로 배재된 화합물 2-메톡시-4,6-비스-[1-(4-메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온은 WO 2007/039110 A2 에 공지되어 있다. 상기 화합물은 WO 2007/039110 A2 의 발명에 따른 피부-결합 UV 여과제의 합성 중간체로서 기술되어 있다. 여러 기질을 위한 친유성 염료 또는 형광성 방사체로서의 사용은 기술되어 있지 않다.

[0031] 본 발명의 목적을 위해서, 화학식 I 의 화합물은 약학적 또는 화장용으로 사용가능한 유도체, 염, 수화물, 용매화물 및 이성체 (예를 들어, 입체이성체, 부분입체이성체, 거울상이성체, 라세미체, 호변이성체, E-Z 이성체)를 의미하는 식으로 정의된다. 화합물의 용매화물은 상호 인력으로 형성한 화합물에 대한 비활성 용매 분자의 부가물을 의미한다. 용매화물은 예를 들어, 1수화물 또는 2수화물 또는 알코올레이트이다 약학적 또는 화장용으로 사용가능한 유도체는 예를 들어, 본 발명에 따른 화합물의 염을 의미한다.

[0032] 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 알킬기는 예를 들어, 메틸, 에틸, 이소프로필, 프로필, 부틸, sec-부틸 또는 tert-부틸, 또한 펜틸, 1-, 2- 또는 3-메틸부틸, 1,1-, 1,2- 또는 2,2-디메틸프로필, 1-에틸프로필, n-헥실, n-헵틸 또는 n-옥틸이다.

[0033] 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기는 상술된 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 알킬기의 군 및 노나닐, 데카닐, 운데카닐, 도데카닐, 트리데카닐, 테트라데카닐, 펜타데카닐, 헥사데카닐, 헵타데카닐,

옥타데카닐, 노나데카닐 및 에이코사닐을 포함한다.

[0034] 용어 "알킬" 은 상술된 바와 같이, 할로겐에 의해 부분 또는 완전 치환될 수 있는 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타낸다, 즉 과불소화 알킬기의 경우에서 알킬기의 모든 H 원자가 F 로 대체된다. 부분 불소화 알킬기의 경우, 하나 이상의 H 원자는, 단 모든 H 원자는 아님, F 원자 (F 원자들) 로 대체된다.

[0035] 부분 불소화 직쇄 또는 분지 알킬기의 바람직한 예는 CF_3-CHF-CF_2-, CF_2H-CF_2-, CF_3-CF_2-CH_2-, CF_3-CF_2-CH_2-CH_2-, 또는 CF_3-CF_2-CF_2-CF_2-CF_2-CF_2-CH_2-CH_2- 이다.

[0036] 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 퍼플루오로알킬기는 예를 들어, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 헵타플루오로프로필, 헵타플루오로이소프로필, n-노나플루오로부틸, sec-노나플루오로부틸, tert-노나플루오로부틸, 도데카플루오로펜틸, 1-, 2- 또는 3-트리플루오로메틸옥타플루오로부틸, 1,1-, 1,2- 또는 2,2-비스(트리플루오로메틸)펜타플루오로프로필, 1-펜타플루오로에틸헥사플루오로프로필, n-트리데카플루오로헥실, n-펜타데카플루오로헵틸 또는 n-헵타데카플루오로옥틸이다. 과불소화 알킬기 R_f 의 바람직한 예는 펜타플루오로에틸, 헵타플루오로프로필, 헵타플루오로이소프로필, n-노나플루오로부틸, sec-노나플루오로부틸 또는 tert-노나플루오로부틸이다.

[0037] 용어 "시클로알킬" 은 탄소수 3 내지 7 의 시클릭 포화 또는 부분 불포화 시클로알킬기를 나타낸다. 탄소수 3 내지 7 의 비치환 포화 또는 부분 불포화 시클로알킬기는 따라서 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로펜테닐, 시클로헥세닐 또는 시클로헵테닐이다.

[0038] 용어 "Hal" 은 F, Cl, Br 또는 I 를 나타낸다. Hal 은 바람직하게는 F, Cl 또는 Br 이다.

[0039] 용어 "아릴" 은 알킬, O-알킬, N(알킬)$_2$ 또는 Hal 로 일치환 또는 다치환될 수 있는 6 또는 10 개의 C 원자를 갖는 아릴기, 예를 들어 알킬, O-알킬, N(알킬)$_2$ 또는 Hal 로 각각 일치환 또는 다치환된 페닐 또는 나프틸을 나타내고, 상기 알킬 및 Hal 은 상기 나타낸 의미들 중 하나를 갖는다.

[0040] 용어 "Het" 은 O, S, N, -N=N-, NH 또는 NR^2 (R^2 는 상기 및 하기에 나타내는 의미를 가짐) 를 나타낸다. Het 은 바람직하게는 O, N 또는 NR^2 (R^2 는 알킬을 나타냄) 이다. Het 은 특히 바람직하게는 N 이다.

[0041] 복수의 이중 결합이 또한 존재할 수 있는 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐은 예를 들어, 알릴, 2- 또는 3-부테닐, 이소부테닐, sec-부테닐, 게다가 4-펜테닐, 이소펜테닐, 헥세닐, 헵테닐, 옥테닐, $-C_9H_{17}$, $-C_{10}H_{19}$ 내지 $-C_{20}H_{39}$; 바람직하게는 알릴, 2- 또는 3-부테닐, 이소부테닐, sec-부테닐, 4-펜테닐, 이소펜테닐, 헥세닐 또는 데세닐이다.

[0042] 복수의 삼중 결합도 존재하는 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐은 예를 들어, 에티닐, 1- 또는 2-프로피닐, 2- 또는 3-부티닐, 또한 4-펜티닐, 3-펜티닐, 헥시닐, 헵티닐, 옥티닐, $-C_9H_{15}$, $-C_{10}H_{17}$ 내지 $-C_{20}H_{37}$, 바람직하게는 에티닐, 1- 또는 2-프로피닐, 2- 또는 3-부티닐, 4-펜티닐, 3-펜티닐 또는 헥시닐이고, 여기서 하나 이상의 이중 결합이 임의로 존재할 수 있다. 2 내지 20 개의 C 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐은 바람직하게는 하나의 삼중 결합을 함유한다.

[0043] 화학식 I 의 화합물에서, R 은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기, 바람직하게는 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 알킬기, 바람직하게는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, n-펜틸, n-헥실, 에틸헥실 또는 n-옥틸, 매우 특히 바람직하게는 에틸이다.

[0044] 화학식 I 의 화합물에서, R^1 은 상술된 바와 같은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기, 바람직하게는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, n-펜틸, n-헥실, 에틸헥실, n-옥틸, n-데카닐, n-도데카닐, n-테트라데카닐, n-헥사데카닐, n-옥타데카닐 또는 n-에이코사닐이다. R^1 은 매우 특히 바람직하게는 메틸이다.

[0045] 화학식 I 의 화합물에서, X 및 Y 각각은, 서로 독립적으로, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴기 또는 헤테로아릴기, 또는 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 및/또는 헤테로아릴기의 군을 나타내고, 상기 군에서 아릴 및/또는 헤테로아릴기는 각각, 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, 공액된 이중 결합, C 원자 또는 화학식 $-(CHR^4)_n-(Het)_o-(CHR^4)_p$

[식 중, R^2 및 R^4 는 상기 또는 하기에 나타낸 의미를 갖고, n 은 0 내지 5 의 정수를 나타내고, o 는 0 또는 1 을 나타내고, p 는 0 내지 5 의 정수를 나타내고 n+o+p 의 합계는 적어도 숫자 1 을 나타냄] 의 단위에 의해 단일 또는 다수로 연결된다.

[0046] 본 발명의 의미에서 치환기 X 및/또는 Y 에 대한 6 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴기는 임의로 R^2 로 일치환 또는 다치환된 6 내지 24 개의 C 원자를 갖는 통상의 방향족 전자계를 갖는 방향족기이다. 6 내지 24 개의 C 원자를 갖는 아릴기는 바람직하게는 1-, 2-, 3-, 4-, 5- 또는 6-페닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 6-, 7- 또는 8-나프틸, 1-, 2-, 3-, 4-, 6-, 7- 또는 8-페난트레닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9- 또는 10-안트라세닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- 또는 12-테트라세닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- 또는 12-벤조[a]안트라세닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11-, 12-, 13- 또는 15-펜타세닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- 또는 12-크리세닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9- 또는 10-피레닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- 또는 12-벤조[a]피레닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-아줄레닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9- 또는 10-플루오란테닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- 또는 12-페릴레닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-인데닐 또는 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8- 또는 9-플루오레닐이고, 이들 각각은 R^2 로 치환 또는 비치환된다.

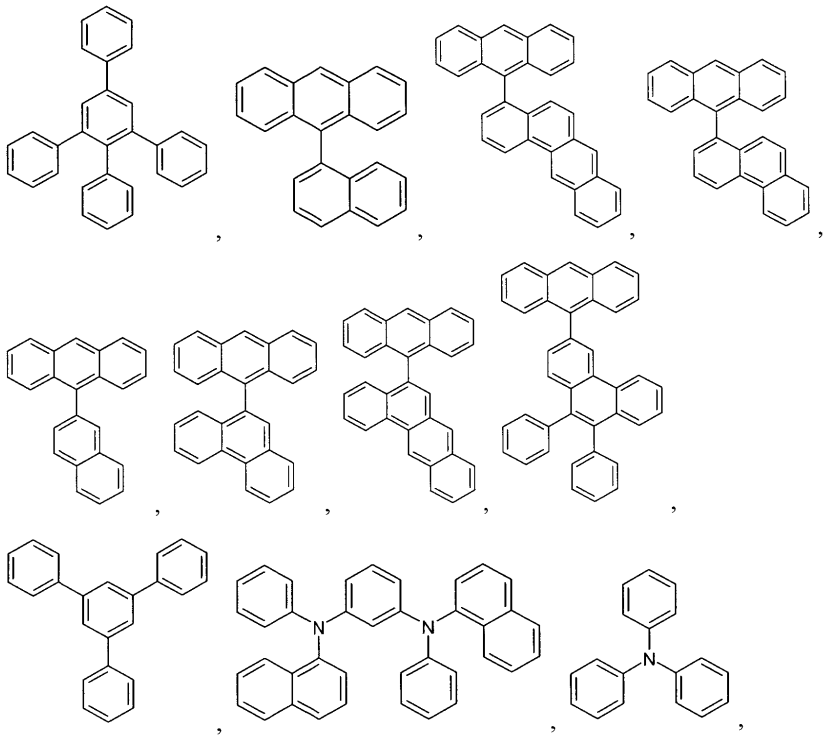
[0047] 본 발명의 의미에서 치환기 X 및/또는 Y 에 대한 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 헤테로아릴기는 임의로 R^2 로 일치환 또는 다치환되는, 2 내지 23 개의 C 원자 및 전체 5 개 이상의 방향족 고리 원자를 갖는 통상의 방향족 전자계를 갖는 헤테로방향족기이다. 헤테로원자는 바람직하게는 N, O 및/또는 S 로부터 선택된다. 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 헤테로아릴기는 바람직하게는 2- 또는 3-푸릴, 2- 또는 3-티에닐, 1-, 2- 또는 3-피롤릴, 1-, 2-, 4- 또는 5-이미다졸릴, 3-, 4- 또는 5-피라졸릴, 2-, 4- 또는 5-옥사졸릴, 3-, 4- 또는 5-이속사졸릴, 2-, 4- 또는 5-티아졸릴, 3-, 4- 또는 5-이소티아졸릴, 2-, 3- 또는 4-피리딜, 2-, 4-, 5- 또는 6-피리미디닐, 또한 바람직하게는 1,2,3-트리아졸-1-, -4- 또는 -5-일, 1,2,4-트리아졸-1-, -4- 또는 -5-일, 1- 또는 5-테트라졸릴, 1,2,3-옥사디아졸-4- 또는 -5-일 1,2,4-옥사디아졸-3- 또는 -5-일, 1,3,4-티아디아졸-2- 또는 -5-일, 1,2,4-티아디아졸-3- 또는 -5-일, 1,2,3-티아디아졸-4- 또는 -5-일, 2-, 3-, 4-, 5- 또는 6-2H-티오피라닐, 2-, 3- 또는 4-4H-티오피라닐, 3- 또는 4-피리다지닐, 피라지닐, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤조푸릴, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤조티에닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-1H-인돌릴, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-2H-인돌릴, 1-, 2-, 4- 또는 5-벤즈이미다졸릴, 1-, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤조피라졸릴, 2-, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤족사졸릴, 3-, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤즈이속사졸릴, 2-, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤조티아졸릴, 2-, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤즈이소티아졸릴, 4-, 5-, 6- 또는 7-벤즈-2,1,3-옥사디아졸릴, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-퀴놀리닐, 1-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-이소퀴놀리닐, 1-, 2-, 3-, 4- 또는 9-카르바졸릴, 1-, 2-, 3-, 4-, 5-, 6-, 7-, 8- 또는 9-아크리디닐, 3-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-시놀리닐, 2-, 4-, 5-, 6-, 7- 또는 8-퀴나졸리닐 또는 1-, 2- 또는 3-피롤리디닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 6-, 7-, 8- 또는 9-디벤조푸라닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 6-, 7-, 8- 또는 9-디벤조티에닐, 1-, 2-, 3-, 5-, 6-, 7- 또는 8-인돌리지닐, 1-, 2-, 3-, 4-, 6-, 7-, 8- 또는 10-페난트리디닐7-1H-인돌릴, 1-, 2-, 3-, 4-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- 또는 12-벤조페난트리디닐 또는 1-, 2-, 3-, 4-, 6-, 7-, 8-, 9-, 10-, 11- 또는 12-벤조아크리디닐이고, 이들 각각은 R^2 로 치환 또는 비치환된다.

[0048] 상술된 바와 같이, 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 비치환 아릴 및/또는 헤테로아릴기로 기초를 이루는 비치환 기본 구조의 예는 (상기 군에서 아릴 및/또는 헤테로아릴기가 각각 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, 공액된 이중 결합, C 원자 또는 화학식 $-(CHR^4)_n-(Het)_o-(CHR^4)_p-$ [상기 R^4, n, o, p 및 n+o+p 는 상기 또는 하기 기재된 의미를 가짐] 의 단위로 단일 또는 다수로 연결됨) 바이페닐, 터페닐, 바이피리딘, 9,9'-스피로바이플루오렌, 9,9-디페닐플루오렌, 디페닐 에테르, 디페닐 티오에테르, 스틸벤, 1,2-디페닐에탄, 1,1-디페닐메탄, 바이페닐렌, 트리페닐렌이고, 이들 각각은 상기 및 하기 기술되는 바와 같이 임의로 R^2 로 일치환 또는 다치환될 수 있다. 아릴 및/또는 헤테로아릴기는 바람직하게는 단일 결합으로 연결된다.

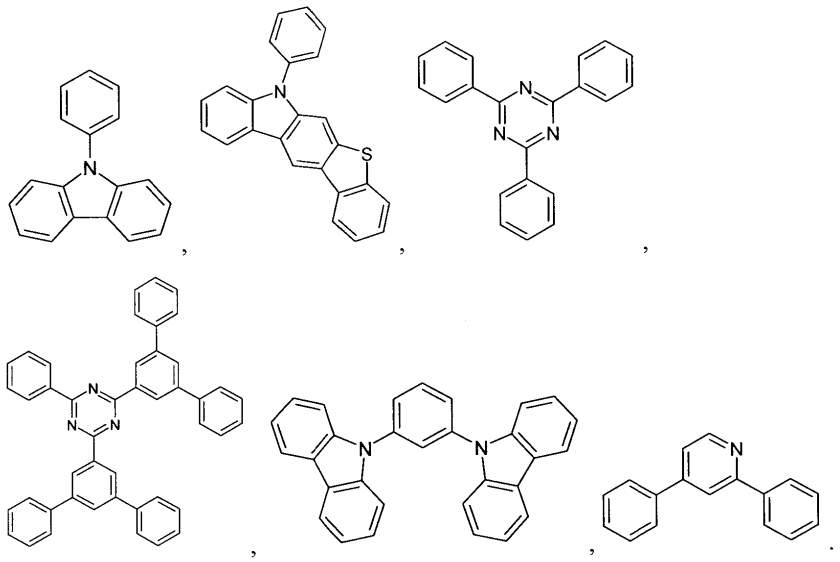
[0049] n 은 0 내지 5 의 정수, 특히 0, 1, 2, 3 또는 4, 특히 바람직하게는 0 또는 1 을 나타낸다.

[0050] o 은 0 또는 1 을 나타낸다. p 는 0 내지 5, 특히 0 또는 1 을 나타내고, 합계 n+o+p 는 바람직하게는 숫자 1 을 나타낸다.

[0051] 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 비치환 아릴 및/또는 헤테로아릴기의 상술된 군에 대한 추가로 더욱 복잡한 비치환된 기본 구조는 하기 화학식으로 나타낼 수 있고, 상기 아릴 및/또는 헤테로아릴기는 상술된 바와 같이 나타낸 대안들로 서로 연결된다:



[0052]



[0053]

[0054] R^2 는 각 경우에서, 각 경우 서로 독립적으로, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH_2, NH알킬, N(알킬)$_2$, N(아릴)$_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, N(시클로알킬)$_2$, CN, NO_2, Si(알킬)$_3$, B(OR^3)$_2$, C(O)R^3, P(O)(R^3)$_2$, S(O)R^3, S(O)$_2R^3$, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고, 상기 Hal, 알킬, 아릴 및 시클로알킬은 상기 제공된 의미를 가지며 R^3 은 각 경우에서, 서로 독립적으로, H, D, OH, 알킬, 아릴, 시클로알킬, O-알킬, O-아릴 또는 O-시클로알킬을 나타낸다.

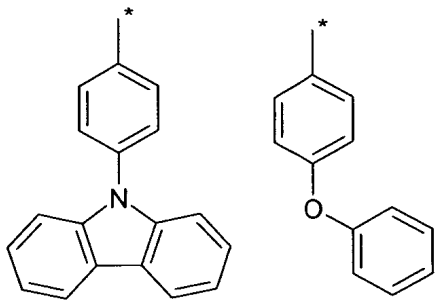
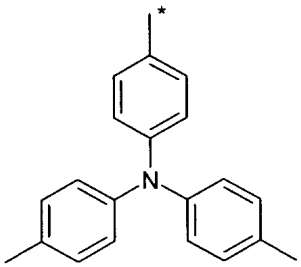
[0055] R^3 은 바람직하게는 H 또는 알킬이고, 상기 알킬은 상술된 바와 같은 의미를 갖는다.

[0056] R^2 는 각 경우에서, 서로 독립적으로, 바람직하게는 Hal, 알킬, O-알킬, O-아릴, NH알킬, $N(알킬)_2$ 이다. X 및/또는 Y 가 R^2 의 바람직한 기로 치환된 화학식 I 의 화합물이 바람직하게는 염료로서 이용된다. R^2 의 정의에서 알킬은 바람직하게는 임의로 부분 불소화될 수 있는 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 알킬기이다.

특히 바람직한 치환기 R^2 는 메틸, 이소프로필, 트리플루오로메틸, 메톡시, 디-(n-부틸)아미노, 디메틸아미노, n-옥틸옥시, 페닐옥시, -F 또는 -Br 이다.

[0057] R^4 는 각 경우에서, 각 경우 서로 독립적으로, H, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH_2, NH알킬, $N(알킬)_2$, $N(아릴)_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, $N(시클로알킬)_2$, CN, NO_2, $Si(알킬)_3$, $B(OR^3)_2$, $C(O)R^3$, $P(O)(R^3)_2$, $S(O)R^3$, $S(O)_2R^3$, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고, 상기 R^3, Hal, 알킬, 아릴 및 시클로알킬은 상기 제공된 의미를 갖는다. R^4 는 바람직하게는 H, Hal 또는 알킬, 매우 특히 바람직하게는 H 이다. R^4 의 정의에서 알킬은 바람직하게는 임의로 또한 부분 불소화될 수 있는 탄소수 1 내지 8 의 직쇄 또는 분지 알킬기이다.

[0058] 본 출원의 초점이 형광성 방사체로서의 용도에 있는 경우, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환되는 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 및/또는 헤테로아릴기의 군 (상기 군에서 아릴 및/또는 헤테로아릴기는 각각 서로 독립적으로, 단일 결합 또는 O 원자에 의해 단일 또는 다수 연결됨) 이 바람직하게는 각 경우에서 서로 독립적으로, X 및 Y 를 위해 선택되고, 상기 R^2 는 알킬을 나타내고 알킬은 바람직하게는 1 내지 4 개의 C 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 알킬기, 특히 바이페닐, 터페닐 또는 하기 화학식의 기를 나타낸다:

[0059] 화학식 , 또는 .

[0060] 치환기 R^1 은 바람직하게는 1 내지 4 개의 C 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 알킬기이다.

[0061] 치환기 R 은 바람직하게는 1 내지 4 개의 C 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 알킬기이다.

[0062] X 및 Y 는 바람직하게는 각각, 서로 독립적으로, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환되는 5 내지 18 개의 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기이다.

[0063] 본 출원의 초점이 염료로서의 또는 광노화로부터의 피부 및 모발의 보호를 위한 용도, 특히 화장, 약학, 피부과용 제제 또는 가정용품의 성분으로서의 추가 용도에 있는 경우, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환되는 페닐, 나프틸, 안트라세닐, 인돌릴, 9-카르바졸-4-일, 아줄레닐, 플루오레닐, 티에닐, 퀴놀리닐, 디벤조피롤릴기로부터의 아릴 또는 헤테로아릴기가 바람직하게는 각 경우에서 서로 독립적으로, X 및 Y 를 위해 선택된다.

[0064] 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환되는 페닐, 나프틸, 아줄레닐, 인돌릴 또는 티에닐기로부터의 아릴 또는 헤테로아릴기가 특히 바람직하게는 염료로서 또는 광노화로부터의 피부 및 모발의 보호를 위해 이용된다.

[0065] 장파 흡수 극대에서 410 nm 초과, 특히 바람직하게는 450 nm 초과 및 매우 특히 바람직하게는 490 nm 초과의 파장을 갖는 빛을 흡수하는 화학식 I 의 화합물이 특히 염료로서 바람직하다.

[0066] 화학식 I 의 화합물의 경우에서, X 및 Y 가 동일한 것이 특히 바람직하다.

[0067] 바람직한 각각의 화학식 I 의 화합물 및 이의 이중 결합 이성질체 및 광학 이성체 또는 매우 특히 바람직한 각각의 화학식 I 의 화합물은 하기와 같다:

[0068] (4Z,6Z)-2-에톡시-4,6-비스[(4-메톡시페닐)메틸렌]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0069] (4Z,6Z)-4,6-비스[(3,4-디메톡시페닐)메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0070] (4Z,6Z)-4,6-비스[(2,4-디메톡시페닐)메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0071] (4Z,6Z)-2-에톡시-2-메틸-4,6-비스[(2,4,5-트리메톡시페닐)메틸렌]-1,3-디옥산-5-온,

[0072] (4Z,6Z)-2-에톡시-2-메틸-4,6-비스[(3,4,5-트리메톡시페닐)메틸렌]-1,3-디옥산-5-온,

[0073] (4Z,6Z)-2-에톡시-2-메틸-4,6-비스[(4-옥톡시페닐)메틸렌]-1,3-디옥산-5-온,

[0074] (4Z,6Z)-2-에톡시-2-메틸-4,6-비스[(4-페녹시페닐)메틸렌]-1,3-디옥산-5-온,

[0075] (4Z,6Z)-4,6-비스[[4-(디부틸아미노)페닐]메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0076] 2-에톡시-4,6-비스-[1-(4-플루오로페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0077] 2-에톡시-4,6-비스-[1-(4-트리플루오로메틸페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0078] 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-(2,4,6-트리메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온,

[0079] 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-(2,3,4-트리메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온,

[0080] 4,6-비스-[1-바이페닐-4-일메트-(Z)-일리덴]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0081] 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-나프탈렌-2-일메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온,

[0082] 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-(1-메틸-1H-인돌-3-일)메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온,

[0083] 2-에톡시-4,6-비스-[1-(9-에틸-9H-카르바졸-3-일)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0084] 4,6-비스-[1-(4-디메틸아미노-2-메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0085] 4,6-비스-[1-(4-디메틸아미노나프탈렌-1-일)메트-(Z)-일리덴]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0086] 2-에톡시-4,6-비스-[1-(4-브로모페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0087] 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-티오펜-2-일메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온,

[0088] 4-[1-(4-디부틸아미노페닐)-메트-(Z)-일리덴]-2-에톡시-6-[1-(4-메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0089] 2-에톡시-4,6-비스-[1-(5-이소프로필-3,8-디메틸아줄렌-1-일)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0090] 4-,6-비스-[1-(4-카르바졸-9-일페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온,

[0091] 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-[1,1';3',1"]터페닐-2'-일메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온,

[0092] 4,6-비스-[1-[3-(디-p-톨릴아미노)페닐]메트-(Z)-일리덴]-2-메톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온.

[0093] 상술된 바와 같이 또는 바람직하게 기술된본 발명에 따른 화학식 I 의 화합물은 특히 비교적 친유성인, 비수성 용매 및 용매 혼합물에서 매우 양호한 용해도 및 분산성을 갖는다. 따라서 화학식 I 의 염료는 친유성이다. 색은 높은 내광성, 열 및 pH 안정성, 및 높은 색강도 및 강렬한 형광 성질에 의해 구별된다. 화학식 I 의 화합물은 자체적으로 또한 내광성 및 내열성이다. 화학식 I 의 화합물의 추가 장점은 표면, 특히 피부, 모발 또는 손톱과 같은 케라틴-함유 표면에 대해 높은 직접성이 있다. 추가 염색할 수 있는 표면 또는 기질의 예는 종이, 면, 울, 예를 들어 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 폴리우레탄, 폴리아미드 기재 플라스틱, 셀룰로오스 또는 유리를 포함하고, 여기서 염료는 기질 제조 동안 첨가되거나 기질이 후속적으로 염색될 수 있다.

