

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2016-539933
(P2016-539933A)

(43) 公表日 平成28年12月22日(2016.12.22)

(51) Int.Cl.

A61K	8/43	(2006.01)
A61K	8/49	(2006.01)
A61Q	5/04	(2006.01)

F 1

A 61 K	8/43
A 61 K	8/49
A 61 Q	5/04

テーマコード(参考)

4 C 0 8 3

審査請求 未請求 予備審査請求 有 (全 100 頁)

(21) 出願番号	特願2016-528133 (P2016-528133)
(86) (22) 出願日	平成26年11月6日 (2014.11.6)
(85) 翻訳文提出日	平成28年6月17日 (2016.6.17)
(86) 國際出願番号	PCT/US2014/064217
(87) 國際公開番号	W02015/069823
(87) 國際公開日	平成27年5月14日 (2015.5.14)
(31) 優先権主張番号	61/901,528
(32) 優先日	平成25年11月8日 (2013.11.8)
(33) 優先権主張国	米国(US)

(71) 出願人	506347528 ルブリゾル アドバンスド マテリアルズ , インコーポレイテッド アメリカ合衆国 オハイオ 44141- 3247, クリーブランド, ブレック スピル ロード 9911
(74) 代理人	100078282 弁理士 山本 秀策
(74) 代理人	100113413 弁理士 森下 夏樹
(72) 発明者	カディール, ムラット アメリカ合衆国 オハイオ 44141- 3247, クリーブランド, ブレック スピル ロード 9911

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】半永久的毛髪直毛化組成物および方法

(57) 【要約】

毛髪をまっすぐにするための組成物および方法が開示される。方法は、熱活性化型薬剤とグアニジン部分を含む補助剤化合物とを含む組成物でケラチン線維をコーティングするステップと、コーティングされたケラチン線維を、ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり、温度が少なくとも185°の加熱装置と接触させるステップとを含む。開示する技術の典型的な実施形態の一態様によれば、当技術は、毛髪をまっすぐにするための熱活性化型組成物であって、(a)少なくとも1種の毛髪直毛化剤と、(b)少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤と、必要に応じて、(c)少なくとも1種の美容上許容される賦形剤とを含む、組成物に関する。

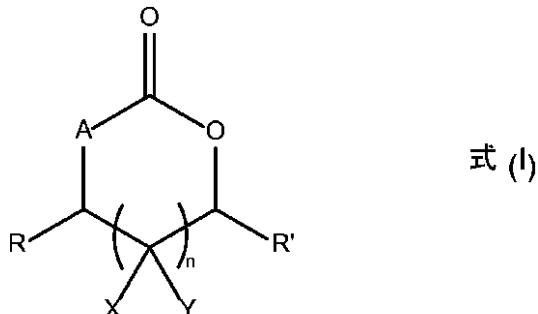
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

毛髪をまっすぐにするまたは弛緩させるための組成物であって、

(a) 式(I)によって表される化合物：

【化 2 1】



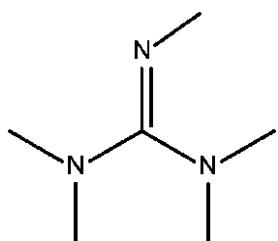
10

[式中、Aは、NHおよびOから選択され、RおよびR'は、水素原子、CH₃、CH₂CH₃、およびCH₂OHから独立に選択され、XおよびYは、水素原子およびC₁～C₅アルキルから独立に選択され、n=0、または1、または2、または3である]から選択される、少なくとも1種の毛髪直毛化剤と、

(b) ラジカル：

【化 2 2】

20



30

によって表されるグアニジン部分を含む化合物から選択される、グアニジン誘導体ならびに/またはその有機塩および無機塩から選択される、少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤化合物と

を含む熱活性化型組成物を含む、組成物。

【請求項 2】

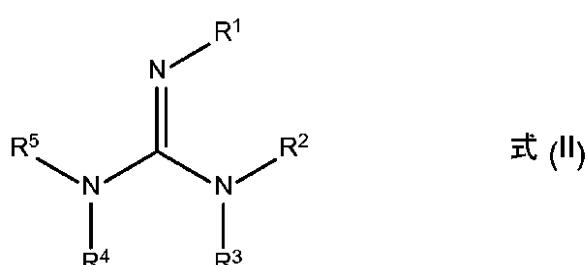
前記グアニジン部分が、直鎖状または環状化合物中に存在する、請求項1に記載の組成物。

【請求項 3】

前記グアニジン部分を含む化合物が、式(II)：

【化 2 3】

40



[式中、R¹、R²、R³、R⁴、およびR⁵は、独立に、水素原子、直鎖または分岐状C₁～C₈アルキル、直鎖または分岐状C₂～C₄アルケニル、フェニル、ベンジルを表

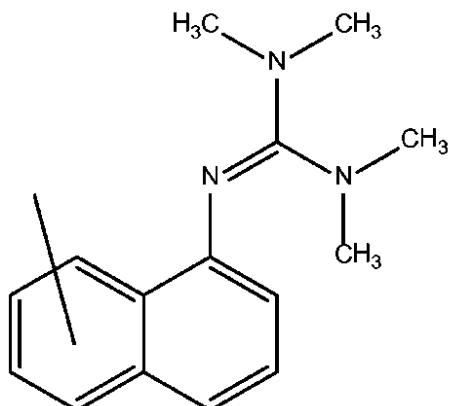
50

し、前記直鎖または分岐状 C₁ ~ C₄ アルキル（たとえば、メチル、エチル、プロピル、ブチル）、前記直鎖または分岐状 C₂ ~ C₄ アルケニル、前記フェニル、および前記ベンジル基は、ハロ（たとえば、ブロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ）、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、ヒドロキシル、メチル、メトキシ、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、および -SO₃H から選択される 1 つまたは 2 つの置換基によって必要に応じて置換されていてもよく、R¹、R²、R³、R⁴、および R⁵ のいずれか 2 つは、これらが結合している窒素原子と一緒に、2 ~ 4 個の炭素原子を含み、C(O)、N、O、および S から選択される 1 個または 2 個の（環）ヘテロ原子を必要に応じて含む、単環式または二環式の 4 ~ 9 員環を形成しており、前記炭素原子は、ヒドロキシルおよびアミノから選択される 1 つまたは 2 つの置換基によって必要に応じて置換されており、

10

R¹ が、水素原子、-C(O)OC(CH₃)₃、またはラジカル

【化 24】

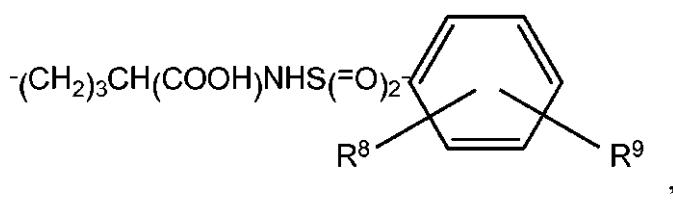
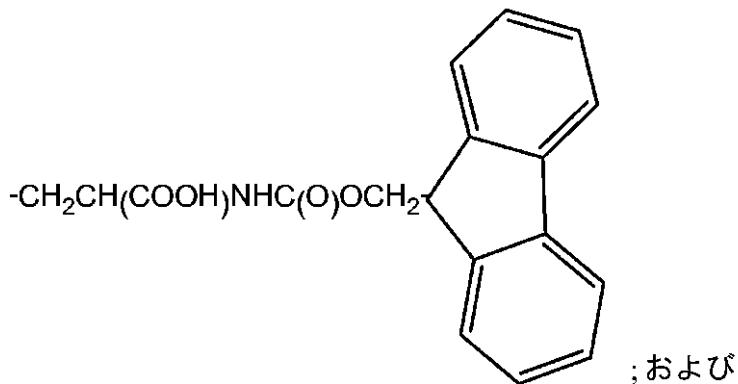
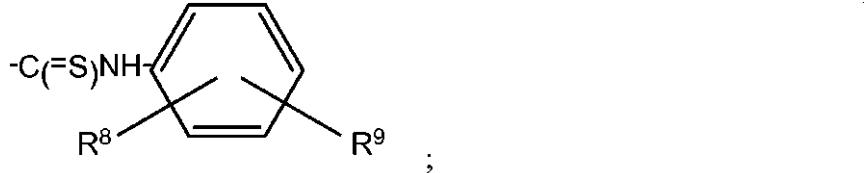
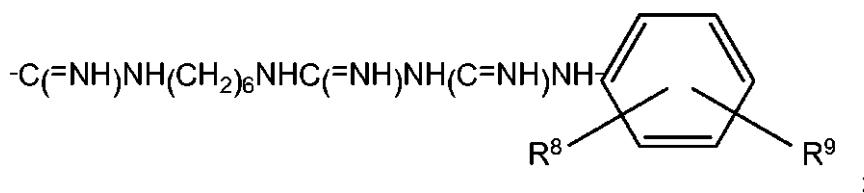
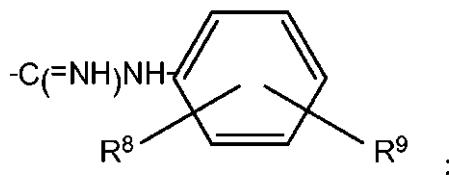
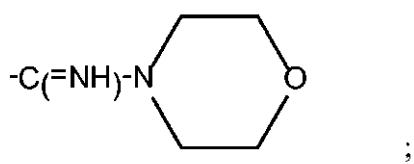


20

を表すとき、R²、R³、R⁴、および R⁵ は、独立に、水素原子；アミノ、ニトロ、シアノ、アセチル、クロロアセチル、カルボキシル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、メトキシ、エトキシ、1,2,4-トリアゾリル、シクロペンチル、シクロヘキシル、-C(O)CH=CHC(O)OH、-CH₂(CO)OCH₃、-CH₂C(O)OCH₂CH₃、-C(O)OC(CH₃)₃、チアゾリドニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、-C(=NH)NH₂、-C(=NH)-NR⁶R⁷ [式中、R⁶ および R⁷ は、独立に、水素原子、またはヒドロキシル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、およびカルボキサミドから選択される 1 つもしくは 2 つの置換基によって必要に応じて置換されている直鎖もしくは分岐状 C₁ ~ C₄ アルキルラジカルを表す]、または

30

【化 2 5】



10

20

30

40

[式中、 R^8 および R^9 は、独立に、ハロ(たとえば、プロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ)、メチル、メトキシ、トリフルオロメチル、およびトリフルオロメトキシを表す]から選択されるラジカルを表す]

によって表され、必要に応じて、

(c) 少なくとも 1 種の美容上許容される賦形剤

であり、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して)第 1 の態様では約 10 ~ 約 70 重量%、第 2 の態様では約 12 ~ 約 50 重量%、第 3 の態様では約 15 ~ 約 40 重量%、第 4 の態様では約 20 ~ 約 35 重量%、第 5 の態様では約 22 ~ 約 30 重量%の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比は、第 1 の態様では重量で約 1.5 : 1 ~ 約 1.0 : 1、第 2 の態様では約 3 : 1 ~ 約 9 : 1、第 3 の態様では約 5 : 1 ~ 約 8 : 1

50

、第4の態様では約6:1～約7:1の範囲である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項4】

式(I)においてAがOである、請求項1に記載の組成物。

【請求項5】

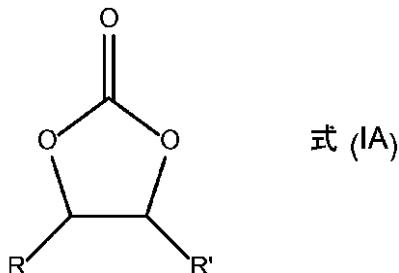
式(I)においてnが0である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項6】

前記毛髪直毛化剤が、式(IA)：

【化26】

10



[式中、RおよびR'は、独立に、水素原子、CH₃、CH₂CH₃、およびCH₂OHから選択される]によって表される化合物である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

20

【請求項7】

RおよびR'の少なくとも一方が水素原子である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項8】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、グリセロールカーボネート、トリメチレンカーボネート、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項9】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

30

【請求項10】

前記毛髪直毛化剤が、第1の態様では約95:5～約5:95、第2の態様では約80:20～約20:80、第3の態様では約75:25～25:75、第4の態様では約50:50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項11】

前記式(II)において、R¹、R²、およびR³が、水素原子を表し、R⁴およびR⁵が、これらが結合している窒素原子と一緒に、ピロリジン、ピペリジン、ピラゾール、チアゾリドン、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、または1,2,4-トリアゾール環を表し、前記環は、ヒドロキシル、アミノ、およびカルボキシリ基から選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されている、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

40

【請求項12】

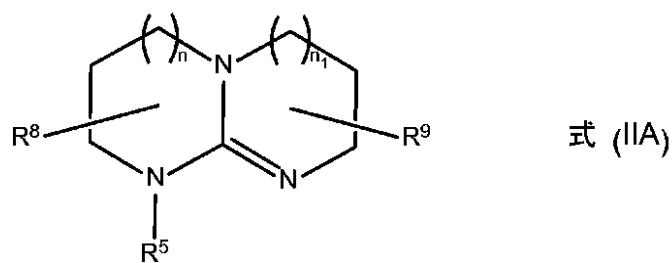
式(II)において、R¹およびR²が、水素原子を表し、R⁵が、水素原子またはメチルを表し、R³およびR⁴は、一緒にになって、-CH₂-CH₂-および-CH₂-O-から選択される二価ラジカルを表してもよく、これらが結合している窒素原子と一緒になったとき、5員環を表す、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

50

【請求項13】

前記補助剤が、式 (IIA) :

【化 27】



式 (IIA)

10

[式中、 R^5 は、上で規定したとおりであり、 R^8 および R^9 は、必要に応じて存在し、存在するとき、 R^8 および R^9 の 1 つまたは 2 つは、同じまたは異なる環炭素原子に結合していてもよく、独立に、C₁ ~ C₅ アルキル、ヒドロキシル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、および SO₃H を表し、 n および n_1 は、独立に、0、1、または 2 を表す] によって表される少なくとも 1 種の化合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

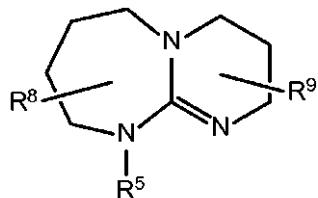
【請求項 14】

前記補助剤が、次のとおりの式 (IIB)、(IIC)、(IID)、(IIE)、および (IIF) :

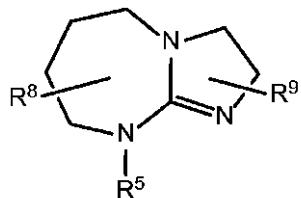
【化 28】

20

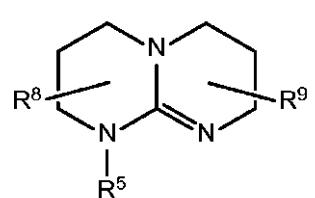
IIB



IIC

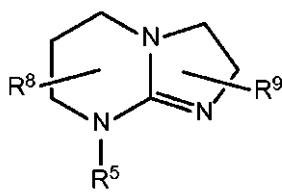


IID

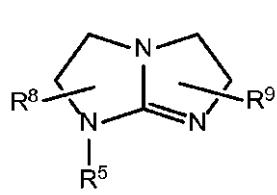


30

IIE



IIF



[式中、 R^5 、 R^8 、および R^9 は、前に規定したとおりである] によって表される少なくとも 1 種の化合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

40

【請求項 15】

R^5 が水素原子を表し、 R^8 および R^9 が存在しない、請求項 12 に記載の組成物。

【請求項 16】

前記補助剤が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジン硝酸塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硝酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、シアノグアニジン、ニトログアニジン、1-メチル-3-ニトログアニジン、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸

50

グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジフェニルグアニジン、1,3-ジ-o-トリルグアニジン、メチル4-グアニジノ-2-メトキシベンゾエート塩酸塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン硫酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン硫酸塩、1-オクチルグアニジンヘミ硫酸塩、1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、N-tert-ブトキシカルボニルグアニジン(N-Bocグアニジン)1,3-ビス(tert-ブトキシカルボニル)グアニジン(ジ-Bocグアニジン)、カルバミン酸、N,N'-[[[(1,1-ジメチルエトキシ)カルボニル]カルボンイミドイル]ビス-、C,C'-ビス(1,1-ジメチルエチル)エステル(N,N',N"-トリ-Bocグアニジン)、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、4-グアニジン安息香酸、4-グアニジン安息香酸塩酸塩、4-グアニジノ-2-メトキシ安息香酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1-o-トリルビグアニド、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-(3-クロロ-4-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2-クロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(4-クロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(4-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,3-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,4-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,5-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,6-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3,4-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3,5-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,4-ジフルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-[4-(トリフルオロメチル)フェニル]ビグアニド塩酸塩、1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]ビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1-フェニルビグアニド炭酸塩、1,1'-ヘキサメチレンビス[5-(4-クロロフェニル)ビグアニド]、1,1'-ヘキサメチレンビス(5-[p-クロロフェニル]ビグアニド)二塩酸塩、[(アミノ(イミノ)メチル]アミノ]カルボチオイル)アミノ]ベンゼン、N-シクロヘキシルグアニジン塩酸塩、N-ベンジルグアニジン塩酸塩、N-ベンジル-N-メチルグアニジンヘミ硫酸塩、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、2-tert-ブチル-1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、4-モルホリンカルボキシミドイルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-トシリ-L-アルギニン、N-アミジノ-N-(2,3-ジヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2,2-ジエトキシエチル)グアニジン、(2S)-3-カルバムイミドアミド-2-{[(9H-フルオレン-9-イルメトキシ)カルボニル]アミノ}プロパン酸、1,8-ビス(テトラメチルグアニジノ)ナフタレン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3,5-ジアミノ-1H-1,2,4-トリアゾール-1-カルボキシミドアミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2,3,4,6,7,8,9,10-オクタヒドロピリミド[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Ht bu)、2,5,6,7,8,9-ヘキサヒドロ-3H-イミダゾ[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Ht bd)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-

10

20

30

40

50

5 - エン (H h p p) 、 3 , 3 , 9 , 9 - テトラメチル - 1 , 2 , 7 - トリアザビシクロ [4 . 4 . 0] デカ - 5 - エン (H T M h p p) 、 3 , 3 , 9 , 9 - テトラエチル - 1 , 2 , 7 , - トリアザビシクロ [4 . 4 . 0] デカ - 5 - エン (H T E h p p) 、 1 , 5 , 7 - トリアザビシクロ [4 . 3 . 0] ノナ - 6 - エン (H t b n) 、 1 , 4 , 6 - トリアザビシクロ [3 . 3 . 0] オクタ - 4 - エン (H t b o) 、 およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 17】

前記毛髪直毛化剤 (a) が、第 1 の態様では約 95 : 5 ~ 約 5 : 95 、第 2 の態様では約 80 : 20 ~ 約 20 : 80 、第 3 の態様では約 75 : 25 ~ 約 25 : 75 、第 4 の態様では約 50 : 50 の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択され、前記補助剤 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸水素塩、3 - グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチニンエチルエステル、L - アルギニン、1 , 5 , 7 - トリアザビシクロ [4 . 4 . 0] デカ - 5 - エン、およびこれらの混合物から選択されるグアニジン部分を含む化合物であり、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比が、第 1 の態様では重量で約 1 . 5 : 1 ~ 約 10 : 1 、第 2 の態様では約 3 : 1 ~ 約 9 : 1 、第 3 の態様では約 5 : 1 ~ 約 8 : 1 、第 4 の態様では約 6 : 1 ~ 約 7 : 1 の範囲である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 18】

前記少なくとも 1 種の美容上許容される賦形剤 (c) が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH 調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 19】

前記希釈剤が、水、プロピレンカーボネート、アルコール、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 20】

前記組成物が、界面活性剤、乳化剤、皮膚軟化剤、湿潤剤、コンディション調整剤、増粘剤、およびこれらの混合物から選択される化合物を含む、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 21】

前記組成物が、噴射剤を含む、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 22】

前記組成物が、液体、クリーム、ムース、ゲル、スプレー、ローション、またはポマードの形態である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 23】

毛髪をまっすぐにするための系であって、以下の少なくとも 2 種の別個の構成材料、すなわち、

i) 前記請求項のいずれかに記載の毛髪直毛化化合物 (a) から選択される少なくとも 1 種の毛髪直毛化剤を含み、グアニジン部分を含む化合物 (b) を含有しない、第 1 の構成材料、

i i) 前記請求項のいずれかに記載のグアニジン部分を含む化合物 (b) から選択される少なくとも 1 種の毛髪直毛化補助剤を含み、前記毛髪直毛化化合物 (a) を含有しない、第 2 の構成材料

を含み、

i i i) 前記第 1 の構成材料 (a) および前記第 2 の構成材料 (b) は、他方と無関係に、前記請求項のいずれかに記載の美容上許容される賦形剤 (c) を必要に応じて含有し、前記第 1 の毛髪構成材料 (a) および前記第 2 の構成材料 (b) は、混ぜ合わせるのに適し、混合した後、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して) 第 1 の態様では約 1

10

20

30

40

50

0～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、第5の態様では約22～約30重量%の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5：1～約10：1、第2の態様では約3：1～約9：1、第3の態様では約5：1～約8：1、第4の態様では約6：1～約7：1の範囲である、系。

【請求項24】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、グリセロールカーボネート、トリメチレンカーボネート、およびこれらの混合物から選択される、請求項23に記載の系。

【請求項25】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項23に記載の系。

【請求項26】

前記毛髪直毛化剤が、第1の態様では約95：5～約5：95、第2の態様では約80：20～約20：80、第3の態様では約75：25～25：75、第4の態様では約50：50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項25に記載の系。

【請求項27】

前記グアニジン部分を含む化合物(b)が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、2-tert-ブチル-1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-アミジノ-N-(2,3-ヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2,2-ジエトキシエチル)グアニジン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3,5-ジアミノ-1H-1,2,4-トリアゾール-1-カルボキシミドアミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2,3,4,6,7,8,9,10-オクタヒドロピリミド[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbu)、2,5,6,7,8,9-ヘキサヒドロ-3H-イミダゾ[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbd)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(Hhpp)、3,3,9,9-テトラメチル-1,2,7,トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTMhpp)、3,3,9,9-テトラエチル-1,2,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTEthpp)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.3.0]ノナ-6-エン(Htbn)、1,4,6-トリアザビシクロ[3.3.0]オクタ-4-

10

20

30

40

50

エン (H t b o) 、および / またはこれらの混合物から選択される、請求項 23 から 26 のいずれかに記載の系。

【請求項 28】

前記グアニジン部分を含む化合物 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸水素塩、3 - グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、L - アルギニン、1, 5, 7 - トリアザビシクロ [4.4.0] デカ - 5 - エン、および / またはこれらの混合物から選択される、請求項 23 から 26 のいずれかに記載の系。

【請求項 29】

前記第 1 の構成材料 (a) が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH 調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤 (c) を含む、請求項 23 から 27 のいずれかに記載の系。

10

【請求項 30】

前記第 2 の構成材料 (b) が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH 調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤 (c) を含む、請求項 23 から 28 のいずれかに記載の系。

20

【請求項 31】

前記第 1 の構成材料 (a) と前記第 2 の構成材料 (b) とが、混ぜ合わせられると、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物となる、請求項 23 から 30 のいずれかに記載の系。

【請求項 32】

前記熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物がクリームの形態である、請求項 31 に記載の系。

30

【請求項 33】

毛髪をまっすぐにするための熱により活性化可能な組成物を調製するためのキットであって、

i) 第 1 の容器に収容された毛髪直毛化構成材料 (a) であって、前記構成材料は、前記請求項のいずれかに記載の毛髪直毛化化合物から選択される少なくとも 1 種の毛髪直毛化剤を含み、前記第 1 の構成材料 (a) は、グアニジン部分を含む化合物を含まない、毛髪直毛化構成材料 (a) と、

ii) 第 2 の容器に収容された毛髪直毛化補助剤構成要素 (b) であって、前記構成要素は、前記請求項のいずれかに記載のグアニジン部分を含む化合物から選択される少なくとも 1 種の補助剤を含み、前記第 2 の構成材料 (b) は、前記毛髪直毛化剤を含まない、毛髪直毛化補助剤構成要素 (b) とを含み、

40

iii) 前記第 1 の構成材料 (a) および前記第 2 の構成材料 (b) は、他方と無関係に、前記請求項のいずれかに記載の美容上許容される賦形剤 (c) を必要に応じて含有し、前記第 1 の毛髪直毛化剤構成材料 (a) および前記第 2 の補助剤構成材料 (b) は、混合するのに適し、混合した後、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して) 第 1 の態様では約 10 ~ 約 70 重量 % 、第 2 の態様では約 12 ~ 約 50 重量 % 、第 3 の態様では約 15 ~ 約 40 重量 % 、第 4 の態様では約 20 ~ 約 35 重量 % 、第 5 の態様では約 22 ~ 約 30 重量 % の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記毛髪直毛化補助剤の比は、第 1 の態様では重量で約 1.5 : 1 ~ 約 1.0 : 1 、第 2 の態様では約 3 : 1 ~ 約 9 : 1 、第 3 の態様では約 5 : 1 ~ 約 8 : 1 、第 4 の態様では約 6 : 1 ~ 約 7 : 1 の範囲であり、

50

前記容器は、使用のためのキットの形態で一緒に包装される、キット。

【請求項 3 4】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、グリセロールカーボネート、トリメチレンカーボネート、およびこれらの組合せから選択される、請求項 3 3 に記載のキット。

【請求項 3 5】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項 3 4 に記載のキット。

【請求項 3 6】

前記毛髪直毛化剤が、第 1 の態様では約 95 : 5 ~ 約 5 : 95、第 2 の態様では約 80 : 20 ~ 約 20 : 80、第 3 の態様では約 75 : 25 ~ 25 : 75、第 4 の態様では約 50 : 50 の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項 3 5 に記載のキット。

【請求項 3 7】

前記グアニジン部分を含む化合物 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1,1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、2-tert-ブチル-1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-アミジノ-N-(2,3-ジヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2,2-ジエトキシエチル)グアニジン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3,5-ジアミノ-1H-1,2,4-トリアゾール-1-カルボキシミドアミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2,3,4,6,7,8,9,10-オクタヒドロピリミド[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbu)、2,5,6,7,8,9-ヘキサヒドロ-3H-イミダゾ[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbd)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(Hhpp)、3,3,9,9-テトラメチル-1,2,7,トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTMhpp)、3,3,9,9-テトラエチル-1,2,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTEthpp)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.3.0]ノナ-6-エン(Htbn)、1,4,6-トリアザビシクロ[3.3.0]オクタ-4-エン(Htbo)、および/またはこれらの混合物から選択される、請求項 3 3 から 3 6 のいずれかに記載のキット。

【請求項 3 8】

前記グアニジン部分を含む化合物 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジ

10

20

30

40

50

ン炭酸水素塩、3-グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、L-アルギニン、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、および/またはこれらの混合物から選択される、請求項33から37のいずれかに記載のキット。

【請求項39】

前記第1の組成物が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤を含む、請求項33から38のいずれかに記載のキット。

10

【請求項40】

前記第2の組成物が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤を含む、請求項33から39のいずれかに記載のキット。

【請求項41】

前記第1の組成物と前記第2の組成物とが、混合されると、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物となる、請求項33から40のいずれかに記載のキット。

20

【請求項42】

前記熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物がクリームの形態である、請求項41に記載のキット。

【請求項43】

毛髪をまっすぐにする方法であって、

(i) 前記請求項のいずれかに記載の、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を用意するステップと、

(i) 前記熱により活性化可能な組成物で毛髪線維をコーティングするステップと、
(ii) コーティングされた毛髪線維を、ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり少なくとも185の温度に設定された加熱装置と接触させるステップと
を含む方法。

30

【請求項44】

毛髪をまっすぐにする方法であって、

(i) 前記請求項のいずれかに記載の、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を用意するステップと、

(ii) 前記熱により活性化可能な組成物で毛髪線維をコーティングするステップと、
(iii) 前記コーティングされた線維を、一態様では少なくとも15~60分間、別の態様では少なくとも20~45分間、別の態様では少なくとも25~30分間静置するステップと、

(iv) 前記コーティングされた毛髪線維を、根本から毛先へと櫛でくすぐるステップと、

(v) 前記櫛がけされた毛髪線維を乾燥させるステップと、

(vi) 前記コーティングされた毛髪線維を、前記ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり少なくとも185の温度に設定された加熱装置と接触させるステップと、

(vii) 前記熱処理された毛髪線維にマスク組成物を適用するステップと、

(viii) 前記コンディション調整された毛髪線維をすすぎ洗浄するステップと、

(ix) 必要に応じて、前記コンディション調整された毛髪線維をシャンプー洗浄およびすすぎ洗浄するステップと、

(xi) まっすぐになった毛髪を乾燥させるステップと

を含む方法。

40

【請求項45】

前記加熱装置が、一態様では約185~250、別の態様では約190~約240

50

、さらなる態様では約200～約230、またさらなる態様では約205～約215の範囲の温度に加熱される、請求項43または44に記載の方法。

【請求項46】

前記加熱装置が、一態様では少なくとも5回の反復動作で、別の態様では少なくとも10回の反復動作で、さらに別の態様では少なくとも12回の反復動作で、さらなる態様では少なくとも15回の反復動作で、同じ毛髪線維に沿って根元から毛先へと引き寄せられる、請求項44または45に記載の方法。

【請求項47】

前記加熱装置が、一態様では約1cm/秒、別の態様では約2cm/秒、さらに別の態様では約2.5cm/秒、さらなる態様では約3cm/秒、またさらなる態様では約3.5cm/秒、追加の態様では約4cm/秒の滑動速度で毛髪線維に沿って引き寄せられる、請求項46に記載の方法。

【請求項48】

前記毛髪マスクのpHが、一態様では約2～約5、別の態様では約2.5～約4.5、さらなる態様では約3～約4の範囲である、請求項44または45に記載の方法。

【請求項49】

前記加熱装置が平型アイロンである、請求項43から46に記載の方法。

【請求項50】

ホルムアルデヒドを含まない、毛髪をまっすぐにするまたは緩めるための請求項1から42に記載の熱により活性化可能な組成物。

【請求項51】

前記熱により活性化可能な組成物が、ホルムアルデヒドを含まない、請求項43から47に記載の方法。

【請求項52】

毛髪をまっすぐにするまたは緩めるための、熱活性化型組成物であって、

(a) エチレンカーボネートと、

(b) グアニジン、L-アルギニン、グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、およびこれらの塩、ならびにこれらの混合物から選択される補助剤化合物とを含み、前記組成物中のエチレンカーボネートの量は、(組成物の総重量に対して)約10～約35重量%の範囲であり、前記組成物中のエチレンカーボネート対前記補助剤化合物の重量比は、約2:1～約10:1の範囲である、熱活性化型組成物。

【請求項52】

プロピレンカーボネートをさらに含み、エチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比が約80:20～約20:80の範囲である、請求項52に記載の熱活性化型組成物。

【請求項53】

前記補助剤化合物の塩が、塩酸塩、硝酸塩、リン酸塩、硫酸塩、ヘミ硫酸塩、スルファン酸塩、酢酸塩、炭酸塩、炭酸水素塩、一水和物塩、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項54】

前記補助剤化合物が、L-アルギニン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチンエチルエステル塩酸塩、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項55】

(c) 美容上許容される賦形剤をさらに含む、前記請求項のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項56】

前記美容上許容される賦形剤が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、タンパク質、湿潤

10

20

30

40

50

剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、およびこれらの混合物から選択される、請求項55に記載の熱活性化型組成物。

【請求項57】

前記コンディション調整剤が、シリコーン、カチオン性化合物、カチオン性ポリマー、炭化水素油、天然油、天然ろう、合成ろう、およびこれらの混合物から選択される、請求項56に記載の熱活性化型組成物。

【請求項58】

前記コンディション調整剤が、ポリクアテルニウム4、ポリクアテルニウム6、ポリクアテルニウム10、ポリクアテルニウム11、ポリクアテルニウム16、ポリクアテルニウム24、ポリクアテルニウム28、ポリクアテルニウム29、ポリクアテルニウム32、ポリクアテルニウム33、ポリクアテルニウム35、ポリクアテルニウム37、ポリクアテルニウム44、ポリクアテルニウム46、ポリクアテルニウム47、ポリクアテルニウム52、ポリクアテルニウム53、ポリクアテルニウム55、ポリクアテルニウム59、ポリクアテルニウム61、ポリクアテルニウム64、ポリクアテルニウム65、ポリクアテルニウム67、ポリクアテルニウム69、ポリクアテルニウム70、ポリクアテルニウム71、ポリクアテルニウム72、ポリクアテルニウム73、ポリクアテルニウム74、ポリクアテルニウム76、ポリクアテルニウム77、ポリクアテルニウム78、ポリクアテルニウム79、ポリクアテルニウム80、ポリクアテルニウム81、ポリクアテルニウム82、ポリクアテルニウム84、ポリクアテルニウム85、ポリクアテルニウム87、およびPEG-2-ココモニウムクロリド、デンブンヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、グアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、ヒドロキシプロピルグアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、およびカッシアヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、およびこれらの混合物から選択されるカチオン性ポリマーである、請求項56に記載の熱活性化型組成物。

10

20

30

40

【請求項59】

前記組成物が、溶液、クリーム、ムース、スプレー、ゲル、ローション、またはポマードの形態である、請求項52から58のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項60】

前記組成物がホルムアルデヒドを含まない、請求項52から59のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項61】

商業的に入手可能な毛髪直毛化または弛緩化組成物の効力を増強する方法であって、請求項1から22のいずれかに記載の毛髪直毛化構成材料を含む組成物をそれに加えるステップを含む方法。

【請求項62】

前記商業的に入手可能な毛髪直毛化組成物が、ホルムアルデヒド、グリオキシロイル、カルボシステイン、グリオキシル、マロンジアルデヒド、スクシンジアルデヒド、グルタルアルデヒド；グリオキシル酸、没食子酸、酒石酸、リンゴ酸、マレイン酸、イタコン酸、シユウ酸、マロン酸、メソキサル酸、フマル酸、コハク酸、イミノ二酢酸、ガラクタル酸、アジピン酸、グルタル酸、クエン酸、イソクエン酸、1,2,3,4-ブタンテトラカルボン酸から選択されるカルボン酸およびその塩；尿素、ジメチロールエチレン尿素、ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素、アルキル化ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素から選択される尿素誘導体、ならびにこれらの組合せを含む、請求項61に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

典型的な実施形態は、熱の適用によって毛髪をまっすぐにする方法、および熱によって活性化しうる組成物に関する。組成物は、a)環状アルキレンカーボネートなどの5~8

50

員環に、窒素および酸素から選択される2個のヘテロ原子を含む少なくとも1種のヘテロ環化合物と、b)少なくとも1種の、グアニジン部分を含む毛髪直毛化補助剤化合物とを含む。

【背景技術】

【0002】

数回の洗髪を経ても毛髪を改質された状態で維持することのできる、毛髪の半永久的および永久的な直毛化には、様々な方法が利用可能である。永久的な施術方法の多くでは、施術を行う者および受ける者に有害となる場合があり、または不快な臭気を発する、刺激の強い化学薬品が使用される。こうした方法のいくつかは、ケラチンの中に存在するシスチンジスルフィド共有結合を切断することに基づく。ある方法では、ジスルフィド結合をまず還元剤で壊す。次いで、毛髪を引っ張られた状態にしながら、過酸化水素などの固定剤を適用して、異なる取り合わせでジスルフィド結合を復元する。過酸化物は、毛髪および頭皮に損傷を与える。他の方法では、最初のステップで水酸化物イオン、次のステップでチオール基を使用する2段階の過程で、ジスルフィド結合(-CH₂-S-S-CH₂-)をランチオニン結合(-CH₂-S-CH₂-)と差し替える、水酸化物塩基が使用される。水酸化物はかなりの高濃度で使用され、頭皮の焼けるような感じと眼や鼻に刺激または損傷を引き起こす可能性がある。チオールは、毛髪に不快な匂いを残し、毛髪線維の分解をもたらすこともある。

10

【0003】

半永久的な方法では、毛髪が加熱されている間に架橋剤を使用して結合を形成する。たとえば、ホルムアルデヒドは、多くの市販の直毛化用製品に、組成物の成分として、または毛髪が加熱されると生成する反応生成物として使用される。しかし、ホルムアルデヒドは、皮膚、眼、および肺にアレルギー反応を引き起こすことがあり、眼に重篤な損傷を与えることもあり、また他の健康上のリスクもある。毛髪直毛化組成物へのホルムアルデヒドの使用は、一部の国々では抑制または禁止されているが、その有効性のために、依然として使用が一般に普及している。尿素などの変性剤を含む弛緩化組成物も提案されている。しかし、尿素は、水酸化物を主体とする組成物ほど苛性でないが、熱による毛髪直毛化に使用される高温で、アンモニアおよび有毒なイソシアニ酸に分解しうる。

20

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

30

【0004】

開示する技術の典型的な実施形態の一態様によれば、当技術は、毛髪をまっすぐにするための熱活性化型組成物であって、(a)少なくとも1種の毛髪直毛化剤と、(b)少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤と、必要に応じて、(c)少なくとも1種の美容上許容される賦形剤とを含む、組成物に関する。

【0005】

開示する技術の典型的な実施形態の一態様によれば、当技術は、ケラチン線維をまっすぐにする方法であって、i)(a)5~8員環中に2個のヘテロ原子を含み、前記ヘテロ原子の少なくとも一方が酸素であり、他方が窒素および酸素から選択される、少なくとも1種のヘテロ環化合物と、(b)少なくとも1種の、グアニジン部分を含む化合物を含む毛髪直毛化補助剤化合物と、必要に応じて、(c)少なくとも1種の美容上許容される賦形剤とを含む、毛髪をまっすぐにするための熱活性化型組成物を含む組成物で、ケラチン線維をコーティングするステップと、ii)コーティングされたケラチン線維を、ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり温度が少なくとも185°の加熱装置と接触させるステップとを含む、方法に関する。

40

【0006】

5~8員環中に2個のヘテロ原子を含み、前記ヘテロ原子の少なくとも一方が酸素であり、他方が窒素および酸素から選択される、少なくとも1種の前述のヘテロ環化合物を、少なくとも1種のグアニジン部分を含む補助剤化合物と組み合わせると、前記ヘテロ環化合物だけを含有する毛髪直毛化配合物に比べて、持続時間がより長い、毛髪直毛化剤使用

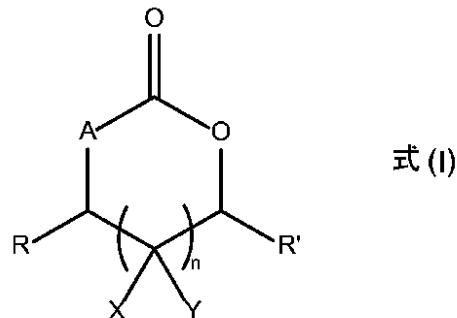
50

量がより少ない、施術温度がより低い、毛髪直毛化組成物を毛髪に最初に適用してから熱処理ステップまでの接触時間の短縮、および何回ものシャンプー洗浄サイクルを経ても威力を保ちうる能力という点で相乗的な効力を有する毛髪直毛化配合物が得られることが発見された。

【0007】

少なくとも1種の毛髪直毛化剤(a)は、次のような一般式(I)によって表される化合物である。

【化1】



式中、

Aは、NHおよびOから選択され、

RおよびR'は、H、CH₃、CH₂CH₃、およびCH₂OHから独立に選択され、

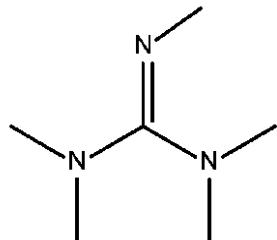
XおよびYは、Hおよびアルキルから独立に選択され、

n=0、または1、または2、または3である。

【0008】

一実施形態では、少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤(b)は、ラジカル：

【化2】



によって表されるグアニジン部分を含む化合物から選択される、グアニジン誘導体ならびに/またはその有機塩および無機塩である。

【0009】

上記部分中の片方が空いた結合線は、グアニジン部分中の各窒素原子の原子価が満たされるよう、別の原子、官能基、および/またはラジカルへの連結を表す。グアニジン部分は、直鎖または環状のグアニジン部分を含む化合物(グアニジン誘導体)中に存在する場合がある。一実施形態では、グアニジン部分を含む化合物は、次のような式(II)によって表すことができる。

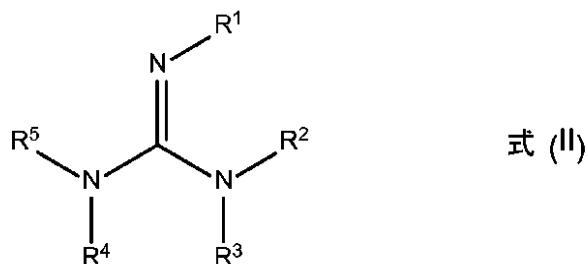
10

20

30

40

【化3】



10

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、および R^5 は、独立に、水素原子、直鎖または分岐状 C_1 ～ C_4 アルキル、直鎖または分岐状 C_2 ～ C_4 アルケニルを表し、前記直鎖または分岐状 C_1 ～ C_4 アルキルおよび前記直鎖または分岐状 C_2 ～ C_4 アルケニルは、ヒドロキシリ、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシリ、カルボキサミド、 N -メチルカルボキサミド、および SO_3H から選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されてもよく、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、および R^5 のいずれか2つは、これらが結合している窒素原子と一緒に、2～4個の炭素原子を含み、 $C(O)$ 、 N 、 O 、および S から選択される1個または2個の(環)ヘテロ原子を必要に応じて含む、単環式または二環式の4～9員環を形成しており、前記炭素原子は、ヒドロキシリおよびアミノから選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されており、 R^1 、 R^2 、 R^3 、および R^4 が水素原子を表すとき、 R^5 は、アセチル、クロロアセチル、カルボキサミド、 N -メチルカルボキサミド、メトキシ、エトキシ、1,2,4-トリアゾリル、シクロペンチル、シクロヘキシリ、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル、 $C(O)CH=CHC(O)OH$ 、フェニル、塩素もしくはヒドロキシリで置換されているフェニル、ベンジル、チアゾリドニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、または

$C(=NH)-NR^6R^7$ [式中、 R^6 および R^7 は、独立に、水素原子、または、ヒドロキシリ、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシリ、およびカルボキサミドから選択される1つもしくは2つの置換基によって必要に応じて置換されている直鎖もしくは分岐状 C_1 ～ C_4 アルキルラジカルを表す]から選択されるラジカルを表してもよい。

【0010】

上で定義した熱活性化型毛髪直毛化剤(a)および補助剤(b)は、1種または複数の美容上許容される賦形剤(c)を必要に応じて含んでもよい。

【発明を実施するための形態】

【0011】

開示する技術に従う典型的な実施形態について記載する。本明細書に記載する典型的な実施形態の様々な変更形態、改変形態、または変形形態が、当業者に明白になる場合もあり、そのようなものとして開示される。開示する技術の教示に依拠しており、こうした教示による当技術分野の進歩の一助である、そのようなすべての変更形態、改変形態、または変形形態が、ここに開示する技術の範囲および意図の内にあるとみなされることが理解されよう。

【0012】

開示する技術の組成物、系、および方法は、本明細書に記載の構成材料、要素、ステップ、および工程の描写について、適宜、これらを含む、これらからなる、またはこれらから本質的になる場合がある。本明細書で説明的に開示する技術は、本明細書で具体的に開示されていないいずれの要素がなくても適宜実施することが可能である。

【0013】

別段記載しない限り、本明細書で示すパーセンテージ、部、および比率はすべて、開示する技術の全組成の重量ベースである。

20

30

40

50

【0014】

開示する熱活性化型毛髪直毛化組成物を構成する種々の成分について部分的にかち合う重量範囲が、開示する技術の種々の実施形態について示されるが、組成物中の各構成材料の詳細な量が、その開示する範囲から選択される結果、各構成材料の所望の量が、組成物中の全構成材料の合計が総計100重量%になるように調製されることは容易に理解されるものと予想される。

【0015】

「熱活性化型」または「熱活性化可能」とは、組成物中の毛髪直毛化剤および補助剤の作用方式を限定するとみなすものではないが、毛髪直毛化組成物が、毛髪を直毛化する過程でのように、熱によって活性化しうるまたは活性化可能であることを意味する。

10

【0016】

「美容上許容される賦形剤」とは、開示する技術の熱活性化型毛髪直毛化剤および補助剤と混合されると、より適切に毛髪に適用され、かつ／または毛髪および／もしくは頭皮に他の望ましい効果を与える組成物をもたらす、構成材料(a)および(b)の希釈剤、担体媒体、および／または添加剤として使用される、非毒性の刺激性でない物質である。

【0017】

用語「まっすぐな」、または「まっすぐにすること(直毛化)」、または「まっすぐに(直毛化)する」、または「緩めること(弛緩化)」、または「緩める(弛緩化する)」、およびこれらの文法上の変形語は、毛髪から縮れを除去する、または毛髪の縮れの程度を軽減することを意味する。こうした用語は、毛髪の形状または毛髪の縮れの程度を変化させて、毛髪をよりまっすぐにすることも意味する。

20

【0018】

本明細書に示される見出しあは、開示する技術を説明するためのものであり、開示する技術を一切限定しないものである。

【0019】

開示する技術の典型的な実施形態は、熱活性化型半永久的毛髪直毛化または毛髪弛緩化組成物、およびその使用方法に関する。典型的な組成物は、(a)5～8員環中に2個のヘテロ原子を含み、前記ヘテロ原子の少なくとも一方が酸素であり、他方が窒素および酸素から選択される、少なくとも1種のヘテロ環化合物と、(b)少なくとも1種の、グアニジン部分を含む毛髪直毛化補助剤化合物と、必要に応じて、(c)美容上許容される賦形剤とを含む。

30

【0020】

典型的な一実施形態では、毛髪直毛化剤(a)は、第1の態様では(組成物の総重量に対して)約10～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、第5の態様では約22～約30重量%の範囲の量で存在する。

【0021】

典型的な一実施形態では、毛髪直毛化剤対毛髪直毛化補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5:1～約10:1、第2の態様では約3:1～約9:1、第3の態様では約5:1～約8:1、第4の態様では約6:1～約7:1の範囲である。典型的な一実施形態では、毛髪直毛化剤対毛髪直毛化補助剤の比は、約2:1、または約3:1、または約4:1、または約5:1、または約6:1、または約7:1、または約8:1、または約9:1、または約10:1である。

40

【0022】

典型的な一実施形態では、開示する技術は、毛髪をまっすぐにするまたは緩める系に関する。系は、i)5～8員環中に2個のヘテロ原子を含み、前記ヘテロ原子の少なくとも一方が酸素であり、他方が窒素および酸素から選択される、少なくとも1種のヘテロ環化合物を含む、第1の毛髪直毛化構成材料(a)、ii)グアニジン部分を含む化合物から選択される少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤を含む、第2の構成材料(b)、およびiii)美容上許容される賦形剤(c)を必要に応じて含有する、互いに独立した前記第1

50

の構成材料(a)および前記第2の構成材料(b)を含めて、少なくとも2種の別個の構成材料を含み、前記第1の構成材料(a)は、(b)が含有する前記毛髪直毛化補助剤を含まず、前記第2の構成材料(b)は、(a)が含有する前記毛髪直毛化剤を含まず、前記構成材料(a)と前記構成材料(b)は、混ぜ合わせて、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を生成するのに適する。

【 0 0 2 3 】

開示する系の典型的な一実施形態では(構成材料(a)と(b)を混ぜ合わせた後)、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して)第1の態様では約10～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、および約22～約30重量%の範囲の量で存在する。

10

【 0 0 2 4 】

開示する系の典型的な一実施形態では(構成材料(a)と(b)を混ぜ合わせた後)、(a)の前記毛髪直毛化剤対(b)の前記補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5：1～約10：1、第2の態様では約3：1～約9：1、第3の態様では約5：1～約8：1、第4の態様では約6：1～約7：1の範囲である。典型的な一実施形態では、毛髪直毛化剤対毛髪直毛化補助剤の比は、約2：1、または約3：1、または約4：1、または約5：1、または約6：1、または約7：1、または約8：1、または約9：1、または約10：1である。

【 0 0 2 5 】

典型的な一実施形態では、開示する技術は、毛髪をまっすぐにするまたは緩めるための、熱により活性化可能な組成物の調製用キットに関する。キットは、i) 5～8員環中に2個のヘテロ原子を含み、前記ヘテロ原子の少なくとも一方が酸素であり、他方が窒素および酸素から選択される、少なくとも1種のヘテロ環化合物を含む、第1の容器に収容された、毛髪直毛化構成材料(a)、ii) グアニジン部分を含む化合物から選択される少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤を含む、第2の容器に収容された、毛髪直毛化補助剤構成材料(b)、およびiii) 美容上許容される賦形剤(c)を必要に応じて含有する、互いに独立した前記第1の構成材料(a)および前記第2の構成材料(b)を含めて、少なくとも2種の別個の構成材料を含み、前記第1の構成材料(a)は、(b)が含有する前記毛髪直毛化補助剤を含まず、前記第2の構成材料(b)は、(a)が含有する前記毛髪直毛化剤を含まず、前記構成材料(a)と前記構成材料(b)は、混ぜ合わせて、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を生成するのに適する。

20

【 0 0 2 6 】

開示するキットの典型的な一実施形態では(構成材料(a)と(b)を混ぜ合わせた後)、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して)第1の態様では約10～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、第5の態様では約22～約30重量%の範囲の量で存在する。

30

【 0 0 2 7 】

開示するキットの典型的な一実施形態では(構成材料(a)と(b)を混ぜ合わせた後)、(a)の前記毛髪直毛化剤対(b)の前記補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5：1～約10：1、第2の態様では約3：1～約9：1、第3の態様では約5：1～約8：1、第4の態様では約6：1～約7：1の範囲である。典型的な一実施形態では、毛髪直毛化剤対毛髪直毛化補助剤の比は、約2：1、または約3：1、または約4：1、または約5：1、または約6：1、または約7：1、または約8：1、または約9：1、または約10：1である。

40

【 0 0 2 8 】

個々の構成材料(a)および(b)、または構成材料(a)および(b)を含む混合された組成物は、液体、クリーム、ムース、ゲル、スプレー、ローション、ポマードなどの形態でよい。