[0094] 따라서 본 발명은 또한 염료로서 상술된 바와 같은 또는 바람직하게 기술된 바와 같은 화학식 I 의 화합물의 용도에 관한 것으로서, 권리포기로 제외된 화합물의 용도가 또한 포함된다. 일반적으로, 권리포기로 제외한 화합물은 상기 화합물의 제조 또는 그의 용도를 논의되고 있는 용어 화학식 I 의 화합물에 의해 포함된다.

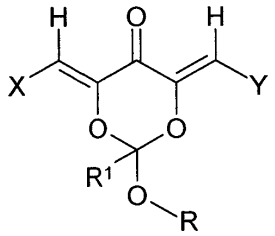
[0095] 화학식 I 의 화합물의 친유성은 친수성인 추가 치환기 R^2, 예를 들어 COOH 기, SO_3H 기 또는 상응하는 이의 염-형성기, 예를 들어 -COOKt, $-SO_3Kt$ (상기 양이온 Kt 는 바람직하게는 암모늄 이온 또는 알칼리 금속 또는 알칼리-토금속 양이온, 예컨대 Na^+, K^+, Mg^{2+} 또는 Ca^{2+} 임) 를 도입함으로써 달라질 수 있다.

[0096] 염료는 특히 피부, 모발을 염색하거나 화장, 약학 또는 피부과용 제제 또는 가정용품을 착색시키는데 적합하다.

[0097] 화학식 I 의 화합물의 추가 바람직한 용도는 가시 광선에 의한 광노화로부터의 피부 및 모발의 보호이다. 이에 대한 과학적 지식은 예를 들어, Zastrow 등에 의해 [Skin Pharmacol. Physiol 2009, 22, 31-44] 에 기술되어 있다. 이러한 이유 때문에, 이상적인 경우에서 전체 UV 및 Vis 영역을 망라할 수 있는 광대역 보호계를 생성하기 위해서 제제 내에 공지된 UVB 및 UVA 여과제와 조합하는 것이 특히 바람직하다.

[0098] 따라서 본 발명은 또한 광선, 특히 가시 광선에 의한 광노화로부터의 피부 및 모발의 보호를 위한, 상술된 바와 같은 또는 바람직하게 기술된 바와 같은 화학식 I 의 화합물의 용도에 관한 것이다.

[0099] 본 발명은 또한 화학식 II 의 화합물이 화학식 IIIa 및/또는 IIIb 의 화합물과 반응되는 것을 특징으로 하는 하기 화학식 I 의 화합물의 제조 방법에 관한 것이다:



I

[0100] .

[0101] [식 중,

[0102] R 은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

[0103] R^1 은 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

[0104] X 및 Y 각각은, 서로 독립적으로, 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 또는 헤테로아릴기, 또는 비치환 또는 R^2 로 일치환 또는 다치환된 5 내지 24 개의 고리 원자를 갖는 아릴 및/또는 헤테로아릴기의 군을 나타내고, 상기 군에서 아릴 및/또는 헤테로아릴기는 각각, 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합, 공액된 이중 결합, C 원자 또는 화학식 $(CHR^4)_n$-$(Het)_o$-$(CHR^4)_p$ 의 단위에 의해 단일 또는 다수로 연결되고,

[0105] R^2 는 각 경우에서 각 경우 서로 독립적으로, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH_2, NH알킬, $N(알킬)_2$, $N(아릴)_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, $N(시클로알킬)_2$, CN, NO_2, $Si(알킬)_3$, $B(OR^3)_2$, $C(O)R^3$, $P(O)(R^3)_2$, $S(O)R^3$, $S(O)_2R^3$, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고,

[0106] R^3 은 각 경우에서, 서로 독립적으로, H, D, OH, 알킬, 아릴, 시클로알킬, O-알킬, O-아릴 또는 O-시클로알킬을 나타내고,

[0107] R^4 는 각 경우에서, 각 경우 서로 독립적으로, H, D, Hal, 알킬, OH, O-알킬, O-아릴, S-알킬, NH_2, NH알킬, $N(알킬)_2$, $N(아릴)_2$, 시클로알킬, O-시클로알킬, S-시클로알킬, NH-시클로알킬, $N(시클로알킬)_2$, CN, NO_2, $Si(알킬)_3$, $B(OR^3)_2$, $C(O)R^3$, $C(O)_2R^3$, $P(O)(R^3)_2$, $S(O)R^3$, $S(O)_2R^3$, 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알케닐기 또는 2 내지 20 개의 C 원자 및 하나 이상의 삼중 결합 및 임의로 하나 이상의 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 분지 알키닐기를 나타내고,

[0108] 알킬은 할로겐으로 부분 또는 완전 치환될 수 있는 탄소수 1 내지 20 의 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타내고,

[0109] 시클로알킬은 탄소수 3 내지 7 의 시클릭 포화 또는 부분 불포화 시클로알킬기를 나타내고,

[0110] 아릴은 알킬, O-알킬, $N(알킬)_2$ 또는 Hal 로 일치환 또는 다치환될 수 있는 탄소수 6 내지 10 의 아릴기를 나타내고,

[0111] Hal 은 F, Cl, Br 또는 I 를 나타내고,

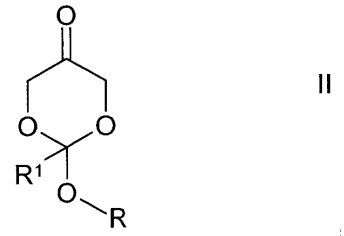
[0112] Het 은 O, S, -N=N-, NH 또는 NR^2 를 나타내고,

[0113] n 은 0 내지 5 의 정수를 나타내고,

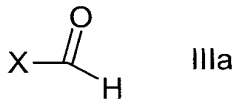
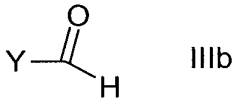
[0114] o 는 0 또는 1 을 나타내고,

[0115] p 는 0 내지 5 의 정수를 나타내고,

[0116] n+o+p 는 적어도 숫자 1 을 나타냄],

[0117]  II

[0118] [식 중, R 및 R^1 이 상기 제공되거나 바람직하게 제공된 의미를 가짐],

[0119]  IIIa  IIIb

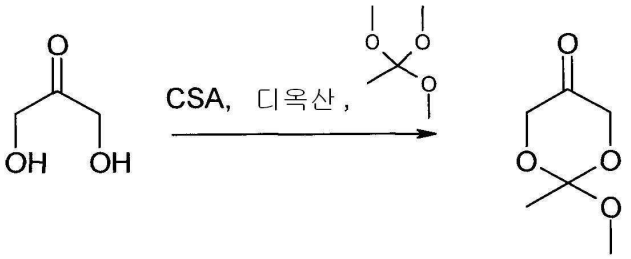
[0120] [식 중, X 및 Y 는 상기 제공되거나 바람직하게 제공된 의미를 가짐].

[0121] 화학식 II 의 화합물과 하나 이상의 화학식 IIIa 또는 IIIb 의 화합물의 반응은 일반적으로 합성 화학 분야에서 당업자에게 알려진 Michael 첨가의 조건에 따라 수행된다. 상기 반응은 일반적으로 강염기, 예를 들어 알칼리 금속 수산화물, 예컨대 수산화나트륨 또는 수산화칼륨, 또는 유기 강염기, 예컨대 리튬 디이소프로필아미드의 존재를 필요로 한다. 알칼리 금속 수산화물을 사용하는 것이 바람직하다. 화학식 IIIa 또는 IIIb 의 하나 이상의 알데히드는 일반적으로 과량 사용되나, 화학식 II 의 화합물과 관련하여 적어도 1 당량을 사용한다. 비대칭적 화학식 I 의 화합물을 제조하기를 원한다면, 화학식 IIIa 및/또는 IIIb 의 2 개의 알데히드의 혼합물을 첨가한다. 2 개의 알데히드의 반응 속도가 상당히 상이한 경우, 화학식 IIIa 및/또는 IIIb 의 상응하는 알데히드는 각 속도에 따라 각각 계측될 수 있다.

[0122] 화학식 I 의 화합물의 임의의 혼합물이 가능하게는 분리되어 단리된 화학식 I 의 화합물을 제공하는 것은 통상적인 방법을 사용하여 가능하다.

[0123] 상기 언급된 방법은 바람직하게는 0℃ 내지 150℃ 의 온도에서, 특히 바람직하게는 사용되는 용매의 비점에서 수행된다. 상기 반응에 적합한 용매는 예를 들어, 메탄올, 에탄올, 부탄올과 같은 알코올, 및 디옥산, tert-부틸 메틸 에테르, 디클로로메탄, 클로로포름 및 톨루엔과 같은 다른 유기 용매이다. 상기 반응은 바람직하게는 에탄올에서 수행된다.

[0124] 상술된 바와 같은 화학식 II 의 화합물은 시판되거나 JACS, 1997, 119, 2795-2803 의 출판물을 기초로 제조될 수 있다. 디히드록시아세톤은 일반적으로 촉매로서 캠퍼술폰산 및 상응하는 예를 들어 화학식 CH_3-C(OR)$_3$ [상기 R 은 상기 언급된 의미들 중 하나임] 인 아세테이트, 예를 들어 트리메톡시오르토아세테이트와 반응된다. 하기 반응식에 따른 트리메톡시오르토아세테이트와의 반응의 경우, 2-메틸-2-메톡시-1,3-디옥산-5-온이 형성된다:



[0125] .

[0126] 다른 오르토에스테르를 사용하여 또한 다른 화학식 II 의 화합물을 합성시킬 수 있다. 예를 들어, 시판되는 트리메틸 오르토발레레이트는 디히드록시아세톤과 반응되어 화학식 II 의 화합물 [식 중, R^1 = C_4H_9 및 R = 메틸] 을 제공할 수 있다. 시판하지 않은 오르토에스테르는 상응하는 이미도에스테르로의 전환 및 후속적인 알코올 분해에 의해 상응하는 아미드 또는 시아니드로부터 오르토에스테르로 전환될 수 있다.

[0127] 화학식 IIIa 또는 IIIb 의 알데히드는 일반적으로 시판되고 또는 공지된 방법, 예를 들어 상응하는 Grignard 화합물과 에틸 포르메이트 (HCO_2Et) 의 반응에 의해 제조될 수 있다.

[0128] 상기 서술된 공정에 의해 제조되는 화학식 I 의 화합물은 당업자에게 충분히 공지된 매우 광범위한 정제 방법, 예를 들어 크로마토그래피 또는 재결정화에 의해 정제될 수 있다.

[0129] 화학식 I 의 화합물의 염으로의 전환은, 화학식 I 의 화합물이 염으로 전환될 수 있는 치환기 R^2, 예를 들어 COOH 또는 SO_3H 기를 지니는 경우, 예를 들어, 극성 용매, 예를 들어 메탄올, 에탄올 또는 이소프로판올 중의 알칼리 또는 알칼리-토금속 수산화물, 탄산염 또는 중탄산염의 첨가에 의해 수행된다.

[0130] 특히, 기 Hal 또는 $B(OR_3)_2$ 로부터 선택되는 치환기 R^2 를 지니는 본 발명에 따른 상술된 화학식 I 의 화합물은 예를 들어, 상응하는 공액된, 부분 공액된 또는 비공액된 중합체, 올리고머의 제조를 위한 공단량체로서 또는 덴드리머의 코어로서 사용될 수 있다. 상기 중합은 바람직하게는 할로겐 관능기를 통해 수행된다. 추가 전환에 바람직한 치환기 R^2 는 Cl, Br, I, $B(OH)_2$ 또는 상응하는 붕산 에스테르 $B(O-알킬)_2$ [상기 알킬 바람직하게는 1 내지 4 개의 C 원자를 갖는 직쇄 또는 분지 알킬기를 나타냄], 매우 특히 바람직하게는 $B(O-메틸)_2$ 이다.

[0131] 따라서 본 발명은 또한 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 함유하는 공액된, 부분 공액된 및 비공액된 중합체, 올리고머 또는 덴드리머에 관한 것으로서 하나 이상의 화학식 I 의 화합물과 중합체, 올리고머 또는 덴드리머 간의 연결 부위가 화학식 I 의 화합물의 하나 이상의 라디칼 R^2 가 반응 전에 위치된 위치에 있다.

[0132] 상기 중합체는 추가의 반복 단위를 함유할 수 있다. 이러한 추가 반복 단위는 바람직하게는 플루오렌 (예를 들어 EP 842208 또는 WO 00/22026 에 따름), 스피로바이플루오렌 (예를 들어 EP 707020, EP 894107 또는 EP 04028865.6 에 따름), 트리아릴아민, 파라페닐렌 (예를 들어 WO 92/18552 에 따름), 카르바졸 (예를 들어 WO 04/070772 및 WO 04/113468 에 따름), 티오펜 (예를 들어 EP 1028136 에 따름), 디히드로페난트렌 (예를 들어 WO 05/014689 에 따름), 인데노플루오렌 (예를 들어 WO 04/041901 및 WO 04/113412 에 따름), 방향족 케톤 (예를 들어 WO 05/040302 에 따름), 페난트렌 (예를 들어 WO 05/104264 에 따름) 및/또는 금속 착물, 특히 오르토-금속화된 이리듐 착물로 이루어진 군으로부터 선택된다. 중합체가 또한 상기 언급된 기들중 하나 이상으로부터 선택되는 복수의 상이한 반복 단위를 함유할 수 있다는 것이 분명히 주목되어야 한다.

[0133] 본 발명은 또한 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 제제에 관한 것이다.

[0134] 본 발명의 의미에서, 용어 조성물 또는 제형은 또한 용어 제제와 함께 동의어로 사용된다.

[0135] 상기 제제는 상기 필수 또는 선택적인 성분을 포함 또는 구성, 그 성분으로 본질적으로 이루어지거나 이루어질 수 있다. 제제에 사용될 수 있는 모든 화합물 또는 성분은 공지되어 있거나 시판되거나 공지된 공정에 의해 합성될 수 있다.

[0136] 하나 이상의 화학식 I 의 화합물 이외에, 상기 제제는 화장, 약학, 피부과용 제제 또는 가정용품에 적합한 담체를 포함할 수 있다. 적합한 담체 물질이 하기 기술된다.

[0137] 본 발명은 또한 하나 이상의 화학식 I 의 화합물이 화장, 약학, 피부과용 제제 또는 가정용품에 적합한 하나 이상의 담체 및 임의로 보조제 및/또는 충전제와 함께 혼합, 특히 분산 및/또는 에멀전화 및/또는 용해되는 것을 특징으로 하는, 상기 유형의 제제의 제조 방법에 관한 것이다.

[0138] 적합한 보조제 또는 충전제는 하기에 기술된다.

[0139] 화학식 I 의 화합물은 피부 또는 모발을 염색하는데 적합한 염료이므로 착색제의 성분일 될 수도 있다.

[0140] 상술된 바와 같은 또는 바람직하게 기술된 바와 같은 화학식 I 의 화합물은 바람직한 적용에 있어서, 예를 들어, 착색된 세팅 조성물, 착색된 블로우-드라이 로션, 착색된 블로우-드라이 폼, 착색된 린스, 착색된 젤 또는 착색된 크림으로부터 선택되는 케라틴-함유 섬유 염색용, 특히 인간 모발 염색용 조성물에서 사용될 수 있다. 그러나, 상기 화합물은 영구 모발 염색용 조성물, 예를 들어 복합성분계에 존재할 수 있다.

[0141] 케라틴-함유 섬유는 바람직하게는 인간 모발, 울, 펠트 또는 털을 의미한다. 그러나, 본 발명에 따른 화합물은 원칙적으로 예를 들어, 면, 황마, 사이잘삼, 린넨 또는 실크와 같은 다른 천연 섬유를 염색하거나, 또는 예를 들어, 재생된 셀룰로오스, 니트로-, 알킬- 또는 히드록시알킬- 또는 아세틸-셀룰로오스와 같은 개질된 천연 섬유를 염색하는데 적합하다. 케라틴-함유 섬유는 특히 바람직하게는 인간 모발이다.

[0142] 상술된 바와 같은 케라틴-함유 섬유 염색을 위한 상응하는 조성물은, 바람직하게는 각 경우에서 전체 조성물에 대해 화학식 I 의 화합물(들)을 0.01 중량% 초과 10 중량% 미만의 양으로 포함한다. 케라틴-함유 섬유 염색을 위한 바람직한 조성물은 화학식 I 의 화합물(들) 을 각 경우에서 전체 조성물에 대해 0.05 내지 5 중량%, 바람직하게는 0.1 내지 2.5 중량%, 특히 바람직하게는 0.25 내지 1.5 중량% 및 특히 0.4 내지 1 중량% 의 양으로 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0143] 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 해당하는 조성물은 상술된 바와 같은 케라틴-함유 섬유, 특히 인간 모발의 색을 변화시키기 위해 제공된다. 색 변화는 오로지 화학식 I 의 화합물(들) 로 인해 일어날 수 있지만, 조성물은 또한 추가의 색을 변화시키는 물질, 예를 들어 추가의 직접 염료 및/또는 산화 착색제를 추가로 포함할 수 있다.

[0144] 상술된 바와 같은, 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 케라틴-함유 섬유 염색용 조성물은, 단일 성분 조성물, 2-성분 조성물 또는 3-성분 조성물로서 제형화되어 서로 맞게 사용될 수 있다. 다성분계에서의 분리는 특히, 성분들의 불친화성이 예상되거나 우려되는 경우 적절하다. 상기 계의 경우, 사용되는 조성물은 소비자가 적용 직전에 성분들을 혼합하여 제조한다.

[0145] 본 발명은 또한 상술되거나 바람직한 것으로서 기술된 바와 같은 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 케라틴-함유 섬유 염색용 조성물을 매일 적어도 한번 또는 적어도 두번 또는 다수 연속적으로 케라틴-함유 섬유에 적용시키고 얼마 동안, 보통 20 내지 45 분 정도 섬유를 방치시킨 후, 다시 헹구거나 샴푸로 세정하는 것을 포함하는 케라틴-함유 섬유의 염색 방법에 관한 것이다.

[0146] 그러나, 케라틴-함유 섬유의 전처리를 수행한 다음 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 조성물을 적용하는 것이 가능하다.

[0147] 게다가, 예를 들어, 추가 색순응을 수행할 수 있기 위해서, 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 조성물은 추가 산화 염료 성분을 포함할 수 있다.

[0148] 커플러 성분은 일반적으로 현색제 (developer) 성분의 산화된 형태에 의해 커플러의 화학 라디칼의 하나 이상의 치환을 가능하게 한다. 여기서 커플러와 현색제 성분 사이에 공유 결합이 형성된다. 커플러는 바람직하게는 (i) 임의로 치환 아미노기 및/또는 (ii) 히드록실기로부터 선택되는 고리에 2 개 이상의 기를 지니는 시클릭 화합물이다. 이러한 기는 이중 결합계를 통해 공액에 있다. 시클릭 화합물이 6-원 고리인 경우, 상기 기는 바람직하게는 서로 오르토-위치 또는 메타-위치에 놓여진다.

[0149] 현색제 성분 및 커플러 성분은 일반적으로 서로에 대략 몰량으로 적용된다. 몰 사용이 유리한 것으로 입증되면, 특정 과량의 각각의 산화 염료 전구체가 불리하지 않고, 이는 현색제 성분 및 커플러 성분이 1:0.5 내지 1:3, 특히 1:1 내지 1:2 의 몰비일 수 있음을 의미한다.

[0150] 상기 현색제 유형의 적합한 산화 염료 성분은 p-페닐렌디아민 및 이의 유도체이다. 적합한 p-페닐렌디아민은 p-페닐렌디아민, p-톨릴렌디아민, 2-클로로-p-페닐렌디아민, 2,3-디메틸-p-페닐렌디아민, 2,6-디메틸-p-페닐렌디아민, 2,6-디에틸-p-페닐렌디아민, 2,5-디메틸-p-페닐렌디아민, N,N-디메틸-p-페닐렌디아민, N,N-디에틸-p-

페닐렌디아민, N,N-디프로필-p-페닐렌디아민, 4-아미노-3-메틸-(N,N-디에틸)아닐린, N,N-비스-(2-히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, 4-N,N-비스-(2-히드록시에틸)아미노-2-메틸아닐린, 4-N,N-비스-(2-히드록시에틸)아미노-2-클로로아닐린, 2-(2-히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, 2-(1,2-디히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, 2-플루오로-p-페닐렌디아민, 2-이소프로필-p-페닐렌디아민, N-(2-히드록시프로필)-p-페닐렌디아민, 2-히드록시메틸-p-페닐렌디아민, N,N-디메틸-3-메틸-p-페닐렌디아민, N-에틸-N-2-히드록시에틸-p-페닐렌디아민, N-(2,3-디히드록시프로필)-p-페닐렌디아민, N-(4'-아미노페닐)-p-페닐렌디아민, N-페닐-p-페닐렌디아민, 2-(2-히드록시에틸옥시)-p-페닐렌디아민, 2-메톡시메틸-p-페닐렌디아민, 2-(2-아세틸아미노에틸옥시)-p-페닐렌디아민, N-(2-메톡시에틸)-p-페닐렌디아민, N-(4-아미노-3-메틸페닐)-N-[3-(1H-이미다졸-1-일)프로필]아민, 5,8-디아미노벤조-1,4-디옥산 및 이의 생리학적으로 용인된 염으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다. 더욱 적합한 p-페닐렌디아민 유도체는 p-페닐렌디아민, p-톨릴렌디아민, 2-(2-히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, 2-(1,2-디히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, N,N-비스-(2-히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, N-(4-아미노-3-메틸페닐)-N-[3-(1H-이미다졸-1-일)-프로필]아민, 2-메톡시메틸-p-페닐렌디아민 및 상기 화합물의 생리학적으로 용인된 염의 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0151] 사용될 수 있는 더욱 적합한 현색제 성분은 아미노 및/또는 히드록실기로 치환되는 2 개 이상의 방향족 고리를 함유하는 화합물이다. 더욱 적합한 현색제 성분은 N,N'-비스-(2-히드록시에틸)-N,N'-비스-(4'-아미노페닐)-1,3-디아미노프로판-2-올, N,N'-비스-(2-히드록시에틸)-N,N'-비스-(4'-아미노페닐)에틸렌디아민, N,N'-비스-(4'-아미노페닐)테트라메틸렌디아민, N,N'-비스-(2-히드록시에틸)-N,N'-비스-(4'-아미노페닐)테트라메틸렌디아민, N,N'-비스-(4-(메틸-아미노)페닐)테트라메틸렌디아민, N,N'-디에틸-N,N'-비스-(4'-아미노-3'-메틸페닐)에틸렌디아민, 비스-(2-히드록시-5-아미노페닐)-메탄, N,N'-비스-(4'-아미노페닐)-1,4-디아자시클로헵탄, N,N'-비스-(2-히드록시-5-아미노벤질)피페라진, N-(4'-아미노페닐)-p-페닐렌디아민 및 1,10-비스-(2',5'-디아미노페닐)-1,4,7,10-테트라옥사데칸 및 이의 생리학적으로 허용되는 염으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다. 더욱 적합한 바이시클릭 현색제 성분은 N,N'-비스-(2-히드록시에틸)-N,N'-비스-(4-아미노페닐)-1,3-디아미노프로판-2-올, 비스-(2-히드록시-5-아미노페닐)메탄, 1,3-비스-(2,5-디아미노페녹시)-프로판-2-올, N,N'-비스-(4-아미노페닐)-1,4-디아자-시클로-헵탄, 1,10-비스-(2,5-디아미노페닐)-1,4,7,10-테트라옥사데칸 또는 상기 화합물들의 생리학적으로 허용되는 염들 중 하나로부터 선택된다.

[0152] p-아미노페놀 유도체 또는 이의 생리학적으로 허용된 염들 중 하나를 현색제 성분으로서 사용하는 것이 또한 가능할 수 있다. 바람직한 p-아미노페놀은 p-아미노페놀, N-메틸-p-아미노페놀, 4-아미노-3-메틸페놀, 4-아미노-3-플루오로페놀, 2-히드록시메틸아미노-4-아미노페놀, 4-아미노-3-히드록시메틸페놀, 4-아미노-2-(2-히드록시에톡시)페놀, 4-아미노-2-메틸페놀, 4-아미노-2-히드록시메틸페놀, 4-아미노-2-메톡시메틸페놀, 4-아미노-2-아미노메틸페놀, 4-아미노-2-(2-히드록시에틸아미노메틸)페놀, 4-아미노-2-(1,2-디히드록시에틸)페놀, 4-아미노-2-플루오로페놀, 4-아미노-2-클로로페놀, 4-아미노-2,6-디클로로페놀, 4-아미노-2-(디에틸아미노메틸)페놀 및 이의 생리학적으로 용인된 염이다. 특히 바람직한 화합물은 p-아미노페놀, 4-아미노-3-메틸페놀, 4-아미노-2-아미노메틸페놀, 4-아미노-2-(1,2-디히드록시에틸)페놀 및 4-아미노-2-(디에틸아미노메틸)페놀이다.

[0153] 게다가, 현색제 성분은 o-아미노페놀 및 이의 유도체, 예를 들어, 2-아미노-4-메틸페놀, 2-아미노-5-메틸페놀 또는 2-아미노-4-클로로페놀로부터 선택될 수 있다.

[0154] 게다가, 현색제 성분은 헤테로시클릭 현색제 성분, 예를 들어, 피리미딘 유도체, 피라졸 유도체, 피라졸로피리미딘 유도체 또는 이의 생리학적으로 허용되는 염으로부터 선택될 수 있다. 바람직한 피리미딘 유도체는 특히, 화합물 2,4,5,6-테트라아미노피리미딘, 4-히드록시-2,5,6-트리아미노피리미딘, 2-히드록시-4,5,6-트리아미노피리미딘, 2-디메틸아미노-4,5,6-트리아미노피리미딘, 2,4-디히드록시-5,6-디아미노피리미딘 및 2,5,6-트리아미노피리미딘이다. 더욱 적합한 피라졸 유도체는 4,5-디아미노-1-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-(2-히드록시에틸)피라졸, 3,4-디아미노피라졸, 4,5-디아미노-1-(4'-클로로벤질)피라졸, 4,5-디아미노-1,3-디메틸피라졸, 4,5-디아미노-3-메틸-1-페닐피라졸, 4,5-디아미노-1-메틸-3-페닐피라졸, 4-아미노-1,3-디메틸-5-히드라지노피라졸, 1-벤질-4,5-디아미노-3-메틸피라졸, 4,5-디아미노-3-t-부틸-1-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-t-부틸-3-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-(2-히드록시에틸)-3-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-에틸-3-메틸-피라졸, 4,5-디아미노-1-에틸-3-(4-메톡시페닐)피라졸, 4,5-디아미노-1-에틸-3-히드록시메틸피라졸, 4,5-디아미노-3-히드록시메틸-1-메틸-피라졸, 4,5-디아미노-3-히드록시메틸-1-이소프로필피라졸, 4,5-디아미노-3-메틸-1-이소프로필피라졸, 4-아미노-5-(2-아미노에틸)아미노-1,3-디-메틸-피라졸, 및 이의 생리학적으로 용인된 염, 특히 4,5-디아미노-1-(2-히드록시에틸)피라졸로부터 선택되는 화합물이다. 적합한 피라졸로-피리미딘은 특히, 피라졸로[1,5-a]피리미딘이고, 여기서 바람직한 피라졸로-[1,5-a]-피리미딘은 피라졸로-[1,5-a]-피리미딘-3,7-디아민, 2,5-디메틸피라졸

로[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민, 피라졸로-[1,5-a]-피리미딘-3,5-디아민, 2,7-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,5-디아민, 3-아미노-피라졸로[1,5-a]-피리미딘-7-올, 3-아미노피라졸로-[1,5-a]-피리미딘-5-올, 2-(3-아미노-피라졸로[1,5-a]피리미딘-7-일아미노)에탄올, 2-(7-아미노-피라졸로-[1,5-a]-피리미딘-3-일아미노)에탄올, 2-[(3-아미노-피라졸로-[1,5-a]-피리미딘-7-일)-(2-히드록시에틸)아미노]에탄올, 2-[(7-아미노-피라졸로-[1,5-a]피리미딘-3-일)-(2-히드록시에틸)아미노]에탄올, 5,6-디메틸-피라졸로-[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민, 2,6-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민, 3-아미노-7-디메틸아미노-2,5-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘 및 이의 생리학적으로 용인된 염 및 이의 호변이성체 형태로부터 선택된다.

[0155] 더욱 적합한 현색제 성분은 p-페닐렌디아민, p-톨릴렌디아민, 2-(2-히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, 2-(1,2-디히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, N,N-비스-(2-히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, 2-메톡시메틸-p-페닐렌디아민, N-(4-아미노-3-메틸페닐)-N-[3-(1H-이미다졸-1-일)프로필]아민,
N,M-비스-(2-히드록시에틸)-N,N'-비스-(4-아미노페닐)-1,3-디아미노프로판-2-올, 비스-(2-히드록시-5-아미노페닐)-메탄, 1,3-비스-(2,5-디아미노페녹시)-프로판-2-올, N,N'-비스-(4-아미노페닐)-1,4-디아자-시클로-헵탄, 1,10-비스-(2,5-디-아미노페닐)-1,4,7,10-테트라옥사데칸, p-아미노페놀, 4-아미노-3-메틸페놀, 4-아미노-2-아미노메틸페놀, 4-아미노-2-(1,2-디히드록시에틸)페놀 및 4-아미노-2-(디에틸아미노메틸)페놀, 4,5-디아미노-1-(2-히드록시에틸)피라졸, 2,4,5,6-테트라아미노피리미딘, 4-히드록시-2,5,6-트리아미노피리미딘, 2-히드록시-4,5,6-트리아미노피리미딘, 및 상기 화합물의 생리학적으로 허용되는 염으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다. 여기서 더욱 적합한 현색제 성분은 p-톨릴렌디아민, 2-(2-히드록시에틸)-p-페닐렌디아민, 2-메톡시메틸-p-페닐렌디아민, N-(4-아미노-3-메틸페닐)-N-[3-(1H-이미다졸-1-일)프로필]아민, 및/또는 4,5-디아미노-1-(2-히드록시에틸)피라졸 및 이의 생리학적으로 용인된 염이다.

[0156] 현색제 성분은 각 경우에서 전체 착색제에 대해 바람직하게는 0.0001 내지 10 중량%, 바람직하게는 0.001 내지 5 중량% 의 양으로 사용된다.

[0157] 커플러 유형의 적합한 산화 염료 성분은 바람직하게는 m-아미노페놀 및/또는 이의 유도체, m-디아미노벤젠 및/또는 이의 유도체, o-디아미노벤젠 및/또는 이의 유도체, o-아미노페놀 및/또는 이의 유도체, 하나 이상의 히드록실기를 함유하는 나프탈렌 유도체, 디- 또는 트리히드록시벤젠 및/또는 이의 유도체, 피리딘 유도체, 피리미딘 유도체, 모노히드록시인돌 유도체 및/또는 모노아미노인돌 유도체, 모노히드록시인돌린 유도체 및/또는 모노아미노인돌린 유도체, 피라졸론 유도체, 예를 들어, 1-페닐-3-메틸피라졸-5-온, 모르폴린 유도체, 예를 들어, 6-히드록시벤조모르폴린 또는 6-아미노벤조모르폴린, 퀴녹살린 유도체, 예를 들어, 6-메틸-1,2,3,4-테트라히드로퀴녹살린, 및/또는 상기 부류의 하나 이상으로부터 둘 이상의 화합물의 혼합물로부터 선택된다.

[0158] 사용될 수 있는 추가 커플러 성분, 예컨대 m-아미노페놀 또는 이의 유도체는 바람직하게는 3-아미노페놀, 5-아미노-2-메틸페놀, N-시클로펜틸-3-아미노페놀, 3-아미노-2-클로로-6-메틸페놀, 2-히드록시-4-아미노페녹시에탄올, 2,6-디메틸-3-아미노페놀, 3-트리플루오로아세틸아미노-2-클로로-6-메틸페놀, 5-아미노-4-클로로-2-메틸페놀, 5-아미노-4-메톡시-2-메틸페놀, 5-(2'-히드록시에틸)아미노-2-메틸페놀, 3-디에틸아미노페놀, N-시클로펜틸-3-아미노페놀, 1,3-디히드록시-5-(메틸아미티오)벤젠, 3-에틸아미노-4-메틸페놀, 2,4-디클로로-3-아미노페놀 및 이의 생리학적으로 용인된 염으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0159] 사용될 수 있는 추가 커플러 성분, 예를 들어, 3-디아미노벤젠 또는 이의 유도체는 바람직하게는 m-페닐렌디아민, 2-(2,4-디-아미노페녹시)에탄올, 1,3-비스(2,4-디아미노페녹시)프로판, 1-메톡시-2-아미노-4-(2'-히드록시에틸아미노)벤젠, 1,3-비스(2,4-디아미노페닐)프로판, 2,6-비스(2'-히드록시에틸아미노)-1-메틸벤젠, 2-({3-[(2-히드록시에틸)아미노]-4-메톡시-5-메틸페닐}아미노)에탄올, 2-({3-[(2-히드록시에틸)아미노]-2-메톡시-5-메틸페닐}아미노)에탄올, 2-({3-[(2-히드록시에틸)아미노]-4,5-디메틸페닐}아미노)에탄올, 2-[3-모르폴린-4-일페닐)아미노]에탄올, 3-아미노-4-(2-메톡시에톡시)-5-메틸페닐-아민, 1-아미노-3-비스-(2'-히드록시에틸)아미노벤젠 및 이의 생리학적으로 용인된 염으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0160] 사용될 수 있는 추가 커플러 성분, 예를 들어, o-디아미노벤젠 또는 이의 유도체는 바람직하게는 3,4-디아미노벤조산 및 2,3-디아미노-1-메틸벤젠 및 이의 생리학적으로 용인된 염으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0161] 사용될 수 있는 추가 커플러 성분, 예를 들어, 디- 또는 트리히드록시벤젠 및 이의 유도체는 레조르시놀, 레조르시놀 모노메틸 에테르, 2-메틸레조르시놀, 5-메틸레조르시놀, 2,5-디메틸레조르시놀, 2-클로로레조르시놀, 4-클로로레조르시놀, 피로갈롤 및 1,2,4-트리히드록시벤젠으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0162] 사용될 수 있는 추가 커플러 성분, 예를 들어, 피리딘 유도체는 2,6-디히드록시피리딘, 2-아미노-3-히드록시피리딘, 2-아미노-5-클로로-3-히드록시피리딘, 3-아미노-2-메틸아미노-6-메톡시피리딘, 2,6-디히드록시-3,4-디메틸피리딘, 2,6-디히드록시-4-메틸-피리딘, 2,6-디아미노피리딘, 2,3-디아미노-6-메톡시피리딘, 3,5-디아미노-2,6-디메톡시피리딘, 3,4-디아미노피리딘, 2-(2-메톡시에틸)아미노-3-아미노-6-메톡시피리딘, 2-(4'-메톡시페닐)아미노-3-아미노피리딘 및 이의 생리학적으로 용인된 염으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0163] 커플러 성분으로서 적합한 하나 이상의 히드록실기를 함유하는 나프탈렌 유도체는 1-나프톨, 2-메틸-1-나프톨, 2-히드록시메틸-1-나프톨, 2-히드록시에틸-1-나프톨, 1,3-디히드록시나프탈렌, 1,5-디히드록시나프탈렌, 1,6-디히드록시나프탈렌, 1,7-디히드록시나프탈렌, 1,8-디히드록시나프탈렌, 2,7-디히드록시나프탈렌 및 2,3-디히드록시나프탈렌으로 형성된 군의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0164] 커플러 성분으로서 적합한 인돌 유도체는 4-히드록시인돌, 6-히드록시인돌 및 7-히드록시인돌 및 이의 생리학적으로 허용되는 염으로부터 선택된다.

[0165] 커플러 성분으로서 적합한 인돌린 유도체는 바람직하게는 4-히드록시인돌린, 6-히드록시인돌린 및 7-히드록시인돌린 및 이의 생리학적으로 용인된 염으로부터 선택된다.

[0166] 커플러 성분로서 적합한 피리미딘 유도체는 4,6-디아미노피리미딘, 4-아미노-2,6-디히드록시피리미딘, 2,4-디아미노-6-히드록시피리미딘, 2,4,6-트리히드록시피리미딘, 2-아미노-4-메틸피리미딘, 2-아미노-4-히드록시-6-메틸피리미딘 및 4,6-디히드록시-2-메틸피리미딘 및 이의 생리학적으로 용인된 염으로 형성된 군으로부터의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다.

[0167] 적합한 커플러 성분은 하기로부터 선택된다: 3-아미노페놀, 5-아미노-2-메틸페놀, 3-아미노-2-클로로-6-메틸페놀, 2-히드록시-4-아미노페녹시에탄올, 5-아미노-4-클로로-2-메틸페놀, 5-(2-히드록시에틸)아미노-2-메틸페놀, 2,4-디클로로-3-아미노페놀, 2-아미노페놀, 3-페닐렌디아민, 2-(2,4-디아미노페녹시)에탄올, 1,3-비스(2,4-디아미노페녹시)프로판, 1-메톡시-2-아미노-4-(2-히드록시에틸아미노)벤젠, 1,3-비스(2,4-디아미노페닐)프로판, 2,6-비스(2'-히드록시에틸아미노)-1-메틸벤젠, 2-({3-[(2-히드록시에틸)아미노]-4-메톡시-5-메틸페닐}아미노)에탄올, 2-({3-[(2-히드록시에틸아미노]-2-메톡시-5-메틸페닐}아미노)에탄올, 2-({3-[(2-히드록시에틸)아미노]-4,5-디메틸페닐}아미노)에탄올, 2-[3-모르폴린-4-일페닐)아미노]에탄올, 3-아미노-4-(2-메톡시에톡시)-5-메틸페닐아민, 1-아미노-3-비스-(2-히드록시에틸)아미노벤젠, 레조르시놀, 2-메틸레조르시놀, 4-클로로레조르시놀, 1,2,4-트리-히드록시벤젠, 2-아미노-3-히드록시피리딘, 3-아미노-2-메틸아미노-6-메톡시피리딘, 2,6-디히드록시-3,4-디메틸피리딘, 3,5-디아미노-2,6-디메톡시피리딘, 1-페닐-3-메틸피라졸-5-온, 1-나프톨, 1,5-디히드록시나프탈렌, 2,7-디히드록시나프탈렌, 1,7-디히드록시나프탈렌, 1,8-디히드록시나프탈렌, 4-히드록시인돌, 6-히드록시인돌, 7-히드록시인돌, 4-히드록시인돌린, 6-히드록시인돌린, 7-히드록시인돌린 또는 이들 화합물의 혼합물 또는 이의 생리학적으로 용인된 염. 특히 바람직한 것은 레조르시놀, 2-메틸레조르시놀, 5-아미노-2-메틸페놀, 3-아미노페놀, 2-(2,4-디아미노페녹시)에탄올, 1,3-비스-(2,4-디아미노페녹시)프로판, 1-메톡시-2-아미노-4-(2'-히드록시에틸아미노)벤젠, 2-아미노-3-히드록시피리딘 및 1-나프톨 및 이의 생리학적으로 용인된 염들 중 하나로 제공된다.

[0168] 커플러 성분은 각 경우에서 전체 조성물에 대해 바람직하게는 0.0001 내지 10 중량%, 바람직하게는 0.001 내지 5 중량% 의 양으로 사용된다.

[0169] 또한, 본 발명에 따른 조성물은 하나 이상의 추가 직접 염료를 포함할 수 있다. 이들은 모발에 직접 흡착되고 색의 형성을 위한 산화 과정이 필요 없는 염료이다. 직접 염료는 보통 니트로페닐렌디아민, 니트로아미노페놀, 아조 염료, 안트라퀴논 또는 인도페놀이다.

[0170] 직접 염료는 각 경우에서 바람직하게는 전체 제제에 대해 0.001 내지 20 중량% 의 양으로 사용된다. 직접 염료의 전체량은 바람직하게는 20 중량% 이하이다.

[0171] 직접 염료는 음이온, 양이온성 및 비이온성 직접 염료로 나눠질 수 있다.

[0172] 바람직한 음이온성 직접 염료는 국제적인 명칭 (INCI) 또는 상품명 Acid Yellow 1, Yellow 10, Acid Yellow 23, Acid Yellow 36, Acid Orange 7, Acid Red 33, Acid Red 52, Pigment Red 57:1, Acid Blue 7, Acid Green 50, Acid Violet 43, Acid Black 1 및 Acid Black 52 로 알려진 화합물이다.

[0173] 바람직한 양이온성 직접 염료는 하기와 같다:

[0174] (a) 양이온성 트리페닐메탄 염료, 예를 들어, Basic Blue 7, Basic Blue 26, Basic Violet 2 및 Basic Violet 14,

[0175] (b) 4차 질소기로 치환된 방향족계, 예를 들어, Basic Yellow 57, Basic red 76, Basic Blue 99, Basic Brown 16 및 Basic Brown 17, 및

[0176] (c) 언급된 바와 같은 하나 이상의 4차 질소 원자를 함유하는 헤테로사이클을 함유한 직접 염료, 예를 들어, 본원에 명시적으로 참조인용된 EP-A2-998 908 의 청구항 6 내지 11 에 있음.

[0177] 적합한 비이온성 직접 염료는 특히, 비이온성 니트로 및 퀴논 염료 및 중성 아조 염료이다.

[0178] 게다가 사용될 수 있는 직접 염료는 또한 예를 들어, 레드 헤나, 뉴트럴 헤나, 블랙 헤나, 카모마일 블로섬, 샌달우드, 블랙티, 앨더 벅손 껍질, 세이지, 로그우드, 꼭두서니 뿌리, 카테쿠, 세드레 및 알카넷 뿌리에 존재하는 바와 같이 천연유래 염료일 수 있다.

[0179] 색을 변화시키기 위한 추가 가능성은 소위 옥소 염료 전구체를 포함하는 착색제의 사용에 의해 제공된다. 옥소 염료 전구체의 제 1 부류는 하나 이상의 반응성 카르보닐기를 함유하는 화합물이다. 상기 제 1 부류는 성분 (옥소1) 로한다. 옥소 염료 전구체의 제 2 부류는 CH-산성 화합물 및 1차 또는 2차 아미노기 또는 히드록실기를 함유하는 화합물로 형성되고, 결국 1차 또는 2차 방향족 아민으로 형성된 군으로부터의 화합물, 질소-함유 헤테로시클릭 화합물 및 방향족 히드록실 화합물로부터 선택된다. 그러한 제 2 부류를 성분 (옥소2) 로 한다. 상기 언급된 성분 (옥소1) 및 (옥소2) 는 일반적으로 그 자체가 염료가 아니므로, 각각 단독으로 사용하는 것은 케라틴-함유 섬유를 염색하는데 적합하지 않다. 그들은 조합시, 비산화 공정으로 염료를 형성하고, 소위 옥소 염색이라 한다. 그결과 형성된 염색은 일부 경우 산화 염색의 것과 비교했을 때 케라틴-함유 섬유에 대해 염색 견뢰도를 갖는다.

[0180] 사용되는 옥소 염료 전구체는 바람직하게는 하기의 조합이다:

[0181] - 하나 이상의 반응성 카르보닐기를 함유하는 하나 이상의 화합물 (성분 (옥소1)) 및 하나 이상의 화합물 (성분 옥소2) 의 조합

[0182] - (옥소2a) CH-산성 화합물로부터 선택되는 화합물

[0183] 및/또는 1차 또는 2차 방향족 아민으로 형성된 군으로부터 하나 이상의 화합물, 질소-함유 헤테로시클릭 화합물 및 방향족 히드록실 화합물로부터 선택되는 1차 또는 2차 아미노기 또는 히드록실기를 함유하는 (옥소2b) 화합물.

[0184] 본 발명의 의미에서 성분 (옥소1) 로서 반응성 카르보닐 화합물은 공유 결합이 형성된 성분 (옥소2) 과 반응하는 반응성 기로서 하나 이상의 카르보닐을 함유한다. 바람직한 반응성 카르보닐 화합물은 하나 이상의 포르밀기 및/또는 하나 이상의 케토기, 특히 하나 이상의 포르밀기를 지닌 화합물로부터 선택된다. 본 발명에 따르면 반응성 카르보닐기가 유도체화된 카르보닐기의 탄소 원자와 성분 (옥소2) 의 반응성이 여전히 존재하도록 유도체화되거나 마스킹된 화합물의 성분 (옥소1) 로서 사용할 수 있다. 이러한 유도체는 바람직하게는 반응성 카르보닐 화합물의 카르보닐기의 탄소 원자 상의

[0185] a) 부가 화합물로서 이민 또는 옥심의 형성에 따른 아민 및 이의 유도체

[0186] b) 부가 화합물로서 아세탈 또는 케탈의 형성에 따른 알코올

[0187] c) 부가 화합물로서 수화물의 형성에 따른 물

[0188] (성분 (옥소1) 는 상기 경우 c) 에서 알데히드로부터 유도됨)

[0189] 의 첨가 화합물이다.

[0190] 옥소 염색의 목적을 위해 사용된 반응성 카르보닐 성분은 매우 특히 바람직하게는 벤즈알데히드 및/또는 시남알데히드 및/또는 나프트알데히드 및/또는 상기 언급된 알데히드 중 하나 이상의 유도체, 특히, 하나 이상의 히드록실, 알콕시 또는 아미노 치환기를 지닌 것이다.

[0191] CH-산성 화합물은 일반적으로 지방족 탄소 원자에 결합된 수소 원자는 지닌 화합물로 간주되고, 상기 화합물에서 전자-끄는 치환기 덕분에, 상응하는 탄소-수소 결합이 활성화된다. 이론상, 육안으로 착색된 것이 보이는 화합물이 성분 (옥소1)의 반응성 카르보닐 화합물과의 조합 후 수득되는 한 CH-산성 화합물의 선택은 비제한

적이다. 본 발명에 따르면, 이들은 바람직하게는 방향족 및/또는 헤테로시클릭 라디칼을 함유하는 CH-산성 화합물이다. 헤테로시클릭 라디칼은 결국 지방족 또는 방향족이 될 수 있다. CH-산성 화합물은 특히 바람직하게는 헤테로시클릭 화합물, 특히 양이온, 헤테로시클릭 화합물로부터 선택된다.

[0192] 성분 (옥소2a) 의 옥소 염료 전구체의 CH-산성 화합물은 매우 특히 바람직하게는 하기로 이루어진 군으로부터의 하나 이상의 화합물로부터 선택된다: 2-(2-푸로일)아세토니트릴, 2-(5-브로모-2-푸로일)아세토니트릴, 2-(5-메틸-2-트리플루오로메틸-3-푸로일)아세토니트릴, 3-(2,5-디메틸-3-푸릴)-3-옥소프로판니트릴, 2-(2-테노일)아세토니트릴, 2-(3-테노일)아세토니트릴, 2-(5-플루오로-2-테노일)아세토니트릴, 2-(5-클로로-2-테노일)아세토니트릴, 2-(5-브로-2-테노일)아세토니트릴, 2-(2,5-디메틸피롤-3-오일)아세토니트릴, 1H-벤즈이미다졸-2-일아세토니트릴, 1H-벤조티아졸-1-일아세토니트릴, 2-(피리드-2-일)아세토니트릴, 2,6-비스(시아노메틸)피리딘, 2-(인돌-3-오일)아세토니트릴, 8-캔아세틸-7-메톡시-4-메틸쿠마린, 2-(퀴녹살린-2-일)아세토니트릴, 1,2,3,3-테트라메틸-3H-인돌륨 이오다이드, 1,2,3,3-테트라메틸-3H-인돌륨 메탄술포네이트, 2,3-디메틸벤조티아졸륨 이오다이드, 1,2-디히드로1,3-디에틸-4,6-디메틸-2-옥소피리미디늄 수소술페이트, 1,2-디히드로-1,3,4,6-테트라메틸-2-티옥소피리미디늄 클로라이드, 1,2-디히드로-1,3-디에틸-4-메틸-2-티옥소피리미디늄 수소술페이트, 1,2-디히드로-1,3-디프로필-4-메틸-2-티옥소피리미디늄 클로라이드 및 1,2-디히드로-1,3-디프로필-4-메틸-2-티옥소피리미디늄 수소술페이트.

[0193] 또한, 사용된 성분 (옥소2b) 은 하나 이상의 1차 또는 2차 아미노기 및/또는 하나 이상의 히드록실기를 함유하는 하나 이상의 산화 염료 전구체일 수 있다. 바람직하게는 적합한 대표물질은 산화 염료 전구체의 설명에 제공된다. 그러나, 본 발명에 따르면 성분 (옥소2) 의 화합물은 오로지 CH-산성 화합물로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0194] 성분 (옥소1) 및 성분 (옥소2) 의 상기 언급된 화합물은, 이들이 사용되는 경우, 각 경우에서 100 g 의 전체 조성물에 대해 바람직하게는 0.03 내지 65 mmol, 특히 1 내지 40 mmol 의 양으로 사용된다.

[0195] 상술된 바와 같은, 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 모발 염색용 조성물은 특히 바람직하게는 추가적으로 과산화수소를 포함한다. 케라틴-함유 섬유를 염색하고 임의로 동시에 라이트닝하기 위한 상기 유형의 조성물은 특히 바람직하게는 0.5 내지 15 중량%, 바람직하게는 1 내지 12.5 중량%, 특히 바람직하게는 2.5 내지 10 중량% 및 특히 3 내지 6 중량% 의 과산화수소 (100% H_2O_2 로서 계산됨) 를 포함하는 것이다.

[0196] 과산화수소는 또한 고체 지지체 상의 첨가 화합물의 형태로 사용될 수 있고, 바람직하게는 과산화수소 그 자체가 사용된다. 과산화수소는 용액으로서 또는 무기 또는 유기 화합물 상의 과산화수소의 고체 첨가 화합물의 형태, 예를 들어, 나트륨 퍼보레이트, 나트륨 퍼카르보네이트, 마그네슘 퍼카르보네이트, 나트륨 퍼카르바미드, 폴리비닐피롤리돈 nH_2O_2 (n 은 0 초과의 양의 정수임), 우레아 퍼옥시드 및 멜라민 퍼옥시드로서 사용된다.

[0197] 매우 특히 바람직한 것은 과산화수소 수용액이다. 과산화수소 용액의 농도는 한편으로는 합법적 설명서에 따라 다른 한편으로는 원하는 효과에 따라 결정된다; 수중 6 내지 12 % 용액이 사용하기에 바람직하다.

[0198] 기질, 예를 들어 모발의 라이트닝 또는 탈색에 의한 색 변화를 위해, 화장 조성물에서 산화제 이외에 하나 이상의 탈색 향상제가 바람직하게는 추가적으로 사용된다.

[0199] 탈색 향상제는 바람직하게는 산화제, 특히 과산화수소의 탈색-작용을 증가시키기 위해서 사용된다. 적합한 탈색 향상제는 하기와 같다:

[0200] (BV-i) 과가수분해 조건 하에 지방족 퍼옥소카르복실산 및/또는 임의로 치환 퍼벤조산을 발생시키는 화합물,

[0201] 및/또는

[0202] (BV-ii) 탄산염 및/또는 탄산수소염,

[0203] 및/또는

[0204] (BV-iii) 유기 탄산염,

[0205] 및/또는

[0206] (BV-iv) 카르복실산,

[0207] 및/또는

[0208] (BV-v) 퍼옥소 화합물.