【 0 0 2 9 】

50

一実施形態では、構成材料(a)および(b)を含む組成物は、クリーム基剤中に配合される。クリーム基剤には、クリームが、ダマになる、流れる、または垂れ落ちることなく制御可能な量で毛髪に容易に適用されるのを可能にするレベルの粘度を有するクリームとなるような量で、成分が配合される。クリームは、処理時間の間、毛髪をまっすぐにされた配置に保つのに十分な濃厚さにすべきであるが、クリームを毛髪に過度に広げにくくするような濃厚さにすべきではなく、また毛髪から頭皮へと垂れ落ちるような希薄さにすべきでない。こうしたクリームは、たとえば、ステアリン酸グリセリル、グリコールステアレート、自己乳化型ろう、脂肪アルコール、鉛油、およびワセリンを主体とした、エマルジョンの形態で製造することができる。クリーム基剤に配合する方法および成分は、当技術分野で周知であり、熟練した配合者によって容易に調製される。

10

【 0 0 3 0 】

別の実施形態では、開示する技術は、人毛などのケラチン線維をまっすぐにするまたは緩める方法に関する。方法は、ケラチン線維を、開示する技術による典型的な組成物と接触させて、線維をコーティングするステップと、線維を加熱した際にまっすぐにするのに十分な接触時間の間、ケラチン線維を組成物と接触した状態に保つステップと、必要に応じて、コーティングされた線維を乾燥させて、存在しうる水分を除去するステップとを含む。一実施形態では、組成物をケラチン線維に適用した後、かつコーティングされた線維に熱を適用する前に、活性毛髪直毛化剤の線維皮質への浸透を可能にする十分な接触時間の間、組成物を定位置に留まらせる。接触時間は、一態様では約 5 ~ 約 60 分、別の態様では約 10 ~ 50 分、さらに別の態様では約 15 ~ 約 45 分、さらなる態様では約 20 ~ 約 30 分の範囲でよい。接触時間が終わりを迎えた後、かつ熱を適用する前に、必要に応じて、コーティングされた線維を、根元から毛先へと櫛ですいて、線維から余分なコーティング剤(毛髪直毛化組成物)を除去する。任意選択の櫛がけステップの後、かつ加熱ステップの前に、ケラチン線維を、根元から毛先へと線維にブラシをかけながら線維をドライヤー乾燥することによる、任意選択の撫でつけステップに供してもよい。撫でつけがなされたケラチン線維は、ケラチン線維をまっすぐにするまたは緩めるのに十分な時間の間、たとえば、線維中の含水量に応じてある程度まで様々となりうるガラス転移温度に到達するまで、温度が一態様では 185 ~ 250 、別の態様では約 190 ~ 約 240 、さらなる態様では約 200 ~ 約 230 、またさらなる態様では約 205 ~ 約 215 である、平型アイロンなどの加熱装置の表面と接触させる。

20

30

【 0 0 3 1 】

一実施形態では、加熱装置は、少なくとも数回の反復動作で、毛髪線維に沿って、根元から毛先へと引き寄せられる。加熱装置は、一態様では少なくとも 5 回の反復動作で、別の態様では少なくとも 10 回の反復動作で、さらに別の態様では少なくとも 12 回の反復動作で、さらなる態様では少なくとも 15 回の反復動作で、またさらなる態様では少なくとも 25 回の反復動作で、施術する毛髪に沿って引き寄せられる。

40

【 0 0 3 2 】

一実施形態では、加熱装置は、一態様では約 1 cm / 秒、別の態様では約 2 cm / 秒、さらに別の態様では約 2.5 cm / 秒、さらなる態様では約 3 cm / 秒、またさらなる態様では約 3.5 cm / 秒、追加の態様では約 4 cm / 秒の滑動速度で、毛髪線維に沿って引き寄せられる。滑動速度とは、根元の端から毛先までの長さにわたり加熱装置が引き寄せられる速度またはスピードであると定義される。

【 0 0 3 3 】

毛髪直毛化組成物の pH がアルカリ性領域にある実施形態では、熱による直毛化または弛緩化ステップの後に、必要に応じて、中和およびコンディション調整マスクをケラチン線維に適用してから、線維を温水で十分にすすいでもよい。すすいだ後、線維をタオル乾燥し、次いで、ドライヤーおよびブラシを用いて撫でつけて、直毛化または弛緩化された所望の最終形状を実現する。直毛化または弛緩化の結果、一般に、縮れた線維の固定具を支持体から吊り下げたときに測定されるケラチン線維の平均長は、少なくとも 5 % または少なくとも 10 % 増し、これは、(毛髪のシャンプー洗浄および乾燥を伴う) 数回の洗髪

50

処理、たとえば、少なくとも 12 回、または少なくとも 18 回、または少なくとも 20 回、または少なくとも 24 回、または少なくとも 30 回、または少なくとも 36 回、または少なくとも 50 回の洗髪を経ても維持することができる。典型的な過程は、直毛化された線維が、時を経てその元の縮れた状態に戻り始めるという点で、半永久的である。本方法は、非常にまっすぐな毛髪にするのに使用してもよいが、半永久的なウェーブを生み出す過程において、毛髪を元の縮れた状態から緩めるのに使用してもよい。

【0034】

一実施形態では、開示する技術の組成物で毛髪に施術する前に、毛髪を、クレンジングシャンプーでの任意選択のシャンプー洗浄ステップに供してもよい。あらゆる商業的に入手可能な適切なクレンジングシャンプーで十分であると予想される。

10

【0035】

一実施形態では、開示する技術の組成物で毛髪に施術する前に、約 7.0 ~ 約 9.5 の pH 範囲で配合されているアルカリ性クレンジングシャンプーで毛髪をシャンプー洗浄してもよい。理論に拘束されたくないが、アルカリ性の pH によって毛幹のキューティクルが開いて、その後適用される毛髪直毛化活性成分のケラチン線維皮質へのより容易な浸透が可能になると考えられる。

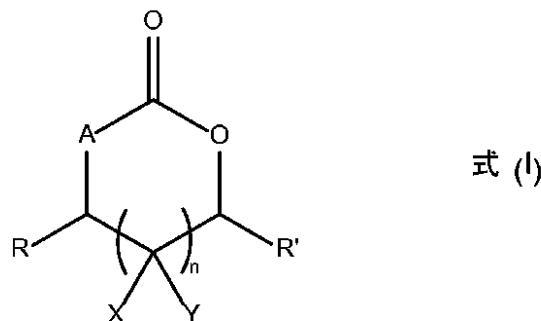
熱活性化型毛髪直毛化剤

【0036】

半永久的毛髪直毛化組成物および開示する技術の方法において使用される熱活性化型毛髪直毛化剤は、5 ~ 8 員環中に 2 個のヘテロ原子を含み、前記ヘテロ原子の少なくとも一方が酸素であり、他方が窒素および酸素から選択される、式 (I) によって表される、少なくとも 1 種のヘテロ環化合物から選択される。

20

【化4】



30

式中、

A は、N H (窒素) および O (酸素) から選択され、

R および R' は、H、C H₃、C H₂ C H₃、および C H₂ O H から独立に選択され、

X および Y は、H およびアルキル、たとえば、C H₃ などの C₁ ~ C₆ または C₁ ~ C₃ アルキル基から独立に選択され、

n = 0、または 1、または 2、または 3 である。

【0037】

一実施形態では、A = O である。したがって、構造は、アルキレンカーボネートとなる。

40

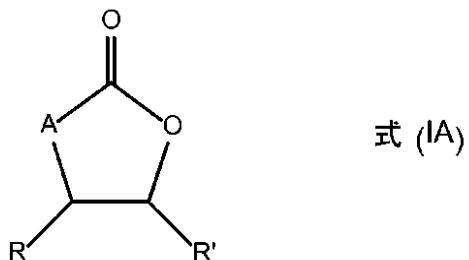
【0038】

一実施形態では、R および R' の少なくとも一方が H である。別の実施形態では、R および R' が両方とも H である。

【0039】

一実施形態では、n = 0、すなわち、構造は、一般式 (IA) の 5 員環となる。

【化5】



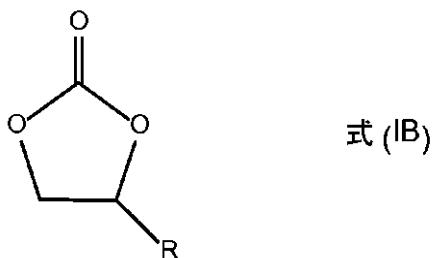
10

式中、A、R、およびR'は、上で規定したとおりである。

【0040】

一例として、アルキレンカーボネートは、一般式 (IB) のものでもよい。

【化6】



20

式中、Rは、上で規定したとおりである。

【0041】

5員アルキレンカーボネート (1,3-ジオキソラン-2-オン)、たとえば、エチレンカーボネート (「EC」、RおよびR'がHである)、プロピレンカーボネート (「PC」、RがCH₃であり、R'がHである)、ブチレンカーボネート (「BC」、RがCH₂CH₃であり、R'がHである、またはRがCH₃であり、R'がCH₃である)、およびグリセロールカーボネート (「GC」、RがCH₂OHであり、R'がHである)は、本明細書において有用な典型的な熱活性化型薬剤である。

30

【0042】

一実施形態では、n = 1 であるとき、XおよびYの少なくとも一方または両方がHとなる。

【0043】

本明細書において有用な6員アルキレンカーボネート (1,3-ジオキサン-2-オン)としては、トリメチレンカーボネート (XおよびY = H、Rであり、R' = Hである)が挙げられる。AがNである典型的な熱活性化型薬剤としては、2-オキサゾリジノン (RおよびR'がHであり、nが0である)およびその誘導体が挙げられる。

【0044】

式 (I) に従う典型的な熱活性化型薬剤は、オリゴマー化合物またはポリマー (1000 g/mol) というより、小分子 (MW 800 g/mol、または 600 g/mol、たとえば 200 g/mol) である。こうした薬剤は、水と相性がよく、安定しており、ケラチン性材料に浸透し、それと反応する能力があり、また 210 の平型または丸型のアイロンによって活性化することができる。

40

【0045】

一実施形態では、アルキレンカーボネートなどの、式 (I) によって表される化合物は、一般に、毒性が低く、加熱段階の間に有毒な副生物を生成しないので、典型的な適用分野に適している。こうした化合物は、室温 (25) での水への溶解性も高く、エチレンカーボネートは、高度に可溶性であり (50重量%を上回る水中濃度が容易に実現可能である)、プロピレンカーボネートは、より少ない量 (約 20重量%まで) で可溶性である

50

。

【0046】

一実施形態では、式(I)に従う熱活性化型薬剤は、直毛化組成物中に、少なくとも10重量%、または少なくとも12重量%、または少なくとも15重量%、または少なくとも18重量%、または少なくとも20重量%、または少なくとも22重量%、または少なくとも25重量%、または少なくとも27重量%、または少なくとも30重量%の濃度で存在し、一部の実施形態では、熱活性化型薬剤は、直毛化組成物中に、一態様では約12重量%～約70重量%、別の態様では約12重量%～約50重量%、さらに別の態様では約15重量%～約40重量%、さらなる態様では20重量%～約35重量%、またさらなる態様では約22～約30重量%の範囲の濃度で存在する(すべて、直毛化組成物の総重量ベース)。

10

【0047】

一実施形態では、熱活性化型毛髪直毛化剤は、エチレンカーボネート(1,3-ジオキソラン-2-オン)、プロピレンカーボネート、グリセロールカーボネート、トリメチレンカーボネート、2-オキサゾリジノン、およびこれらの組合せから選択される。一実施形態では、このような熱活性化型薬剤は、組成物中に、10～40重量%、または少なくとも12重量%、または少なくとも15重量%、または少なくとも18重量%、または少なくとも20重量%、または少なくとも22重量%、または少なくとも25重量%、または少なくとも27重量%、または少なくとも30重量%、または少なくとも35重量%の合計濃度で適切に存在してよい(すべて、毛髪直毛化組成物の総重量ベース)。

20

【0048】

一実施形態では、熱活性化型薬剤は、第1の態様では約95:5～約5:95、第2の態様では約90:10～約10:90、第3の態様では約80:20～約20:80、第4の態様では約75:25～約25:75、第5の態様では約50:50の重量比の、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物を含む。周囲温度(たとえば、20～25)において、エチレンカーボネートは、固体状態で存在し、プロピレンカーボネートは、液体状態で存在する。このような実施形態では、エチレンカーボネートが、プロピレンカーボネートへの溶解性に優れていることを踏まえると、プロピレンカーボネートによって、組成物中に使用される他の溶媒/希釈剤の一部または全部を差し替えることができる。

30

【0049】

本明細書における使用に適するアルキレンカーボネートは、Huntsman CorporationからJEFFSOL(登録商標)アルキレンカーボネートの商品名で入手可能である。JEFFSOLエチレンカーボネートは、室温で固体である。JEFFSOL EC-75、EC-50、およびEC-25は、それぞれ、75/25、50/50、および25/75の重量比の、JEFFSOLエチレンカーボネートとプロピレンカーボネートのブレンド品である。これらのブレンド品は、室温で液体である。販売されている、こうした製品は、純度が少なくとも99.8%であるとされている。より高純度の型も、入手可能である。

40

【0050】

米国特許第2,873,282号は、アルキレンオキシドまたはその化合物を二酸化炭素と反応させることによる、アルキレンカーボネートの生成方法を記載している。米国特許第2,773,070号も、同様の方法を記載している。通常、臭化テトラエチルアンモニウムなどのハロゲン化アルキルアンモニウム触媒が用いられる。グリセロール(グリセリン)カーボネート(GC)は、商業的に入手可能であり、グリセリンをホスゲン、ジアルキルカーボネート、アルキレンカーボネートなどのカーボネート源と反応させる、グリセリンを尿素、二酸化炭素、および酸素と反応させる、または二酸化炭素をグリシドールと反応させることにより合成できる。

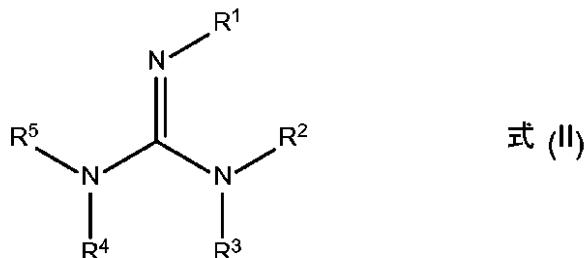
熱活性化型毛髪直毛化補助剤

【0051】

50

半永久的毛髪直毛化組成物および開示する技術の方法において使用される熱活性化型毛髪直毛化補助剤は、グアニジン部分を含む少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤化合物から選択される。一実施形態では、グアニジン部分を含む少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤は、次のような一般式(II)によって表される化合物である。

【化7】



10

【0052】

一態様では、R¹、R²、R³、R⁴、およびR⁵は、独立に、水素原子、直鎖または分岐状C₁～C₈アルキル、直鎖または分岐状C₂～C₄アルケニル、フェニル、ベンジルを表し、前記直鎖または分岐状C₁～C₄アルキル(たとえば、メチル、エチル、プロピル、ブチル)、前記直鎖または分岐状C₂～C₄アルケニル、前記フェニル、および前記ベンジル基は、ハロ(たとえば、ブロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ)、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、ヒドロキシル、メチル、メトキシ、メトキシカルボニル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、および-SO₃Hから選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されていてもよく、R¹、R²、R³、R⁴、およびR⁵のいずれか2つは、これらが結合している窒素原子と一緒に、2～4個の炭素原子を含み、C(O)、N、O、およびSから選択される1個または2個の(環)ヘテロ原子を必要に応じて含む、単環式または二環式の4～9員環を形成しており、前記炭素原子は、ヒドロキシルおよびアミノから選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されている。

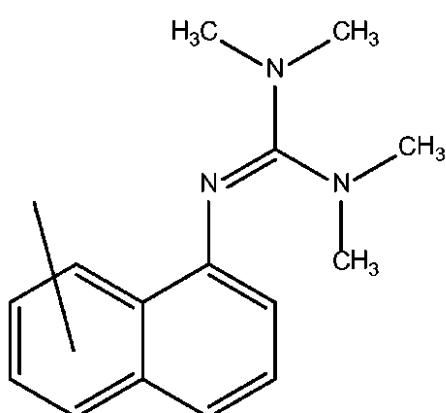
20

【0053】

前記式(II)の一態様では、R¹は、水素原子、-C(CH₃)₃、-C(O)OC(CH₃)₃、またはラジカル：

30

【化8】



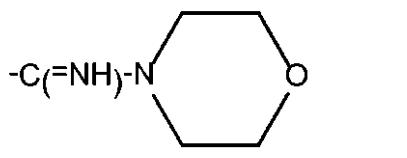
40

[式中、ナフタレン部分中の片方が空いた結合線は、式(II)の窒素原子への共有結合連結を表す]を表し、R²、R³、R⁴、およびR⁵は、独立に、水素原子；アミノ、ニトロ、シアノ、アセチル、クロロアセチル、カルボキシル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、メトキシ、エトキシ、1,2,4-トリアゾリル、シクロペンチル、シクロヘキシル、-C(O)CH=C(H)C(O)OH、-CH₂(CO)OCH₃、-CH₂C(O)OCH₂CH₃、-C(O)OC(CH₃)₃、チアゾリドニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、-C(=NH)NH₂、-C(=N

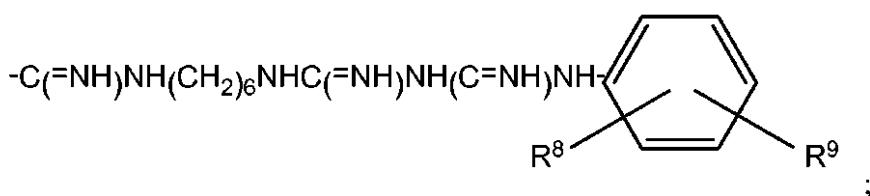
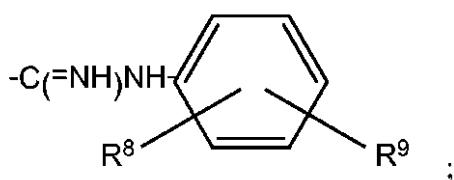
50

H) - N R⁶ R⁷ [式中、R⁶ および R⁷ は、独立に、水素原子、またはヒドロキシル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、およびカルボキサミドから選択される1つもしくは2つの置換基によって必要に応じて置換されている直鎖もしくは分岐状C₁ ~ C₄アルキルラジカルを表す]、

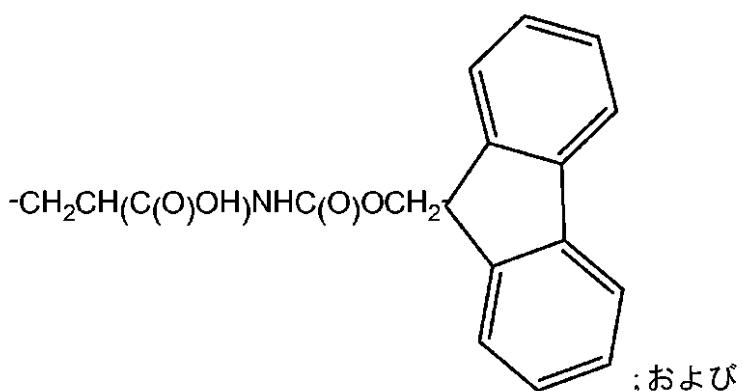
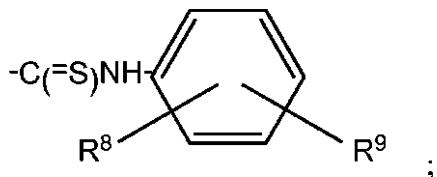
【化9】



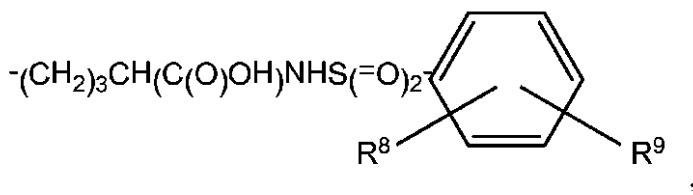
10



20



30



40

[式中、R⁸ および R⁹ は、独立に、ハロ(たとえば、ブロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ)、メチル、メトキシ、トリフルオロメチル、およびトリフルオロメトキシを表す]から選択されるラジカルを表す。

【0054】

前記式(I)の一態様では、R¹、R²、およびR³は、水素原子を表し、R⁴およびR⁵は、これらが結合している窒素原子と一緒に、ピロリジン、ピペリジン、ピラゾー

50

ル、モルホリン、チアゾリドン、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、または1, 2, 4-トリアゾール環を表し、前記環は、ヒドロキシル、アミノ、およびカルボキシル基から選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されていてもよい。

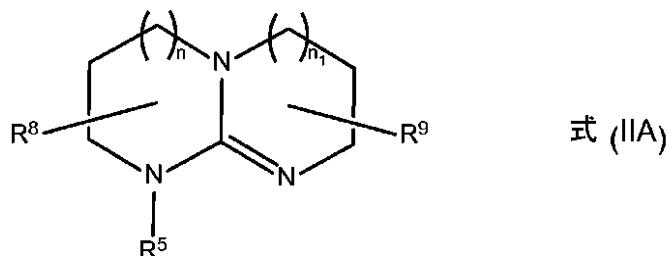
【0055】

前記式(II)の一態様では、R¹およびR²は、水素原子を表し、R⁵は、水素原子またはメチルを表し、R³およびR⁴は、一緒になって、-CH₂-CH₂-および-CH₂-O-から選択される二価ラジカルを表してもよく、これらが結合している窒素原子と一緒にになったとき、5員環を表す。

【0056】

前記式(II)の一態様では、R¹、R²、およびR³、R⁴は、これらが結合している窒素原子と一緒にになって、式(IIA)によって表される二環式縮合環構造を形成してもよい。

【化10】



式中、R⁵は、上で規定したとおりであり、R¹⁰およびR¹¹は、必要に応じて存在し、存在するとき、R¹⁰およびR¹¹の1つまたは2つは、同じまたは異なる環炭素原子に結合してもよく、独立に、C₁~C₅アルキル(たとえば、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、ペンチル、ネオペンチル)、ヒドロキシル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、およびSO₃Hを表し、nおよびn₁は、独立に、0、1、または2を表す。

【0057】

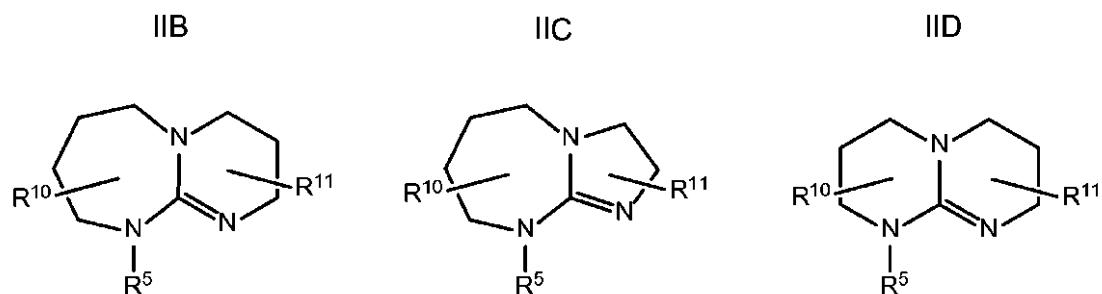
一態様では、二環式縮合環は、式(IIIB)~(IIF)によって表すことができる。

10

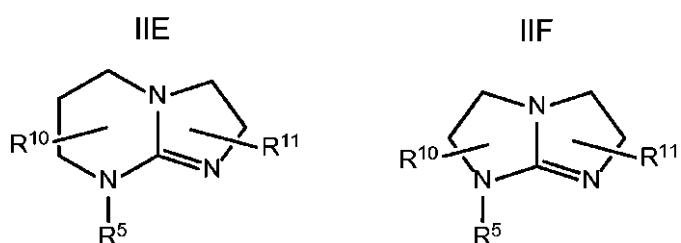
20

30

【化11】



10



20

式中、R⁵、R¹⁰、およびR¹¹は、前もって規定したとおりである。

【0058】

一態様では、式(II)～式(II F)によって表される化合物の塩を利用することができる。適切な塩としては、限定はしないが、グアニジン部分を含む化合物の塩酸塩、硝酸塩、リン酸塩、硫酸塩、ヘミ硫酸塩、スルファミン酸塩、酢酸塩、炭酸塩、炭酸水素塩、および一水和物塩が挙げられる。

【0059】

一態様において、一実施形態では、毛髪直毛化補助剤は、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジン硝酸塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硝酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、シアノグアニジン、ニトログアニジン、1-メチル-3-ニトログアニジン、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸グアニル尿素(guanidine acetic acid guanylurea)、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジフェニルグアニジン、1,3-ジ-o-トリルグアニジン、メチル4-グアニジノ-2-メトキシベンゾエート塩酸塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン硫酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン硫酸塩、1-オクチルグアニジンヘミ硫酸塩、1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、N-tert-ブトキシカルボニルグアニジン(N-Bocグアニジン)1,3-ビス(tert-ブトキシカルボニル)グアニジン(ジ-Bocグアニジン)、カルバミン酸、N,N'-[(1,1-ジメチルエトキシ)カルボニル]カルボンイミドイル]ビス-、C,C'-ビス(1,1-ジメチルエチル)エステル(N,N',N"-トリ-Bocグアニジン)、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸(guanidineacetic acid)、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、4-グアニジン安息香酸、4-グアニジン安息香酸塩酸塩、4-グアニジノ-2-メトキシ安息香酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸

30

40

50

塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1-o-トリルビグアニド、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-(3-クロロ-4-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2-クロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(4-クロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(4-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,3-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,4-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,5-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,6-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3,4-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3,5-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,4-ジフルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,5-ジフルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-[4-(トリフルオロメチル)フェニル]ビグアニド塩酸塩、1-[3,5-ジ-(トリフルオロメチル)フェニル]ビグアニド塩酸塩、1-[4-(トリフルオロメトキシ)フェニル]ビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1-フェニルビグアニド炭酸塩、1,1'-ヘキサメチレンビス[5-(4-クロロフェニル)ビグアニド]、1,1'-ヘキサメチレンビス(5-[p-クロロフェニル]ビグアニド)二塩酸塩、[(アミノ(イミノ)メチル]アミノ}カルボチオイル)アミノ]ベンゼン(Aldrich(登録商標)CDS 000226)、N-シクロヘキシルグアニジン塩酸塩、N-ベンジルグアニジン塩酸塩、N-ベンジル-N-メチルグアニジンヘミ硫酸塩、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、2-tert-ブチル-1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、4-モルホリンカルボキシミドイルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-トシリ-L-アルギニン、N-アミジノ-N-(2,3-ジヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2,2-ジエトキシエチル)グアニジン、(2S)-3-カルバムイミドアミド-2-{[(9H-フルオレン-9-イルメトキシ)カルボニル]アミノ}プロパン酸(Fmoc-L-2-アミノ-3-グアニジノプロピオン酸、Aldrich(登録商標)CDS 019428)、1,8-ビス(テトラメチルグアニジノ)ナフタレン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3,5-ジアミノ-1H-1,2,4-トリアゾール-1-カルボキシミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2,3,4,6,7,8,9,10-オクタヒドロピリミド[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbu)、2,5,6,7,8,9-ヘキサヒドロ-3H-イミダゾ[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbd)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(Hhpp)、3,3,9,9-テトラメチル-1,2,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTMhpp)、3,3,9,9-テトラエチル-1,2,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTEthpp)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.3.0]ノナ-6-エン(Htbn)、1,4,6-トリアザビシクロ[3.3.0]オクタ-4-エン(Htbo)、およびこれらの混合物から選択される、1種または複数のグアニジン部分を含む化合物から選択することができる。

【0060】

5~8員環中に2個のヘテロ原子を含み、前記ヘテロ原子の少なくとも一方が酸素であり、他方が窒素および酸素から選択される、少なくとも1種のヘテロ環化合物を、少なくとも1種のグアニジン部分を含む化合物と組み合わせると、前記ヘテロ環化合物だけを利用している毛髪直毛化配合物と比べたとき、相乗的な効力を有する毛髪直毛化配合物が得られることが発見された。一実施形態では、式(I B)の環状アルキレンカーボネート(たとえば、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、およびこれらの混合物)を

10

20

30

40

50

、グアニジン部分を含む化合物（たとえば、グアニジン、グアニジン酢酸、L-アルギニン、クレアチニン、クレアチニンエチルエステル、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン（TBD）、およびこれらの塩、ならびにこれらの混合物）と組み合わせて用いている毛髪直毛化配合物は、相乗効果および効力の増強を示す。

【0061】

一実施形態では、組成物（および本明細書に記載の施術過程）は、式（I）および（II）の薬剤以外の熱活性化型薬剤／架橋剤を含まない（0重量%）、または実質的に含まない（組成物の総重量に対して1重量%未満、たとえば、0.1重量%未満、または0.01重量%未満、または0.001重量%未満）。典型的な一実施形態では、式（I）および（II）の熱活性化型薬剤は、開示する技術の毛髪直毛化組成物中に存在する唯一の熱活性化型毛髪直毛化剤である。詳細には、毛髪直毛化組成物および方法は、ホルムアルデヒドまたはホルムアルデヒド前駆体を含まない（0重量%）、または実質的に含まない（組成物の総重量に対して1重量%未満、たとえば、0.1重量%未満、または0.01重量%未満、または0.001重量%未満）。開示する技術の典型的な方法および組成物は、ホルムアルデヒドを、そのまま組成物中に使用することもなく、またはホルムアルデヒドのいずれかの供給源の反応を通して方法の際に使用することもない。同様に、組成物および方法は、分解されて刺激物を生成することのあるグリオキシル酸、尿素、およびこれらの誘導体を含まない（0重量%）、または実質的に含まなくてよい（組成物の総重量に対して1重量%未満、または0.1重量%未満、または0.01重量%未満、または0.001重量%未満）。

10

20

30

40

【0062】

一実施形態では、組成物および施術過程は、環状の含メルカプト（チオール）基化合物を含まない（0重量%）、または実質的に含まない（組成物の総重量に対して1重量%未満、または0.1重量%未満、または0.01重量%未満、または0.001重量%未満）。環状の含メルカプト基化合物とは、環炭素原子に直接連結したS-H基を含む環状化合物である。一実施形態では、組成物（および本明細書に記載の施術方法）は、脂肪族および環状の含チオール基化合物を含めた、チオール基を含むすべての化合物を含まない、または実質的に含まない（組成物の総重量に対して1重量%未満、または0.1重量%未満、または0.01重量%未満、または0.001重量%未満）。

【0063】

一実施形態では、組成物および施術過程は、ケラチン線維中のジスルフィド（bisulfide）結合を壊すことのできる亜硫酸塩（パーマネントウェーブ用組成物中に通常使用される）を含まない、または実質的に含まない（組成物の総重量に対して1重量%未満、または0.1重量%未満、または0.01重量%未満、または0.001重量%未満）。

【0064】

一実施形態では、当技術の毛髪直毛化剤（a）およびグアニジン部分を含む補助剤（b）は、ホルムアルデヒド、グリオキシロイル、カルボシステイン、グリオキシル、マロンジアルデヒド、スクシンジアルデヒド、グルタルアルデヒド；グリオキシル酸、没食子酸、酒石酸、リンゴ酸、マレイン酸、イタコン酸、シュウ酸、マロン酸、メソキサル酸、フマル酸、コハク酸、イミノ二酢酸、ガラクタル酸（galactartic acid）、アジピン酸、グルタル酸、クエン酸、イソクエン酸、1,2,3,4-ブタンテトラカルボン酸から選択されるカルボン酸およびその塩；尿素、ジメチロールエチレン尿素、ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素、アルキル化ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素から選択される尿素誘導体、ならびにこれらの組合せを始めとする、当技術分野で公知の適切ないずれかの熱活性化型毛髪直毛化剤と組み合わせて利用することができる。

【0065】

一実施形態では、当技術の毛髪直毛化剤（a）およびグアニジン部分を含む補助剤（b）を、既存の商用毛髪直毛化製品に加えて、その毛髪直毛化効力を増強することができる。

美容上許容される賦形剤

50

【0066】

予め述べたように、美容上許容される賦形剤とは、開示する技術の熱活性化型毛髪直毛化剤および補助剤と混合されると、より適切に毛髪に適用され、かつ／または毛髪および／もしくは頭皮に他の望ましい効果を与える組成物をもたらす、構成材料(a)および(b)に配合するための希釈剤、担体媒体、および／または補助添加剤として使用される、非毒性の刺激性でない物質である。

【0067】

毛髪ケア業界で使用される美容上許容される賦形剤は、いくつかの部門に分類することができる。ある部門からの構成材料を、最終組成物の用途および所望の形態(たとえば、液体、クリーム、ムース、ゲル、スプレー、ローション、ポマードなど)に応じて、最終毛髪ケア組成物に含め、またはそれから除外することができる。任意選択の各賦形剤の選択および量は、最終製品の目的および特徴により様々となり、配合技術者の手で、また文献から、容易に突き止めることができる。本明細書に記載の賦形剤、添加剤、補助剤、および有益な薬剤は、たとえば、界面活性剤、乳化剤、可溶化剤、コンディショナー、皮膚軟化剤、湿潤剤、潤滑剤、pH調整剤、および酸系保存剤など、組成物中で1つに留まらない機能を果たす場合もあると認識される。賦形剤の部門としては、限定はしないが、以下のものが挙げられる。

溶媒／希釈剤／担体

【0068】

存在する1種または複数の熱活性化型薬剤および補助剤に加えて、組成物は、熱活性化型薬剤および補助剤がそれに可溶性または分散性である、溶媒、希釈剤、およびまたは担体を含んでもよい。詳細な例として、水および／またはエタノールが挙げられる。

【0069】

組成物は、無水または水系配合物として調製することができ、水と混和性の補助溶媒、希釈剤、および／または担体を含有する配合物も企図される。

【0070】

一般に用いられる有用な溶媒は、通常は、液体、たとえば、水(脱イオン水、蒸留水、または精製水)、アルコール、たとえば、C₁～C₁₀脂肪族および芳香族アルコール(グリコール、たとえば、エチレングリコール、プロピレングリコール、グリセリンなどの、ジオールおよびトリオールを含める)、ポリオールなど、ならびにこれらの混合物である。

【0071】

水以外の溶媒の例としては、直鎖および分岐状アルコール、たとえば、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、ヘキサノールなど、および芳香族アルコール、たとえば、ベンジルアルコール、シクロヘキサノールなどが挙げられる。ポリオールの非限定的な例としては、多価アルコール、たとえば、グリセリン、ポリエチレングリコール、プロピレングリコール、ブチレングリコール、ヘキシレングリコール、C₂～C₄アルコキシ化アルコール、およびC₂～C₄アルコキシ化ポリオール、たとえば、約2～約30個の炭素原子、および1～約40個のアルコキシ単位を有する、アルコール、ジオール、およびポリオールのエトキシ化、プロポキシ化、およびブトキシ化エーテル、ポリブロピレングリコール、ポリブチレングリコールなどが挙げられる。非水性溶媒または希釈剤の他の例としては、シリコーン、およびシクロメチコンなどのシリコーン誘導体、アセトンやメチルエチルケトンなどのケトン、ジメチルエーテルやジメトキシメタンなどのエーテル、天然および合成の油およびろう、たとえば、植物油、植物性油、動物性油、精油、流動パラフィン(鉛油)、C₇～C₄イソパラフィン、アルキルカルボン酸エステル、たとえば、酢酸エチル、酢酸アミル、乳酸エチルなど、ホホバ油、サメ肝油などが挙げられる。前述の非水性補助溶媒または希釈剤のいくつかは、コンディショナーおよび乳化剤としての働きをすることもある。しかし、組成物中の重量ベースで計算する目的では、本節で挙げた液体はすべて、溶媒／希釈剤とみなす。

界面活性剤

10

20

30

40

50

【0072】

組成物は、アニオン、カチオン、両性、および非イオン界面活性剤、ならびにこれらの混合物などの、1種または複数の界面活性剤を含んでもよい。

【0073】

アニオン界面活性剤は、水性界面活性剤組成物の分野で公知であるまたは以前から使用されているアニオン界面活性剤のいずれかでよい。適切なアニオン界面活性剤としては、限定はしないが、アルキル硫酸、アルキルエーテル硫酸、アルキルスルホン酸、アルカリルスルホン酸、-オレフィン-スルホン酸、アルキルアミドスルホン酸、アルカリルポリエーテル硫酸、アルキルアミドエーテル硫酸、アルキルモノグリセリルエーテル硫酸、アルキルモノグリセリド硫酸、アルキルモノグリセリドスルホン酸、アルキルコハク酸、アルキルスルホコハク酸、アルキルスルホスクシナメート、アルキルエーテルスルホコハク酸、アルキルアミドスルホコハク酸、アルキルスルホ酢酸、アルキルリン酸、アルキルエーテルリン酸、アルキルエーテルカルボン酸、アルキルアミドエーテルカルボン酸、N-アルキルアミノ酸、N-アシルアミノ酸、アルキルペプチド、N-アシルタウリン酸(N-acyl taurate)、アルキルイセチオン酸、アシル基が脂肪酸由来であるカルボン酸塩、ならびにこれらのアルカリ金属、アルカリ土類金属、アンモニウム、アミン、およびトリエタノールアミン塩が挙げられる。

10

【0074】

一態様では、前述の塩のカチオン部分は、ナトリウム、カリウム、マグネシウム、アンモニウム、モノ-、ジ-、およびトリエタノールアミン塩、ならびにモノ-、ジ-、およびトリ-イソプロピルアミン塩から選択される。前述の界面活性剤のアルキルおよびアシル基は、一態様では約6～約24個の炭素原子、別の態様では8～22個の炭素原子、さらなる態様では約12～18個の炭素原子を含み、不飽和でもよい。界面活性剤中のアリール基は、フェニルまたはベンジルから選択される。上述の含エーテル界面活性剤は、一態様では界面活性剤分子あたり1～10個のエチレンオキシドおよび/またはプロピレンオキシド単位、別の態様では界面活性剤分子あたり1～3個のエチレンオキシド単位を含んでいてよい。

20

【0075】

適切なアニオン界面活性剤の例としては、限定はしないが、1、2、および3モルのエチレンオキシドでエトキシ化されたラウレス硫酸、トリデセス硫酸、ミレス硫酸、C₁~C₁₃パレス硫酸、C₁₂~C₁₄パレス硫酸、およびC₁₂~C₁₅パレス硫酸のナトリウム、カリウム、リチウム、マグネシウム、およびアンモニウム塩；ラウリル硫酸、ココ硫酸、トリデシル硫酸、ミルスチル硫酸、セチル硫酸、セテアリル硫酸、ステアリル硫酸、オレイル硫酸、および牛脂硫酸のナトリウム、カリウム、リチウム、マグネシウム、およびアンモニウム、およびトリエタノールアミン塩；ラウリルスルホコハク酸二ナトリウム、ラウレススルホコハク酸二ナトリウム、ココイルイセチオン酸ナトリウム、C₁₂~C₁₄オレフィンスルホン酸ナトリウム、ラウレス-6カルボン酸ナトリウム、メチルココイルタウリン酸ナトリウム、ココイルグリシン酸ナトリウム、ミリストチルサルコシン酸ナトリウム(sodium myristyl sarcocinate)、ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム、ココイルサルコシン酸ナトリウム(sodium cocoyl sarcosinate)、ココイルグルタミン酸ナトリウム、ミリストイルグルタミン酸カリウム、モノラウリルリン酸トリエタノールアミン、ならびに、約8～約22個の炭素原子を含む飽和および不飽和脂肪酸のナトリウム、カリウム、アンモニウム、およびトリエタノールアミン塩を始めとする脂肪酸石けんが挙げられる。

30

【0076】

カチオン界面活性剤は、コンディション調整剤として働き、毛髪線維上の加熱装置の滑らかな滑りを確実にすることにより、加熱ステップを援助することができる。界面活性剤は、粘性の増大を助けることがあるが、本明細書において典型的な実施形態を述べる目的では、レオロジー改質剤とはみなさない。

40

【0077】

50

カチオン界面活性剤は、水性界面活性剤組成物の分野で公知であるまたは以前から使用されているカチオン界面活性剤のいずれかでよい。適切な部類のカチオン界面活性剤としては、限定はしないが、アルキルアミン、アルキルイミダゾリン、エトキシ化アミン、第四級化合物、および四級化エステルが挙げられる。加えて、アルキルアミンオキシドも、低pHでカチオン界面活性剤として機能しうる。

【0078】

アルキルアミン界面活性剤は、置換または非置換の、第一級、第二級、および第三級C₁₀~C₃₂脂肪アルキルアミン、および、時に「アミドアミン」と呼ばれる物質の塩でよい。アルキルアミンおよびその塩の例としては、ジメチルコカミン、ジメチルパルミタミン、ジオクチルアミン、ジメチルステアラミン、ジメチルソヤミン、ソヤミン、ミリスチルアミン、トリデシルアミン、エチルステアリルアミン、N-牛脂プロパンジアミン、エトキシ化ステアリルアミン、ジヒドロキシエチルステアリルアミン、アラキジルベヘニルアミン、ジメチルラウラミン、ステアリルアミン塩酸塩、ソヤミン塩化物、ステアリルアミンギ酸塩、N-牛脂プロパンジアミンニ塩化物、およびアモジメチコン（アミノエチルアミノプロピルシロキサンなどの、アミノ官能基でブロックされたシリコーンポリマーのINC名）が挙げられる。

10

【0079】

アミドアミンおよびその塩の例としては、ステアラミドプロピルジメチルアミン、ステアラミドプロピルジメチルアミンクエン酸塩、パルミタミドプロピルジエチルアミン、およびコカミドプロピルジメチルアミン乳酸塩が挙げられる。

20

【0080】

アルキルイミダゾリン界面活性剤の例としては、アルキルヒドロキシエチルイミダゾリン、たとえば、ステアリルヒドロキシエチルイミダゾリン、ココヒドロキシエチルイミダゾリン、エチルヒドロキシメチルオレイルオキサゾリンなどが挙げられる。

【0081】

エトキシ化アミンの例としては、PEG-ココポリアミン、PEG-15牛脂アミン、クアテルニウム52などが挙げられる。

【0082】

カチオン界面活性剤として有用な第四級アンモニウム化合物の中でも、一般式：(R¹5R¹6R¹7R¹8N⁺)E⁻ [式中、R¹5、R¹6、R¹7、およびR¹8は、独立に、1~約22個の炭素原子を有する脂肪族基、またはアルキル鎖中に1~約22個の炭素原子を有する芳香族のアルコキシ、ポリオキシアルキレン、アルキルアミド、ヒドロキシアルキル、アリール、もしくはアルキルアリール基から選択され、E⁻は、ハロゲン（たとえば、塩化物、臭化物）、酢酸、クエン酸、乳酸、グリコール酸、リン酸、硝酸、硫酸、およびアルキル硫酸から選択されるものなどの、塩形成性アニオンである]に対応するものがある。脂肪族基は、炭素および水素原子に加えて、エーテル結合、エステル結合、およびアミノ基などの他の基を含んでいてよい。比較的長鎖の脂肪族基、たとえば、約12炭素またはより高級である基（アルキル鎖中C₁₀~C₃₂）は、飽和でも不飽和でもよい。一態様では、アリール基は、フェニルおよびベンジルから選択される。

30

【0083】

典型的な第四級アンモニウム界面活性剤としては、限定はしないが、塩化セチルトリメチルアンモニウム（塩化セトリモニウム）、塩化セチルピリジニウム、塩化ジセチルジメチルアンモニウム、塩化ジヘキサデシルジメチルアンモニウム、塩化ステアリルジメチルベンジルアンモニウム、塩化ジオクタデシルジメチルアンモニウム、塩化ジエイコシルジメチルアンモニウム、塩化ジドコシルジメチルアンモニウム、塩化ジヘキサデシルジメチルアンモニウム、酢酸ジヘキサデシルジメチルアンモニウム、塩化ベヘニルトリメチルアンモニウム（塩化ベヘントリモニウム）、塩化ベンザルコニウム、塩化ベンゼトニウム、および塩化ジ（ヤシアルキル）ジメチルアンモニウム、塩化ジ牛脂ジメチルアンモニウム、塩化ジ（水添牛脂）ジメチルアンモニウム、酢酸ジ（水添牛脂）ジメチルアンモニウム、メチル硫酸ジ牛脂ジメチルアンモニウム、リン酸ジ牛脂ジプロピルアンモニウム、およ

40

50

び硝酸ジ牛脂ジメチルアンモニウムが挙げられる。

【0084】

アミンオキシドは、低pHではプロトン化し、N-アルキルアミンと同様に挙動しうる。例としては、限定はしないが、ジメチル-ドデシルアミンオキシド、オレイルジ(2-ヒドロキシエチル)アミンオキシド、ジメチルテトラデシルアミンオキシド、ジ(2-ヒドロキシエチル)-テトラデシルアミンオキシド、ジメチルヘキサデシルアミンオキシド、ベヘナミンオキシド、コカミンオキシド、デシルテトラデシルアミンオキシド、ジヒドロキシエチルC₁₂~C₁₅アルコキシプロピルアミンオキシド、ジヒドロキシエチルコカミンオキシド、ジヒドロキシエチルラウラミンオキシド、ジヒドロキシエチルステアラミンオキシド、ジヒドロキシエチル牛脂アミンオキシド、水添パーム核アミンオキシド、水添牛脂アミンオキシド、ヒドロキシエチルヒドロキシプロピルC₁₂~C₁₅アルコキシプロピルアミンオキシド、ラウラミンオキシド、ミリストミンオキシド、セチルアミンオキシド、オレイミドプロピルアミンオキシド、オレアミンオキシド、パルミタミンオキシド、PEG-3ラウラミンオキシド、ジメチルラウラミンオキシド、カリウムトリホスホノメチルアミンオキシド、ソイアミドプロピルアミンオキシド、コカミドプロピルアミンオキシド、ステアラミンオキシド、牛脂アミンオキシド、およびこれらの混合物が挙げられる。

10

【0085】

特に有用なカチオン界面活性剤として、限定はしないが、塩化脂肪(アルキル鎖中C₁₀~C₃₂)アルキルアンモニウム、たとえば、塩化セトリモニウムおよび塩化ベヘントリモニウムなどの脂肪酸誘導体が挙げられる。このような界面活性剤は、コンディション調整剤および皮膚軟化剤の働きをすることもある。

20

【0086】

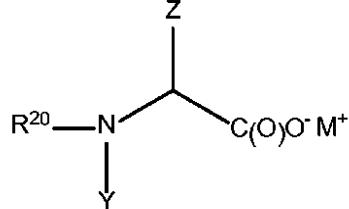
両性または双性イオン界面活性剤とは、酸性と塩基性の部分を含み、酸または塩基のどちらとしても挙動しうる能力を有する。適切な界面活性剤は、水性界面活性剤組成物の分野で公知であるまたは以前から使用されている両性界面活性剤のいずれかでよい。典型的な両性界面活性剤の部類としては、限定はしないが、アミノ酸(たとえば、N-アルキルアミノ酸およびN-アシルアミノ酸)、ベタイン、スルタイン(sultaine)、およびアルキルアンホカルボン酸(alkyl amphocarboxylate)が挙げられる。

30

【0087】

本明細書における適切なアミノ酸系界面活性剤としては、式:

【化12】



40

によって表される界面活性剤が挙げられる。

式中、

R²⁰は、10~22個の炭素原子を有する飽和もしくは不飽和炭化水素基、または9~22個の炭素原子を有する飽和もしくは不飽和炭化水素基を含むアシル基を表し、Yは、水素またはメチルであり、Zは、水素、-CH₃、-CH(CH₃)₂、-CH₂CH(CH₃)₂、-CH(CH₃)CH₂CH₃、-CH₂CH₂C₆H₅、-CH₂CH₂C₆H₄OH、-CH₂OH、-CH(OH)CH₃、-(CH₂)₄NH₂、-(CH₂)₃NHCO(NH)NH₂、-CH₂C(O)O⁻M⁺、-(CH₂)₂C(O)O⁻M⁺から選択される。Mは、塩形成性カチオンである。一態様では、R²⁰は、直鎖または分岐状C₁₀~C₂₂アルキル基、直鎖または分岐状C₁₀~C₂₂アルケニル基、R²¹C(O)

50

- で表されるアシル基 [式中、 R^{21} は、直鎖または分岐状 $C_9 \sim C_{22}$ アルキル基、直鎖または分岐状 $C_9 \sim C_{22}$ アルケニル基から選択される] から選択されるラジカルを表す。一様では、 M^+ は、ナトリウム、カリウム、アンモニウム、およびトリエタノールアミン (TEA) から選択される。

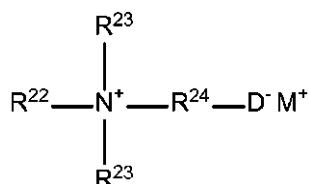
【0088】

アミノ酸界面活性剤は、 - たとえば、アラニン、アルギニン、アスパラギン酸、グルタミン酸、グリシン、イソロイシン、ロイシン、リシン、フェニルアラニン、セリン、チロシン、バリンなどのアミノ酸のアルキル化およびアシル化から導かれるものでよい。代表的な N - アシルアミノ酸界面活性剤は、限定はしないが、 N - アシル化グルタミン酸のカルボン酸一および二塩 (たとえば、ナトリウム、カリウム、アンモニウム、および TEA) 、たとえば、ココイルグルタミン酸ナトリウム、ラウロイルグルタミン酸ナトリウム、ミリストイルグルタミン酸ナトリウム、パルミトイイルグルタミン酸ナトリウム、ステアロイルグルタミン酸ナトリウム、ココイルグルタミン酸二ナトリウム、ステアロイルグルタミン酸二ナトリウム、ココイルグルタミン酸カリウム、ラウロイルグルタミン酸カリウム、およびミリストイルグルタミン酸カリウム ; N - アシル化アラニンのカルボン酸塩 (たとえば、ナトリウム、カリウム、アンモニウム、および TEA) 、たとえば、ココイルアラニン酸ナトリウム、およびラウロイルアラニン酸 TEA ; N - アシル化グリシンのカルボン酸塩 (たとえば、ナトリウム、カリウム、アンモニウム、および TEA) 、たとえば、ココイルグリシン酸ナトリウム、およびココイルグリシン酸カリウム、 N - アシル化サルコシンのカルボン酸塩 (たとえば、ナトリウム、カリウム、アンモニウム、および TEA) 、たとえば、ラウロイルサルコシン酸ナトリウム、ココイルサルコシン酸ナトリウム、ミリストイルサルコシン酸ナトリウム、オレオイルサルコシン酸ナトリウム、およびラウロイルサルコシン酸アンモニウム、ならびに前述の界面活性剤の混合物である。