[0209] 탈색 향상제는 바람직하게는 퍼옥소 화합물, 특히 무기 퍼옥소 화합물이다. 탈색을 향상시키는 퍼옥소 화합물은 다른 성분에 대한 과산화수소의 임의의 부가 생성물 또는 과산화수소 그 자체를 포함하지 않는다. 추가적으로, 퍼옥소 화합물의 선택은 임의의 제한이 없다. 바람직한 퍼옥소 화합물은 퍼옥시디술페이트 염, 퍼술페이트 염, 퍼옥시디포스페이트 염 (특히 암모늄 퍼옥시디술페이트, 칼륨 퍼옥시디술페이트, 나트륨 퍼옥시디술페이트, 암모늄 퍼술페이트, 칼륨 퍼술페이트, 나트륨 퍼술페이트, 칼륨 퍼옥시디포스페이트) 및 퍼옥시드 (예컨대 바륨 퍼옥시드 및 마그네슘 퍼옥시드) 이다. 조합으로 사용될 수 있는 상기 퍼옥소 화합물들 중에서, 본 발명에 따라 바람직한 것은 퍼옥시디술페이트, 특히 암모늄 퍼옥시디술페이트이다. 바람직한 것은 암모늄, 알칼리-금속 및 알칼리-토금속 퍼술페이트, 퍼옥소모노술페이트 및 퍼옥시디술페이트로부터 선택되는 0.01 내지 2 중량% 의 하나 이상의 고체 퍼옥소 화합물을 추가적으로 포함하는, 케라틴 섬유를 염색시키는 동시에 임의로 라이트닝시키는 조성물이고, 이 경우 바람직한 조성물은 바람직하게는 나트륨 퍼옥시-디술페이트 및/또는 칼륨 퍼옥시디술페이트 및/또는 암모늄 퍼옥시디술페이트로부터 선택되는 퍼옥시디술페이트이고, 바람직한 조성물은 상이한 2 개 이상의 퍼옥시디술페이트를 포함한다.

[0210] 특히 바람직한 것은 또한 퍼술페이트, 특히 Caro 의 염으로 알려진 칼륨 퍼옥소술페이트, 칼륨 수소술페이트 및 칼륨 술페이트의 혼합물이다.

[0211] 탈색 향상제는 각 경우에서 본 발명에 따른 화장 조성물에서 즉시 사용가능한 조성물의 중량을 기준으로 바람직하게는 5 내지 30 중량%, 특히 8 내지 20 중량% 의 양으로 존재한다.

[0212] 또한, 착색제 및/또는 라이트닝 조성물의 경우 비이온성 계면활성 물질을 포함하는 것이 유리한 것으로 입증되었다.

[0213] 바람직한 것은 HLB 값이 5.0 이상인 계면활성 물질이다. HLB 값의 정의에 있어서, 특별히 Hugo Janistyn, Handbuch der Kos-metika und Riechstoffe [Handbook of Cosmetics and Fragrances], Volume III: Die Koerperpflegemittel [Body-Care composition], 2nd Edition, Dr Alfred Huethig Verlag Heidelberg, 1973, pages 68-78 and Hugo Janistyn, Taschen-buch der modernen Parfuemerie and Kosmetik [Pocketbook of Modern Perfumery and Cosmetics], 4th Edition, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft m.b.H. Stuttgart, 1974, pages 466-474, 및 본원에 인용된 원논문에 있는 설명을 참조한다.

[0214] 단순한 가공성 덕분에, 특히 바람직한 비이온성 계면활성 물질은 고체 또는 액체로서 순수한 형태로 시판되는 물질이다. 이와 관련한 순도의 정의는 화학적으로 순수한 화합물에 관한 것이 아니다. 대신에, 특히 천연물의 경우, 상이한 동족체, 예를 들어 천연 지방 및 오일 기재의 생성물의 경우에서 수득되는 바와 같은 상이한 알킬 사슬 길이를 갖는 동족체의 혼합물을 이용할 수 있다. 또한 알콕시화 생성물의 경우, 상이한 알콕시화도의 혼합물이 보통 존재한다. 대신에 이와 관련된 용어 순도는 선택된 물질에 바람직하게는 용매, 증량제 및 기타 첨부 물질이 없어야 하는 사실과 관련된다.

[0215] 추가 성분으로서, 본 발명에 따른 조성물은 모발 착색제로서 염화암모늄, 탄산암모늄, 중탄산암모늄, 황산암모늄 및/또는 암모늄 카르바메이트의 군으로부터 하나 이상의 암모늄 화합물을 전체 조성물에 대해 0.5 내지 10, 바람직하게는 1 내지 5 중량% 의 양으로 포함할 수 있다.

[0216] 더욱이, 본 발명에 따른 착색제 및/또는 라이트닝 조성물은 추가 활성 화합물, 보조제 및 첨가제, 예를 들어 하기를 포함할 수 있다:

[0217] - 비이온성 중합체, 예를 들어, 비닐피롤리돈-비닐 아크릴레이트 공중합체, 폴리비닐피롤리돈 및 비닐피롤리돈-비닐 아세테이트 공중합체 및 폴리실록산,

[0218] - 양이온성 중합체, 예컨대 4차화 셀룰로오스 에테르, 4차 기를 함유하는 폴리실록산, 디메틸디알릴암모늄 클로라이드 중합체, 아크릴아미드-디메틸디알릴암모늄 클로라이드 공중합체, 디에틸 술페이트-4차화 디메틸아미노에틸 메타크릴레이트-비닐피롤리돈 공중합체, 비닐피롤리돈-이미다졸리늄 메토클로라이드 공중합체 및 4차화 폴리비닐 알코올,

[0219] - 쯔비터이온성 및 양쪽성 중합체, 예를 들어, 아크릴아미도프로필트리메틸암모늄 클로라이드-아크릴레이트 공중합체 및 옥틸아크릴아미드-메틸 메타크릴레이트-tert-부틸아미노에틸 메타크릴레이트-2-히드록시프로필 메타크릴레이트 공중합체,

[0220] - 음이온성 중합체, 예를 들어, 폴리아크릴산, 가교된 폴리아크릴산, 비닐 아세테이트-크로톤산 공중합체, 비닐

피롤리돈-비닐 아크릴레이트 공중합체, 비닐 아세테이트-부틸 말레에이트-이소보르닐 아크릴레이트 공중합체, 메틸 비닐 에테르-말레산 무수물 공중합체 및 아크릴산-에틸 아크릴레이트-N-tert-부틸아크릴아미드 삼원중합체,

[0221] - 증점제, 예컨대 아가-아가, 구아검, 알지네이트, 잔탄검, 아라비아검, 카라야검, 캐럽씨 가루, 아마씨검, 덱스트란, 셀룰로오스 유도체, 예를 들어 메틸셀룰로오스, 히드록시알킬셀룰로오스 및 카르복시메틸셀룰로오스, 전분 분획물 및 유도체, 예컨대 아밀로오즈, 아밀로펙틴 및 덱스트린, 클레이, 예를 들어, 벤토나이트 또는 완전 합성 하이드로콜로이드, 예를 들어, 폴리비닐 알코올,

[0222] - 구조화제, 예컨대 말레산 및 락트산,

[0223] - 모발-컨디셔닝 화합물, 예컨대 인지질, 예를 들어 콩 레시틴, 에그 레시틴 및 세팔린,

[0224] - 단백질 가수분해물, 특히 엘라스틴, 콜라겐, 케라틴, 우유 단백질, 콩 단백질 및 밀 단백질 가수분해물, 지방산과의 그의 축합 생성물 및 4차화 단백질 가수분해물,

[0225] - 향수 오일, 디메틸이소소르비드 및 시클로덱스트린,

[0226] - 용매 및 가용화제, 예컨대 에탄올, 이소프로판올, 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 글리세롤 및 디에틸렌 글리콜,

[0227] - 섬유 구조-향상 활성 화합물, 특히 단당류, 이당류 및 올리고당류, 예를 들어, 글루코오스, 갈락토오스, 프룩토오스, 과당 및 락토오스,

[0228] - 4차화 아민, 예컨대 메틸-1-알킬아미도에틸-2-알킬이미다졸리늄 메토술페이트

[0229] - 소포제, 예컨대 실리콘,

[0230] - 조성물을 염색하기 위한 염료,

[0231] - 항비듬성 활성 화합물, 예컨대 피록톤 올라민, 징크 오마딘 (Zink Omadine) 및 클림바졸,

[0232] - 광보호제, 특히 유도체화된 벤조페논, 신남산 유도체 및 트리아진,

[0233] - pH 조절용 물질, 예를 들어, 통상적인 산, 특히 식용 산 및 염기,

[0234] - 활성 화합물, 예컨대 판테놀, 판토텐산, 알란토인, 피롤리돈카르복실산 및 이의 염, 뿐만 아니라 비사볼올,

[0235] - 비타민, 프로비타민 및 비타민 전구체, 특히 A, B_3, B_5, B_6, C, E, F 및 H 의 군으로부터 선택된 것,

[0236] - 식물 추출물, 예컨대 녹차, 오크나무 껍질, 애기쐐기풀, 위치 하젤, 홉, 카모마일, 우엉 뿌리, 쇠뜨기, 산사나무, 린덴 블로섬, 아몬드, 알로에 베라, 스프러스 니들, 칠엽수, 샌달우드, 주니퍼, 코코넛, 망코, 살구, 라임, 밀, 키위, 멜론, 오렌지, 자몽, 세이지, 로즈메리, 자작나무, 아욱, 황새냉이 무리, 섬백리향, 서양톱풀, 타임, 레몬밤, 레스트해로, 머위, 마시멜로, 분열조직, 인삼 및 생강 뿌리의 추출물,

[0237] - 콜레스테롤,

[0238] - 점조 개질제, 예컨대 당 에스테르, 폴리올 에스테르 또는 폴리알킬 에테르,

[0239] - 지방 및 왁스, 예컨대 경랍, 밀랍, 몬탄 왁스 및 파라핀, 지방 알코올 및 지방산 에스테르,

[0240] - 지방산 알칸올아미드,

[0241] - 착화제, 예컨대 EDTA, NTA, β-알라닌디아세트산 및 포스폰산,

[0242] - 팽윤 및 침투 물질, 예컨대 글리세롤, 프로필렌 글리콜 모노에틸 에테르, 카르보네이트, 수소카르보네이트, 구아니딘, 우레아 및 1차, 2차 및 3차 포스페이트,

[0243] - 불투명화제, 예컨대 라텍스, 스티렌-PVP 및 스티렌-아크릴아미드 공중합체

[0244] - 진주광택제, 예컨대 에틸렌 글리콜 모노- 및 디스테아레이트 및 PEG-3 디스테아레이트,

[0245] - 안료,

[0246] - 과산화수소 및 다른 산화제를 위한 안정화제,

[0247] - 발포제, 예컨대 프로판/부탄 혼합물, N_2O, 디메틸 에테르, CO_2 및 공기,

[0248] - 항산화제.

[0249] 상기 언급된 활성 화합물, 보조제 및 첨가제가 또한 하나 이상의 화학식 I 의 화합물 및 화장, 약학, 피부과용 제제 또는 가정용품에 적합한 담체를 포함하는 본 발명에 따른 제제에 존재할 수 있고, 상기 제제는 예를 들어, 피부를 염색하거나 제제가 착색되어야 하는 경우에 사용된다. 그러한 제제의 성분에 관해서는 제약이 없다.

[0250] 바람직한 구현예에서, 바람직한 또는 바람직한 각각의 화합물로서 정의되거나 나타낸 치환기를 갖는 하나 이상의 화학식 I 의 화합물은 전형적으로 피부 또는 다른 기질을 염색하고 제제 자체를 염색하기 위해 본 발명에 따른 제제에 0.05 내지 10 중량% 의 양, 바람직하게는 0.1 중량% 내지 5 중량% 의 양 및 특히 바람직하게는 0.5 내지 2 중량% 의 양으로 사용된다. 당업자에게는 제제의 의도된 작용에 따라 상응하게 양을 선택하는 어려움이 전혀 없이 제공된다.

[0251] 본 발명에 따른 화학식 I 의 화합물은 또한 가정용품, 특히 투명하게 포장된 가정용품을 염색하는데 사용될 수 있다. 가정용품은 예를 들어, 식기세척 조성물, 세정 조성물 및 세제 뿐아니라 방, 자동차 및 화장실용 방향제를 포함한다.

[0252] 본 발명에 따른, 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 기술된 화장, 피부과용, 약학 제제 또는 가정용품은 또한 추가로 착색된 안료를 포함할 수 있고, 그 안료의 층구조는 한정되지 않는다.

[0253] 착색된 안료는 0.5 내지 5 중량% 사용시 바람직하게는 피부색이거나 약간 갈색을 띄어야 한다. 상응하는 안료의 선택은 당업자에게는 익숙하다.

[0254] 화학식 I 의 화합물 및 임의의 다른 성분들 이외에, 제제는 UVA 영역 및/또는 UVB 영역 및/또는 IR 및/또는 VIS 영역에 효과적인 추가 유기 UV 여과제, 소위 친수성 또는 친유성 햇빛차단 여과제 (흡수제) 를 포함할 수 있다.

상기 물질은 특히, 시남산 유도체, 살리실산 유도체, 캠퍼 유도체, 트리아진 유도체, β,β-디페닐아크릴레이트 유도체, p-아미노벤조산 유도체 및 중합체성 여과제 및 실리콘 여과제로부터 선택될 수 있고, 이는 출원 WO-93/04665 에 기술되어 있다. 유기 및 또한 무기 UV 여과제의 추가 예는 특허 출원 EP-A 0 487 404 및 WO2009/077356 에 나타나 있다. 상기 UV 여과제는 보통 INCI 명명법에 따라 하기와 같이 명명된다.

[0255] 조합에 특히 적합한 것은 하기이다:

[0256] 파라-아미노벤조산 및 이의 유도체: PABA, 에틸 PABA, 에틸 디히드록시프로필 PABA, 에틸헥실 디메틸 PABA, 예를 들어 ISP 사의 상품명 "Escalol 507" 으로 판매되는 것, 글리세릴 PABA, PEG-25 PABA, 예를 들어 BASF 사의 상품명 "Uvinul P25" 으로 판매되는 것.

[0257] 살리실레이트: Merck 사의 상품명 "Eusolex HMS" 으로 판매되는 호모살레이트; 에틸헥실 살리실레이트, 예를 들어 Symrise 사의 상품명 "Neo Heliopan OS" 으로 판매되는 것, 디프로필렌 글리콜 살리실레이트, 예를 들어 Scher 사의 상품명 "Dipsal" 으로 판매되는 것, TEA 살리실레이트, 예를 들어 Symrise 사의 상품명 "Neo Heliopan TS" 으로 판매되는 것.

[0258] β,β-디페닐아크릴레이트 유도체: 옥토크릴렌, 예를 들어 Merck 사의 상품명 "Eusolex® OCR" 으로 판매되는 것, BASF 사의 상품명 "Uvinul N539" 으로 판매되는 것, 에토크릴렌, 예를 들어 BASF 사의 상품명 "Uvinul N35" 으로 판매되는 것.

[0259] 벤조페논 유도체: 벤조페논-1, 예를 들어 상품명 "Uvinul 400" 으로 판매되는 것; 벤조페논-2, 예를 들어 상품명 "Uvinul D50" 으로 판매되는 것; 벤조페논-3 또는 옥시벤존, 예를 들어 상품명 "Uvinul M40" 으로 판매되는 것; 벤조페논-4, 예를 들어 상품명 "Uvinul MS40" 으로 판매되는 것; 벤조페논-9, 예를 들어 BASF 사의 상품명 "Uvinul DS-49" 으로 판매되는 것, 벤조페논-5, 벤조페논-6, 예를 들어 Norquay 사의 상품명 "Helisorb 11" 으로 판매되는 것, 벤조페논-8, 예를 들어 American Cyanamid 사의 상품명 "Spectra-Sorb UV-24" 으로 판매되는 것, 벤조페논-12 n-헥실 2-(4-디에틸아미노-2-히드록시벤조일) 벤조에이트 또는 2-히드록시-4-메톡시벤조페논, Merck, Darmstadt 의 상품명 Eusolex® 4360 으로 판매되는 것.

[0260] 벤질리덴캠퍼 유도체: 3-벤질리덴캠퍼, 예를 들어 Chimex 사의 상품명 "Mexoryl SD" 으로 판매되는 것, 4-메틸벤질리덴캠퍼, 예를 들어 Merck 사의 상품명 "Eusolex 6300" 으로 판매되는 것, 벤질리덴캠퍼술폰산, 예를 들어 Chimex 사의 상품명 "Mexoryl SL" 으로 판매되는 것, 캠퍼 벤잘코늄 메토술페이트, 예를 들어 Chimex 사의 상품명 "Mexoryl SO" 으로 판매되는 것, 텔레프탈일리덴디캠퍼술폰산, 예를 들어 Chimex 사의 상품명 "Mexoryl SX"

으로 판매되는 것, Chimex 사의 상품명 "Mexoryl SW" 으로 판매되는 폴리아크릴아미도메틸벤질리덴캠퍼.

[0261] 페닐벤즈이미다졸 유도체: 예를 들어 Merck 사의 상품명 "Eusolex 232" 으로 판매되는 페닐벤즈이미다졸술폰산, 예를 들어 Symrise 사의 상품명 "Neo Heliopan AP" 으로 판매되는 이나트륨 페닐 디벤즈이미다졸 테트라술포네이트.

[0262] 페닐벤조트리아졸 유도체: 예를 들어 Rhodia Chimie 사의 상품명 "Silatrizole" 으로 판매되는 드로메트리졸 트리실록산, 예를 들어 Fairmount Chemical 사의 상품명 "MIXXIM BB/100" 로 판매되는 고체 형태, 또는 예를 들어 Ciba Specialty Chemicals 사의 상품명 "Tinosorb M" 으로 판매되는 수성 분산액으로서 미분화된 형태의 메틸렌비스(벤조트리아졸릴)테트라메틸부틸페놀.

[0263] 트리아진 유도체: 예를 들어 BASF 사의 상품명 "Uvinul T150" 으로 판매되는 에틸헥실트리아존, 예를 들어 Sigma 3V 사의 상품명 "Uvasorb HEB" 으로 시판되는 디에틸헥실부타미도트리아존, 2,4,6-트리스(디이소부틸 4'-아미노벤잘말로네이트)-s-트리아진 또는 2,4,6-트리스-(바이페닐)-1,3,5-트리아진.

[0264] 안트라닐린 유도체: 예를 들어 Symrise 사의 상품명 "Neo Heliopan MA" 으로 판매되는 멘틸 안트라닐레이트.

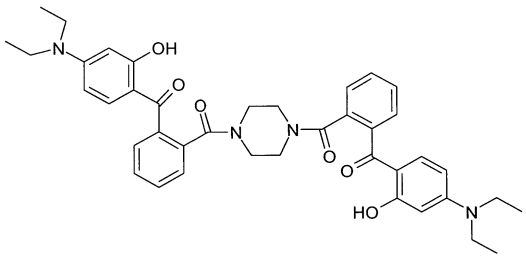
[0265] 이미다졸 유도체: 에틸헥실디메톡시벤질리덴디옥소이미다졸린 프로피오네이트.

[0266] 벤잘말로네이트 유도체: 관능적인 벤잘말로네이트기를 함유하는 폴리오르가노실록산, 예를 들어, Hoffmann LaRoche 사의 상품명 "Parsol SLX" 으로 판매되는 폴리실리콘-15.

[0267] 4,4-디아릴부타디엔 유도체: 1,1-디카르복시(2,2'-디메틸프로필)-4,4-디페닐부타디엔.

[0268] 벤족사졸 유도체: 예를 들어 Sigma 3V 사의 상품명 Uvasorb K2A 로 판매되는 2,4-비스[5-(1-디메틸프로필)벤족사졸-2-일(4-페닐) 이미노]-6-(2-에틸헥실)이미노-1,3,5-트리아진, 및 이를 포함하는 혼합물.

[0269] 피페라진 유도체, 예를 들어, 화합물



[0270] .

[0271] 상기 나열된 화합물은 오로지 예로서 간주되어야 한다. 물론 다른 UV 여과제를 사용하는 것도 가능하다.

[0272] 적합한 유기 UV-보호 물질은 바람직하게는 하기 목록으로부터 선택될 수 있다: 에틸헥실 살리실레이트, 페닐벤즈이미다졸술폰산, 벤조페논-3, 벤조페논-4, 벤조페논-5, n-헥실 2-(4-디에틸아미노-2-히드록시벤조일)벤조에이트, 4-메틸벤질리덴캠퍼, 테레프탈일리덴디캠퍼술폰산, 이나트륨 페닐디벤즈이미다졸테트라술포네이트, 메틸렌비스(벤조트리아졸릴)테트라메틸부틸페놀, 에틸헥실 트리아존, 디에틸헥실 부타미도 트리아존, 드로메트리졸 트리실록산, 폴리실리콘-15, 1,1-디카르복시(2,2'-디메틸프로필)-4,4-디페닐부타디엔, 2,4-비스[5-1 (디메틸프로필)벤족사졸-2-일(4-페닐) 이미노]-6-(2-에틸헥실)이미노-1,3,5-트리아진 및 이의 혼합물.

[0273] 이러한 유기 UV 여과제는 일반적으로 0.01 중량% 내지 20 중량%, 바람직하게는 1 중량% - 10 중량% 의 양으로 제형에 혼입된다.

[0274] 화학식 I 의 화합물 및 적절한 경우, 상술된 바와 같은 다른 유기 UV 여과제 이외에, 제제는 추가 무기 UV 여과제, 소위 입자성 UV 여과제를 포함할 수 있다.

[0275] 이러한 입자성 UV 여과제와의 조합은 하기 유형의 분말 및 또한 분산제 또는 페이스트로서 가능하다.

[0276] 바람직한 것은 이산화티탄, 예컨대, 코팅된 이산화티탄 (예를 들어 Eusolex®T-2000, Eusolex®T-아쿠아, Eusolex®T-AVO, Eusolex®T-OLEO), 산화아연 (예를 들어 Sachtotec®), 산화철 또는 산화세륨 및/또는 산화지르코늄의 군으로부터의 것으로 제공된다.

[0277] 더욱이, 색소를 분비하는 이산화티탄 또는 산화아연의 조합이 또한 가능하고, 이 경우 상기 안료의 입자 크기는 200 nm 이상이고, 예를 들어 Hombitan® FG 또는 Hombitan® FF-Pharma 이다.

[0278] 제제는 추가로 예를 들어, [Cosmetics & Toiletries, February 1990, Vol. 105, pp. 53-64] 에 기재된 바와 같은 통상적인 방법에 의해 후처리된 무기 UV 여과제를 포함하는 것이 바람직할 수 있다. 하기 후처리 성분들 중 하나 이상이 선택될 수 있다: 아미노산, 밀랍, 지방산, 지방산 알코올, 음이온성 계면활성제, 레시틴, 인지질, 지방산의 나트륨, 칼륨, 아연, 철 또는 알루미늄 염, 폴리에틸렌, 실리콘, 단백질 (특히 콜라겐 또는 엘라스틴), 알칸올아민, 이산화규소, 산화알루미늄, 추가 금속 산화물, 포스페이트, 예컨대 나트륨 헥사메타포스페이트, 또는 글리세린.

[0279] 여기서 바람직하게 이용될 수 있는 입자성 UV 여과제는 하기이다:

[0280] - 미처리된 이산화티탄, 예를 들어, Tayca 사의 제품 Microtitanium Dioxide MT 500 B ; Degussa 사의 이산화티탄 P25,

[0281] - 산화알루미늄 및 이산화규소 후처리를 이용한 후처리된 미분화 이산화티탄, 예를 들어, Tayca 사의 제품 "Microtitanium Dioxide MT 100 SAS"; 또는 Uniqema 사의 제품 "Tioveil Fin",

[0282] - 산화알루미늄 및/또는 알루미늄 스테아레이트/라우레이트 후처리를 이용한 후처리된 미분화 이산화티탄, 예컨대, Tayca 사의 Microtitanium Dioxide MT 100 T, Merck 사의 Eusolex T-2000,

[0283] - 산화철 및/또는 철 스테아레이트 후처리를 이용한 후처리된 미분화 이산화티탄, 예를 들어, Tayca 사의 제품 "Microtitanium Dioxide MT 100 F",

[0284] - 이산화규소, 산화알루미늄 및 실리콘 후처리를 이용한 후처리된 미분화 이산화티탄, 예컨대, Tayca 사의 제품 "Microtitanium Dioxide MT 100 SAS",

[0285] - 나트륨 헥사메타포스페이트를 이용한 후처리된 미분화 이산화티탄, 예를 들어, Tayca 사의 제품 "Microtitanium Dioxide MT 150 W".

[0286] 조합용으로 사용되는 처리된 미분화된 이산화티탄은 또한 하기를 이용하여 후처리될 수 있다:

[0287] - 옥틸트리메톡시실란; 예를 들어, Degussa 사의 제품 Tego Sun T 805,

[0288] - 이산화규소; 예를 들어, DSM 사의 제품 Parsol T-X,

[0289] - 산화알루미늄 및 스테아르산; 예를 들어, Sachtleben 사의 제품 UV-Titan M160,

[0290] - 알루미늄 및 글리세린; 예를 들어, Sachtleben 사의 제품 UV-Titan,

[0291] - 알루미늄 및 실리콘 오일, 예를 들어, Sachtleben 사의 제품 UV-Titan M262,

[0292] - 나트륨 헥사메타포스페이트 및 폴리비닐피롤리돈,

[0293] - 폴리디메틸실록산, 예를 들어, Cardre 사의 제품 70250 Cardre UF TiO2SI3",

[0294] - 폴리디메틸수소실록산, 예를 들어, Color Techniques 사의 제품 Microtitanium Dioxide USP Grade Hydrophobic".

[0295] 하기 제품과의 조합이 더욱 유리할 수 있다:

[0296] - 미처리된 산화아연, 예를 들어, BASF (Sunsmart) 사의 제품 Z-Cote, Elementis 사의 Nanox

[0297] - 후처리 산화아연, 예를 들어, 하기 제품:

[0298] o Toshibi 사의 "Zinc Oxide CS-5" (폴리메틸수소실로산을 사용하여 후처리된 ZnO)

[0299] o Nanophase Technologies 사의 Nanogard Zinc Oxide FN

[0300] o Shin-Etsu 사의 "SPD-Z1" (시클로디메틸실록산 중에 분산된 실리콘-그래프트된 아크릴 중합체로 후처리된 ZnO)

[0301] o ISP 사의 "Escalol Z100" (에틸헥실 메톡시시나메이트/PVP-헥사데센/메티콘 공중합체 혼합물에 분산된 산화알루미늄-후처리된 ZnO)

[0302] o Fuji Pigment 사의 "Fuji ZNO-SMS-10" (이산화규소 및 폴리메틸실세스퀴옥산으로 후처리된 ZnO);

[0303] o 미처리된 산화세륨 미세안료, 예를 들어 Rhone Poulenc 사의 상품명 "Colloidal Cerium Oxide"

[0304] o 미처리된 및/또는 후처리된 산화철, Arnaud 사의 상품명 Nanogar.

[0305] 예를 들어, 후처리 유무에 관계없이 여러 금속 산화물, 예를 들어, 이산화티탄 및 산화세륨의 혼합물을 사용하는 것이 가능하고, 예를 들어, Ikeda 사의 제품 Sunveil A 이다. 게다가, 본 발명에 따른 UV 보호제와 조합하여 산화알루미늄, 이산화규소 및 실리콘-후처리 이산화티탄의 혼합물, 산화아연 혼합물, 예를 들어, Sachtleben 사의 제품 UV-Titan M261 을 사용하는 것이 가능하다

[0306] 상기 무기 UV 여과제는 일반적으로 0.1 중량% 내지 25 중량%, 바람직하게는 2 중량% - 10 중량% 의 양으로 제제에 혼입된다.

[0307] UV 여과 작용을 갖는 화합물들 중 하나 이상의 조합에 의해, UV 선의 해로운 영향으로부터의 보호 작용이 최적화될 수 있다.

[0308] 상기 모든 UV 여과제는 또한 캡슐 형태로 사용될 수 있다. 특히, 캡슐 형태의 유기 UV 여과제를 사용하는 것이 유리하다. 따라서 상기 언급된 UV 여과제들 중 하나 이상이 캡슐 형태인 것이 바람직할 수 있다. 캡슐은 육안으로 관찰될 수 없이 매우 작은 것이 유리하다. 상기 언급된 효과를 달성하기 위해서, 더욱이 상기 캡슐은 충분히 안정하고, 캡슐화된 활성 화합물 (UV 여과제) 을 환경에 방출시키기 않고, 오직 작은 정도로 방출하는 것이 필수적이다.

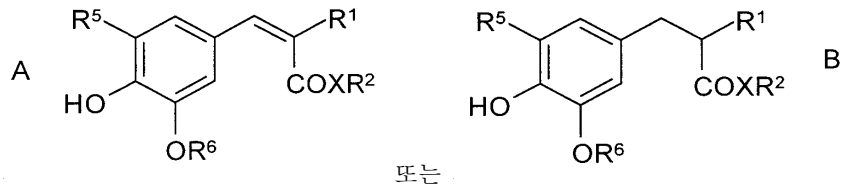
[0309] 바람직한 제제는 또한 예를 들어 항산화제, 항노화 활성 화합물, 항셀룰라이트 활성 화합물, 셀프-태닝 물질, 피부-라이트닝 활성 화합물 또는 비타민으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 화장 활성 화합물을 포함할 수 있다.

[0310] 본 발명에 따른 염료는 더욱이 WO2009/098139 에 체계적으로 나열된 모든 활성 화합물 및 보조제와 조합될 수 있다. 특히, 이러한 물질은 하기 언급되는 용도 카테고리에 속한다: "습윤제 및 보습제", "박리제", "장벽 기능 향상제", "미백제", "항산화제", "더모-이완제 또는 더모-탈수축제", "당화결합저해제", "진피 및/또는 상피 거대분자의 합성 자극용 및/또는 이들의 분해 방지용 작용제", "섬유아세포 또는 케라티노사이트 증식 및/또는 케라티노사이트 분화용 자극제", "각질 외피막의 발육 촉진제", "NO-신타아제 저해제", "벤조디아제핀 말초 수용체 (PBR) 길항근", "피지선 활성 증가제", "세포의 에너지 대사 자극제", "팽창제", "지방-재구조화제", "체중감소제", "피부 미소순환 촉진제", "진정제 또는 비자극제", "피지조절 또는 항지루성 작용제", "수렴제", "반흔형성제", "항염증제", "항여드름제".

[0311] 상기 제제가 하나 이상의 항산화제를 포함하는 경우, 산화 스트레스 또는 자유 라디칼의 영향으로부터의 제제의 보호 작용이 향상될 수 있고, 당업자에게 신속하거나 시간을 지연시키며 적절히 작용하는 항산화제를 선택하는 데 전혀 어려움이 없이 제공된다.

[0312] 하기로서 사용될 수 있는 입증된 물질이 전문 문헌에 많이 있다: 항산화제, 예를 들어 아미노산 (예를 들어 글리신, 히스티딘, 티로신, 트립토판) 및 이의 유도체, 이미다졸, (예를 들어 우로칸산) 및 이의 유도체, 펩티드, 예컨대 D,L-카르노신, D-카르노신, L-카르노신 및 이의 유도체 (예를 들어 안세린), 카로티노이드, 카로틴 (예를 들어 α-카로틴, β-카로틴, 리코펜) 및 이의 유도체, 클로로겐산 및 이의 유도체, 리포산 및 이의 유도체 (예를 들어 디히드로리포산), 아우로티오글루코오스, 프로필티오우라실 및 다른 티올 (예를 들어 티오레독신, 글루타티온, 시스테인, 시스틴, 시스타민 및 글리코실, N-아세틸, 메틸, 에틸, 프로필, 아밀, 부틸 및 라우릴, 팔미토일, 올레일, γ-리놀레일, 콜레스테릴 및 이의 글리세릴 에스테르) 및 이의 염, 디라우릴 티오디프로피오네이트, 디스테아릴 티오디프로피오네이트, 티오디프로피온산 및 이의 유도체 (에스테르, 에테르, 펩티드, 지질, 뉴클레오티드, 뉴클레오시드 및 염), 및 술폭시민 화합물 (예를 들어 부티오닌 술폭시민, 호모시스테인 술폭시민, 부티오닌 술폰, 펜타-, 헥사- 및 헵타-티오닌 술폭시민), 이들은 허용되는 매우 적응 용량 (예를 들어 pmol 내지 μmol/kg)으로 사용됨, 및 또한 (금속) 킬레이트제, (예를 들어 α-히드록시지방산, 팔미트산, 피트산, 락토페린), α-히드록시산 (예를 들어 시트르산, 락트산, 말산), 훔산, 빌산, 담즙산, 빌리루빈, 빌리베르딘, EDTA, EGTA 및 이의 유도체, 불포화 지방산 및 이의 유도체, 비타민 C 및 유도체 (예를 들어 아스코르빌 팔미테이트, 마그네슘 아스코르빌 포스페이트, 아스코르빌 아세테이트), 토코페롤 및 유도체 (예를 들어 비타민 E 아세테이트), 비타민 A 및 유도체 (예를 들어 비타민 A 팔미테이트) 및 벤조인 수지의 코니페릴 벤조에이트, 루틴산 및 이의 유도체, α-글리코실루틴, 페룰산, 푸르푸릴리덴글루시톨, 카르노신, 부틸히드록시톨루엔, 부틸히드록시아니솔, 노르디히드로구아이아레트산, 트리히드록시부티로페논, 퀘르세틴, 요산 및 이의 유도체, 만노오스 및 이의 유도체, 아연 및 이의 유도체 (예를 들어 ZnO, $ZnSO_4$), 셀레늄 및 이의 유도체 (예를 들어 셀레노메티오닌), 스틸벤 및 이의 유도체 (예를 들어 스틸벤 옥시드, 트랜스-스틸벤 옥시드).

[0313] 적합한 항산화제는 하기 화학식 A 또는 B 의 화합물이다:



[0314] 또는

[0315] [식중,

[0316] R^1 는 $-C(O)CH_3$, $-CO_2R^3$, $-C(O)NH_2$ 및 $-C(O)N(R^4)_2$ 군으로부터 선택될 수 있고,

[0317] X 는 O 또는 NH 를 나타내고,

[0318] R^2 는 1 내지 30 개의 C 원자를 갖는 선형 또는 분지 알킬을 나타내고,

[0319] R^3 은 1 내지 20 개의 C 원자를 갖는 선형 또는 분지 알킬을 나타내고,

[0320] R^4 는 각 경우에서, 서로 독립적으로, H 또는 1 내지 8 개의 C 원자를 갖는 선형 또는 분지 알킬을 나타내고,

[0321] R^5 는 H 또는 1 내지 8 개의 C 원자를 갖는 선형 또는 분지 알킬 또는 1 내지 8 개의 C 원자를 갖는 선형 또는 분지 알콕시를 나타내고,

[0322] R^6 은 1 내지 8 개의 C 원자를 갖는 선형 또는 분지 알킬, 바람직하게는 2-(4-히드록시-3,5-디메톡시벤질리덴)말론산 및/또는 2-(4-히드록시-3,5-디메톡시벤질)말론산의 유도체, 특히 바람직하게는 비스(2-에틸헥실) 2-(4-히드록시-3,5-디메톡시벤질리덴)말로네이트 (예를 들어 Oxynex® ST Liquid) 및/또는 비스(2-에틸헥실) 2-(4-히드록시-3,5-디메톡시벤질)말로네이트 (예를 들어 RonaCare® AP) 를 나타냄].

[0323] 더욱이, 비스이소프로필 2-(4-히드록시-3-메톡시벤질리덴)말로네이트 또는 비스이소프로필 2-(4-히드록시-3-메톡시벤질)말로네이트 (수소화 디이소프로필 바닐리덴 말로네이트) 와의 조합이 바람직하다. 유사한 상황이 상응하는 비스에틸 에스테르에 적용된다.

[0324] 항산화제의 혼합물이 마찬가지로 본 발명에 따른 화장 제제에 사용하는데 적합하다. 공지되고 통상적인 혼합물은 예를 들어, 활성 성분으로서 하기를 포함하는 혼합물이다: 레시틴, L-(+)-아스코르빌 팔미테이트 및 시트르산, 천연 토코페롤, L-(+)-아스코르빌 팔미테이트, L-(+)-아스코르브산 및 시트르산 (예를 들어 Oxynex® K LIQUID), 천연 공급원의 토코페롤 추출물, L-(+)-아스코르빌 팔미테이트, L-(+)-아스코르브산 및 시트르산 (예를 들어 Oxynex® L LIQUID), DL-α-토코페롤, L-(+)-아스코르빌 팔미테이트, 시트르산 및 레시틴 (예를 들어 Oxynex® LM) 또는 부틸히드록시톨루엔 (BHT), L-(+)-아스코르빌 팔미테이트 및 시트르산 (예를 들어 Oxynex® 2004). 이러한 유형의 항산화제는 보통 조성물에서 본 발명에 따른 화합물과 함께 1000:1 내지 1:1000, 바람직하게는 100:1 내지 1:100 의 중량% 비율로 사용된다.

[0325] 본 발명에 따라 사용될 수 있는 페놀 중에서, 일부가 천연유래인 폴리페놀은 약학, 화장 또는 영양 부문에 적용하는데 특히 흥미롭다. 예를 들어, 주로 식물 염료로서 알려져 있는 플라보노이드 또는 바이오플라보노이드는 흔히 항산화제 가능성이 있다. 모노- 및 디히드록시플라본의 치환 패턴의 효과가 [K. Lemanska, H. Szymusiak, B. Tyrakowska, R. Zielinski, I.M.C.M. Rietjens; Current Topics in Biophysics 2000, 24(2), 101-108] 에 기재되어 있고, 3'4'- 또는 6,7- 또는 7,8-위치에서 OH 기 또는 케토 관능기에 인접한 OH 기를 함유하는 디히드록시플라본이 항산화적 성질을 갖는다는 것을 관찰한 반면, 몇몇 경우에서 다른 모노- 및 디히드록시플라본은 항산화 성질을 갖지 않는다.

[0326] 퀘르세틴 (시아니다놀, 시아니데놀론 1522, 멜레틴, 소포레틴, 에리신, 3,3',4',5,7-펜타히드록시플라본) 이 흔히 특히 효과적인 항산화제로서 언급된다 (예를 들어 C.A. Rice-Evans, N.J. Miller, G. Paganga, Trends in Plant Science 1997, 2(4), 152-159). K. Lemanska, H. Szymusiak, B. Tyrakowska, R. Zielinski, A.E.M.F. Soffers 및 I.M.C.M. Rietjens (Free Radical Biology&Medicine 2001, 31(7), 869-881) 은 히드록시플라본의 항산화제 작용의 pH 의존성을 조사하였다. 조사된 구조들 중에서, 퀘르세틴은 전체 pH 범위에 걸

쳐 최고 활성을 나타낸다.

[0327] 특히 스킨케어 제제에 적합한 항노화 활성 화합물은 바람직하게는 소위 호환성 용질이다. 이들은 식물 또는 미생물의 삼투압 조절에 포함되는 물질이고, 이러한 유기체들로부터 단리될 수 있다. 일반적인 용어 호환성 용질은 또한 독일 특허 출원 DE-A-10133202 에 기재된 삼투물질을 포함한다. 적합한 삼투물질은 예를 들어, 폴리올, 메틸아민 화합물 및 아미노산 및 이들의 각 전구체이다. 독일 특허 출원 DE-A-10133202 의 의미에서 삼투물질은 특히, 폴리올, 예를 들어, 미오-이노시톨, 만니톨 또는 소르비톨, 및/또는 하기 언급되는 삼투성으로 활성인 물질들 중 하나 이상의 군으로부터 물질을 의미한다: 타우린, 콜린, 베타인, 포스포릴콜린, 글리세로포스포릴콜린, 글루타민, 글리신, α-알라닌, 글루타메이트, 아스파르테이트, 프롤린, 및 타우린. 이러한 물질의 전구체는 예를 들어, 글루코오스, 글루코오스 중합체, 포스파티딜콜린, 포스파티딜이노시톨, 무기 포스페이트, 단백질, 펩티드 및 폴리아미노산이다. 전구체는 예를 들어, 신진대사 단계에 의해 삼투물질로 전환되는 화합물이다.

[0328] 본 발명에 따라 바람직하게 사용되는 호환성 용질은 피리미딘-카르복실산 (예컨대 엑토인 및 히드록시엑토인), 프롤린, 베타인, 글루타민, 시클릭 디포스포글리세레이트, N.-아세틸오르니틴, 트리메틸아민 N-옥시드 디미오이노시톨 포스페이트 (DIP), 시클릭 2,3-디포스포글리세레이트 (cDPG), 1,1-디글리세롤 포스페이트 (DGP), β-만노실 글리세레이트 (피로인), β-만노실 그리세라미드 (피로인-A) 또는/및 디만노실 디이노시톨 포스페이트 (CMIP) 또는 이들 화합물의 광학이성체, 유도체, 예를 들어 산, 염 또는 에스테르, 또는 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되는 물질이다.

[0329] 피리미딘카르복실산 중에서,특히 엑토인 ((S)-1,4,5,6-테트라히드로-2-메틸-4-피리미딘카르복실산) 및 히드록시엑토인 ((S,S)-1,4,5,6-테트라히드로-5-히드록시-2-메틸-4-피리미딘-카르복실산) 및 이의 유도체가 언급된다.

[0330] 사용될 수 있는 항노화 활성 화합물은 추가적으로 Merck 사의 제품, 예를 들어, 상품명 RonaCare® Luremine, Ronacare® Isoquercetin, Ronacare®Tiliroside, 또는 Ronacare® Cyclopeptide 5 로 판매되는 5,7-디히드록시-2-메틸크로몬이다.

[0331] 더욱이, 본 발명에 따른 제제는 추가 성분으로서 하나 이상의 셀프-태닝제를 포함할 수 있다.

[0332] 사용될 수 있는 유리한 셀프-태닝제는 그 중에서도 1,3-디히드록시아세톤, 글리세롤알데히드, 히드록시메틸글리옥살, γ-디알데히드, 에리트룰로오스, 6-알도-D-프룩토오스, 닌히드린, 5-히드록시-1,4-나프토퀴논 (주글론) 또는 2-히드록시-1,4-나프토퀴논 (로손) 이다. 매우 특히 바람직한 것은 1,3-디히드록시아세톤, 에리트룰로오스 또는 이들의 조합으로 제공된다.

[0333] 셀프-테너 성질을 갖는 제제, 특히 디히드록시아세톤을 포함하는 제제는 디히드록시아세톤 그 자체의 분해 생성물 또는 부반응의 생성물에 의해 야기되는 것으로 여겨지고 몇몇 사용자에 의해 불쾌한 것으로 여겨지는, 인간 피부에 적용시 악취가 나는 경향이 있다. 이러한 악취는 포름알데히드 스케빈저 및/또는 플라보노이드의 사용시 방지된다는 것을 밝혀내었다. 하나 이상의 셀프-테너를 포함하는 본 발명에 따른 제제는 따라서 바람직하게는 또한 냄새를 개선시키기 위해서 포름알데히드 스케빈저 및 임의로 플라보노이드를 포함할 수 있다.

[0334] 포름알데히드 스케빈저는 바람직하게는 알칼리-금속, 알칼리-토금속 또는 아황산수소암모늄 군으로부터 선택된다. 특히 바람직한 것은 조합 DHA Plus 에서, DHA, 아황산수소나트륨 및 마그네슘 스테아레이트의 혼합물을 포함하는 제제로 제공된다.

[0335] DHA Plus 는 포름알데히드의 차단, 제거 또는 중화를 위한 메타중아황산나트륨 ($Na_2S_2O_5$ 또는 INCI: 아황산수소나트륨과 동의어임) 을 포함하는 제품 혼합물이다. 아황산수소나트륨을 완성된 제형에 첨가한 결과 불쾌한 냄새가 유의하게 감소 또는 억제된다. DHA Plus 는 Merck, Darmstadt 에서 시판된다.

[0336] 제제에 임의로 존재하는 플라보노이드는 추가적으로 셀프-테너 또는 셀프-태닝 물질을 위한 안정화제로서 작용하고/하거나 존재하는 첨가제 또는 보조제를 통해 생길 수도 있는 저장에 좌우되는 악취를 감소 또는 방지 또는 개선시킨다.

[0337] 플라보노이드는 바람직하게는 에테르화 또는 에스테르화에 의해 블록화된 하나 이상의 페놀 히드록실기를 함유한다. 예를 들어, 히드록시에틸-치환 플라보노이드, 예컨대, 바람직하게는, 트록세루틴, 트록세퀘르세틴, 트록세이소퀘르세틴 또는 트록셀루테올린, 및 플라보노이드 술페이트 또는 플라보노이드 포스페이트, 예컨대, 바람직하게는, 루틴 술페이트는 여기서 특히 적합한 플라보노이드로 입증되었다. 본 발명에 따른 용도의 의미에서, 특히 바람직한 것은 루틴 술페이트 및 트록세루틴으로 제공된다. 매우 특히 바람직하게는 트록세루

틴이 사용된다.

[0338] 바람직한 플라보노이드는 비양으로 하전된 플라반 골격을 갖는다. 플라보노이드 복합적 금속 이온, 예를 들어, Fe^{2+}/Cu^{2+} 은 분해결과 악취를 생성하는 향기 또는 화합물 내의 자동산화 공정을 예방 또는 감소시키는 것으로 여겨진다.

[0339] 특히 바람직한 것은 화학식 I 의 화합물 이외에, DHA Rapid 및/또는 메타중아황산나트륨을 포함하는 제제로 제공된다. DHA Rapid 는 Merck, Darmstadt 사의 디히드록시아세톤 및 트록세루틴을 포함하는 제품 혼합물이다.

[0340] 피부에 대한 냄새를 개선시키기 위해서 포름알데히드 스케빈저 및 임의로 플라보노이드를 포함하는 상응하는 프리믹스 및 제제는 참조문헌 DE 10 2007 013 368.7 으로 출원 제출된 독일 특허 출원에 기재되어 있고, 이와 과련된 내용은 본 출원의 개시된 내용에 속한다.

[0341] 본 발명에 따른 화학식 I 의 화합물과 셀프-태닝 물질의 조합은 셀프-테너에 의해, 예를 들어 노랑 느낌을 감소시키기 위해 색 이미지에 적새 비율을 증가시킴으로써 달성될 수 있는 색 효과를 향상시키기 위해서 특히 바람직하다. 추가로, 본 발명에 따른 화학식 I 의 화합물은 셀프-테너에 대해 공지되어 있는 악취 문제를 감소시켜 셀프-테너를 안정화시킬 수 있다.

[0342] 제제는 또한 하나 이상의 추가의 피부-라이트닝 활성 화합물 또는 동의어로 탈색소 활성 화합물을 포함할 수 있다. 피부-라이트닝 활성 화합물은 이론상 당업자에게 공지된 모든 활성 화합물이다. 피부-라이트닝 활성을 갖는 화합물의 예는 하이드로퀴논, 코지산, 알부틴, 알로에신 또는 루시놀이다. 상기 유형의 제제는 예를 들어, 밝고 어두운 면적 간의 피부 대비를 감소시킬 수 있다. 따라서 피부는 더욱 균일한 색을 나타낸다.

[0343] 제제는 또한 항노화 활성 화합물을 포함하여 대부분 본 발명에 따른 화학식 I 의 화합물에 의해 시각적 항노화 효과 (광노화로부터의 보호) 를 지지할 수 있다. 시각적 항노화 효과는 성취할 수 있는 균일한 피부 색에 기초한다. 적합한 항노화 활성 화합물은 Merck 사 시판의 제품, 예를 들어, 상품명 RonaCare® Luremine, 또는 제품 Ronacare® Isoquercetin, Ronacare®Tiliroside, 또는 Ronacare® Cyclopeptide 5 로 판매되는 5,7-디히드록시-2-메틸크로몬이다.

[0344] 사용되는 제제는 추가 성분으로서 비타민을 포함할 수 있다. 바람직한 것은 비타민 A, 비타민 A 프로피오네이트, 비타민 A 팔미테이트, 비타민 A 아세테이트, 레티놀, 비타민 B, 티아민 클로라이드 하이드로클로라이드 (비타민 B_1), 리보플라빈 (비타민 B_2), 니코틴아미드, 비타민 C (아스코르브산), 비타민 D, 에르고칼시페롤 (비타민 D_2), 비타민 E, DL-α-토코페롤, 토코페롤 E 아세테이트, 토코페롤 수소숙시네이트, 비타민 K_1, 에스쿨린 (비타민 P 활성 화합물), 티아민 (비타민 B_1), 니코틴산 (나이아신), 피리독신, 피리독살, 피리독사민, (비타민 B_6), 판토텐산, 비오틴, 엽산 및 코발라민 (비타민 B_{12}), 특히 바람직하게는 비타민 A 팔미테이트, 비타민 C 및 이의 유도체, DL-α-토코페롤, 토코페롤 E 아세테이트, 니코틴산, 판토텐산 및 비오틴으로부터 선택되는 비타민 및 비타민 유도체로 제공된다. 화장 적용의 경우에서, 비타민은 보통 전체 중량에 대해 0.01 내지 5.0 중량 % 범위로 플라보노이드-함유 프리믹스 또는 제제를 이용하여 첨가된다. 영양-생리학적 적용은 각각 권장되는 비타민 요건을 지향한다.

[0345] 기술된 레티노이드는 동시에 효과적인 항셀룰라이트 활성 화합물이다. 또한 공지된 항셀룰라이트 활성 화합물은 카페인이다.

[0346] 제제의 상기 성분은 당업자가 익히 알고 있는 기술을 이용하여 보통의 방식으로 혼입될 수 있다.

[0347] 적합한 제제는 외용을 위한 것이고, 예를 들어 크림 또는 밀크 (O/W, W/O, O/W/O, W/O/W), 로션 또는 에멀전으로서, 유성-알코올성, 유성-수성 또는 수성-알코올성 젤 또는 용액의 형태로 피부에 분무될 수 있다. 이들은 고체 스틱의 형태이거나 에어로졸로서 제형화될 수 있다. 캡슐, 드라제, 파우더, 정제 요액 또는 용액과 같은 투여 형태가 내용에 적합하다.

[0348] 사용되는 제제의 적용 형태에 대해 언급될 수 있는 예는 용액, 현탁액, 에멀전, PIT 에멀전, 페이스트, 연고, 젤, 크림, 로션, 파우더, 비누, 계면활성제 함유세정 제제, 오일, 에어로졸 및 스프레이이다.

[0349] 바람직한 보조제는 보존제, 안정화제, 가용화제, 착색제, 악취 개선제의 군으로부터 유래한다.

[0350] 연고, 페이스트, 크림 및 젤은 국부 적용에 적합한 통상적인 비히클, 예를 들어 동물성 및 식물성 지방, 왁스, 파라핀, 전분, 트래거캔스, 셀룰로오스 유도체, 폴리에틸렌 글리콜, 실리콘, 벤토나이트, 실리카, 탈크 및 산화아연, 또는 이들 물질의 혼합물을 포함할 수 있다.