【0089】

本組成物において有用なベタインおよびスルタインは、式 :

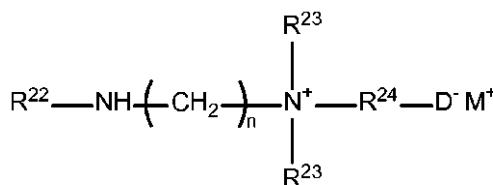
【化13】



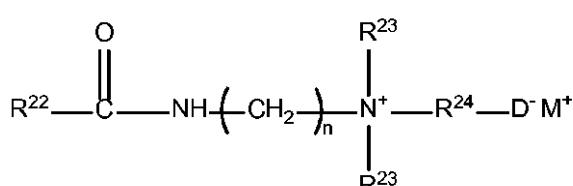
10

20

30



40



によって表される、アルキルベタイン、アルキルアミノベタイン、およびアルキルアミドベタイン、ならびに対応するスルホベタイン (スルタイン) から選択される。

式中、

50

R^{22} は、 $C_7 \sim C_{22}$ アルキルまたはアルケニル基であり、各 R^{23} は、独立に、 $C_1 \sim C_4$ アルキル基であり、 R^{24} は、 $C_1 \sim C_5$ アルキレン基またはヒドロキシ置換されている $C_1 \sim C_5$ アルキレン基であり、 n は、2 ~ 6 の整数であり、 D は、カルボン酸またはスルホン酸基であり、 M は、塩形成性カチオンである。一態様では、 R^{22} は、 $C_{11} \sim C_{18}$ アルキル基または $C_{11} \sim C_{18}$ アルケニル基である。一態様では、 R^{23} は、メチルである。一態様では、 R^{24} は、メチレン、エチレン、またはヒドロキシプロピレンである。一態様では、 n は 3 である。さらなる態様では、 M は、ナトリウム、カリウム、マグネシウム、アンモニウム、モノ-、ジ-、およびトリエタノールアミンカチオンから選択される。

【0090】

10

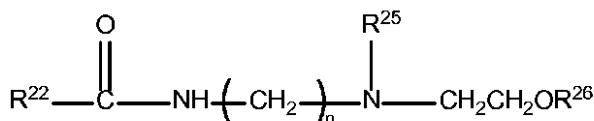
適切なベタインの例としては、限定はしないが、ラウリルベタイン、ココベタイン、オレイルベタイン、ココヘキサデシルジメチルベタイン、ラウリルアミドプロピルベタイン、ココアミドプロピルベタイン、およびコカミドプロピルヒドロキシスルタインが挙げられる。

【0091】

アルキルアンホ酢酸やアルキルアンホプロピオン酸（一および二置換カルボン酸）などのアルキルアンホカルボン酸は、式、

【化14】

20



によって表すことができる。

式中、

R^{22} は、 $C_7 \sim C_{22}$ アルキルまたはアルケニル基であり、 R^{25} は、 $-CH_2C(O^-)M^+$ 、 $-CH_2CH_2C(O^-)O^-M^+$ 、または $-CH_2CH(OH)CH_2SO_3^-M^+$ であり、 R^{26} は、水素または $-CH_2C(O^-)O^-M^+$ であり、 M は、ナトリウム、カリウム、マグネシウム、アンモニウム、モノ-、ジ-、およびトリエタノールアミンから選択されるカチオンである。

30

【0092】

典型的なアルキルアンホカルボン酸としては、限定はしないが、ココアンホ酢酸ナトリウム、ラウロアンホ酢酸ナトリウム、カプリロアンホ酢酸ナトリウム、ココアンホ二酢酸ニナトリウム、ラウロアンホ二酢酸ニナトリウム、カプリルアンホ二酢酸ニナトリウム、カプリロアンホ二酢酸ニナトリウム、ココアンホジプロピオン酸ニナトリウム、ラウロアンホジプロピオン酸ニナトリウム、カプリルアンホジプロピオン酸ニナトリウム、およびカプリロアンホジプロピオン酸ニナトリウムが挙げられる。

【0093】

非イオン界面活性剤は、水性界面活性剤組成物の分野で公知であるまたは以前から使用されている非イオン界面活性剤のいずれかでよい。適切な非イオン界面活性剤としては、限定はしないが、直鎖または分岐鎖の第一級または第二級脂肪族（ $C_6 \sim C_{18}$ ）酸、アルコール、またはフェノール；アルキルエトキシレート；アルキルフェノールアルコキシレート（特に、エトキシレート、およびエトキシ/プロポキシ混合部分）、アルキルフェノールのブロックアルキレンオキシド縮合物；アルカノールのアルキレンオキシド縮合物；およびエチレンオキシド/プロピレンオキシドブロックコポリマーが挙げられる。適切な他の非イオン界面活性剤としては、モノ-またはジアルキルアルカノールアミド、アルキルポリグルコシド（APG）、ソルビタン脂肪酸エステル、ポリオキシエチレンソルビタン脂肪酸エステル、ポリオキシエチレンソルビトールエステル、ポリオキシエチレン酸、およびポリオキシエチレンアルコールが挙げられる。適切な非イオン界面活性剤の他の例としては、ココモノ-またはジエタノールアミド、ココグルコシド、デシリジグルコシ

40

50

ド、ラウリルジグルコシド、ココジグルコシド、ポリソルベート 20、40、60、および 80、エトキシ化直鎖アルコール、セテアリルアルコール、ラノリンアルコール、ステアリン酸、ステアリン酸グリセリル、ステアリン酸 PEG-100、ラウレス-7、およびオレス-20 が挙げられる。

【0094】

非イオン界面活性剤として、たとえば、Lubrizol Advanced Materials, Inc. から、Glucam (登録商標) E10、Glucam (登録商標) E20、Glucam (登録商標) P10、および Glucam (登録商標) P20 の商品名でそれぞれ入手可能な、メチルグルセス-10、メチルグルセス-20、PPG-10メチルグルコースエーテル、PPG-20メチルグルコースエーテルなどのアルコキシ化メチルグルコシドも挙げられ、Lubrizol Advanced Materials, Inc. から、Glucamate (登録商標) DOE-120 および Glucamate (商標) LT の商品名でそれぞれ入手可能な、ジオレイン酸 PEG120 メチルグルコースやトリオレイン酸 PEG120 メチルグルコースなどの疎水変性アルコキシ化メチルグルコシドも適する。典型的な他の疎水変性アルコキシ化メチルグルコシドは、米国特許第 6,573,375 号および第 6,727,357 号で開示されている。

【0095】

組成物中に利用することのできる他の非イオン界面活性剤は、WO99/21530、米国特許第 3,929,678 号、第 4,565,647 号、第 5,720,964 号、および第 5,858,948 号に、より詳細に記載されている。加えて、適切な界面活性剤は、McCutcheon's Emulsifiers and Detergents (North American and International Editions、Schwartz、Perry、および Berch 著) にも記載されている。

【0096】

典型的な熱活性化型薬剤を含む組成物中に利用される界面活性剤の量は、所望の配合に応じて、大きく異なる場合があるが、利用されることの多い量は、一般に、活性成分ベースで 1 重量 % ~ 80 重量 % の範囲である。たとえば、界面活性剤は、活性成分ベースで、0.001 ~ 20 重量 %、たとえば、少なくとも 0.1 重量 % の総濃度で組成物中に存在してよい。

乳化剤

【0097】

有用な乳化剤としては、限定はしないが、脂肪アルコールおよび脂肪酸ならびにそのアルコキシ化物；2 ~ 6 個の炭素原子を有するポリオールの部分エステル、たとえば、ポリグリセロールの部分エステル；自然に存在するゴム、たとえば、アカシアゴムやトラガガントゴム；自然に存在するホスファチド、たとえば、ダイズレシチン；モノオレイン酸ソルビタン誘導体；羊毛脂；羊毛アルコール；ソルビタンエステル；モノグリセリド；ならびに乳化性シリコーン、オルガノシロキサン、乳化ろう、およびこれらの組合せが挙げられる。脂肪アルコールおよび脂肪酸は、自然源から得たものでよく、したがって、アルコールおよび酸それぞれの混合物でよい。

【0098】

有用な脂肪アルコールとしては、限定はしないが、C₁₂ ~ C₃₂ または C₁₂ ~ C₂₂ 脂肪アルコール、アルコキシ化アルコール、たとえば、C₁₂ ~ C₃₂ または C₁₂ ~ C₂₂ アルコキシ化アルコールが挙げられる。

【0099】

有用な脂肪酸としては、限定はしないが、C₁₂ ~ C₃₂ または C₁₂ ~ C₂₂ 脂肪酸、アルコキシ化脂肪酸、たとえば、C₁₂ ~ C₃₂ または C₁₂ ~ C₂₂ アルコキシ化脂肪酸が挙げられる。

【0100】

一態様では、脂肪アルコールおよび脂肪酸アルコキシル化物は、それぞれ、分子中に存在するエチレンオキシド、プロピレンオキシド、およびエチレンオキシド/プロピレンオキシドの組合せを、一態様では 2 ~ 150 単位、別の態様では 10 ~ 80 単位有する。

10

20

30

40

50

【0101】

本明細書において有用である脂肪アルコールの一例は、セテアリルアルコールであり、これは、大部分はセチルおよびステアリルアルコールである脂肪アルコールの混合物である。このような脂肪アルコールは、皮膚軟化剤および/またはコンディション調整剤の働きをすることもある。

【0102】

適切な乳化剤としては、脂肪アルコールポリオキシエチレンエーテル、たとえば、セテアレス-20などの、セテアレス-n(nは、2~100、たとえば5~50など、鎖中のポリエチレン単位の数を表す)も挙げられる。

【0103】

2~6個の炭素原子を有するポリオールのエステルおよび部分エステルを主体とする乳化剤は、12~30個の炭素原子を有する直鎖飽和および不飽和脂肪酸と縮合したものでよい。たとえば、グリセロールもしくはエチレングリコールのモノエステルおよびジエステルまたはプロピレングリコールのモノエステルは、グリセロール、エチレングリコール、またはプロピレングリコールの飽和および不飽和C₁₂~C₃₀脂肪酸、たとえば、ステアリン酸グリセリルおよびステアリン酸グリコールとの縮合から生成される。

【0104】

適切な乳化剤として、メチルグルコシド、C₈~C₂₂アルキルグルコシド、およびC₈~C₂₂アルキルポリグルコシド(APG)も挙げられる。典型的なアルキルグルコシドおよびアルキルポリグルコシドは、オクチルグルコシド、デシルグルコシド、ラウリルグルコシド、パルミチルグルコシド、イソステアリルグルコシド、ステアリルグルコシド、アラキジルグルコシド、およびベヘニルグルコシド、ならびにこれらのオリゴマー、およびアルキルグルコシドとアルキルポリグルコシドの混合物から選択することができる。典型的なメチルグルコシドとしては、Lubrizol Advanced Materials, Inc.がGlucate(商標)SS、Glucate(商標)SSE-20、およびGlucate DO乳化剤の商品名でそれぞれ販売している、セスキステアリン酸メチルグルコース、ニオレイン酸メチルグルコース、およびセスキステアリン酸PEG-20メチルグルコースが挙げられる。

【0105】

乳化剤は、組成物中に存在する量を計算する目的でレオロジー改質剤として上で挙げたものを除外した組成物の、適切には0.01~20重量%、たとえば、少なくとも0.1重量%、たとえば、5重量%までで存在してよい。

湿潤剤

【0106】

湿潤剤とは、環境の相対湿度に応じて、水蒸気を吸収または放出する材料であると定義される(Harry's Cosmeticology, Chemical Publishing Company Inc., 1982年、266頁)。適切な湿潤剤としては、限定はしないが、アラントイン;ピロリドンカルボン酸およびその塩;ヒアルロン酸およびその塩;ソルビン酸およびその塩;尿素、リシン、シスチン、およびグアニジン部分を含むアミノ酸以外のアミノ酸;ポリヒドロキシアルコール、たとえば、グリセリン、プロピレングリコール、ヘキシレングリコール、ヘキサントリオール、エトキシジグリコール、ジメチコンコポリオール、ソルビトール、およびこれらのエステル;ポリエチレンジコール;グリコール酸およびグリコール酸塩(たとえば、アンモニウムおよび第四級アルキルアンモニウム);キトサン;アロエベラ抽出物;藻類抽出物;ハチミツおよびその派生物;イノシトール;乳酸および乳酸塩(たとえば、アンモニウムおよび第四級アルキルアンモニウム);糖およびデンプン;糖およびデンプン誘導体(たとえば、グルコースアルコキシ化グルコース、マンニトール、キシリトール);DL-パンテノール;リン酸アスコルビルマグネシウム、アルブチン、コウジ酸、ラクタミドモノエタノールアミン、アセトアミドモノエタノールアミンなど、ならびにこれらの混合物が挙げられる。湿潤剤として、C₃~C₆ジオールおよびトリオール、たとえば、グリセリン、プロピレングリコール、ブタン-1,2,3-トリオール、ヘキ

10

20

30

40

50

シレングリコール、ヘキサントリオールなど、ならびにこれらの混合物も挙げられる。平均で5～30モルのエトキシ化を含むエトキシ化メチルグルコースエーテル、たとえば、ラウリルメチルグルセス-10ヒドロキシプロピルジモニウムクロリド、メチルグルセス-10、およびメチルグルセス-20のINCI名で入手可能なものが適する。

【0107】

このような潤滑剤は、組成物の0.01～20重量%、たとえば、少なくとも0.1重量%、または少なくとも1重量%、たとえば、8重量%まで、または5重量%まで存在してよい。

皮膚軟化剤

【0108】

皮膚軟化剤とは、皮膚による水分取込みの速度および量を調節する物質であると定義される(Handbook of Cosmetic Science and Technology, Elsevier Science Publishing, 1993年、175頁)。適切な皮膚軟化剤としては、鉛油；植物油；水素添加植物油；ステアリン酸；脂肪アルコール、たとえば、セチルアルコール、セテアリルアルコール、ミリスチルアルコール、ベヘニルアルコール、ラウリルアルコール；アセチル化ラノリンアルコール中の酢酸セチル；安息香酸エステル、たとえば、安息香酸C₁₂～C₁₅アルキル、安息香酸イソステアリル；マレイン酸ジカプリリル；ワセリン、ラノリン、ココバター(coco butter)、シア脂、蜜ろう、およびこれらのエステル；エトキシ化脂肪アルコールエステル、たとえば、セテアレス-20、オレス-5、およびセテス-5；アルコキシ化脂肪酸エステル、たとえば、ポリエチレングリコール400プロポキシ化モノラウレート；アボカド油またはグリセリド、ゴマ油またはグリセリド、ベニバナ油またはグリセリド、ヒマワリ油またはグリセリド、他の天然植物油および植物性油のモノ-、ジ-、およびトリグリセリド、たとえば、カプリル酸トリグリセリド、カプリン酸トリグリセリド、カプリル酸/カプリン酸トリグリセリド、カプリル酸/カプリン酸/ラウリン酸トリグリセリド；Guerbetエステル、たとえば、Lubrizol Advanced Materials, Inc.によって市販されているG-20、G-36、G-38、およびG-66；植物種子油；揮発性シリコーン油；不揮発性皮膚軟化剤など、ならびにこれらの混合物が挙げられる。

【0109】

適切な不揮発性皮膚軟化剤としては、脂肪酸と脂肪アルコールのエステル、高度分岐炭化水素など、およびこれらの混合物が挙げられる。このような脂肪酸と脂肪アルコールのエステルとしては、オレイン酸デシル、ステアリン酸ブチル、ステアリン酸オクチル、ミリスチン酸ミリスチル、ヒドロキシステアリン酸イソステアリル、イソステアリン酸イソステアリル、セバシン酸ジイソプロピル、ステアロイルステアリン酸オクチルドデシル、ヒドロキシステアリン酸オクチル、アジピン酸ジイソプロピル、ミリスチン酸イソプロピル、パルミチン酸イソプロピル、パルミチン酸エチルヘキシル、ネオペンタン酸イソデシルC₁₂～C₁₅アルコール安息香酸エステル、マレイン酸ジエチルヘキシル、PPG-14ブチルエーテルおよびPPG-2ミリスチルエーテルプロピオネート、オクタン酸セテアリルなど、ならびにこれらの混合物が挙げられる。適切な高度分岐炭化水素としては、イソヘキサデカンなど、およびその混合物が挙げられる。

【0110】

適切な揮発性皮膚軟化剤としては、たとえば、環状または直鎖状ポリジメチルシロキサンなどの、揮発性シリコーンが挙げられる。環状シリコーン中のケイ素原子の数は、開示する技術の一態様では約3～約7個、別の態様では4～5個の範囲でよい。典型的な揮発性シリコーンは、環状および直鎖状の両方とも、Dow Corning Corporationから、Dow Corning 344、345、および200として入手可能である。直鎖状揮発性シリコーンは通常、25℃での粘度が約5cP未満であり、環状揮発性シリコーンは通常、25℃での粘度が約10cP未満である。「揮発性」とは、シリコーンが、測定可能な蒸気圧を有することを意味する。揮発性シリコーンについての記述は、ToddおよびByers、「Volatile Silicone Fluids for Cosmetics」、Cosmetics

10

20

30

40

50

and Toiletries、91巻、1976年1月、27~32頁において見ることができる。

【0111】

他の皮膚軟化剤シリコーンとしては、ポリジメチルシロキサンゴム、アミノシリコーン、フェニルシリコーン、ポリジメチルシロキサン、ポリジエチルシロキサン、ポリメチルフェニルシロキサン、ポリジメチルシロキサンゴム、ポリフェニルメチルシロキサンゴム、アモジメチコン、トリメチルシリルアモジメチコン、ジフェニル-ジメチルポリシロキサンゴムなどが挙げられる。

【0112】

皮膚軟化剤は、(単独または組合せとして)存在する場合、石けん組成物の総重量に対して、一態様では約1重量%~約15重量%、別の態様では約2重量%~約10重量%、さらなる態様では約3重量%~約5重量%の範囲に及ぶ。

コンディション調整剤

【0113】

開示する技術の熱活性化型毛髪直毛化組成物は、適切な毛髪コンディション調整剤も含んでよい。毛髪コンディション調整剤の選択は、活性毛髪直毛化構成材料の効力の妨げになることなく、まっすぐになった毛髪に対して実質的なコンディション調整効果を生じうるその能力によってのみ絞られる。典型的なコンディション調整剤としては、限定はしないが、シリコーンおよびシリコーン誘導体、カチオン性化合物およびポリマー、炭化水素油、天然油、天然および合成ろう、エステル油、ならびにこれらの組合せが挙げられる。

1. シリコーンおよびシリコーン誘導体

【0114】

シリコーンコンディション調整剤は、揮発性シリコーン、不揮発性シリコーン、およびこれらの混合物を含む場合がある。揮発性シリコーンは、存在する場合、通常は、油、ゴム、樹脂など、商業的に入手可能な形態の不揮発性シリコーン流体コンディション調整剤の溶媒または担体として用いられる。揮発性シリコーン流体は、シリコーン流体付着効力を向上させ、または毛髪の輝き、艶、もしくは光沢を増強するために、コンディション調整パッケージに含められることが多い。揮発性シリコーン材料は、毛髪および頭皮に対する官能特性(たとえば、感触)を向上させるために、配合物に含められることが多い。

【0115】

一態様では、シリコーンコンディション調整剤は、不揮発性であり、シリコーン油、ゴム、樹脂、およびこれらの混合物がそれに含まれる。不揮発性とは、シリコーンが、周囲温度条件で非常に低い蒸気圧(たとえば、20で2mmHg未満)を有することを意味する。不揮発性シリコーンコンディション調整剤は、沸点が、一態様では約250より高く、別の態様では約260より高く、さらなる態様では約275より高い。シリコーン油、ゴム、および樹脂、ならびにその製造について論じる節を含む、シリコーンについての背景情報は、Encyclopedia of Polymer Science and Engineering、15巻、第2版、204~308頁、John Wiley & Sons, Inc.(1989年)において見出される。

A. シリコーン油

【0116】

一態様では、シリコーンコンディション調整剤は、ポリオルガノシロキサン材料から選択されるシリコーン油である。一態様では、ポリオルガノシロキサン材料は、ポリアルキルシロキサン、ポリアリールシロキサン、ポリアルキルアリールシロキサン、ヒドロキシリ末端ポリアルキルシロキサン、ポリアリールアルキルシロキサン、アミノ官能性ポリアルキルシロキサン、第四級官能性ポリアルキルシロキサン、およびこれらの混合物から選択することができる。

【0117】

一態様では、シリコーン油コンディション調整剤として、式:

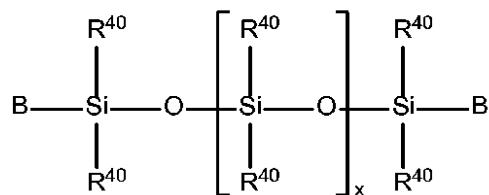
10

20

30

40

【化15】



によって表されるポリオルガノシロキサンが挙げられる。

式中、Bは、独立に、ヒドロキシ、メチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、およびフェノキシを表し、R⁴⁰は、独立に、メチル、エチル、プロピル、フェニル、メチルフェニル、フェニルメチル、第一級、第二級、または第三級アミン、

- R⁴¹ - N (R⁴²)₂ CH₂ CH₂ N (R⁴²)₂、
- R⁴¹ - N (R⁴²)₂、
- R⁴¹ - N⁺ (R⁴²)₃ CA⁻、および
- R⁴¹ - N (R⁴²)₂ CH₂ CH₂ N⁺ (R⁴²) H₂ CA⁻

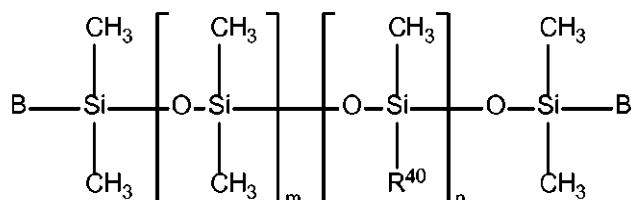
から選択される第四級基を表し、

R⁴¹は、2～10個の炭素原子を含む直鎖または分岐状のヒドロキシル置換または非置換アルキレンまたはアルキレンエーテル部分であり、R⁴²は、水素、C₁～C₂₀アルキル（たとえば、メチル）、フェニル、またはベンジルであり、qは、約2～約8の範囲の整数であり、CA⁻は、塩素、臭素、ヨウ素、およびフッ素から選択されるハロゲン化物イオンであり、xは、一態様では約7～約8000、別の態様では約50～約5000、さらに別の態様では約100～約3000、さらなる態様では約200～約1000の範囲の整数である。

【0118】

一態様では、アミノ官能性ポリアルキルシロキサンは、式：

【化16】



によって表すことができる。

式中、Bは、独立に、ヒドロキシ、メチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、およびフェノキシを表し、R⁴⁰は、

- R⁴¹ - N (R⁴²)₂ CH₂ CH₂ N (R⁴²)₂、
- R⁴¹ - N (R⁴²)₂、
- R⁴¹ - N⁺ (R⁴²)₃ CA⁻、および
- R⁴¹ - N (R⁴²)₂ CH₂ CH₂ N⁺ (R⁴²) H₂ CA⁻

から選択され、

R⁴¹は、2～10個の炭素原子を含む直鎖または分岐状のヒドロキシル置換または非置換アルキレンまたはアルキレンエーテル部分であり、R⁴²は、水素、C₁～C₂₀アルキル（たとえば、メチル）、フェニル、またはベンジルであり、CA⁻は、塩素、臭素、ヨウ素、およびフッ素から選択されるハロゲン化物イオンであり、m+nの合計は、mまたはnが0でないという条件付きで、一態様では約7～約1000、別の態様では約50～約250、別の態様では約100～約200の範囲である。一態様では、Bは、ヒドロキシであり、R⁴⁰は、-(CH₂)₃NH(CH₂)₃NH₂である。別の態様では、Bは、メチルであり、R⁴⁰は、-(CH₂)₃NH(CH₂)₃NH₂である。さらに

10

20

30

40

50

別の態様では、Bは、メチルであり、R⁴⁻⁰は、-(CH₂)₃OCH₂CH(OH)CH₂N⁺(R⁴⁻²)₃CA⁻ [式中、R⁴⁻²およびCA⁻は、前に規定したとおりである]によって表される第四級アンモニウム部分である。

【0119】

シリコーン油コンディション調整剤は、粘度が、一態様では25で約25超～約1,000,000mPa·s、別の態様では約100～約600,000mPa·s、さらに別の態様では約1000～約100,000mPa·s、さらに別の態様では約2,000～約50,000mPa·s、さらなる態様では約4,000～約40,000mPa·sの範囲でよい。粘度は、1970年7月20日付けのDow Corning Corporate Test Method CTM004に記載のとおりに、ガラス毛細管粘度計によって測定する。一態様では、シリコーン油は、平均分子量が約200,000ダルトン未満である。平均分子量は、通常、一態様では約400～約199,000ダルトン、別の態様では約500～約150,000ダルトン、さらに別の態様では約1,000～約100,000ダルトン、さらなる態様では約5,000～約65,000ダルトンの範囲でよい。