[0351] 파우더 및 스프레이는 통상적인 비히클, 예를 들어 락토오스, 탈크, 실리카, 알루미늄 수산화물, 칼슘 실리케이트 및 폴리아미드 분말, 또는 이들 물질의 혼합물을 포함할 수 있다. 스프레이는 추가적으로 통상적인 용이한 휘발성인 액화된 추진제, 예를 들어 클로로플루오로카본, 프로판/부탄 또는 디메틸 에테르를 포함할 수 있다. 압축 공기가 또한 유리하게 사용될 수 있다.

[0352] 용액 및 에멀전은 통상적인 비히클, 예컨대 용매, 가용화제 및 유화제, 예를 들어 물, 에탄올, 이소프로판올, 에틸 카르보네이트, 에틸 아세테이트, 벤질 알코올, 벤질 벤조에이트, 프로필렌 글리콜, 1,3-부틸 글리콜, 오일, 특히 면실유, 땅콩 오일, 밀 배아유, 올리브 오일, 피마자유 및 참깨유, 글리세롤 지방산 에스테르, 폴리에틸렌 글리콜 및 소르비탄의 지방산 에스테르, 또는 이들 물질의 혼합물을 포함할 수 있다.

[0353] 바람직한 가용화제는 일반적으로 2-이소프로필-5-메틸시클로헥산카르보닐-D-알라닌 메틸 에스테르이다.

[0354] 현탁액은 통상적인 비히클, 예컨대 희석액, 예를 들어 물, 에탄올 또는 프로필렌 글리콜, 현탁액 매질, 예를 들어 에톡시화 이소스테아릴 알코올, 폴리옥시에틸렌 소르비톨 에스테르 및 폴리옥시에틸렌 소르비탄 에스테르, 미세결정질 셀룰로오스, 알루미늄 메타-수산화물, 벤토나이트, 아가-아가 및 트래거캔스, 또는 이들 물질의 혼합물을 포함할 수 있다.

[0355] 비누는 통상적인 비히클, 예컨대 지방산의 알칼리 금속 염, 지방산 모노에스테르의 염, 지방산 단백질 가수분해물, 이소티오네이트, 라놀린, 지방 알코올, 식물성 오일, 식물 추출물, 글리세롤, 당, 또는 이들 물질의 혼합물을 포함할 수 있다.

[0356] 계면활성제-함유 세정 제품은 통상적인 비히클, 예컨대 지방 알코올 술페이트의 염, 지방 알코올 에테르 술페이트, 술포숙신산 모노에스테르, 지방산 단백질 가수분해물, 이소티오네이트, 이미다졸리늄 유도체, 메틸 타우레이트, 사르코시네이트, 지방산 아미드 에테르 술페이트, 알킬아미도베타인, 지방 알코올, 지방산 글리세리드, 지방산 디에탄올아미드, 식물성 및 합성 오일, 라놀린 유도체, 에톡시화 글리세롤 지방산 에스테르, 또는 이들 물질의 혼합물을 포함할 수 있다.

[0357] 페이스 및 바디 오일은 통상적인 비히클, 예컨대 합성 오일, 예컨대 지방산 에스테르, 지방 알코올, 실리콘 오일, 천연 오일, 예컨대 식물성 오일 및 유성 식물 추출물, 파라핀 오일, 라놀린 오일, 또는 이들 물질의 혼합물을 포함할 수 있다.

[0358] 추가 전형적인 화장 적용 형태는 또한 립스틱, 립케어 스틱, 메이크업 파우더, 메이크업 에멀전 및 메이크업 왁스 및 햇볕차단, 프리선 및 에프터선 제제이다.

[0359] 바람직한 제제 형태는 또한 특히, 에멀전을 포함한다.

[0360] 에멀전이 유리하고, 이는 상기 유형의 제제에 통상 사용되는 바와 같은 예를 들어, 상기 지방, 오일, 왁스 및 다른 지방 물질, 뿐만 아니라 물 및 유화제를 포함한다.

[0361] 지질상은 유리하게는 하기 물질 군으로부터 선택된다:

[0362] - 광물 오일, 광물 왁스

[0363] - 오일, 예컨대 카프릴산 또는 카프릴산의 트리글리세리드, 더욱이 천연 오일, 예컨대, 피마자유;

[0364] - 지방, 왁스 및 다른 천연 및 합성 지방 물질, 바람직하게는 지방산과 적은 탄소수를 갖는 알코올, 예를 들어 이소-프로판올, 프로필렌 글리콜 또는 글리세롤의 에스테르, 또는 지방 알코올과 적은 탄소수를 갖는 알칸산 또는 지방산의 에스테르;

[0365] - 실리콘 오일, 예컨대 디메틸폴리실록산, 디에틸폴리실록산, 디페닐폴리실록산,및 이들의 혼합된 형태.

[0366] 본 발명의 목적을 위해서, 에멀전, 올레오겔 또는 하이드로 분산액 또는 리포 분산액의 유상은 유리하게는 3 내지 30 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알칸카르복실산 및 3 내지 30 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알코올의 에스테르의 군, 방향족 카르복실산 및 3 내지 30 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알코올의 에스테르의 군으로부터 선택된다. 이러한 유형의 에스테르 오일은 유리하게는 이소프로필 미리스테이

트, 이소프로필 팔미테이트, 이소프로필 스테아레이트, 이소프로필 올레에이트, n-부틸 스테아레이트, n-헥실 라우레이트, n-데실 올레에이트, 이소옥틸 스테아레이트, 이소노닐 스테아레이트, 이소노닐 이소노나노에이트, 2-에틸헥실 팔미테이트, 2-에틸헥실 라우레이트, 2-헥실데실 스테아레이트, 2-옥틸도데실 팔미테이트, 올레일 올레에이트, 올레일 에루케이트, 에루실 올레에이트, 에루실 에루케이트 및 상기 유형의 에스테르의 합성, 반합성 및 천연 혼합물, 예를 들어 호호바 오일 군으로부터 선택될 수 있다.

[0367] 본 발명에 따른 혼합물은 바람직하게는 보조제, 예를 들어, 화장 오일 (예를 들어 카프릴릭/카프릭 트리글리세리드, C12-15 알킬 벤조에이트, 이소프로필 미리스테이트, 아릴알킬 벤조에이트, 예를 들어, 페네틸 벤조에이트 (X-Tend 226) 또는 Cosmacol 브랜드의 오일 성분, 예컨대 디미리스틸 타르트레이트, 트리 C14-C15 알킬 시트레이트, C12-C13 알킬 락테이트, 트리데실 살리실레이트, C12-C13 알킬 옥타노에이트, C12-C13 알킬 말레이트, C12-C13 알킬 시트레이트, C12-C13 알킬 타르트레이트), 또는 극성-양자성 보조제 (예를 들어 프로필렌 글리콜, 글리세린, 이소프로판올, 에탄올) 또는 소위 가용화제 (예를 들어 부틸프탈이미드, 이소프로필프탈이미드, 디메틸이소소르비드) 를 포함할 수 있다.

[0368] 오일상은 더욱이 유리하게는 분지 및 비분지 탄화수소 및 탄화수소 왁스의 군, 실리콘 오일, 디알킬 에테르, 포화 또는 불포화, 분지 또는 비분지 알코올의 군, 및 지방산 트리글리세리드, 특히 8 내지 24, 특히 12-18 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알칸카르복실산의 트리글리세롤 에스테르로부터 선택될 수 있다. 지방산 트리글리세리드는 예를 들어, 유리하게는 합성, 반합성 및 천연 오일, 예를 들어 올리브 오일, 해바라기 오일, 콩 오일, 땅콩 오일, 유채유, 아몬드유, 팜유, 코코넛유, 팜 핵유 등의 군으로부터 선택될 수 있다.

[0369] 상기 유형의 오일 및 왁스 성분의 임의의 원하는 혼합물이 또한 유리하게는 본 발명의 목적을 위해서 사용될 수 있다. 또한 왁스, 예를 들어 세틸 팔미테이트를 오일상의 유일한 지질 성분으로서 사용하는 것이 유리할 수 있다.

[0370] 임의로 유리하게 사용되는 제제의 수성상은 낮은 탄소수를 갖는 알코올, 디올 또는 폴리올, 및 이의 에테르, 바람직하게는 에탄올, 이소프로판올, 프로필렌 글리콜, 글리세롤, 에틸렌 글리콜, 에틸렌 글리콜 모노에틸 또는 모노부틸 에테르, 프로필렌 글리콜 모노메틸, 모노에틸 또는 모노부틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노메틸 또는 모노에틸 에테르 및 유사 생성물, 더욱이 낮은 탄소수를 갖는 알코올, 예를 들어 에탄올, 이소프로판올, 1,2-프로판디올, 글리세롤, 및, 특히, 이산화규소, 알루미늄 실리케이트, 다당류 및 이의 유도체, 예를 들어 히알루론산, 잔탄검, 히드록시프로필메틸셀룰로오스의 군, 특히 유리하게는 폴리아크릴레이트의 군, 바람직하게는 소위 Carbopols, 예를 들어 Carbopol 등급 980, 981, 1382, 2984, 5984 의 군의 폴리아크릴레이트로부터 선택될 수 있는 하나 이상의 증점제를 각 경우에서 각각의 또는 조합으로 포함한다.

[0371] 특히, 상기 언급된 용매의 혼합물이 사용된다. 알코올성 용매의 경우, 물이 추가 성분일 수 있다.

[0372] 에멀전이 유리하고 예를 들어, 상기 유형의 제형에 보통 사용되는 상기 지방, 오일, 왁스 및 다른 지방 물질, 뿐만 아니라 물 및 유화제를 포함한다.

[0373] 바람직한 구현예에서, 사용되는 제제는 친수성 계면활성제를 포함한다. 친수성 계면활성제는 바람직하게는 알킬글루코시드, 아실 락틸레이트, 베타인 및 코코넛 암포아세테이트의 군으로부터 선택된다.

[0374] 효과적인 함량의 본 발명에 따라 사용되는 활성 화합물과 구별되는 천연 또는 합성 원물질 및 보조제 또는 혼합물, 예를 들어 Plantaren®1200 (Henkel KGaA), Oramix®NS 10 (Seppic) 을 사용하는 것이 또한 유리하다.

[0375] 화장 및 피부과용 제제는 다양한 형태로 존재할 수 있다. 따라서, 상기 제제는 예를 들어, 용액, 물이 없는 제제, 유중수 (W/O) 유형 또는 수중유 (O/W) 유형의 에멀전 또는 마이크로에멀전, 예를 들어 수중유중수 (W/O/W) 유형의 복합 에멀전, 젤, 고체 스틱, 연고 또는 에어로졸일 수 있다. 엑토인을 캡슐 형태로, 예를 들어 콜라겐 매트릭스 및 다른 통상적인 캡슐화 물질에, 예를 들어 셀룰로오스 캡슐로서, 젤라틴, 왁스 매트릭스 또는 리포솜으로 캡슐화된채 투입하는 것이 유리하다. 특히, DE-A-43 08 282 에 기재된 바와 같은 왁스 매트릭스가 유리한 것으로 입증되었다. 바람직한 것은 에멀전으로 제공된다. O/W 에멀전이 특히 바람직하다. 에멀전, W/O 에멀전 및 O/W 에멀전이 통상적인 방식으로 수득될 수 있다.

[0376] 사용될 수 있는 유화제는 예를 들어, 공지된 W/O 및 O/W 유화제이다. 바람직한 O/W 에멀전에서 통상적인 추가 보조-유화제를 사용하는 것이 유리하다.

[0377] 예를 들어, O/W 유화제, 주로 HLB 값이 11-16, 매우 특히 유리하게는 HLB 값이 14.5-15.5 인 물질의 군으로부터

선택되는 보조-유화제가 O/W 유화제가 포화 라디칼 R 및 R'를 갖는 한 유리하다. O/W 유화제가 불포화 라디칼 R 및 R'를 갖는 경우 또는 이소알킬 유도체가 존재하는 경우, 상기 유화제의 바람직한 HLB 값은 또한 낮거나 높을 수 있다.

[0378] 에톡시화 스테아릴 알코올, 세틸 알코올, 세틸스테아릴 알코올 (세테아릴 알코올) 의 군으로부터 지방 알코올 에톡실레이트를 선택하는 것이 유리하다.

[0379] 하기 군으로부터 지방산 에톡실레이트를 선택하는 것이 또한 유리하다:

[0380] 폴리에틸렌 글리콜 (20) 스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (21) 스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (22) 스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (23) 스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (24) 스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (25) 스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (12) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (13) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (14) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (15) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (16) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (17) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (18) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (19) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (21) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (22) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (23) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (24) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (25) 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (12) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (13) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (14) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (15) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (16) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (17) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (18) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (19) 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 올레에이트.

[0381] 유리하게 사용될 수 있는 에톡시화 알킬 에테르 카르복실산 또는 이의 염은 나트륨 라우레스-11 카르복실레이트이다. 유리하게 사용될 수 있는 알킬 에테르 술페이트는 나트륨 라우레스1-4 술페이트이다. 유리하게 사용될 수 있는 에톡시화 콜레스테롤 유도체는 폴리에틸렌 글리콜 (30) 콜레스테릴 에테르이다. 폴리에틸렌 글리콜 (25) 소야스테롤이 또한 성공적인 것으로 입증되었다. 유리하게 사용될 수 있는 에톡시화 트리글리세리드는 폴리에틸렌 글리콜 (60) 달맞이꽃글리세리드이다.

[0382] 폴리에틸렌 글리콜 (20) 글리세릴 라우레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (21) 글리세릴 라우레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (22) 글리세릴 라우레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (23) 글리세릴 라우레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (6) 글리세릴 카프레이트/카프리네이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 글리세릴 올레에이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 글리세릴 이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (18) 글리세릴 올레에이트 (코코에이트) 군으로부터 폴리에틸렌 글리콜 글리세롤 지방산 에스테르를 선택하는 것이 더욱 유리하다.

[0383] 폴리에틸렌 글리콜 (20) 소르비탄 모노라우레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 소르비탄 모노스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 소르비탄 모노이소스테아레이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 소르비탄 모노팔미테이트, 폴리에틸렌 글리콜 (20) 소르비탄 모노올레에이트 군으로부터 소르비탄 에스테르를 선택하는 것이 또한 유리하다.

[0384] 하기는 임의의 W/O 유화제로서 그러나 본 발명에 따라 유리할 수 있는 것으로서 사용될 수 있다:

[0385] 8 내지 30 개의 탄소 원자를 갖는 지방 알코올, 8 내지 24, 특히 12-18 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알칸카르복실산의 모노글리세롤 에스테르, 8 내지 24, 특히 12-18 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알칸카르복실산의 디글리세롤 에스테르, 8 내지 24, 특히 12-18 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알코올의 모노글리세롤 에테르, 8 내지 24, 특히 12-18 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알코올의 디글리세롤 에테르, 8 내지 24, 특히 12-18 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알칸카르복실산의 프로필렌 글리콜 에스테르, 및 8 내지 24, 특히 12-18 개의 C 원자의 사슬 길이를 갖는 포화 및/또는 불포화, 분지 및/또는 비분지 알칸카르복실산의 소르비탄 에스테르.

[0386] 특히 유리한 W/O 유화제는 글리세릴 모노스테아레이트, 글리세릴 모노이소스테아레이트, 글리세릴 모노미리스테이트, 글리세릴 모노올레에이트, 디글리세릴 모노스테아레이트, 디글리세릴 모노이소스테아레이트, 프로필렌 글리콜 모노스테아레이트, 프로필렌 글리콜 모노이소스테아레이트, 프로필렌 글리콜 모노카프릴레이트, 프로필렌 글리콜 모노라우레이트, 소르비탄 모노이소스테아레이트, 소르비탄 모노라우레이트, 소르비탄 모노카프릴레이트, 소르비탄 모노이소올레에이트, 수크로오스 디스테아레이트, 세틸 알코올, 스테아릴 알코올, 아라키딜 알코올, 베헤닐 알코올, 이소베헤닐 알코올, 셀라킬 알코올, 키밀 알코올, 폴리에틸렌 글리콜 (2) 스테아릴 에테르 (스테아레스-2), 글리세릴 모노라우레이트, 글리세릴 모노카프리네이트, 글리세릴 모노카프릴레이트 또는 PEG-30 디폴리히드록시스테아레이트이다.

[0387] 상기 제제는 상기 유형의 제제에 보통 사용되는 화장 아쥬반트, 예를 들어, 증점제, 연화제, 습윤제, 계면활성제, 유화제, 보존제, 소포제, 향료, 왁스, 라놀린, 추진제, 염료 및/또는 안료, 및 화장품에 통용되는 다른 성분을 포함할 수 있다.

[0388] 사용되는 분산제 또는 가용화제는 오일, 왁스 또는 다른 지방 물질, 저급 모노알코올 또는 저급 폴리올 또는 이들의 혼합물일 수 있다. 특히 바람직한 모노알코올 또는 폴리올은 에탄올, i-프로판올, 프로필렌 글리콜, 글리세롤 및 소르비톨을 포함한다.

[0389] 본 발명의 바람직한 구현예는 보호용 크림 또는 밀크 형태의 에멀전이고 물의 존재 하에 예를 들어, 지방 알코올, 지방산, 지방산 에스테르, 특히 지방산의 트리글리세리드, 라놀린, 천연 및 합성 오일 또는 왁스 및 유화제를 포함한다.

[0390] 추가 바람직한 구현예는 천연 또는 합성 오일 및 왁스, 라놀린, 지방산 에스테르, 특히 지방산의 트리글리세리드 기재의 유성 로션, 또는 저급 알코올, 예컨대 에탄올, 또는 글리세롤, 예컨대 프로필렌 글리콜, 및/또는 폴리올, 예컨대 글리세롤, 및 오일, 왁스 및 지방산 에스테르, 예컨대 지방산의 트리글리세리드 기재의 유성-알코올성 로션이다.

[0391] 상기 제제는 하나 이상의 저급 알코올 또는 폴리올, 예컨대 에탄올, 프로필렌 글리콜 또는 글리세롤, 및 증점제, 예컨대 규조토의 형태일 수 있다. 유성-알코올성 젤이 또한 천연 또는 합성 오일 또는 왁스를 포함한다.

[0392] 고체 스틱은 천연 또는 합성 왁스 및 오일, 지방 알코올, 지방산, 지방산 에스테르, 라놀린 및 다른 지방 물질로 이루어진다.

[0393] 제제가 에어로졸로서 제형화되는 경우, 일반적으로 통상적인 추진제, 예컨대 알칸, 플루오로알칸 및 클로로플루오로알칸, 바람직하게는 알칸을 사용한다.

[0394] 상술된 바와 같은 화학식 I 의 화합물은 형광성 방사체이고 따라서 또한 전자 장치에서 사용될 수 있다.

[0395] 따라서 본 발명은 더욱이 상술된 바와 같은 하나 이상의 화학식 I 의 화합물을 포함하는 전자 장치에 관한 것이다.

[0396] 상기 전자 장치는 하나 이상의 유기 화합물을 포함하는 하나 이상의 층을 포함하는 장치를 의미한다. 그러나, 상기 성분은 또한 무기 물질을 포함할 수 있거나, 또한 층들은 전적으로 무기 물질로부터 증강된다.

[0397] 전자 장치는 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED), 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 광 검출기, 유기 광수용기, 유기 전계-켄치 장치 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저), 유기 플라즈몬 방사 장치 (D. M. Koller et al., Nature Photonics 2008, 1-4) 및 전기사진 장치, 바람직하게는 유기 전계발광 소자 (OLED) 또는 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC) 로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0398] 유기 전계발광 소자는 캐소드, 애노드 및 하나 이상의 방사층을 포함한다. 이러한 층들 이외에, 또한 추가 층, 예를 들어 각 경우에서 하나 이상의 정공-주입층, 정공-수송층, 정공-차단층, 전자-수송층, 전자-주입층, 엑시톤-차단층 및/또는 전하-발생층을 포함할 수 있다. 예를 들어, 엑시톤-차단 기능을 갖는 중간층의 경우 2 개의 방사층들 사이에 도입되는 것이 가능하다. 그러나, 이러한 층들 각각은 반드시 존재할 필요는 없다는 것을 주목해야 한다. 가능한 층 구조는 예를 들어, 캐소드/EML/중간층/버퍼층/애노드이고, 상기 EML 은 방사층을 나타낸다. 여기서 유기 전계발광 소자는 하나의 방사층 또는 복수의 방사층을 포함할 수 있다. 복수의 방사층이 존재하는 경우, 이들은 바람직하게는 통틀어 380 nm 내지 750 nm 사이에서 복수의 방출 최대를 갖고, 그 결과 전부 백색 방출이다, 즉 형광 또는 인광을 낼 수 있는 여러 방사 화합물은 방사층에서 사용된다. 특히 바람직한 것은 3-층 시스템으로 제공되고, 상기 3 층은 파랑, 녹색 및 주황 또는 적색 방출을 나타낸다 (기본 구조는 예를 들어, WO 2005/011013 을 참조). 더욱이, 광학적 커플링-아웃 층은 전극 중 하나 또는 둘다에 적용될 수 있다.

[0399] 특정 적용을 위해 본 발명에 따른 화학식 I 의 화합물과 조합될 수 있는 추가 유기 관능적 물질은 예를 들어, 호스트 물질, 매트릭스 물질, 전자-수송 물질 (ETM), 전자-주입 물질 (EIM), 정공-수송 물질 (HTM), 정공-주입 물질 (HIM), 전자-차단 물질 (EBM), 정공-차단 물질 (HBM), 엑시톤-차단 물질 (ExBM) 및/또는 방사체이다.

[0400] 따라서 본 발명은 더욱이 상술된 바와 같은 하나 이상의 화학식 I 의 화합물, 및 호스트 물질, 매트릭스 물질,

전자-수송 물질, 전자-주입 물질, 정공-수송 물질, 정공-주입 물질, 전자-차단 물질, 정공-차단 물질, 엑시톤-차단 물질 및/또는 방사체의 군으로부터 선택되는 하나 이상의 추가 유기 관능적 물질을 포함하는 제형 또는 또한 조성물에 관한 것이다.

[0401] 화학식 I 의 화합물의 전자 장치에서 사용하는 경우의 본 발명의 바람직한 구현예에서, 하나 이상의 화학식 I 의 화합물은 방사층에서, 바람직하게는 하나 이상의 추가 화합물과의 혼합물에서 사용된다. 화학식 I 의 화합물이 혼합물에서 방사 화합물 (도펀트) 이 되는 것이 바람직하다. 바람직한 호스트 물질은 방사가 화학식 I 의 화합물 보다 파장이 더 짧거나 전혀 방사하지 않는 유기 화합물이다.

[0402] 따라서 본 발명은 더욱이 상술된 바와 같은 하나 이상의 화학식 I 의 화합물이 형광성 방사체로서 사용되는 것을 특징으로 하는 상술된 바와 같은 유기 전계발광 소자에 관한 것이다.

[0403] 방사층의 혼합물에서 화학식 I 의 화합물의 비율은 0.1 내지 99.0 중량%, 바람직하게는 0.5 내지 50.0 중량%, 특히 바람직하게는 1.0 내지 20.0 중량%, 특히 1.0 내지 10.0 중량% 이다. 상응하게는, 층에서 호스트 물질의 비율은 1.0 내지 99.9 중량%, 바람직하게는 50.0 내지 99.5 중량%, 특히 바람직하게는 80.0 내지 99.0 중량%, 특히 90.0 내지 99.0 중량% 이다.

[0404] 적합한 호스트 물질은 다양한 부류의 물질이다. 바람직한 호스트 물질은 올리고아릴렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 2,2',7,7'-테트라페닐스피로바이플루오렌 또는 디나프틸안트라센), 특히 축합된 방향족기를 함유하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌 (예를 들어 EP 676461 에 따른 DPVBi 또는 스피로-DPVBi), 다지 금속 착물 (예를 들어 WO 04/081017 에 따름), 정공-전도성 화합물 (예를 들어 WO 04/058911 에 따름), 전자-전도성 화합물, 특히 케톤, 포스핀 옥시드, 술폭시드 등 (예를 들어 WO 05/084081 또는 WO 05/084082 에 따름), 아트로프이성체 (예를 들어 비공개 출원 EP 04026402.0 에 따름) 또는 보론산 유도체 (예를 들어 비공개 출원 EP 05009643.7 에 따름) 의 부류로부터 선택된다. 특히 바람직한 호스트 물질은 나프탈렌, 안트라센 및/또는 피렌 또는 상기 화합물들의 아트로프이성체를 함유하는 올리고아릴렌, 올리고아릴렌비닐렌, 케톤, 포스핀 옥시드 및 술폭시드의 부류로부터 선택된다. 매우 특히 바람직한 호스트 물질은 안트라센 및/또는 피렌 또는 상기 화합물들의 아트로프이성체를 함유하는 올리고아릴렌, 포스핀 옥시드 및 술폭시드 부류로부터 선택된다.

[0405] 본 발명에 따른 화학식 I 의 화합물과 조합하여 사용될 수 있는 특히 적합한 매트릭스 물질은 방향족 케톤, 방향족 포스핀 옥시드 또는 방향족 술폭시드 또는 술폰, 예를 들어 WO 2004/013080, WO 2004/093207, WO 2006/005627 또는 WO 2010/006680 에 따름, 트리아릴아민, 예를 들어 CBP (N,N-비스카르바졸릴바이페닐) 에 따른 카르바졸 유도체, 또는 WO 2005/039246, US 2005/0069729, JP 2004/288381, EP 1205527 또는 WO 2008/086851 에 개시된 카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 인돌로카르바졸 유도체, 예를 들어 EP 1617710, EP 1617711, EP 1731584, JP 2005/347160 에 따른 아자카르바졸 유도체, 예를 들어 WO 2007/137725 에 따른 양극성 매트릭스 물질, 예를 들어 WO 2005/111172 에 따른 실란, 예를 들어 WO 2006/117052 에 따른 아자보롤 또는 보로닉 에스테르, 예를 들어 WO 2010/015306, WO 2007/063754 또는 WO 2008/056746 에 따른 트리아진 유도체, 예를 들어 EP 652273 또는 WO 2009/062578 에 따른 아연 착물, 예를 들어 비공개 출원 DE 102008056688.8 에 따른 디아자실롤 또는 테트라아자실롤 유도체, 예를 들어 비공개 출원 DE 102009022858.6 에 따른 디아자포스폴 유도체, 또는 예를 들어 비공개 출원 DE 102009023155.2 및 DE 102009031021.5 에 따른 인데노카르바졸 유도체이다.