10

【0120】

典型的なシリコーン油コンディション調整剤としては、限定はしないが、ポリジメチルシロキサン(ジメチコン)、ポリジエチルシロキサン、末端ヒドロキシル基を有するポリジメチルシロキサン(ジメチコノール)、ポリメチルフェニルシロキサン、フェニルメチルシロキサン、アミノ官能性ポリジメチルシロキサン(アモジメチコン)、およびこれらの混合物が挙げられる。

20

B.シリコーンゴム

【0121】

開示する技術において有用な別のシリコーンコンディション調整剤は、シリコーンゴムである。シリコーンゴムは、Bが、独立に、ヒドロキシ、メチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、およびフェノキシを表し、R⁴⁻⁰が、独立に、メチル、エチル、プロピル、フェニル、メチルフェニル、フェニルメチル、およびビニルを表す、上で示したシリコーン油と同じ一般構造のポリオルガノシロキサン材料である。シリコーンゴムは、25で測定した粘度が、1,000,000mPa·sより大きい。粘度は、シリコーン油について上述したように、ガラス毛細管粘度計によって測定することができる。一態様では、シリコーンゴムは、平均分子量が約200,000ダルトンおよびそれ超である。分子量は通常、約200,000～約1,000,000ダルトンの範囲でよい。本明細書に記載のシリコーンゴムは、予め記載しているシリコーン油と一部共通するところがあつてもよいと認識される。その共通事項は、これら材料のいずれかに限定を課すものではない。

30

【0122】

開示する技術の組成物のシリコーン構成材料への使用に適するシリコーンゴムは、ヒドロキシルなどの末端基(ジメチコノール)を必要に応じて有する、ポリジメチルシロキサン(ジメチコン)、ポリメチルビニルシロキサン、ポリジフェニルシロキサン、およびこれらの混合物である。

30

C.シリコーン樹脂

【0123】

開示する技術の組成物への使用に適するシリコーンコンディション調整剤として、シリコーン樹脂を挙げることができる。こうした樹脂は、架橋ポリシロキサンである。架橋は、シリコーン樹脂を製造する際に、三官能性および四官能性シランを単官能性および/または二官能性シランと合体させることで導入される。当技術分野で十分に理解されているとおり、結果としてシリコーン樹脂になるのに必要となる架橋の程度は、シリコーン樹脂に組み込まれる特有のシラン単位によって様々となる。一般に、剛直または硬質な被膜を形成するだけの十分なレベル(すなわち、架橋の十分なレベル)の三官能性および四官能性シロキサンモノマー単位を有するシリコーン材料が、シリコーン樹脂とみなされる。酸素原子のケイ素原子に対する比は、特定のシリコーン材料における架橋のレベルを示すものである。ケイ素原子1個あたり少なくとも約1.1個の酸素原子を有するシリコーン材

40

50

料は、本明細書では一般にシリコーン樹脂となる。一態様では、酸素：ケイ素原子の比は、少なくとも約1.2:1.0である。シリコーン樹脂の製造において使用されるシランとしては、モノメチル-、ジメチル-、トリメチル-、モノフェニル-、ジフェニル-、メチルフェニル-、モノビニル-、およびメチルビニル-クロロシラン、ならびにテトラクロロシラン(terachlorosilane)が挙げられ、メチル置換されたシランが最もよく利用される。

【0124】

シリコーン材料およびシリコーン樹脂は、当業者に「MDTQ」命名法として公知である略記命名方式に従って識別することができる。この命名方式のもと、シリコーンは、シリコーンを構成する種々のシロキサンモノマー単位の存在に従って書き表される。「MDTQ」命名法は、「Silicones:Preparation, Properties and Performance」と題された刊行物、Dow Corning Corporation、2005年、および米国特許第6,200,554号に記載されている。10

【0125】

開示する技術の組成物中に使用する典型的なシリコーン樹脂としては、限定はしないが、MQ、MT、MTQ、MDT、およびMDTQ樹脂が挙げられる。一態様では、メチルが、シリコーン樹脂置換基である。別の態様では、シリコーン樹脂は、M:Q比が約0.5:1.0～約1.5:1.0であり、シリコーン樹脂の平均分子量が約1000～約10,000ダルトンである、MQ樹脂から選択される。20

D. 振発性シリコーン

【0126】

上で言及した任意選択の揮発性シリコーンとしては、直鎖状ポリジメチルシロキサンおよび環状ポリジメチルシロキサン(シクロメチコン)、ならびにこれらの混合物が挙げられる。揮発性直鎖状ポリジメチルシロキサン(ジメチコン)は、通常、直線的配置において、約2～約9個のケイ素原子を、酸素原子と交互に含む。各ケイ素原子は、たとえばメチル基などの、2つのアルキル基でも置換されている(末端ケイ素原子は、3つのアルキル基で置換されている)。シクロメチコンは、通常、環状の環構造において、一態様では約3～約7個、別の態様では約3～約5個のジメチル置換されたケイ素原子を、酸素原子と交互に含む。用語「揮発性」とは、シリコーンが、測定可能な蒸気圧、または20で少なくとも2mmHgの蒸気圧を有することを意味する。揮発性シリコーンは、25での粘度が、一態様では25mPa・sまたはそれ未満、別の態様では約0.65～約1.0mPa・s、さらに別の態様では約1～約5mPa・s、さらなる態様では約1.5～約3.5mPa・sである。直鎖状および環状の揮発性シリコーンについての記述は、ToddおよびByers、「Volatile Silicone Fluids for Cosmetics」、Cosmetics and Toiletries、91巻(1号)、27～32頁(1976年)、およびKasprzak、「Volatile Silicones」、Soap/Cosmetics/Chemical Specialities、40～43頁(1986年12月)において見出される。30

【0127】

典型的な揮発性直鎖状ジメチコンとしては、限定はしないが、ヘキサメチルジシロキサン、オクタメチルトリシロキサン、デカメチルテトラシロキサン、ドデカメチルペンタシロキサン、およびこれらのブレンド品が挙げられる。揮発性直鎖状ジメチコンおよびジメチコンブレンド品は、Dow Corning Corporationから、Dow Corning 200(登録商標)Fluid(たとえば、製品呼称0.65CST、1CST、1.5CST、および2CST)およびDow Corning(登録商標)2-1184 Fluidとして市販されている。40

【0128】

典型的な揮発性シクロメチコンは、D4シクロメチコン(オクタメチルシクロテトラシロキサン)、D5シクロメチコン(デカメチルシクロペンタシロキサン)、D6シクロメチコン、およびこれらのブレンド品(たとえば、D4/D5およびD5/D6)である。揮発性シクロメチコンおよびシクロメチコンブレンド品は、Momentive Per50

formance Materials Inc. から、SF1173、SF1202、SF1256、およびSF1258シリコーン流体として、またDow Corning Corporationから、Dow Corning (登録商標) 244、245、246、345、および1401シリコーン流体として市販されている。揮発性シクロメチコンと揮発性直鎖状ジメチコンのブレンド品も、用いることができる。

【0129】

当技術の組成物中のシリコーンコンディショナーの量は、毛髪に所望のコンディション調整性能を提供するのに十分にすべきであり、一般に、組成物の総重量に対して、一態様では約0.01～約20重量%、別の態様では約0.05～約15重量%、さらに別の態様では約0.1%～約10重量%、さらなる態様では約1～約5重量%の範囲である。

10

2. カチオン性化合物およびポリマー

【0130】

カチオン性化合物とは、少なくとも1つのカチオン性部分、またはイオン化してカチオン性部分をなしうる少なくとも1つの部分を含む、非高分子化合物および高分子化合物を指す。通常、こうしたカチオン性部分は、第四級アンモニウムやプロトン付加されたアミノ基などの、含窒素基である。プロトン付加されたカチオン性アミンは、第一級、第二級、または第三級アミンの場合がある。一態様では、カチオン性コンディション調整化合物として、毛髪コンディション調整について当技術分野で周知されている、第四級窒素を含んだ非高分子および高分子材料が挙げられる。カチオン性コンディション調整化合物として、第四級アンモニウム塩部分を1つ含む非高分子化合物、および第四級アンモニウム塩部分を少なくとも1つ含む高分子化合物（ポリマー）も挙げられる。

20

【0131】

一態様では、第四級アンモニウム塩部分は、一般式： $(R^{50})(R^{51})(R^{52})(R^{53})N^+ E^-$ に相当し、ここで、 R^{50} 、 R^{51} 、 R^{54} 、および R^{55} はそれぞれ、1～約22個の炭素原子を有する脂肪族基（たとえば、アルキル、アルケニル）；芳香族（たとえば、フェニル ベンジル）；アルコキシ；ポリオキシアルキレン（たとえば、ポリエチレン、ポリプロピレン、およびこれらの組合せ）；アセトアミド；アルキルアミド；アルキルアミドアルキル；ヒドロキシアルキル；アリール；アラルキル(araalkyl)；またはアルキル鎖中に1～約22個の炭素原子を有するアルキルアリール基から独立に選択され、 E^- は、ハロゲン（たとえば、塩化物、臭化物）、酢酸、クエン酸、乳酸、グリコール酸、リン酸、硝酸、硫酸、およびアルキル硫酸（たとえば、メト硫酸、エト硫酸）から選択されるものなどの塩形成性アニオンである。脂肪族基は、炭素および水素原子に加えて、エーテル結合、エステル結合、およびアミノ基などの他の基を含んでいてよい。比較的長鎖の脂肪族基、たとえば、約12炭素またはより高級である基は、飽和でも不飽和でもよい。 R^{50} 、 R^{51} 、 R^{54} 、および R^{55} のいずれか2つと、これらが結合している窒素原子とが、一緒になって、5～6個の炭素原子を含む環構造を形成してもよく、前記炭素原子の1つは、窒素、酸素、または硫黄から選択されるヘテロ原子によって必要に応じて置き換えられていてよい。

30

【0132】

一態様では、第四級アンモニウム部分は、少なくとも3つのアルキルおよび/またはアリール置換基に共有結合連結した少なくとも1個の窒素原子を含み、窒素原子は、環境のpHにかかわりなく正電荷を有したままである。

40

【0133】

一態様では、第四級アンモニウム部分は、1個の窒素原子と、少なくとも1つの $C_{1,2}$ ～ $C_{2,2}$ アルキル基とを含む。一態様では、第四級アンモニウム部分は、1つの $C_{1,2}$ ～ $C_{2,2}$ アルキル基と、少なくとも2つの $C_{1,2}$ ～ $C_{5,5}$ アルキル基（たとえば、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、およびこれらの組合せ）とを含む。一態様では、第四級アンモニウム部分は、1つの $C_{1,2}$ ～ $C_{2,2}$ アルキル基と、3つの $C_{1,2}$ ～ $C_{5,5}$ アルキル基（たとえば、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、およびこれらの組合せ）とを含む。一態様では、第四級アンモニウム部分は、1つの $C_{1,2}$ ～ $C_{2,2}$ アルキル基と

50

、2つのC₁～C₅アルキル基（たとえば、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、およびこれらの組合せ）と、アルコキシ、ポリオキシアルキレン（たとえば、ポリエチレン、ポリプロピレン、およびこれらの組合せ）[ポリオキシアルキレン部分は、3～100の繰り返し単位を含む]、アセトアミド、アルキルアミド、アルキルアミドアルキル、ヒドロキシアルキル、アリール、アラルキル、またはアルキル鎖中に1～約22個の炭素原子を有し、アリール部分中に6～約14個の炭素原子を有するアルキルアリール基を含んだ、1つの部分とを含む。

【0134】

第四級窒素を含んだいくつかの化合物およびポリマー、その製造、ならびにその化学的特徴の概要是、CTFA Dictionary、ならびにInternational Cosmetic Ingredient Dictionary、1巻および2巻、第5版、Cosmetic Toiletry and Fragrance Association, Inc.(CTFA)刊(1993年)において見出され、該当する開示は、参照により本明細書に援用される。便宜上、CTFAまたは製造者が成分に割り当てた名称を使用する。

10

【0135】

当技術においてカチオン性コンディショナーとして有用な单量体第四級アンモニウム化合物の非限定的な例としては、アセトアミドプロピルトリモニウムクロリド、ベヘナミドプロピルエチルジモニウムエトサルフェート、塩化ベヘントリモニウム、メト硫酸ベヘントリモニウム、エト硫酸セチルモルホリニウム、塩化セトリモニウム、ココアミドプロピルエチルジモニウムエトサルフェート、塩化ジセチルジモニウム、ヒドロキシエチルベヘナミドプロピルジモニウムクロリド、クアテルニウム26、クアテルニウム27、クアテルニウム53、クアテルニウム63、クアテルニウム70、クアテルニウム72、クアテルニウム76 PPG-9ジエチルモニウムクロリド、PPG-25ジエチルモニウムクロリド、PPG-40ステアラルコニウムクロリド、イソステアラミドプロピルエチルジモニウムエトサルフェート、およびこれらの混合物が挙げられる。

20

【0136】

カチオン性ポリマーも、単独で、または本明細書に記載の他のコンディション調整剤と組み合わせて、コンディション調整剤として有用である。適切なカチオン性ポリマーは、合成によって得ることができ、またはカチオン性部分を含むように天然ポリマーを合成によって変性させることもできる。高分子第四級アンモニウム部分塩を含んだポリマーは、アルキル基が、一態様では1～約22個の炭素原子を含み、別の態様ではメチルまたはエチルである、ジアルキルジアリルアンモニウム塩またはそのコポリマーなどのジアリルアミンを重合させて調製することができる。ジアルキルジアリルアンモニウム塩から導かれた第四級部分と、アクリル酸およびメタクリル酸のアニオンモノマーから導かれたアニオン性構成材料とを含んだコポリマーは、適切なコンディション調整剤である。また、ジメチルジアリルアンモニウム塩などのジアリルアミンの誘導体から調製されたカチオン性構成材料と、アクリル酸または2-アクリルアミド-2-メチルプロパンスルホン酸のアニオンモノマーから導かれたアニオン性構成材料と、アクリルアミドの非イオンモノマーから導かれた非イオン性構成材料とを有する、高分子両性電解質ターポリマーも適する。このような第四級アンモニウム塩部分を含んだポリマーの調製については、たとえば、米国特許第3,288,770号、第3,412,019号、第4,772,462号、および第5,275,809号において見ることができ、該当する開示は、参照により本明細書に援用される。

30

【0137】

一態様では、適切なポリマーとして、アルキル基がメチルまたはエチルである、前述の四級化されたホモポリマーおよびコポリマーの塩化物塩が挙げられ、Lubrizol Advanced Materials, Inc.から、Merquat(登録商標)シリーズの商標で商業的に入手可能である。

40

【0138】

ポリカテルニウム6というCTFA名を有する、ジアリルジメチルアンモニウムクロリド(DADMAC)から調製されたホモポリマーは、Merquat100およびMe

50

rq uat 106 の商標で入手可能である。ポリクアテルニウム 7 という C T F A 名を有する、D A D M A C とアクリルアミドから調製されたコポリマーは、Mer quat 550 の商標で販売されている。ポリクアテルニウム 22 という C T F A 名を有する、D A D M A C とアクリル酸から調製された別のコポリマーは、Mer quat 280 の商標で販売されている。ポリクアテルニウム 22 およびその関連ポリマーの調製については、米国特許第 4,772,462 号に記載されており、該当する開示は、参照により本明細書に援用される。

【 0139 】

アクリルアミドまたはアクリル酸メチルから導かれる非イオン性構成材料と、D A D M A C またはメタクリルアミドプロピルトリメチルアンモニウムクロリド (M A P T A C) から導かれるカチオン性構成要素と、アクリル酸もしくは 2 - アクリルアミド - 2 - メチルプロパンスルホン酸またはアクリル酸と 2 - アクリルアミド - 2 - メチルプロパンスルホン酸の組合せから導かれるアニオン性構成要素とから調製された両性ターポリマーも有用である。ポリクアテルニウム 39 という C T F A 名を有する、アクリル酸、D A D M A C 、およびアクリルアミドから調製された両性ターポリマーは、Mer quat Plus 3330 の商標で入手可能である。ポリクアテルニウム 47 という C T F A 名を有する、アクリル酸、メタクリルアミドプロピルトリメチルアンモニウムクロリド (M A P T A C) 、およびアクリル酸メチルから調製された別の両性ターポリマーは、Mer quat 2001 の商標で入手可能である。ポリクアテルニウム 53 という C T F A 名を有する、アクリル酸、M A P T A C 、およびアクリルアミドから調製されたさらに別の両性ターポリマーは、Mer quat 2003 PR の商標で入手可能である。このようなターポリマーの調製については、米国特許第 5,275,809 号に記載されており、その関連する開示は、参照により本明細書に援用される。

【 0140 】

開示する技術の毛髪直毛化組成物中のコンディショナーとして適する他のカチオン性ポリマーおよびコポリマーは、ポリクアテルニウム 4 、ポリクアテルニウム 11 、ポリクアテルニウム 16 、ポリクアテルニウム 28 、ポリクアテルニウム 29 、ポリクアテルニウム 32 、ポリクアテルニウム 33 、ポリクアテルニウム 35 、ポリクアテルニウム 37 、ポリクアテルニウム 44 、ポリクアテルニウム 46 、ポリクアテルニウム 47 、ポリクアテルニウム 52 、ポリクアテルニウム 53 、ポリクアテルニウム 55 、ポリクアテルニウム 59 、ポリクアテルニウム 61 、ポリクアテルニウム 64 、ポリクアテルニウム 65 、ポリクアテルニウム 67 、ポリクアテルニウム 69 、ポリクアテルニウム 70 、ポリクアテルニウム 71 、ポリクアテルニウム 72 、ポリクアテルニウム 73 、ポリクアテルニウム 74 、ポリクアテルニウム 76 、ポリクアテルニウム 77 、ポリクアテルニウム 78 、ポリクアテルニウム 79 、ポリクアテルニウム 80 、ポリクアテルニウム 81 、ポリクアテルニウム 82 、ポリクアテルニウム 84 、ポリクアテルニウム 85 、ポリクアテルニウム 87 、および P E G - 2 - ココモニウムクロリド という C T F A 名を有する。

【 0141 】

毛髪直毛化組成物への使用に適する典型的なカチオン変性天然ポリマーとしては、ハロゲン化第四級アンモニウム部分で変性させた、カチオン変性セルロースやカチオン変性デンプン誘導体などの、多糖ポリマーが挙げられる。典型的なカチオン変性セルロースポリマーは、トリメチルアンモニウム置換されたエポキシドと反応させたヒドロキシエチルセルロースの塩 (C T F A 、ポリクアテルニウム 10) である。他の適切なタイプのカチオン変性セルロースとしては、ラウリルジメチルアンモニウム置換されたエポキシドと反応させたヒドロキシエチルセルロースの高分子第四級アンモニウム塩 (C T F A 、ポリクアテルニウム 24) が挙げられる。デンプンヒドロキシプロピルトリモニウムクロリドという C T F A 名を有するカチオン変性ジャガイモデンプンは、L u b r i z o l A d v a n c e d M a t e r i a l s , I n c . から、S e n s o m e r (商標) C I - 50 の商標で入手可能である。

【 0142 】

10

20

30

40

50

他の適切なカチオン変性天然ポリマーとしては、グアーガム誘導体やカッシアゴム誘導体などのカチオン性ポリガラクトマンナン誘導体、たとえば、C T F A : グアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、ヒドロキシプロピルグアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、およびカッシアヒドロキシプロピルトリモニウムクロリドが挙げられる。グアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリドは、Rhodia Inc. からJaguar (商標) という商品名のシリーズとして、Ashland Inc. からN-Hanceの商品名のシリーズとして、商業的に入手可能である。カッシアヒドロキシプロピルトリモニウムクロリドは、Lubrizol Advanced Materials, Inc. から、Sensomer (商標) CT-250 およびSensomer (商標) CT-400 の商標で、商業的に入手可能である。

10

【0143】

非高分子および高分子のカチオン性化合物は、一態様では（組成物の総重量に対して）約0.05重量%～約5重量%、別の態様では約0.1重量%～約3重量%、さらなる態様では約0.5重量%～約2.0重量%存在してよい。

3. 炭化水素油

【0144】

開示する技術の毛髪直毛化組成物のコンディション調整構成材料は、炭化水素油コンディショナーを含有してもよい。

【0145】

開示する技術の組成物へのコンディション調整剤としての使用に適するコンディション調整油としては、限定はしないが、少なくとも約10個の炭素原子を有する炭化水素油、たとえば、環状炭化水素、（飽和または不飽和の）直鎖脂肪族炭化水素、およびポリマーを含めた（飽和または不飽和の）分岐鎖脂肪族炭化水素、ならびにこれらの混合物が挙げられる。直鎖炭化水素油は、通常、約12～19個の炭素原子を含む。炭化水素ポリマーを含めた分岐鎖炭化水素油は、通常、19個を超える炭素原子を含むことになる。

20

【0146】

こうした炭化水素油の非限定的な詳細な例として、パラフィン油、鉱油、飽和および不飽和ドデカン、飽和および不飽和トリデカン、飽和および不飽和テトラデカン、飽和および不飽和ペントデカン、飽和および不飽和ヘキサデカン、ポリブテン、ポリデセン、ならびにこれらの混合物が挙げられる。こうした化合物の分岐鎖異性体、ならびにより高級な鎖長の炭化水素を使用してもよく、その例としては、飽和または不飽和の高度分岐アルカン、たとえば、ペルメチル置換異性体、たとえば、Permethyl Corporation から入手可能な2,2,4,4,6,6,8,8-ジメチル-10-メチルウンデカンや2,2,4,4,6,6-ジメチル-8-メチルノナンなどの、ヘキサデカンおよびエイコサンのペルメチル置換異性体、ポリブテンやポリデセンなどの炭化水素ポリマーが挙げられる。好ましい炭化水素ポリマーは、ポリブテン、たとえば、イソブチレンとブテンのコポリマーである。商業的に入手可能なこのタイプの材料は、B P Chemical Company のL-14ポリブテンである。

30

【0147】

液体ポリオレフィンコンディション調整油は、当技術の毛髪直毛化組成物中に使用することができる。液体ポリオレフィンコンディション調整剤は、通常、水素添加されているポリ- -オレフィンである。本明細書で使用するポリオレフィンは、C₄～約C₁₄オレフィンモノマーの重合によって調製することができる。本明細書における液体ポリオレフィンの調製において使用するオレフィンモノマーの非限定的な例としては、エチレン、プロピレン、1-ブテン、1-ペンテン、1-ヘキセン、1-オクテン、1-デセン、1-ドデセン、1-テトラデセン、4-メチル-1-ペンテンなどの分岐鎖異性体、およびこれらの混合物が挙げられる。開示する技術の一態様では、水素添加-オレフィンモノマーとして、限定はしないが、1-ヘキセンから1-ヘキサデセン、1-オクテンから1-テトラデセン、およびこれらの混合物が挙げられる。

40

【0148】

50

フッ素化または過フッ素化油も、当技術の範囲内に考えられる。フッ素化油としては、
欧洲特許 0 4 8 6 1 3 5 に記載のペルフルオロポリエーテルおよび WO 9 3 / 1 1 1 0 3
に記載のフッ化炭化水素化合物が挙げられる。フッ素化 (fluoridated) 油は、フルオロ
アミン、たとえば、ペルフルオロトリブチルアミンなどのフルオロカーボン、ペルフルオ
ロデカヒドロナフタレン、フルオロエステル、フルオロエーテルなどのフルオロ置換炭化
水素でもよい。

4. 天然油

【0149】

天然油コンディショナーも、開示する技術の実施において有用であり、限定はしないが
、ラッカセイ油、ゴマ油、アボカド油、ヤシ油、カカオ脂油、扁桃油、ベニバナ油、トウ
モロコシ油、綿実油、ゴマ油、クルミ油、ヒマシ油、オリーブ油、ホホバ油、パーム油、
パーム核油、大豆油、コムギ胚芽油、亜麻仁油、ヒマワリ種子油；ユーカリ油、ラベンダ
ー油、ベチバー油、アオモジ (litsea, cubeba) 油、レモン油、ビャクダン油、ローズ
マリー油、カモミール油、セイバリー油、ニクズク油、ケイヒ油、ヤナギハッカ油、カラ
ウェー油、オレンジ油、ゼラニウム油、カデ油、ベルガモット油、魚油、グリセロールト
リカプロカブリル酸エステル、およびこれらの混合物が挙げられる。天然油は、皮膚軟化
剤としても利用できる。

5. 天然および合成ろう

【0150】

天然および合成ろうコンディション調整剤を、開示する技術の毛髪直毛化組成物中に用
いることができ、限定はしないが、カルナウバろう、カンデリラろう、アルファろう、パ
ラフィンろう、オゾケライトろう、オリーブろう、米ろう、水素添加ホホバろう、蜜ろう
、改質蜜ろう、たとえば、セラベリナワックス (cerabellina wax) 、マリーンワックス
(marine wax) 、ポリオレフィンろう、たとえば、ポリエチレンろう、および
これらの混合物がこれに含まれる。