[0406] 적합한 인광성 화합물 (삼중항 방사체) 는 특히, 적합한 여기시 예를 들어 가시 영역 및/또는 자외선 영역 및/또는 적외선 영역에 있는 광선을 방사하고, 추가로 20 초과, 바람직하게는 38 초과 84 미만, 특히 바람직하게는 56 초과 80 미만의 원자수를 갖는 하나 이상의 원자를 함유하는 화합물이다. 사용되는 인광성 방사체는 바람직하게는 구리, 몰리브덴, 텅스텐, 레늄, 루테늄, 오스뮴, 로듐, 이리듐, 팔라듐, 백금, 은, 금 또는 유로퓸을 함유하는 화합물, 특히 이리듐 또는 백금을 함유하는 화합물이다.

[0407] 상술되는 방사체의 예는 출원 WO 00/70655, WO 2001/41512, WO 2002/02714, WO 2002/15645, EP 1191613, EP 1191612, EP 1191614, WO 2005/033244, WO 2005/019373 및 US 2005/0258742 에 나타나 있다. 일반적으로, 종래기술에 따라 인광성 OLED 를 위해 사용되고 유기 전계발광 분야의 당업자에게 공지된 바와 같은 모든 인광성 착물이 적합하고, 당업자는 진보적 단계 없이 추가 인광성 착물을 사용할 수 있을 것이다.

[0408] 인광성 금속 착물은 바람직하게는 Ir, Ru, Pd, Pt, Os 또는 Re 를 함유한다. 인광성 금속 착물을 위한 바람직한 리간드는 2-페닐피리딘 유도체, 7,8-벤조퀴놀린 유도체, 2-(2-티에닐)피리딘 유도체, 2-(1-나프틸)피리딘 유도체 또는 2-페닐퀴놀린 유도체이다. 이러한 모든 화합물은 예를 들어 청색용 플루오로, 시아노 및/또는

트리플루오로메틸 치환기로 치환될 수 있다. 보조 리간드는 바람직하게는 아세틸아세토네이트 또는 피콜린산이다.

[0409] 테트라덴테이트 리간드를 갖는 Pt 또는 Pd 의 착물, (US 2007/0087219), 증대된 고리계를 갖는 Pt-포르피린 착물 (US 2009/0061681 A1) 및 Ir 착물, 예를 들어 2,3,7,8,12,13,17,18-옥타에틸-21H, 23H-포르피린-Pt(II), 테트라페닐-Pt(II) 테트라벤조포르피린 (US 2009/0061681), 시스-비스(2-페닐피리디네이토-N,$C^{2'}$)Pt(II), 시스-비스(2-(2'-티에닐)피리디네이토-N,$C^{3'}$)Pt(II), 시스-비스(2-(2'-티에닐)퀴놀리네이토-N,$C^{5'}$)Pt(II), (2-(4,6-디플루오로페닐)피리디네이토-N,$C^{2'}$)Pt(II) (아세틸아세토네이트), 또는 트리스(2-페닐피리디네이토-N,$C^{2'}$)Ir(III) (= $Ir(ppy)_3$, 그린), 비스(2-페닐피리디네이토-N,C^{2})Ir(III) (아세틸아세토네이트) (= $Ir(ppy)_2$ 아세틸아세토네이트, 그린, US 2001/0053462 A1, Baldo, Thompson et al. Nature 403, (2000), 750-753), 비스(1-페닐이소퀴놀리네이토-N,$C^{2'}$)(2-페닐피리디네이토-N,$C^{2'}$)이리듐(III), 비스(2-페닐피리디네이토-N,$C^{2'}$)(1-페닐이소퀴놀리네이토-N,$C^{2'}$)이리듐(III), 비스(2-(2'-벤조티에닐)피리디네이토-N,$C^{3'}$)이리듐(III) (아세틸아세토네이트), 비스(2-(4',6'-디플루오로페닐)피리디네이토-N,$C^{2'}$)이리듐(III) (피콜리네이트) (FIrpic, 블루), 비스(2-(4',6'-디플루오로페닐)피리디네이토-N,$C^{2'}$)Ir(III) (테트라키스(1-피라졸릴)보레이트), 트리스(2-(바이페닐-3-일)-4-tert-부틸피리딘)이리듐(III), $(ppz)_2Ir(5phdpym)$ (US 2009/0061681 A1), $(45ooppz)_2Ir(5phdpym)$ (US 2009/0061681 A1), 2-페닐피리딘-Ir 착물의 유도체, 예를 들어, PQIr (= 이리듐(III) 비스(2-페닐퀴놀릴-N,$C^{2'}$)아세틸아세토네이트), 트리스(2-페닐이소퀴놀리네이토-N,C)Ir(III) (레드), 비스(2-(2'-벤조[4,5-a]티에닐)피리디네이토-N,C^{3})Ir (아세틸아세토네이트) ([$Btp_2Ir(acac)$], 레드, Adachi et al. Appl. Phys. Lett. 78 (2001), 1622-1624) 이 특히 적합하다.

[0410] 또한 3가 란탄족의 착물, 예를 들어, Tb^{3+} 및 Eu^{3+} (J. Kido et al. Appl. Phys. Lett. 65 (1994), 2124, Kido et al. Chem. Lett. 657, 1990, US 2007/0252517 A1) 또는 Pt(II), Ir(I), Rh(I) 와 말레오니트릴레디티올레이트의 인광성 착물 (Johnson et al., JACS 105, 1983, 1795), Re(I) 트리카르보닐-디이민 착물 (Wrighton, JACS 96, 1974, 998, 그 중에서도), 시아노 리간드 및 바이피리딜 또는 페난트롤린 리간드를 갖는 Os(II) 착물 (Ma et al., Synth. Metals 94, 1998, 245) 이 적합하다.

[0411] 트리덴테이트 리간드를 갖는 추가 인광성 방사체가 US 6824895 및 US 10/729238 에 기재되어 있다. 적색-방출 인광성 착물은 US 6835469 및 US 6830828 에 존재한다.

[0412] 상술된 바와 같은 화학식 I 의 화합물은 바람직하게는 하나 이상의 추가 형광성 물질 (일중항 방사체) 와 조합하여 본 출원에 사용될 수 있다. 본 발명의 의미에서 형광은 낮은 스핀 다중도를 갖는 여기 상태, 즉 스핀 상태 S = 1 로부터의 발광을 의미한다.

[0413] 적합한 형광성 화합물 (일중항 방사체) 는 특히, 적합한 여기시 빛 또는 상사선을, 예를 들어 가시 영역 및/또는 자외선 영역 및/또는 적외선 영역에서 방출하는 화합물이다.

[0414] 바람직한 도펀트 (방사체) 는 모노스티릴아민, 디스티릴아민, 트리스티릴아민, 테트라스티릴아민, 스티릴포스핀, 스티릴 에테르 및 아릴아민 부류로부터 선택된다.

[0415] 모노스티릴아민은 하나의 치환 또는 비치환 스티릴기 및 하나 이상의, 바람직하게는 방향족 아민을 함유하는 화합물을 의미한다. 디스티릴아민은 2 개의 치환 또는 비치환 스티릴기 및 하나 이상의, 바람직하게는 방향족 아민을 함유하는 화합물을 의미한다. 트리스티릴아민은 3 개의 치환 또는 비치환 스티릴기 및 하나 이상의, 바람직하게는 방향족 아민을 함유하는 화합물을 의미한다. 테트라스티릴아민은 4 개의 치환 또는 비치환 스티릴기 및 하나 이상의, 바람직하게는 방향족 아민을 함유하는 화합물을 의미한다.

[0416] 본 발명의 추가 구현예에서, 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 별개의 정공-주입층 및/또는 정공-수송층 및/또는 정공-차단층 및/또는 전자-수송층을 포함하지 않는다, 즉 예를 들어, WO 2005/053051 에 기술된 바와 같이 방사층이 정공-주입층 또는 애노드에 바로 인접해 있고/있거나, 방사층이 전자-수송층 또는 전자-주입층 또는 캐소드에 바로 인접해 있다. 더욱이 예를 들어, WO 2009/030981 에 기술된 바와 같이, 방사층에 바로 인접해 있는 정공-수송 또는 정공-주입 물질로서 방사층에 금속 착물과 동일하거나 유사한 금속 착물을 사용하는

것이 가능하다.

[0417] 전자 소자의 특정 적용에 있어서 본 발명의 추가 구현예는 본 발명에 따른 화합물 중 하나 이상 및 하나 이상의 용매를 포함하는 제형과 관련된다. 상기 제형은 용액으로부터의 층의 생성에 매우 적합하다.

[0418] 적합하면서 바람직한 용매는 예를 들어, 톨루엔, 아니솔, 자일렌, 메틸 벤조에이트, 디메틸아니솔, 트리메틸벤젠, 테트랄린, 베라트롤, 테트라히드로푸란, 클로로벤젠 또는 디클로로벤젠 및 이들의 혼합물이다.

[0419] 본 발명에 따른 유기 전계발광 소자는 예를 들어, 디스플레이에서 또는 조명 목적을 위해, 또한 의학 또는 화장 적용을 위해 사용될 수 있다.

[0420] 본 발명에 따른 화합물은 발광 장치에 사용하는데 적합하다. 따라서 이러한 화합물은 매우 다용도식으로 사용될 수 있다. 상기 적용의 주요 분야들 중 일부는 디스플레이 또는 조명 기술이다. 또한 광선치료법 분야에서 상기 화합물 및 상기 화합물을 포함하는 장치를 사용하는 것이 특히 유리하다.

[0421] 광선치료법 또는 광 치료법이 많은 의학 및/또는 화장 분야에서 사용된다. 따라서 본 발명에 따른 화합물 및 상기 화합물을 포함하는 장치는 모든 질환의 치료 및/또는 예방 및/또는 진단을 위해 및/또는 화장 적용에서 사용될 수 있고, 그러한 경우, 당업자는 광선치료법의 사용을 고려한다. 조사 이외에, 용어 광선치료법은 또한 일반적으로 광역학 치료 (PDT) 뿐아니라 소독 및 살균을 포함한다. 광선치료법 또는 광 치료법으로 치료될 수 있는 인간 또는 동물뿐만 아니라, 다른 유형의 생체 또는 비생물 물질이다. 이들은 예를 들어, 곰팡이, 박테리아, 미생물, 바이러스, 진핵생물, 원핵생물, 식품, 음료, 물 및 음료수를 포함한다.

[0422] 용어 광선치료법은 또한 광 치료법 및 다른 유형의 치료, 예를 들어, 활성 화합물을 이용한 치료의 조합의 임의의 유형을 포함한다. 많은 광 치료법은 대상의 외장, 예컨대 인간 및 동물의 피부, 상처, 점막, 눈, 모발, 손톱, 손톱 바닥, 잇몸 및 혀를 조사하거나 치료하는 것을 목적으로 한다. 추가로, 본 발명에 따른 치료 또는 조사는 또한 예를 들어, 내장 (심장, 폐 등) 또는 혈관 또는 유방을 치료하기 위해 대상의 내부에서 수행될 수 있다.

[0423] 본 발명에 따른 적용의 치료 및/또는 화장 분야는 바람직하게는 피부 질환 및 피부-관련 질환 또는 변화 또는 상태의 군, 예를 들어, 건선, 피부 노화, 피부 주름, 피부 재생, 커진 모공, 셀룰라이트, 지성/기름진 피부, 모낭염, 광선각하증, 전암 광선각하증, 피부 병변, 일광노출 및 일광에 지친 피부, 눈가 주름, 피부 궤양, 여드름, 여드름 주사 (rosacea), 여드름으로 인한 흉터, 여드름 박테리아, 기름진/지성 피지선 및 이의 주변 조직의 광조절, 황달, 신생아 황달, 백반증, 피부암, 피부 종양, 크리글러-나자르, 피부염, 아토피성 피부염, 당뇨병 피부 궤양, 및 피부의 탈감각화로부터 선택된다.

[0424] 특히 바람직한 것은 본 발명의 목적이 건선, 여드름, 셀룰라이트, 피부 주름, 피부 노화, 황달 및 백반증의 치료 및/또는 예방을 제공하는 것이다.

[0425] 본 발명에 따른 조성물 및/또는 상기 조성물을 포함하는 장치를 위한 본 발명에 따른 추가 적용 분야는 염증 질환, 류마티스 관절염, 통증 치료, 상처 치료, 신경 질환 및 상태, 부종, 파제트병, 1차 및 전이 종양, 결합 조직 질환 또는 변화, 콜라겐의 변화, 포유류 조직의 섬유아세포 및 섬유아세포 유래의 세포층, 망막의 조사, 황반변성 및 비대성 질환, 알레르기 반응, 기도의 조사, 발한, 혈관 신생성 질환, 바이러스 감염, 특히 사마귀 및 곤지름의 치료를 위한 단순 포진 또는 HPV (인간 유두종 바이러스) 로 인한 감염의 군으로부터 선택된다.

[0426] 특히 바람직한 것은 본 발명의 목적이 류마티스 관절염, 바이러스 감염 및 통증의 치료 및/또는 예방으로 제공되는 것이다.

[0427] 본 발명에 따른 조성물 및/또는 상기 조성물을 포함하는 장치를 위한 본 발명에 따른 추가 적용 분야는 겨울 우울증, 수면병, 기분 향상을 위한 조사, 통증 특히 예를 들어, 긴장으로 인한 근육 통증 또는 관절 통증의 감소, 관절 강직의 제거 및 치아의 미백 (탈색) 이다.

[0428] 본 발명에 따른 조성물 및/또는 상기 조성물을 포함하는 장치를 위한 본 발명에 따른 추가 적용 분야는 소독의 군으로부터 선택된다. 본 발명에 따른 본 발명에 따른 화합물 및/또는 장치는 소독, 살균 또는 보존의 목적을 위해 대상 (비생물 물질) 또는 대상 (생체 물질 예를 들어, 인간 및 동물) 의 임의의 유형의 치료에 사용될 수 있다. 이는 예를 들어, 상처의 소독, 박테리아 감소, 수술 기구 또는 다른 물품의 소독, 식품, 액체, 특히 물, 음료수 및 다른 음료의 소독 또는 보존, 점막 및 잇몸 및 치아의 소독을 포함한다. 상기 소독은 원치않는 효과의 살아있는 미생물학적 감염인자, 예컨대 박테리아 및 세균의 감소를 의미한다.

[0429] 상술된 광선치료법의 목적에 있어서, 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 장치는 바람직하게는 250 내지 1250 nm, 특히 바람직하게는 300 내지 1000 nm 및 특히 바람직하게는 400 내지 850 nm 의 파장을 갖는 빛을 방사한다.

[0430] 본 발명의 특히 바람직한 구현예에서, 본 발명에 따른 화합물은 광선치료법의 목적을 위해서 유기 발광 다이오드 (OLED) 또는 유기 발광 전기화학 전지 (OLEC) 에서 사용된다. OLED 및 OLEC 둘다 평면 또는 단층 또는 다층 구조를 갖는 임의의 원하는 단면을 갖는 섬유같은 구조 (예를 들어 원형, 타원형, 다각형, 사각형) 를 가질 수 있다.

[0431] 이러한 OLEC 및/또는 OLED 는 추가 기계적인, 접착제 및/또는 전자 소자 (예를 들어 조사 횟수, 강도 및 파장의 조절을 위한 배터리 및/또는 조절 유닛) 를 포함하는 다른 장치에서 설치될 수 있다. 본 발명에 따른 OLEC 및/또는 OLED 를 포함하는 이러한 장치는 바람직하게는 플라스터, 패드, 테이프, 밴드, 커프, 블랭킷, 후드, 슬리핑 백, 텍스타일 및 스텐트를 포함하는 군으로부터 선택된다.

[0432] 치료 및/또는 화장 목적을 위한 장치의 용도는 낮은 조사 강도의 균일한 방사가 사실상 임의의 부위에 언제든지 OLED 및/또는 OLEC 를 사용하는 본 발명에 따른 장치의 도움으로 가능하기 때문에 특히 종래 기술에 비해 유리하다. 조사는 입원 환자로서, 외래 환자로서 및/또는 환자 직접에 의해, 즉 의학 또는 화장 전문가에 의한 인도 없이 수행될 수 있다. 따라서, 예를 들어, 플라스터는 옷안에 착용될 수 있어서, 근무 시간, 여가 또는 잠자는 동안 조사가 가능하다. 복합 입원 환자/외래 환자 치료는 많은 경우에서 방지되거나 흔히 감소될 수 있다. 본 발명에 따른 장치는 재사용을 목적으로 하거나 1회, 2회 또는 3회 사용후 버릴 수 있는 일회용 물품일 수 있다.

[0433] 종래 기술보다 나은 장점은 예를 들어, 열의 낮은 방산 및 감성 측면이다. 따라서, 황달로 치료될 신생아는 전형적으로 부모와 신생아를 위한 감성적 스트레스 상황을 나타내는 부모와의 접촉 없이 인큐베이터에서 눈을 가린채 방사되어야 한다. 본 발명에 따른 OLED 및/또는 OLEC 를 포함하는 본 발명에 따른 블랭킷의 도움 없이, 감성적 스트레스가 유의하게 감소될 수 있다. 추가로, 통상적인 조사 장비에 비해 본 발명에 따른 장치의 감소된 열 생산 때문에 어린이의 더 양호한 온도 조절이 가능하다.

[0434] 추가 설명이 없어도, 당업자는 가장 넓은 범위에서 상기 서술을 활용할 것으로 추정된다. 따라서 바람직한 구현예 및 실시예는 임의의 방식에 절대적으로 한정되지 않는 서술적 사실로서 간주될 뿐이다. 상기 언급된 모든 출원 및 공개물의 전체 개시 내용은 참조로서 본 출원에 인용된다. 실시예의 제제 내의 각각의 성분 중량% 비는 명확히 서술의 개시 내용에 속하고 따라서 특징으로 활용될 수 있다.

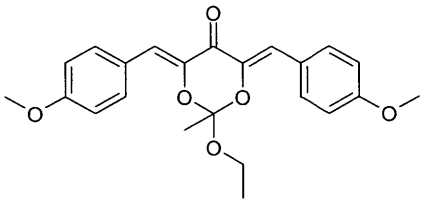
[0435] 본 발명의 추가 중요한 특색 및 장점은 하위 청구항 및 실시예로부터 초래한다. 상술된 특색 및 하기 설명될 특색은 지시된 각 조합뿐만 아니라 본 발명의 문맥을 벗어나지 않는 다른 조합 또는 분리에서 사용될 수 있다.

[0436] 실시예:

[0437] 실시예 1: (4Z,6Z)-2-에톡시-4,6-비스[(4-메톡시페닐)메틸렌]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온의 합성

[0438] 20 ㎖ 의 에탄올 중의 1.96 g 의 수산화칼륨 (34.89 mmol; 2.24 eq.) 을 초기에 도입한다. 10 ㎖ 의 에탄올에 용해된 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온 (2.5 g; 15.61 mmol; 1 eq.) 을 첨가하고, 후속적으로 4.24 g 의 4-메톡시벤즈알데히드 (34.89 mmol, 2.34 eq.) 를 30 분에 걸쳐 적가한다. 이어서 혼합물을 3 시간 동안 환류 하에 가열한다. 에탄올을 증류제거하고, 실온으로 냉각한 후 50 ㎖ 의 물을 첨가하고, 고체 침전물을 제거하고 10 ㎖ 의 물로 세척한다. 수득된 고체를 85 ㎖ 의 비등 에탄올에서 재결정한다. 건조하여 노랑색 결정으로서 생성물을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.81 (d, 4x Ar-H), 7.01 (d, 4x Ar-H), 6.82 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.81 (s, 2x Ar-C*H*$_3$), 3.60 (q, O-C*H*$_2$-), 1.97 (s, C-C*H*$_3$), 1.04 (t, CH_2-C*H*$_3$).

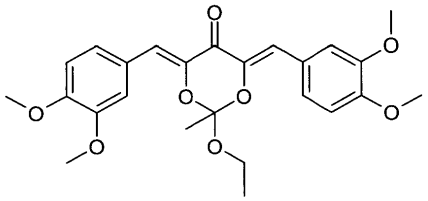


[0439]

[0440] 실시예 2:

[0441] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 3,4-디메톡시벤즈알데히드와 반응시켜 노랑색 결정으로서 (4Z,6Z)-4,6-비스[3,4-디메톡시페닐]메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.50 (d, 2x Ar-H), 7.44 (dd, 2x Ar-H), 7.03 (d, 2x Ar-H), 6.93 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.81 (s, 4x Ar-C*H*$_3$), 3.61 (q, O-C*H*$_2$-), 1.98 (s, C-C*H*$_3$), 1.03 (t, CH_2-C*H*$_3$).



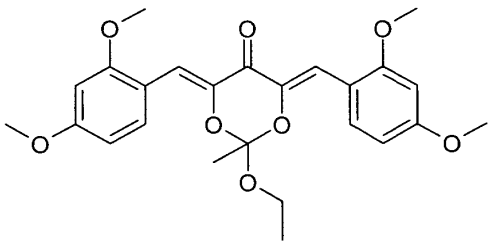
[0442]

[0443] 실시예 3:

[0444] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 2,4-디메톡시벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 (4Z,6Z)-4,6-비스[2,4-디메톡시페닐]메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 8.03 (d, 2x Ar-H), 7.14 (s, 2x Ar-H), 6.63 (m, 2x Ar-H, 2x C=C*H*Ar), 3.87 (s, 2x Ar-C*H*$_3$), 3.82 (s, 2x Ar-C*H*$_3$), 3.56 (q, O-C*H*$_2$-), 1.93 (s, C-C*H*$_3$), 1.03 (t, CH_2-C*H*$_3$).

[0445]

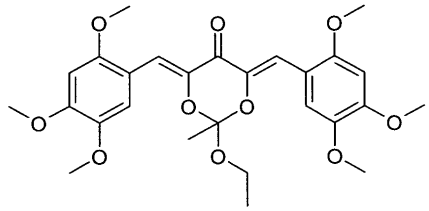


[0446]

[0447] 실시예 4:

[0448] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 알데히드 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게, 2,4,5-트리메톡시벤즈와 반응시켜 오렌지색 결정으로서 (4Z,6Z)-4,6-비스[2,4,5-트리메톡시페닐]메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.71 (s, 2x Ar-H), 7.16 (s, 2x Ar-H), 6.74 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.87 (s, 2x Ar-CH_3), 3.83 (s, 2x Ar-CH_3), 3.74 (s, 2x Ar-CH_3), 3.59 (q, O-CH_2-), 1.94 (s, C-CH_3), 1.03 (t, CH_2-CH_3).



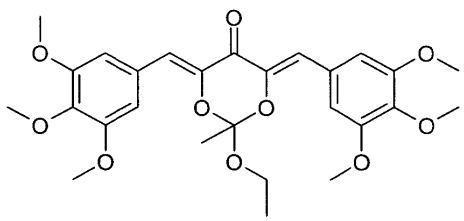
[0449]

[0450] 실시예 5:

[0451] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 3,4,5-트리메톡시벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 (4Z,6Z)-4,6-비스[3,4,5-트리메톡시페닐]메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.23 (s, 4x Ar-H), 6.85 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.82 (s, 4x mAr-CH_3), 3.72 (s, 2x pAr-CH_3), 3.62 (q, O-CH_2-), 1.99 (s, C-CH_3), 1.05 (t, CH_2-CH_3).

[0452]

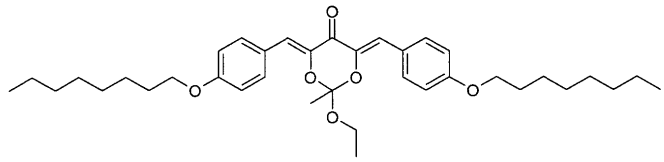


[0453]

[0454] 실시예 6:

[0455] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-옥틸옥시 벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 (4Z,6Z)-4,6-비스[(4-옥틸옥시페닐)메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.79 (d, 4x Ar-H), 7.00 (d, 4x Ar-H), 6.81 (s, 2x C=C*H*Ar), 4.02 (t, 2x CH_2), 3.60 (q, O-CH_2-), 1.97 (s, C-CH_3), 1.73 (m, 2x CH_2), 1.47-1.20 (m, 10x CH_2), 1.05 (t, CH_2-CH_3), 0.86 (t, 2x CH_3).

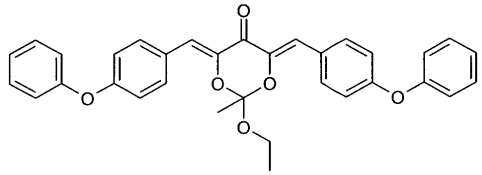


[0456]

[0457] 실시예 7:

[0458] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-펜녹시벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 (4Z,6Z)-4,6-비스[(4-펜녹시페닐)메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.88 (d, 4x r-H), 7.43 (m, 4x Ar-H), 7.19 (m, 2x Ar-H), 7.08 (m, 4x Ar-H), 7.01 (d, 4x Ar-H), 6.85 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.61 (q, O-C*H*$_2$-), 1.96 (s, C-C*H*$_3$), 1.04 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

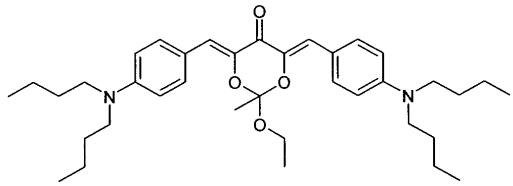


[0459]

[0460] 실시예 8:

[0461] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-디부틸아미노벤즈알데히드와 반응시켜, 적색 결정으로서 (4Z,6Z)-4,6-비스[[(4-디부틸아미노)페닐]메틸렌]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (400 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.64 (d, 4x Ar-H), 6.70 (s, 2x C=C*H*Ar), 6.66 (d, 4x Ar-H), 3.58 (q, O-C*H*$_2$-), 1.92 (s, C-C*H*$_3$), 1.52 (m, 4x CH$_2$), 1.33 (m, 4x CH$_2$), 1.03 (t, CH$_2$-C*H*$_3$), 0.92 (t, 4x CH$_3$).

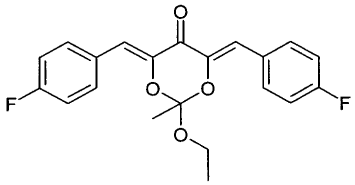


[0462]

[0463] 실시예 9:

[0464] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-플루오로벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(4-플루오로페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.90 (dd, 4x Ar-H), 7.27 (*t*, 4x Ar-H), 6.87 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.59 (q, O-C*H*$_2$-), 1.99 (s, C-C*H*$_3$), 1.02 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

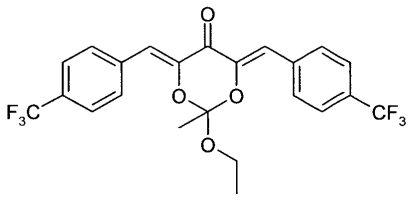


[0465]

[0466] 실시예 10:

[0467] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-트리플루오로메틸벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(4-트리플루오로메틸페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 8.03 (d, 4x Ar-H), 7.79 (t, 4x Ar-H), 6.96 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.63 (q, O-C*H*$_2$-), 2.03 (s, C-C*H*$_3$), 1.03 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

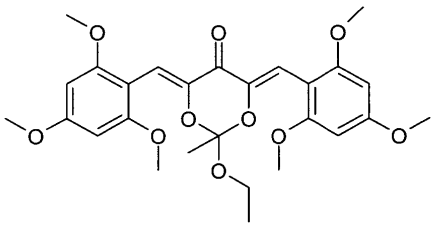


[0468]

[0469] 실시예 11:

[0470] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 2,4,6-트리메톡시벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(2,4,6-트리메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 6.60 (s, 4x Ar-H), 6.26 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.81 (s, p-MeO-Ar), 3.78 (s, 2x o-MeO-Ar), 3.62 (q, O-C*H*$_2$-), 1.60 (s, C-C*H*$_3$), 1.08 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

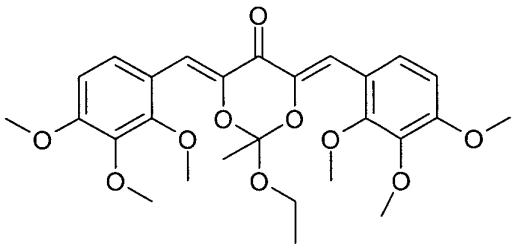
[0471] 

[0472] 실시예 12:

[0473] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 2,3,4-트리메톡시벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(2,3,4,-트리메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.85 (d, 4x Ar-H), 7.05 (s, 2x C=C*H*Ar), 6.91 (d, 4x Ar-H), 3.85 (s, MeO-Ar), 3.84 (s, MeO-Ar), 3.77 (s, MeO-Ar), 3.59 (q, O-C*H*$_2$-), 1.94 (s, C-C*H*$_3$), 1.04 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

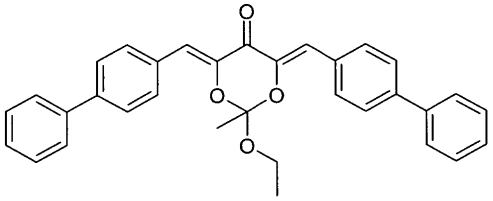
[0474]

[0475] 

[0476] 실시예 13:

[0477] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 바이페닐-4-카르발데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-바이페닐-4-일메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

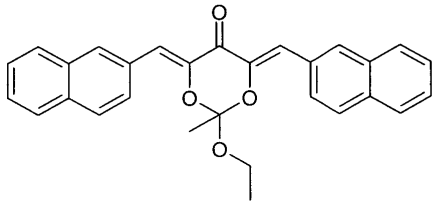
^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.96 (d, 4x Ar-H), 7.75 (t, 8x Ar-H), 7.49 (t, 4x Ar-H), 7.41 (m, 4x Ar-H), 6.94 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.66 (q, O-C*H*$_2$-), 2.05 (s, C-C*H*$_3$), 1.06 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

[0478] 

[0479] 실시예 14:

[0480] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 나프탈렌-2-카르발데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-나프탈렌-2-일메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 8.34 (s, 2x Ar-H), 7.92-8.03 (m, 8x Ar-H), 7.55-7.59 (m, 4x Ar-H), 7.05 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.69 (q, O-C*H*$_2$-), 2.13 (s, C-C*H*$_3$), 1.05 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

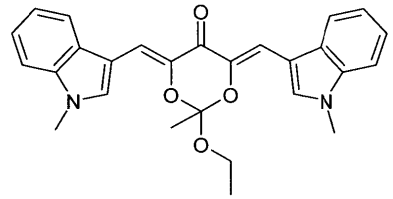


[0481]

[0482] 실시예 15:

[0483] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 1-메틸인돌-3-카르발데히드와 반응시켜, 오렌지색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(1-메틸-1-H-인돌-3-일)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 8.02 (s, 2x Ar-H), 7.86 (d, 2x Ar-H), 7.52 (d, 2x Ar-H), 7.16-7.31 (m, 4x Ar-H), 7.22 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.91 (s, 2x N-C*H*$_3$), 3.63 (q, O-C*H*$_2$-), 2.11 (s, C-C*H*$_3$), 1.04 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

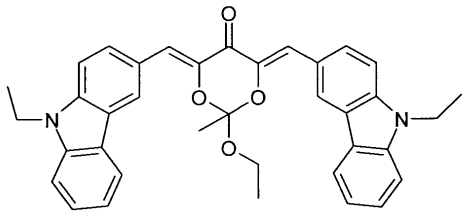


[0484]

[0485] 실시예 16:

[0486] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 9-에틸카르바졸-3-카르발데히드와 반응시켜, 오렌지색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(9-에틸-9H-카르바졸-3-일)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 8.56 (d, 2x Ar-H), 8.21 (d, 2x Ar-H), 8.03 (dd, 2x Ar-H), 7.67 (*t*, 2x Ar-H), 7.51 (dt, 2x Ar-H), 7.27 (dt, 2x Ar-H), 7.10 (s, 2x C=C*H*Ar), 4.48 (q, N-C*H*$_2$-CH$_3$), 3.71 (q, O-C*H*$_2$-), 2.16 (s, C-C*H*$_3$), 1.35 (t, N-CH$_2$-C*H*$_3$), 1.06 (t, CH$_2$-C*H*$_3$).

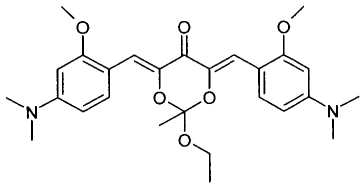


[0487]

[0488] 실시예 17:

[0489] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-디메틸아미노-2-메톡시벤즈알데히드와 반응시켜, 적색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(4-디메틸아미노-2-메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.95 (d, 2x Ar-H), 7.15 (s, 2x C=C*H*Ar), 6.37 (dd, 2x Ar-H), 6.26 (dd, 2x Ar-H), 3.86 (s, 2x MeO-Ar) 3.55 (q, O-C*H*$_2$-), 3.00 (s, 2x Me_2N), 1.88 (s, C-C*H*$_3$), 1.01 (t, CH_2-C*H*$_3$).

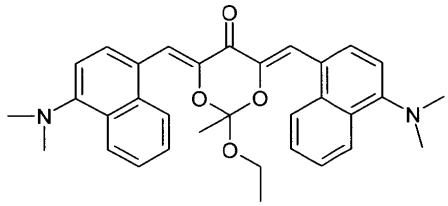


[0490]

[0491] 실시예 18:

[0492] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-디메틸아미노-나프탈렌-1-카르발데히드와 반응시켜, 적색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(4-디메틸아미노나프탈렌-1-일)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 8.24 (d, 2x Ar-H), 8.16-8.22 (m, 4x Ar-H), 7.58 (s, 2x C=C*H*Ar), 7.46.-7.68 (dd, 2x Ar-H), 7.19 (d, 2x Ar-H), 3.65 (q, O-C*H*$_2$-), 2.91 (s, 2x Me_2N), 1.96 (s, C-C*H*$_3$), 1.05 (t, CH_2-C*H*$_3$).



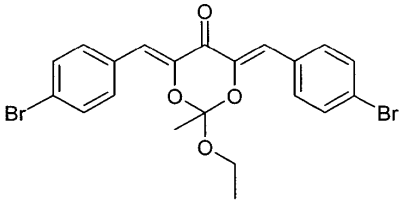
[0493]

[0494] 실시예 19:

[0495] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-브로모벤즈알데히드와 반응시켜, 노랑색 결정으로서 2-에톡시-2,6-비스-[1-(4-브로모페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.79 (d, 4x Ar-H), 7.63 (d, 4x Ar-H), 6.86 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.60 (q, O-C*H*$_2$-), 2.00 (s, C-C*H*$_3$), 1.02 (t, CH_2-C*H*$_3$).

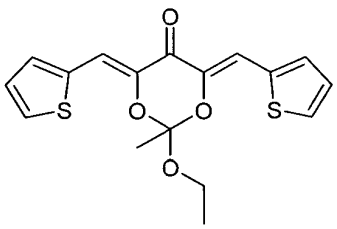
[0496]



[0497]

[0498] 실시예 20:

[0499] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 티오펜-2-카르발데히드와 반응시켜, 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-티오펜-2-일메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.



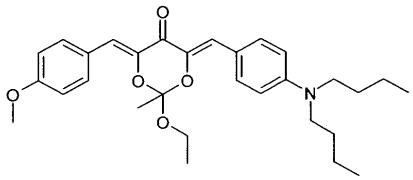
[0500]

[0501] 실시예 21:

[0502] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-메톡시벤즈알데히드 및 4-(디부틸아미

노)벤즈알데히드의 혼합물과 반응시킨다. 수득된 생성 혼합물을 크로마토그래피로 분리하여, 특히, 화합물 4-[1-(4-디부틸아미노페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-에톡시-6-[1-(4-메톡시페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

^{1}H-NMR (300 MHz, DMSO-d_6) δ = 7.78 (d, 2x Ar-H), 7.67 (d, 2x Ar-H), 7.00 (d, 2x Ar-H), 6.67 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.79 (s, Ar-OMe), 3.58 (q, O-C*H*$_2$-), 3.35 (m, 4xCH_2) 1.94 (s, C-C*H*$_3$), 1.52 (m, 2xCH_2), 1.42 (m, 2xCH_2), 1.03 (t, CH_2-C*H*$_3$), 0.91 (t, 2x CH_3).

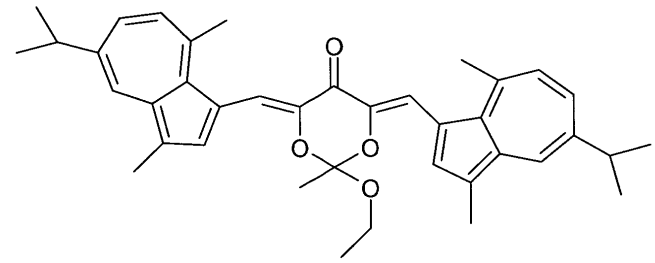


[0503]

[0504] 실시예 22:

[0505] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 5-이소프로필-3,8-디메틸아줄렌-1-카르발데히드와 반응시켜, 2-에톡시-4,6-비스-[1-(5-이소프로필-3,8-디메틸아줄렌-1-일)메트-(Z)-일리덴]-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.

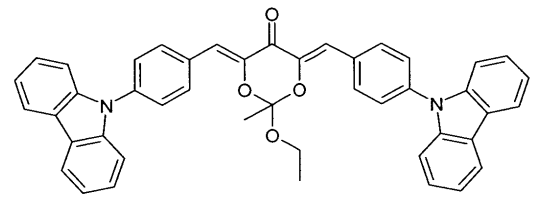
^{1}H-NMR (300 MHz, $CDCl_3$) δ = 8.41 (s, 2x Ar-H), 8.07 (d, 2x Ar-H), 7.35 (d, 2x Ar-H), 7.04 (s, 2x C=C*H*Ar), 3.72 (q, O-C*H*$_2$-), 3.15 (s, 2x Ar-Me), 3.01 (m, 2x C*H*$(CH_3)_2$), 2.59 (s, 2x Ar-Me), 2.05 (s, C-C*H*$_3$), 1.25 (s, 2xCH$(CH_3)_2$), 1.13 (t, CH_2-C*H*$_3$).



[0506]

[0507] 실시예 23:

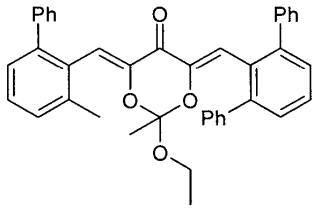
[0508] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 4-카르바졸-9-일벤즈알데히드와 반응시켜, 4,6-비스-[1-(4-카르바졸-9-일페닐)메트-(Z)-일리덴]-2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.



[0509]

[0510] 실시예 24:

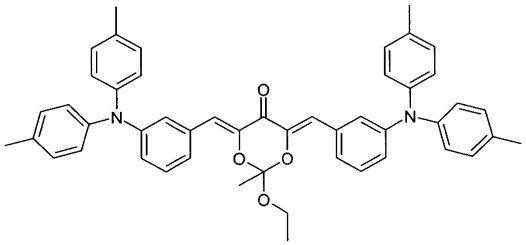
[0511] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 [1,1',3',1"]터페닐-2'-카르발데히드와 반응시킨다. 알데히드는 [Bahaaldin Rashidzadeh et al, ARKIVOC 2008 (xvii) 167-172] 의 명세서에 따라 상응하게 합성될 수 있다. 2-에톡시-2-메틸-4,6-비스-[1-[1,1';3',1"]터페닐-2'-일메트-(Z)-일리덴]-1,3-디옥산-5-온을 수득한다. Ph = 페닐.



[0512]

[0513] 실시예 25:

[0514] 2-에톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 실시예 1 의 반응 조건과 유사하게 3-(디-p-톨릴아미노)벤즈알데히드와 반응시켜, 4,6-비스-[1-[3-(디-p-톨릴아미노)페닐]메트-(Z)-일리덴]-2-메톡시-2-메틸-1,3-디옥산-5-온을 수득한다.



[0515]

[0516] 실시예 A: 흡수 강도

[0517] 흡수 강도를 위해 사용되는 척도는 소위 E1% 값, 및 나타낸 흡수 극대 λmax 와 관련된 흡수대의 반값폭이다. E1% 값은 농도 1 g/100 ml 로 추정된 흡수 극대에서 흡광도를 나타낸다. 이 때문에, 에탄올 중의 물질의 흡수 스펙트럼은 희석 용액에서 기록된다. 값을 커큐민 및 베타-카로틴의 기준 스펙트럼과 비교한다.

[0518]

시험 물질	λmax	E1% 값	반값폭 [nm]
실시예 1 에 따름	402	873	84
실시예 2 에 따름	412	617	85
실시예 3 에 따름	419	688	93
실시예 4 에 따름	444	304	92
실시예 5 에 따름	394	647	85
실시예 6 에 따름	404	557	87
실시예 7 에 따름	389	675	84
실시예 8 에 따름	486	953	105
커큐민	426	1507	78
베타-카로틴	453	408	88

[0519] 실시예 B: 열 안정성:

[0520] 열 안정성을 열무게 측정방법의 도움으로 측정한다 (기구 TGA Q5000 V3.10 Build 258, 온도 범위 실온 내지 800 ℃, 가열 속도 10K/min).

[0521]

시험 물질	중량의 98% 가 여전히 존재한 온도
실시예 4 에 따름	256℃
실시예 8 에 따름	274℃
커큐민 (비교예)	223℃
베타-카로틴 (비교예)	84℃

[0522] 열 안정성은 우수하고, 이는 화학식 I 의 염료, 예를 들어 실시예 4 및 8 의 화합물의 고온 가공, 예를 들어, 플라스틱 내의 혼입이 또한 분해 없이 가능하다는 것을 의미한다.

[0523] 실시예 C: 형광 측정

[0524] 표에 나타낸 에탄올 중의 물질 농도는 Aminco Bowman 2 형광 분광기 (셀 두께 1 cm; 여기 220-600nm; 방사 220-800nm; 분광 갭 폭 (여기) 4nm, (방사) 8 nm; 기록 속도 10nm/min; 단계 폭 (여기) 5nm, (방출) 4nm) 를 사용하여 측정한다.

[0525]

물질	측정농도	여기	방출
실시예 4 에 따름	0.00436 mg/ml	440 nm	596 nm
실시예 8 에 따름	0.00048 mg/ml	485 nm	640 nm
실시예 17 에 따름	0.00045 mg/ml	490 nm	632 nm

[0526] 실시예 D: 용해도

[0527] 용해도 측정을 페네틸 벤조에이트 (X-Tend 226) 에서 수행하였다:

[0528]

시험 물질	X-Tend 226 에서의 용해도:
실시예 1 에 따름	2.8%
실시예 2 에 따름	1.2%
실시예 3 에 따름	1.0%
실시예 4 에 따름	<0.1%
실시예 5 에 따름	1.1%
실시예 6 에 따름	1.0%
실시예 7 에 따름	2.2%
실시예 8 에 따름	2.8%
커큐민	0.4%
베타-카로틴	0.2%

[0529] 실시예 E: 피부 착색 시험

[0530] 인간 각질층의 샘플을 염색하기 위해서, 하기 절차에 따른다: 약 0.3 ㎠ 의 인간 각질층 조각을 실시예 8 에 따른 화합물의 0.6% 용액에 48 시간 동안 인큐베이션시킨다 (용매 혼합물: 테트라히드로푸란/에틸렌 글리콜/ 포스페이트 버퍼 pH6 = 50/47/3). 피부 조각은 강렬한 오렌지색이 된다. 이어서 피부 표본을 인큐베이션 용액으로부터 제거하고 물에 일주일 동안 저장한다. 그 시간 동안 시각적 색 흔적은 완전히 유지된다. 색이 눈에 띄게 세척되지 않는다. 추가 시험에서, 피부 조각을 물에서 제거하고 2 조각으로 분리한다. 한 조각은 암실에 놓고, 다른 조각은 자극적 태양광 (기구 설정: 500Wm2) 을 사용하여 솔라 시뮬레이터 (Atlas CPS+) 에 한시간 동안 2회 놓고 탈색시킨다. 암실에 보관한 샘플과 비교했을 때 시각적으로 감지할만한 변화가 없다.

[0531] 제형예:

[0532] 실시예 A-1: 헤어 린스

[0533]

	중량% [%]
세테아릴 알코올	10
해바라기씨아미도프로필 에틸디모늄 에토술페이트	0.5
세테아레스-20	3.0
판테놀	0.4
페닐 트리메티콘	0.3
히드록시프로필 구아 히드록시프로필트리모늄 클로라이드	0.8
실시예 8 에 따른 화합물	1.0
인카나타 시계초 씨 오일	0.2
Basic red 51	0.1
Basic red 76	0.2
향료	1.0
보존제	적정량
시트르산 / 수산화나트륨	pH 5.5 가 될때까지 적정량
아쿠아	100 이 될 때까지

[0534] 실시예 B-1: 샴푸

	중량% [%]
나트륨 라우레스 술페이트	5.0
코카미도프로필 베타인	5.0
라우로일 글루탐산	3.0
데실 글루코시드	5.0
폴리쿼터늄-10	0.5
PEG-3 디스테아레이트	0.8
실시예 22 에 따른 화합물	0.5
달맞이꽃 오일	0.3
Basic red 51	0.1
유비퀴논	0.1
벤질 알코올	0.5
향료	1.0
보존제	적정량
염화나트륨	0.8
시트르산 / 수산화나트륨	pH 5.5 가 될때까지 적량
아쿠아	100 이 될 때까지

[0535]

[0536] 실시예 C-1: 모발 염색 처방

	1	2	3	4	5	6	7
벤질 알코올	2.5						
프로필렌 카르보네이트	10						
에탄올	5.0						
히드록시에틸셀룰로오스	2.0						
피레녹신 나트륨 CAS 51410-30-1	2.0						2.0
트람산구인 (Tramsanguine) CAS 34083-17-5		1.0				1.0	
신나바린 CAS 606-59-7			1.0				
신나바르산 CAS 146-90-7				1.0			
레조르시놀 블루 CAS 71939-12-3					1.0		
실시예 22 에 따른 화합물	1.0	1.0	2.0	1.0	1.0	0.5	
실시예 4 에 따른 화합물						1.5	2.0
향료	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
보존제	적정량	적정량	적정량	적정량	적정량	적정량	적정량
시트르산	pH 5.5 가 될 때까지 적정량	pH 5.5 가 될 때까지 적정량	pH 5.5 가 될 때까지 적정량	pH 5.5 가 될 때까지 적정량	pH 5.5 가 될 때까지 적정량	pH 5.5 가 될 때까지 적정량	pH 5.5 가 될 때까지 적정량
아쿠아	100 이 될 때까지	100 이 될 때까지	100 이 될 때까지	100 이 될 때까지	100 이 될 때까지	100 이 될 때까지	100 이 될 때까지

[0537]

[0538] 실시예 D-1: 마일드 투명한 W/O 태닝 로션

[0539] 성분 / 상품명 INCI [중량%]

[0540] A

[0541] Dow Corning 3225 C 시클로메티콘, 23.60

[0542] 디메티콘 코폴리올

[0543] 프로필 4-히드록시벤조에이트 프로필파라벤 0.05

[0544] 실시예 8 에 따른 화합물 0.25

[0545] B

[0546] 디히드록시아세톤 드록시아세톤 3.00

[0547] 메틸 4-히드록시벤조에이트 메틸파라벤 0.15

[0548] 1,2-프로판디올 프로필렌 글리콜 35.90

[0549] 탈염수 아쿠아 (물) 35.30

[0550] 전체 100.00

[0551] 실시예 E-1: 착색된 샤워 젤

[0552] 성분 INCI 농도

[0553] Texapon NSO 나트륨 라우레스 에테르 술페이트 10%

[0554] Dehyton K 코카미도프로필 베타인 3%

[0555] Tagat L 2 PEG-20 글리세릴 라우레이트 1%

[0556] 실시예 22 0.001%

[0557] 실시예 8 0.05%-0.1%

[0558] 물 아쿠아 100 이 될 때까지

[0559] 실시예 F-1: 가시 광선으로부터 보호하기 위한 O/W 에멀젼

[0560] 이론상, 다른 화학식 I 의 화합물은 또한 하기 표에 나타낸 예시 물질의 사용에 대안으로서 사용될 수 있다.

[0561] 수치 (중량%)

	2-1	2-2	2-3	2-4	2-5	2-6	2-7	2-8	2-9	2-10
이산화티탄		2	5							3
메틸렌 비스벤즈트리아졸릴 테트라메틸부틸페놀						1	2	1		
실시예 8	0.5	1	2	3	5				1	1
실시예 17						4	3	2	1	0.5
실시예 22	0.5	0.5	0.5							
실시예 4								0.5	0.5,	0.5
4-메틸벤질리덴 캠퍼	2		3		4		3		2	
부틸 메톡시디벤조일메탄	1	3		3	3		3	3	3	
스테아릴 알코올 (및) 스테아레스-7 (및) 스테아레스-10	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
글리세릴 스테아레이트 (및) 세테스-20	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
글리세릴 스테아레이트	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
마이크로왁스	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
세테아릴 옥타노에이트	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5	11.5
카프릴릭/카프릭 트리글리세리드	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6
올레일 올레에이트	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6
프로필렌 글리콜	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4
글리세릴 스테아레이트 SE										
스테아르산										
페르세아 그라티시마										
프로필파라벤	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
메틸파라벤	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15
트로메타민			1.8							
물	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지

[0562]

	2-11	2-12	2-13	2-14	2-15	2-16	2-17	2-18
이산화티탄	3		2				2	5
폴리실리콘 15		1	0.5					
실시예 4	0.5	1.5	0.5	1				
실시예 22					1	0.5	1.5	0.5
옥토크릴렌	5	5	5	5	5	5	5	5
실시예 17	0.5	1.5	1		3		2	
산화아연			2					
4-메틸벤질리덴 캠퍼				3				
부틸 메톡시디벤조일메탄				2				
페닐벤즈이미다졸 술폰산					1			
스테아릴 알코올 (및) 스테아레스-7 (및) 스테아레스-10	3	3	3	3				
글리세릴 스테아레이트 (및) 세테스-20	3	3	3	3				
글리세릴 스테아레이트	3	3	3	3				
마이크로왁스	1	1	1	1				
세테아릴 옥타노에이트	11.5	11.5	11.5	11.5				
카프릴릭/카프릭 트리글리세리드	6	6	6	6	14	14	14	14
올레일 올레에이트	6	6	6	6				
프로필렌 글리콜	4	4	4	4				
글리세릴 스테아레이트 SE					6	6	6	6
스테아르산					2	2	2	2
페르세아 그라티시마					8	8	8	8
프로필파라벤	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
메틸파라벤	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15
1-메틸히단토인-2-이미드					3			
글리세린					3	3	3	3
물	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지	100이 될 때까지

[0563]