6. エステル油

【0151】

エステル油コンディショナーとしては、限定はしないが、少なくとも 10 個の炭素原子
を有する脂肪酸エステルが挙げられる。こうした脂肪酸エステルには、脂肪酸またはアル
コールから導かれるエステル (たとえば、モノエステル、多価アルコールエステル、ジ -
およびトリ - カルボン酸エステル) が含まれる。本明細書の脂肪酸エステルは、それに共
有結合した他の適合する官能基、たとえば、アミドおよびアルコキシ部分 (たとえば、エ
トキシまたはエーテル結合など) を含むまたは有することもある。

【0152】

典型的な脂肪酸エステルとしては、限定はしないが、イソステアリン酸イソプロピル、
ラウリン酸ヘキシル、ラウリン酸イソヘキシル、パルミチン酸イソヘキシル、パルミチン
酸イソプロピル、オレイン酸デシル、オレイン酸イソデシル、ステアリン酸ヘキサデシル
、ステアリン酸デシル、イソステアリン酸イソプロピル、アジピン酸ジヘキシルデシル、
乳酸ラウリル、乳酸ミリスチル、乳酸セチル、ステアリン酸オレイル、オレイン酸オレイ
ル、ミリスチン酸オレイル、酢酸ラウリル、プロピオン酸セチル、およびアジピン酸オレイ
ルが挙げられる。

【0153】

開示する技術の組成物への使用に適する他の脂肪酸エステルは、一般式 $R^{6-0}C(O)OR^{6-1}$ [式中、 R^{6-0} および R^{6-1} は、アルキルまたはアルケニルラジカルであり、 R^{6-0} および R^{6-1} にある炭素原子の合計は、開示する技術の一態様では少なくとも 10 個
、別の態様では少なくとも 22 個である] のモノカルボン酸エステルである。

【0154】

開示する技術の組成物への使用に適する、さらに他の脂肪酸エステルは、カルボン酸の
ジ - およびトリ - アルキルおよびアルケニルエステル、たとえば、 $C_4 \sim C_8$ ジカルボン
酸のエステル (たとえば、コハク酸、グルタル酸、アジピン酸の $C_1 \sim C_{2-2}$ 、好ましく

10

20

30

40

50

は C₁ ~ C₆ エステル) である。カルボン酸のジ - およびトリ - アルキルおよびアルケニルエステルの非限定的な詳細な例としては、ステアリン酸イソセチルステアロイル (stearyl) 、アジピン酸ジイソプロピル、およびクエン酸トリステアリルが挙げられる。

【 0 1 5 5 】

開示する技術の組成物への使用に適する他の脂肪酸エステルは、多価アルコールエステルとして公知のものである。そのような多価アルコールエステルとして、アルキレングリコールエステル、たとえば、エチレングリコール - および二脂肪酸エステル、ジエチレングリコール - および二脂肪酸エステル、ポリエチレングリコール - および二脂肪酸エステル、プロピレングリコール - および二脂肪酸エステル、ポリプロピレングリコールモノオレイン酸エステル、ポリプロピレングリコール 2000 モノステアリン酸エステル、エトキシ化プロピレングリコールモノステアリン酸エステル、グリセリル - および二脂肪酸エステル、ポリグリセロール多脂肪酸エステル、エトキシ化モノステアリン酸グリセリル、1, 3 - ブチレングリコールモノステアリン酸エステル、1, 3 - ブチレングリコールジステアリン酸エステル、ポリオキシエチレンポリオール脂肪酸エステル、ソルビタン脂肪酸エステル、およびポリオキシエチレンソルビタン脂肪酸エステルが挙げられる。

10

【 0 1 5 6 】

適切な合成脂肪酸エステルの非限定的な詳細な例としては、P - 43 (トリメチロールプロパンの C₈ ~ C₁₀ トリエステル) 、M C P - 684 (3, 3 ジエタノール - 1, 5 ペンタジオールのテトラエステル) 、M C P 121 (アジピン酸の C₈ ~ C₁₀ ジエステル) が挙げられ、これらはすべて、ExxonMobil Chemical Company から入手可能である。

20

【 0 1 5 7 】

炭化水素および天然コンディション調整油、天然および合成のろう、ならびにエステル油コンディション調整剤の量は、一態様では (組成物の総重量に対して) 約 0.05 ~ 約 1.0 重量 % 、別の態様では約 0.5 ~ 約 5 重量 % 、さらなる態様では約 1 ~ 約 3 重量 % の範囲であった。

レオロジー改質剤

【 0 1 5 8 】

毛髪線維によく付着する組成物を提供するために、組成物に、組成物の全体としての粘度を増大させるレオロジー改質剤を含めることができる。組成物の粘度は、毛髪に適用したとき、少なくとも 400 cPs 、または少なくとも 1000 cPs 、または少なくとも 2000 cPs 、または少なくとも 3000 cPs とすることができます、10,000 cPs までとすることができます。

30

【 0 1 5 9 】

粘度を増大させるために、組成物は、合成でも天然でもよい、1種または複数のレオロジー改質剤を含んでよい。

【 0 1 6 0 】

例としては、C₁₀ ~ C₃₂ アルコール、たとえば、C₁₂ ~ C₂₂ アルコールなど、脂肪アルコール、天然油、ならびアクリル酸および / またはメタクリル酸のポリマー、たとえば、カルボマーが挙げられる。典型的な天然油としては、流動パラフィンとして販売されることもある、鉱油 (主として直鎖および分岐状 C₁₅ ~ C₄₀ 脂肪族アルカン、少量のシクロアルカンを含む) が挙げられる。

40

【 0 1 6 1 】

典型的な合成レオロジー改質剤としては、アクリル系ポリマーおよびコポリマーが挙げられる。アクリル系レオロジー改質剤の一部類は、単独または他のエチレン不飽和モノマーと組み合わされたアクリル酸のフリーラジカル重合によって生成された、カルボキシル官能性アルカリ膨潤性およびアルカリ可溶性増粘剤 (AST) である。このポリマーは、溶媒 / 沈殿ならびに乳化重合技術によって合成することができる。この部類の典型的な合成レオロジー改質剤としては、アクリル酸またはメタクリル酸のホモポリマー、ならびにアクリル酸、置換アクリル酸、アクリル酸および置換アクリル酸の塩および C₁ ~ C₃₀

50

アルキルエステルのうちの 1 種または複数のモノマーから重合されたコポリマーが挙げられる。本明細書で定義するとき、置換アクリル酸は、分子のアルファおよび / またはベータ炭素原子上に位置する置換基を含み、一態様では、置換基は、C₁ ~ C₄ アルキル、-C≡N、および -COOH から独立に選択される。必要に応じて、たとえば、スチレン、酢酸ビニル、エチレン、ブタジエン、アクリロニトリル、ならびにこれらの混合物などの、他のエチレン不飽和モノマーを主鎖に共重合させてもよい。前述のポリマーは、エチレン不飽和を含んだ 2 つまたはそれ超の部分を含むモノマーによって必要に応じて架橋されている。一態様では、架橋剤は、1 分子あたり少なくとも 2 つのアルケニルエーテル基を含む、多価アルコールのポリアルケニルポリエーテルから選択される。典型的な他の架橋剤は、スクロースのアリルエーテル、ペンタエリトリトールのアリルエーテル、およびこれらの混合物から選択される。こうしたポリマーは、米国特許第 5,087,445 号、米国特許第 4,509,949 号、および米国特許第 2,798,053 号により十分に記載されている。

10

【0162】

一態様では、AST レオロジー改質剤または増粘剤は、アクリル酸またはメタクリル酸から重合された架橋ホモポリマーであり、一般に、カルボマーという INCI 名で呼ばれる。商業的に入手可能なカルボマーとしては、Lubrizol Advanced Materials, Inc. から入手可能な Carbopol (登録商標) ポリマー 934、940、941、956、980、および 996 が挙げられる。さらなる態様では、レオロジー改質剤は、アクリル酸、置換アクリル酸、アクリル酸の塩、および置換アクリル酸の塩のうちの 1 種または複数のモノマーから選択される第 1 のモノマーと、1 種または複数のアクリル酸またはメタクリル酸 C₁ ~ C₃ アルキルアクリル酸エステルから選択される第 2 のモノマーとから重合された、架橋コポリマーから選択される。一態様では、モノマーは、参照により本明細書に援用される米国特許第 5,288,814 号に開示のものなどの立体安定剤の存在下で重合させることができる。前述のポリマーの一部は、INCI 命名法で、アクリレーツ / C₁₀ ~ C₃₀ アクリル酸アルキルクロスポリマーと呼ばれ、Lubrizol Advanced Materials, Inc. から、Carbopol (登録商標) 1342 および 1382、Carbopol (登録商標) Ultrez 20 および 21、Carbopol (登録商標) ETD 2020、Pemulen (登録商標) TR-1 および TR-2 の商品名で商業的に入手可能である。

20

【0163】

別の態様では、補助レオロジー改質剤は、米国特許第 7,205,271 号に開示のとおりの架橋された直鎖状ポリ(ビニルアミド / アクリル酸)コポリマーでよく、この開示は、参照により本明細書に援用される。

30

【0164】

組成物への使用に適する別の部類の合成レオロジー改質剤としては、一般に、疎水変性アルカリ膨潤性およびアルカリ可溶性エマルション (HASE) ポリマーと呼ばれる、疎水変性 AST が挙げられる。典型的な HASE ポリマーは、pH 感応性または親水性モノマー (たとえば、アクリル酸および / またはメタクリル酸) と、疎水性モノマー (たとえば、アクリル酸および / またはメタクリル酸の C₁ ~ C₃ アルキルエステル、アクリロニトリル、スチレン) と、「会合性モノマー」と、任意選択の架橋性モノマーとから重合されたラジカル付加ポリマーである。会合性モノマーは、エチレン不飽和のある重合性末端基、疎水性末端基を終端とする非イオン性の親水性中間部を含む。非イオン性の親水性中間部は、ポリオキシアルキレン基、たとえば、ポリエチレンオキシド、ポリプロピレンオキシド、またはポリエチレンオキシド / ポリプロピレンオキシド区分の混合物を含む。終端の疎水性末端基は通常、C₈ ~ C₄₀ 脂肪族部分である。典型的な脂肪族部分は、直鎖および分岐状アルキル置換基、直鎖および分岐状アルケニル置換基、炭素環置換基、アリール置換基、アラルキル置換基、アリールアルキル置換基、およびアルキルアリール置換基から選択される。一態様では、会合性モノマーは、ポリエトキシ化および / またはポリプロポキシ化脂肪族アルコール (通常、分岐または非分岐 C₈ ~ C₄₀ 脂肪族部分を含

40

50

む)を、カルボン酸基を含んだエチレン不飽和モノマー(たとえば、アクリル酸、メタクリル酸)、不飽和環状無水物モノマー(たとえば、無水マレイン酸、無水イタコン酸、無水シトラコン酸)、モノエチレン不飽和モノイソシアネート(たとえば、 $\text{--}\text{--}\text{ジメチル-}m\text{-イソプロペニルベンジルイソシアネート}$)、またはヒドロキシル基を含んだエチレン不飽和モノマー(たとえば、ビニルアルコール、アリルアルコール)と縮合させること(たとえば、エステル化またはエーテル化)により調製できる。ポリエトキシ化および/またはポリプロポキシ化脂肪族アルコールは、C₈～C₄₀脂肪族部分を含むモノアルコールのエチレンオキシドおよび/またはプロピレンオキシド付加物である。C₈～C₄₀脂肪族部分を含むアルコールの非限定的な例は、カプリルアルコール、iso-オクチルアルコール(2-エチルヘキサノール)、ペラルゴンアルコール(1-ノナノール)、デシルアルコール、ラウリルアルコール、ミリスチルアルコール、セチルアルコール、セテアリルアルコール(C₁₆～C₁₈モノアルコールの混合物)、ステアリルアルコール、イソステアリルアルコール、エライジルアルコール、オレイルアルコール、アラキジルアルコール、ベヘニルアルコール、リグノセリルアルコール、セリルアルコール、モンタニルアルコール、メリシル、ラセリルアルコール、ゲジルアルコール、およびC₂～C₂₀アルキル置換フェノール(たとえば、ノニルフェノール)などである。

【0165】

典型的なHASEポリマーは、米国特許第3,657,175号、第4,384,096号、第4,464,524号、第4,801,671号、および第5,292,843号で開示されている。加えて、HASEポリマーについての幅広い論評が、Gregory D.

Shay、25章、「Alkali-Swellable and Alkali-Soluble Thickener Technology A Review」、Polymers in Aqueous Media - Performance Through Association、Advances in Chemistry Series 223、J. Edward Glass(編)、ACS、457～494頁、Division Polymeric Materials、Washington, DC(1989年)において見出され、その関連する開示は、参照により本明細書に援用される。商業的に入手可能なHASEポリマーは、Rohm&Haasから、Aculyn(登録商標)22(INCI名:アクリレーツ/ステアレス-20メタクリレートコポリマー)、Aculyn(登録商標)44(INCI名:PEG-150/デシルアルコール/SMDIコポリマー)、Aculyn46(登録商標)(INCI名:PEG-150/ステアリルアルコール/SMDIコポリマー)、およびAculyn(登録商標)88(INCI名:アクリレーツ/ステアレス-20メタクリレートクロスポリマー)の商品名で、Lubrizol Advanced Materials, Inc.から、Novethix(商標)L-10(INCI名:アクリレーツ/ベヘネス-25メタクリレートコポリマー)の商品名で販売されている。

【0166】

別の実施形態では、酸膨潤性会合性ポリマーを、開示する技術の疎水変性カチオン性ポリマーと一緒に使用することができる。このようなポリマーは、一般に、カチオン性および会合性の特徴を有する。こうしたポリマーは、酸感応性アミノ置換親水性モノマー(たとえば、ジアルキルアミノアルキル(メタ)アクリレートまたは(メタ)アクリルアミド)、会合性モノマー(上で定義している)と、低級アルキル(メタ)アクリレート、または(メタ)アクリル酸のヒドロキシアルキルエステル、ポリエチレングリコールのビニルおよび/またはアリルエーテル、ポリプロピレングリコールのビニルおよび/またはアリルエーテル、ポリエチレングリコール/ポリプロピレングリコールのビニルおよび/またはアリルエーテル、(メタ)アクリル酸のポリエチレングリコールエステル、(メタ)アクリル酸のポリプロピレングリコールエステル、(メタ)アクリル酸のポリエチレングリコール/ポリプロピレングリコールエステル、ならびにこれらの組合せから選択される他のフリーラジカル重合性コモノマーとを含むモノマー混合物から重合されたフリーラジカル付加ポリマーである。これらのポリマーは、必要に応じて架橋されていてもよい。酸感応性とは、アミノ置換基が、通常は0.5～6.5の範囲である低いpH値でカチオン性になることを意味する。典型的な酸膨潤性会合性ポリマーは、Akzo Nobelから

10

20

30

40

50

、 Structure (登録商標) Plus (INC1名: アクリレーツ / アミノアクリレーツ / C₁₀ ~ C₃₀ アルキルPEG-20イタコネット) の商品名で、 Lubrizol Advanced Materials, Inc. から、 Carbopol (登録商標) Aqua CC (INC1名: ポリアクリレーツ - 1クロスポリマー) の商品名で商業的に入手可能である。一態様では、酸膨潤性ポリマーは、1種または複数の、(メタ)アクリル酸C₁ ~ C₅ アルキルエステル、C₁ ~ C₄ジアルキルアミノC₁ ~ C₆ アルキルメタクリレート、PEG / PPG - 30 / 5 アリルエーテル、PEG 20 - 25 C₁₀ ~ C₃₀ アルキルエーテルメタクリレート、ヒドロキシC₂ ~ C₆ アルキルメタクリレートのコポリマーが、エチレングリコールジメタクリレートで架橋されたものである。有用な他の酸膨潤性会合性ポリマーは、米国特許第7,378,479号で開示されている。

10

【0167】

疎水変性アルコキシ化メチルグルコシド、たとえば、Lubrizol Advanced Materials, Inc. から、それぞれ、Glucamate (登録商標) DOE-120、Glucamate (商標) LT、およびGlucamate (商標) SSE-20の商品名で入手可能な、ジオレイン酸PEG-120メチルグルコース、トリオレイン酸PEG-120メチルグルコース、セスキステアリン酸PEG-20メチルグルコースも、レオロジー改質剤として適する。

【0168】

樹木および灌木浸出液から得られる多糖、たとえば、アラビアゴム、ガッティゴム(gum gahatti)、トラガカントゴム、ならびにペクチン；アルギン酸やカラゲナン(たとえば、ラムダ、カッパ、イオタ、およびその塩)などの海藻抽出物、寒天などの藻類抽出物；キサンタン、ゲラン、ウェラン(wellan)などの微生物多糖；エチルヘキシリルセルロース、ヒドロキシブチルメチルセルロース、ヒドロキシエチルメチルセルロース、ヒドロキシプロピルメチルセルロース、メチルセルロース、カルボキシメチルセルロース、ヒドロキシエチルセルロース、ヒドロキシプロピルセルロースなどのセルロースエーテル；コロハガム、カッシアガム、ローカストビーンガム、タラガム、グアーガムなどのポリガラクトマンナン；トウモロコシデンプン、タピオカデンプン、コメデンプン、コムギデンプン、ジャガイモデンプン、ソルガムデンプンなどのデンプンも、本明細書における組成物に適切なレオロジー改質剤として用いることができる。

20

【0169】

レオロジー改質剤は、単独で、または組み合わせて使用することができ、組成物の総重量に対して、活性成分ベースで、0.001 ~ 50重量%、たとえば、少なくとも0.1重量%、または少なくとも1重量%、たとえば20重量%まで、または10重量%まで、または3重量%までの合計濃度で組成物中に存在してよい。

30

pH調整剤

【0170】

組成物のpHは、一態様では1.5 ~ 9.5、第2の態様では少なくとも4.5、第3の態様では少なくとも5.5、第4の態様では少なくとも6.5、第5の態様では少なくとも7.0、第6の態様では少なくとも7.5、第7の態様では少なくとも8.0、第8の態様では少なくとも8.5、第9の態様では少なくとも9.0、第10の態様では少なくとも9.5の範囲でよい。所望のpHとするために、組成物は、有機および無機の酸および塩基から選択される1種または複数のpH調整剤で調整してよい。

40

【0171】

組成物のpHは、当業者に公知である酸性および/または塩基性pH調整剤のいずれかの組合せによって調整することができる。酸性の材料としては、有機酸および無機酸、詳細には、モノカルボン酸、ジカルボン酸、およびトリカルボン酸、たとえば、酢酸、クエン酸、酒石酸、アルファ-ヒドロキシ酸、ベータ-ヒドロキシ酸、サリチル酸、乳酸、リンゴ酸、グリコール酸、アミノ酸、および天然果実酸、または無機酸、たとえば、塩酸、硝酸、硫酸、スルファミン酸、リン酸、ならびにこれらの組合せが挙げられる。

50

【0172】

塩基性の材料には、無機および有機の塩基、ならびにその組合せが含まれる。無機塩基の例としては、限定はしないが、アルカリ金属水酸化物（たとえば、水酸化カリウム、水酸化ナトリウム）、アルカリ金属炭酸塩（たとえば、炭酸カリウム、炭酸ナトリウム）、およびホウ酸ナトリウム（ホウ砂）、リン酸ナトリウム、ピロリン酸ナトリウムなどのアルカリ金属塩、ならびにこれらの混合物が挙げられる。有機塩基の例としては、水酸化アンモニウム、トリエタノールアミン（TEA）、ジイソプロパノールアミン、トリイソプロパノールアミン、アミノメチルプロパノール、デシルアミン、コカミン、オレアミン、モルホリン、トリアミルアミン、トリエチルアミン、テトラキス（ヒドロキシプロピル）エチレンジアミン、L-アルギニン、アミノメチルプロパノール、トロメタミン（2-アミノ2-ヒドロキシメチル-1,3-プロパンジオール）、およびPEG-15コカミンが挙げられる。10

保存剤

【0173】

一態様では、身だしなみケアにおける使用に適するどんな保存剤も、毛髪をまっすぐにする組成物に使用することができる。適切な保存剤としては、ポリメトキシ二環式オキサゾリジン、メチルパラベン、プロピルパラベン、エチルパラベン、ブチルパラベン、ベンジルトリニアゾール、DMDMヒダントイン（1,3-ジメチル-5,5-ジメチルヒダントインとしても公知）、イミダゾリジニル尿素、フェノキシエタノール、フェノキシエチルパラベン、メチルイソチアゾリノン、メチルクロロイソチアゾリノン、ベンゾイソチアゾリノン、トリクロサン、および上述のとおりの適切なポリクアテルニウム化合物（たとえば、ポリクアテルニウム1）が挙げられる。20

【0174】

別の態様では、酸系保存剤が、典型的な組成物において有用である。酸系保存剤の使用により、低いpH範囲での製品の配合が容易になる。配合物のpHを下げることで、直毛化の過程に適合することに加えて、微生物の成長にとって過酷な環境が本質的にもたらされる。その上、低いpHでの配合により、酸系保存剤の効力は増強され、肌において酸性のpHバランスを維持する身だしなみケア製品が得られる。身だしなみケア製品において有用であるどんな酸系保存剤も、典型的な組成物において使用することができる。一態様では、酸保存剤は、式：R³C(O)OH [式中、R³は、水素、1~8個の炭素原子を含む飽和および不飽和ヒドロカルビル基、またはC₆~C₁₀アリールを表す]で表されるカルボン酸化合物である。別の態様では、R³は、水素、C₁~C₈アルキル基、C₂~C₈アルケニル基、またはフェニルから選択される。典型的な酸は、限定はしないが、ギ酸、酢酸、プロピオン酸、ソルビン酸、カブリル酸、安息香酸、およびこれらの混合物である。30

【0175】

別の態様では、適切な酸として、限定はしないが、シュウ酸、コハク酸、グルタル酸、アジピン酸、アゼライン酸、マレイン酸、フマル酸、乳酸、グリセリン酸、タルトロン酸、リンゴ酸、酒石酸、グルコン酸、クエン酸、アスコルビン酸、サリチル酸、フタル酸、マンデル酸、ベンジル酸、およびこれらの混合物が挙げられる。40

【0176】

前述の酸の塩も、低いpH値での効力が保持される限り、有用である。適切な塩としては、上で列挙した酸のアルカリ金属（たとえば、ナトリウム、カリウム、カルシウム）およびアンモニウム塩が挙げられる。

【0177】

酸系保存剤および/またはその塩は、単独で、または身だしなみケア、ホームケア、健康管理、施設および工業衛生製品において通常用いられる非酸性保存剤と組み合わせて使用することができる。

【0178】

保存剤は、一態様では、毛髪直毛化組成物の総重量の0.01重量%~3.0重量%、

10

20

30

40

50

または0.1重量%～1重量%、または0.3重量%～1重量%を占めてよい。

キレート剤

【0179】

金属イオンの有害な影響に対して組成物を安定化するのに、キレート剤を用いることができる。利用する場合、適切なキレート剤としては、EDTA（エチレンジアミン四酢酸）およびEDTA二ナトリウムなどのその塩、クエン酸およびその塩、シクロデキストリンなど、およびこれらの混合物が挙げられる。

【0180】

そのような適切なキレート剤は、毛髪直毛化組成物の総重量の0.001重量%～3重量%、たとえば、0.01重量%～2重量%、または0.01重量%～1重量%を占めてよい。

噴射剤

【0181】

所望される場合では、たとえば、毛髪直毛化および/または毛髪直毛化補助剤構成材料を、エアロゾルスプレー、ムース、またはゲルの形で一定量供給するための、公知のいずれかのエアロゾル噴射剤を利用して、毛髪直毛化組成物を、まっすぐにしようとする毛髪の表面に送達してもよい。典型的な噴射剤としては、C₃～C₆直鎖および分岐鎖炭化水素などの低沸点炭化水素が挙げられる。典型的な炭化水素噴射剤には、プロパン、ブタン、イソブテン、およびこれらの混合物が含まれる。適切な他の噴射剤としては、ジメチルエーテルなどのエーテル、1,1-ジフルオロエタンなどのフッ化炭化水素、および空気や二酸化炭素などの圧縮気体が挙げられる。

【0182】

一態様では、こうした組成物は、組成物の総重量に対して、0.1重量%～60重量%、または0.5～35重量%の噴射剤を含有してよい。

植物性物質

【0183】

毛髪直毛化組成物は、1種または複数の植物性物質を含有してよい。適切な植物性物質として、たとえば、エキナセア（たとえば、*s p . a n g u s t i f o l i a*、*p u r p u r e a*、*p a l l i d a*）、*y u c c a g l a u c a*、ヤナギソウ、バジルの葉、ターキッシュオレガノ（Turkish oregano）、ニンジンの根、グレープフルーツ、フェンネル種子、ローズマリー、ウコン（*t u m e r i c*）、タイム、ブルーベリー、ピーマン、プラックベリー、スピルリナ、クロフサスグリ果実、チャの葉、たとえば、中国茶、紅茶（たとえば、フラワリー-オレンジペコ、ゴールデンフラワリー-オレンジペコ、ファインティップ-ゴールデンフラワリー-オレンジペコの種類）、緑茶（たとえば、日本種、グリーンダージリン種）、ウーロン茶、コーヒー豆、タンポポの根、ナツメヤシ果実、イチョウ葉、緑茶、サンザシ漿果、カンゾウ、杏仁、セージ、イチゴ、スイートピー、トマト、ヒマワリ種子抽出物、ビャクダン抽出物、ブドウ種子、アロエの葉、バニラ果実、コンフリー、アルニカ、*C e n t e l l a a s i a t i c a*、ヤグルマソウ、トチノキ、キヅタ、*M a c a d a m i a t e r n i f o l i a*種子、モクレン、カラスムギ、パンジー、タツナミソウ、シーバックソーン（seabuckthorn）、ホワイトネトル（white nettle）、およびウィッチヘーゼルの抽出物を挙げることができる。植物抽出物には、たとえば、クロロゲン酸、グルタチオン、グリチルリチン（glycrrhizin）、ネオヘスペリジン、ケルセチン、ルチン、モリン、ミリセチン、アブサン、およびカモミールも含めてよい。

【0184】

一態様では、毛髪直毛化組成物は、上述の植物性抽出物の1種または複数を、組成物の総重量に対して、約0.01～約10重量%、別の態様では約0.05～約5重量%、さらに別の態様では約0.1～約3重量%、さらなる態様では約0.5～約1重量%含有してよい。

アミノ酸

【0185】

10

20

30

40

50

本明細書で提供する毛髪直毛化組成物は、1種または複数の、グアニジン部分を含まないアミノ酸を含有してよい。使用できるアミノ酸の例としては、限定はせず、カプリルケラチニアミノ酸、カプリルシルクアミノ酸、ホホバアミノ酸、ケラチニアミノ酸、パルミトイルケラチニアミノ酸、パルミトイルシルクアミノ酸、ナトリウムココイルアミノ酸、ナトリウムココイルシルクアミノ酸、および甘扁桃アミノ酸が挙げられる。

【0186】

毛髪直毛化組成物は、適量のアミノ酸を含んでよい。アミノ酸の量は、一態様では、組成物の総重量に対して約0.001～約5重量%、別の態様では約0.01パーセント～約3重量%、さらに別の態様では約0.1～約2重量%、さらなる態様では約0.5～約1重量%の範囲である。

10

ビタミン

【0187】

毛髪直毛化組成物は、1種または複数のビタミンを含有してよい。使用できるビタミンの例としては、限定はせず、ナイアシンアミド、オクテニルコハク酸デンプンナトリウム、パントテン酸カルシウム、マルトデキストリン、アスコルビルリン酸ナトリウム、酢酸トコフェロール、ピリドキシンHCl、シリカ、パンテノール（たとえば、プロビタミンB5）、フィタントリオール、パントテン酸カルシウム（たとえば、ビタミンB5）、ビタミンE、およびビタミンEエステル（たとえば、酢酸トコフェリル、トコフェリルニコチネート（tocopheryl nocotinate）、トコフェリルパルミテート、またはトコフェリルレチノエート）が挙げられる。

20

【0188】

本明細書で提供する毛髪ケア組成物は、いずれかの量のビタミンを含んでよい。ビタミンの量は、一態様では、組成物の総重量に対して約0.05～約10重量%、別の態様では約0.1～約5重量%、さらに別の態様では約0.5～約3重量%、さらなる態様では約0.75～約1重量%の範囲でよい。

着香剤および香料

【0189】

毛髪直毛化組成物中の種々の構成材料のいずれかの匂いを隠し、または組成物に美的に心地よい香りを与えるために、典型的な組成物において使用してよい着香剤および香料構成材料。一態様では、適切な着香剤および香料には、天然および合成の着香剤、香料、芳香、エッセンス、および香りを発する他のいずれかの物質が含まれる。天然着香剤としては、花（たとえば、ユリ、ラベンダー、バラ、ジャスミン、ネロリ、イランイラン）、茎および葉（ゼラニウム、パチョリ、ブチグレン、ペパーミント）、果実（アニス、コリアンダー、フェンネル、メース、ネズ）、果皮（ベルガモット、レモン、オレンジ）、根（アンゼリカ、セロリ、カルダモン、コスタス、アヤメ、ショウブ）、木（マツノキ、ビャクダン、ユソウボク、ヒマラヤスギ、シタン、シナモン）、ハーブおよびイネ科草本（タラゴン、レモングラス、セージ、タイム）、針葉および小枝（トウヒ、マツ、欧洲アカマツ、ストーンパイン（stone pine））、樹脂およびバルサム（ガルバヌム、エレミ、安息香、ミルラ、乳香、オポバナックス）からの油抽出物など、植物生まれのものと、ジャコウ、レイビヨウコウ、カイリコウ、アンバーグリスなど、動物生まれのもの、ならびにこれらの混合物がある。

30

【0190】

合成着香剤および香料の例は、酢酸ベンジル、イソ酪酸フェノキシエチル（phenoxyethyl isobutylate）、酢酸p-tert-ブチルシクロヘキシル、酢酸リナリル、酢酸ジメチルベンジルカルビニル、酢酸フェニルエチル、安息香酸リナリル、ギ酸ベンジル、グリシン酸エチルメチルフェニル、プロピオン酸アリルシクロヘキシル、プロピオン酸スチラリル、およびサリチル酸ベンジル；ベンジルエチルエーテル；8～18個の炭素原子を有する直鎖アルカナール、シトラール、シトロネラール、シトロネリルオキシアルデヒド、シクラメンアルデヒド、ヒドロキシシトロネラール、リリアール、およびボウゲオナール；イオノン化合物、-イソメチルイオノン、およびメチルセドリルケトン；アネト-

40

50

ル、シトロネロール、オイゲノール、イソオイゲノール、ゲラニオール、ラバンジュロール、ネロリドール、リナロール、フェニルエチルアルコール、およびテルピネオール、アルファ-ピネン、テルペン（たとえば、リモネン）、およびバルサム、ならびにこれらの混合物を含めて、芳香族エステル、エーテル、アルデヒド、ケトン、アルコール、および炭化水素である。

【0191】

用いる着香剤または香料の量は、特定の匂いを隠し、または所望の美的に心地よい香気、香り、または芳香を与えるのに適するいずれかの量でよい。一態様では、着香剤の量は、組成物の総重量に対して、約0.05～約10重量%、別の態様では約0.1～約5重量%、さらに別の態様では約0.5～約3.5重量%、さらなる態様では約1～約2.5重量%の範囲でよい。

10

整髪剤

【0192】

典型的な熱活性化型薬剤に加えて、シリコーンおよびシロキサンの2-エチル-4,5-ジヒドロオキサゾールホモポリマー、硫酸エチルとの3-アミノプロピルメチル、ジメチル反応生成物などのポリマー固定剤、たとえば、ポリシリコーン-9、ならびにポリアクリル酸およびポリアクリル酸ナトリウムポリマー固定剤などの皮膜形成ポリマー、たとえば、Lubrizol Corp. から入手可能なFixate（商標）RSPを始めとする、整髪剤を含めてもよい。

20

【0193】

整髪剤は、組成物中に、0.001重量%～20重量%、たとえば、少なくとも0.1重量%、または5重量%まで存在してよい。

緩衝剤

【0194】

典型的な組成物中に、緩衝剤を使用することができる。適切な緩衝剤としては、アルカリまたはアルカリ土類金属炭酸塩、リン酸塩、炭酸水素塩、クエン酸塩、ホウ酸塩、酢酸塩、酸無水物、コハク酸塩など、たとえば、リン酸ナトリウム、クエン酸ナトリウム、酢酸ナトリウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸ナトリウムが挙げられる。

20

【0195】

本明細書において有用な他の補助剤構成材料として、ベンゾフェノン-4などのUV吸収剤を挙げることができる。

30

【0196】

加えて、以下の実施例が示すとおり、接触時間、加熱温度、および毛髪に加熱装置を滑らせるスピード（滑動速度）など、選択した過程によって、組成物構成材料およびその量の選択が左右される場合もある。

40

【0197】

半永久的な毛髪直毛化組成物は、加圧容器や非加圧容器などの適切な包装形態、たとえば、缶、ボトル、小包装、アンプル、広口瓶、チューブなどから用意し、一定量を供給することができる。スプレー組成物は、指で動かされるポンプ装置から、噴射剤を含有する加圧されたエアロゾルスプレー、ムース、霧、および泡として、または加圧されていない、機械的に噴射されるスプレーおよび泡として、一定量を供給することができる。

40

【0198】

典型的な組成物を毛髪に対して利用すると、熱の使用によって、優れた直毛化効果を付与することができる。施術方法は、毛髪をまず組成物でコーティングするステップを含む。このステップは、ブラシ、櫛、スポンジ、パッド、布、指（たとえば手袋をはめて）などの、毛髪線維を組成物でコーティングするのに適するどんな塗布具で行ってもよい。組成物は、熱活性化型薬剤が線維に浸透するのに十分な接触期間、たとえば、数分、たとえば、少なくとも5分もしくは少なくとも10分、または少なくとも20分、または少なくとも30分、または少なくとも40分、または少なくとも45分、かつ60分までの間、毛髪と接触させておく。最適な接触時間は、熱活性化型薬剤の濃度、選択されたグアニジ

50

ン部分を含む補助剤、加熱段階で毛髪との接触に使用する加熱装置の温度などの要素に応じて様々となりうる。

【0199】

熱は、構造(1)の熱活性化型薬剤を活性化するのに十分な温度、たとえば、少なくとも185、または少なくとも190、または少なくとも200、または少なくとも205、または少なくとも約210、または少なくとも215、または220まで、または225まで、または230までの温度を提供する加熱装置で適用することができる。加熱装置は、所望の形状変更、たとえば、毛髪束の長さの少なくとも5%、または少なくとも10%の伸長を実現するのに十分な時間にわたり、毛髪と接触した状態で保持される。時間は、毛髪の含水量、加熱装置の温度、熱活性化型毛髪直毛化組成物の濃度などのいくつかの要素に応じて決まるが、一般に、長さ1センチメートルずつの毛髪について、合計で、少なくとも10秒、または少なくとも1もしくは2分である。加熱装置の例としては、平型または丸型アイロン、マイクロ波生成装置、赤外線放射源などが挙げられる。たとえば、平型または丸型アイロンの場合では、加熱装置は、たとえば電力源によって、少なくとも180、または少なくとも190、または少なくとも200、または少なくとも205、または少なくとも約210、かつ230まで、または225まで、または220までの表面温度に上昇させられる、(線維と接触する)少なくとも1つの表面を有する。

10

【0200】

毛髪束の温度は、たとえば、毛髪束内に置かれた電熱対で測定することができ、加熱装置で加熱する間、少なくとも150または少なくとも170の温度に達してよい。

20

【0201】

必要に応じて、加熱段階の際にケラチン線維の温度を上昇させ、かつ/または蒸気の相当な放出を回避するために、毛髪を、直毛化組成物で処理した後、かつ熱を適用する前に、ある程度乾かしてもよい。部分的な乾燥は、たとえば、ヘアドライヤー、約100の温度の乾燥用フードでのドライヤー乾燥、自然乾燥、タオルドライなどによって実現することができる。たとえば、加熱装置で熱を適用する前に、組成物の含水量を、10重量%またはそれ未満、たとえば、約2重量%に減らすことができる。一般に、乾燥は、毛髪に塗布された熱活性化型薬剤の少なくとも一部または全部を保持しつつ、溶媒が除去されるように行う。またこの理由のため、典型的な実施形態における塗布段階と加熱段階の合間に、毛髪を(たとえば、水または他の水溶液で)すすぎ洗浄しない。

30

【0202】

毛髪と接触するアイロンの端は、一般に、2つの平らな表面を有する。こうした2つの平らな表面は、金属製またはセラミック製でよい。表面は、平滑でも、刻み目があってもよい。アイロンの適用は、毛髪の長さを数秒単位で分けて次々と滑り降ろしていく、または徐々に動かすもしくは止め具に沿って滑らせるなどして行うことができる。典型的な過程におけるアイロンの適用は、1回または複数の動作、たとえば、少なくとも5回の動作、または少なくとも10回の動作、または少なくとも12回の動作、または少なくとも15回の動作で、根元から毛先へと継続的な動きで実施する。平型アイロンなどの加熱装置を毛髪の根元から先端へと滑らせるスピードは、少なくとも1cm/秒、または少なくとも2cm/秒/動作、または少なくとも約2.5cm/秒/動作、または少なくとも3cm/秒/動作、または少なくとも4cm/秒/動作でよい。

40

【0203】

いかなる特定の理論に拘束されるつもりはないが、熱い平型アイロンによって、硬質な-ケラチンが軟化し、毛髪線維がまっすぐになり、また相乗作用的に、平型アイロンが与える熱によって、環状カーボネート(または構造(I)に従う他の熱活性化型薬剤)と毛髪線維のアミン基との反応(たとえば、架橋または他の修飾反応)が活性化される結果、ことによると、N、N'-二置換尿素結合が生じることが示唆される。この結果、新たに形成された形状が固定される。

【0204】

50

試験の結果からは、とりわけ、水溶液などのエチレンカーボネートが、毛髪線維に容易に浸透し、185より高温、たとえば約210の平型アイロンを介して、硬いタンパク質性の材料と反応しうることが示唆される。試験で使用した縮れた毛髪束は、一度まっすぐになると、一様では12回のシャンプー洗髪サイクルまで、別の様では24回のシャンプー洗髪サイクルまで、さらに別の様では30回のシャンプー洗髪サイクルまで、さらなる様では36回のシャンプー洗髪サイクルまで、またさらなる様では50回のシャンプー洗髪サイクルまで持ちこたえることができる。まっすぐになった毛髪束は、輝いて見え、滑らかですべすべとした感触であり、悪臭がない。一実施形態では、プロピレンカーボネートおよびグリセロールカーボネートは、構造(I)の他の熱活性化型薬剤または他のケラチン架橋剤と組み合わせて使用することができる。加えて、プロピレンカーボネートおよびグリセロールカーボネートは、エチレンカーボネートを可溶化する優れた溶媒/希釈剤もある。

10

【0205】

グアニジン部分を含む補助剤と組み合わされたアルキレンカーボネート、特にエチレンカーボネートは、有効な毛髪直毛化組成物であることが発見された。手短に述べると、エチレンカーボネートおよびグアニジン部分を含むを含有する組成物を縮毛または波状毛に適用した後、(たとえば、210以下で)熱平型アイロン処理を施すと、その形状を望み通りに効果的に変更する(まっすぐにする)ことができ、その形状は、数日から数週間(たとえば、50回のシャンプー洗浄または約4か月に相当)、その元の縮れまたは波状の状態に戻ることなく、持続しうる。これは、ホルムアルデヒドを主体とする配合に比べて甚だ優るとも劣らない。

20

【0206】

例として、本組成物および過程によって、以下の特性の一部または全部が提供される。

1. 平型アイロン加熱装置によって活性化されて、まっすぐで、滑らかで、艶のある毛髪が作り出される。
2. 少なくとも24回のシャンプー洗髪を経て、また(毎週3回のシャンプー洗髪を行う消費者について)8または12週間まで、スタイルを保持し、50回のシャンプー洗浄もしくは約4か月相当まで、またはより長くなる場合もある。
3. 高い湿度に耐性がある。
4. 既存の、ホルムアルデヒドを主体とする毛髪直毛化組成物より、毛髪に対する熱損傷が少ない。
5. 撥発性有機化合物(VOC)が少ないまたはゼロである。
6. ホルムアルデヒド不使用である。
7. 地毛および化学的処理を受けた毛髪を含めて、すべての毛髪タイプに適用できる。
8. 美容室での適用に加えて家庭での使用に適する。

30

【0207】

典型的な実施形態の範囲を限定する意図はなく、以下の実施例によって、実施例組成物の有効性を実証する。

【実施例】

【0208】

以下の実施例において、毛髪タイプおよび縮れ具合は、L'Oréalが発表した定義に基づく(Roland de la Mettrieら、「Shape Variability and Classification of Human Hair: A Worldwide Approach」、Human Biology、2007年7月)。この定義では、Iを最もまっすぐとし、VI~VIIIを稠密な非常に縮れた毛髪とする、I~VIIIの数字が毛髪に割り当てられる。一般に、本明細書で使用した毛髪サンプルは、当初、タイプIII~IV(縮毛)として分類された。熱による直毛化後、毛髪束は通常、タイプI(直毛)になる。しかし、3回のシャンプー洗髪サイクルの後、毛髪束が弛緩してタイプIIになる場合、これを波状(緩んだ)とみなすことができる。

40

【0209】

頭部にある人毛を模るために、International Hair Impor

50

ters and Products Inc. から、濃褐色の縮れた無処理ブラジル人毛髪束（タイプIII～IVに分類されたもの）を入手した。個々の各毛髪束は、重量が約2.5gであり、根元の端が締め具で締められている。各束は、概ね、長さ17cm（自然な縮れた状態）、締め付けられた端で幅2cmの寸法である。

【0210】

熱活性化型毛髪直毛化組成物を、溶液への浸漬またはクリームシャーシ（cream chassis）適用によって毛髪束に適用した後、熱処理し、次いで洗髪堅牢度について評価する。

（実施例1～17）

（溶液浸漬適用）

毛髪束の調製

10

【0211】

浸漬する前に、各毛髪束を、市販のクレンジングシャンプー（たとえば、VO5（商標）またはSuave（商標）シャンプー）でシャンプー洗浄する。シャンプー（2.5g）を各毛髪束につけ、30秒間束にやさしく揉み込んだ後、温かい水道水（35～38）を流しかけながら60秒間十分にすすぐ。洗髪された各毛髪束を、相対湿度50%の条件下、室温（23）で一晩かけて乾かす。次いで、乾かした毛髪束を、温かい水道水（35～38）を流しかけながら30秒間かけて湿らせる。各束を、手袋をはめた人差し指と中指で挟み、束を根元の端から毛先へと指の間でやさしくしごくことにより、余分な水を除去する。

溶液浸漬処理

20

【0212】

表1に示す所望の試験量のアルキレンカーボネート（直毛化剤）およびグアニジン部分を含む化合物（補助剤）を脱イオン水に溶解させることにより、試験毛髪直毛化組成物の水性溶媒系溶液を調製する。所望であれば、適切な酸または塩基（たとえば、クエン酸または炭酸ナトリウム）で溶液のpHを調整した。浸漬用溶液を周囲室温（23）になじませた。湿った毛髪束を、所望の接触時間（表1）にわたり、浸漬用溶液に完全に浸した。次いで、処理した毛髪束を溶液から取り出し、各束を人差し指と中指で挟み、手袋をはめた指の間で束を根元の端から毛先へとやさしくしごくことにより、余分な量の材料を搾り出した。毛髪束を、わずかな圧力をかけながら2枚の紙タオルの間に挟んで、束の表面に残存する溶液を除去した。各束をドライヤー乾燥して、熱による直毛化前の乾燥度を少なくとも95%とした。

30

【0213】

浸漬用溶液の組成情報、試験パラメータ、および評価結果を表1に示す。

【表1】

表1

実施例番号	EC (重量%)	直毛化補助剤	直毛化補助剤 (重量%)	pH	脱イオン水 (重量%)	接触時間(分)	シャンプー ¹ サイクル	平型アイロン 温度(°C)	タイプ ²	評価
1	25	グアニジン塩酸塩	5	6.2	100となる適量	20	24	約 210	I	S
2	25	グアニジン炭酸塩	5	8.7	100となる適量	20	24	約 210	I	S
3	27	グアニジン炭酸塩	3	8.3	100となる適量	20	24	約 210	I	S
4	23	グアニジノプロピオン酸	7	6.8	100となる適量	20	24	約 210	I	S
5	25	グアニジノプロピオン酸	5	6.9	100となる適量	20	24	約 210	I	S
6	20	クレアチニン	10	8.5	100となる適量	20	24	約 210	I	S
7	25	クレアチニン	5	8.4	100となる適量	20	24	約 210	I	S
8	25	クレアチニンエチルエステル塩酸塩	5	7.9	100となる適量	20	24	約 210	I	S
9	25	1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン	5	8.5	100となる適量	20	24	約 210	I	S
10	25	1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン	3	8.0	100となる適量	20	24	約 210	I	S
11	0 ¹	グアニジン塩酸塩	45	5.4	100となる適量	20	24	約 210	III-IV	C
12	0 ¹	グアニジン炭酸塩	45	9.8	100となる適量	20	24	約 210	III-IV	C
13	25 ¹	L-オルニチン	5	6.3	100となる適量	20	24	約 210	III-IV	C
14	25 ¹	L-シトルリン	5	7.2	100となる適量	20	24	約 210	III-IV	C
15	30 ¹	なし	0	6.7	100となる適量	30	3	約 210	III	C
16	30 ¹	なし	0	6.7	100となる適量	45	>24	約 210	I-II	S
17	30 ¹	なし	0	6.7	100となる適量	30	12	約 226	I-II	S

¹比較例²Shape Variability and Classification of Human Hair: A Worldwide Approach, Human Biology, 79巻3号、2007年6月に従って分類した

EC=エチレンカーボネート

S=直毛

C=縮毛

【0 2 1 4】

熱による直毛化

熱による直毛化には、Babyliss PROがNano Titanium(商標)の商品名で販売している、市販の平型アイロン加熱装置を使用した。プロトコールは、次のとおりである。

10

20

30

40

50

1. 平型アイロンを、およそ210 の目標温度に設定する。
2. 加熱された平型アイロンを、束の上部の根元の端（締め付けられた端）から底部へと、およそ10 ~ 12秒（およそ2 ~ 2.3 cm / 秒の滑動速度）で滑らせる。
3. 熱による過程を、所望の直毛化効果を目指して繰り返す（たとえば、208 ~ 210 で10 ~ 12回の動作）。
4. 熱による直毛化処理後、毛髪束を室温に冷まし、洗髪堅牢度について評価する。

洗髪堅牢度

【0215】

シャンプー洗髪堅牢度（何回ものシャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクルの後、まっすぐな状態のままの形状を維持しうる能力）は、処理された毛髪束を、毛髪束調製ステップについて上述したとおりに、シャンプー洗浄およびすすぎ洗浄することにより実施する。24回の連続するシャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクルを実施した。3回目のシャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクル後に毎回（12回まで）、乾燥ステップを用いた（毛髪束調製ステップについて記載したとおり）。12回目のシャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクルの後は、乾燥ステップを、6回目のシャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクル後に毎回用いた。24回目のシャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクルの後、各毛髪束を、上記プロトコールに従って乾かし、評価した。

10

【0216】

結果は、接触時間、平型アイロン温度、および熱活性化型薬剤の濃度の選択により、直毛化が実現できることを示している。エチレンカーボネートと、アミノ基に富んだ化合物（グアニジン部分を含まない化合物）である、L-オルニチンおよびL-シトルリンとを含む比較組成物で処理した毛髪束では、同じ接触時間および熱設定で、24回のシャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクル後に、まっすぐな形状が維持されなかった。対照配合物（30重量%のエチレンカーボネート、グアニジン部分を含む補助剤化合物不使用）で処理した毛髪束では、シャンプー洗髪 - すすぎ洗浄サイクルが繰り返された後もまっすぐな形状を維持するのに、接触時間の実質的な延長および/または高められた平型アイロン温度が必要となった。

20

【0217】

エチレンカーボネートは、グアニジン部分を含む直毛化補助剤と組み合わせて利用したとき、効力の増強（たとえば、より短い接触時間および低めの平型アイロン温度）を示す。

30

（実施例18 ~ 36）

（クリームシャーシ適用）

【0218】

クリーム系毛髪直毛化配合物は、表2（部分1）に示す成分および量を含む、クリーム基剤中のグアニジン部分を含む補助剤と、表3に示す成分および量を含むアルキレンカーボネート毛髪直毛化構成材料の溶液とを、別々に配合を行うことにより調製した。クリーム基剤には、7.5重量%または11.0重量%のL-アルギニンを含有するように配合し、アルキレンカーボネート溶液は、エチレンカーボネート（EC）をプロピレンカーボネート（PC）に溶解させることにより調製した（75:25 EC:PC 重量/重量）（部分2）。

40

【0219】

最終クリーム系毛髪直毛化組成物は、毛髪束に適用する直前に、必要な量のクリーム系のグアニジン部分を含む補助剤構成材料（部分1）を必要な量のエチレンカーボネート毛髪直毛化剤溶液（部分2）と合わせて、表6に示す重量%の活性構成材料を得、合わせた構成材料を、均質なクリームが得られるまでへらで混合することにより調製した。

【表2】

表2
(部分1 惩助剤クリーム)

構成材料	INCI名	重量%
A相		
1	セテアレス-20(乳化剤)	0.3
2	ワセリン(皮膚軟化剤)	1.5
3	セスキステアリン酸メチルグルコース(Glucate(商標)SS 乳化剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.7
4	ステアリン酸グリセリル(乳化剤)	2.0
5	流動パラフィン(皮膚軟化剤)	2.0
6	セテアリルアルコール ¹ (乳化剤/コンディション調整剤)	4.5
B相		
7	水(脱イオン水希釈剤)	100となる適量
8	メチルグルセス-20(Glucam(商標)E-20 湿潤剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.5
C相		
9	L-アルギニン	7.5または11.0
10	水(脱イオン水希釈剤)	30.0
E相		
11	メチルクロロイソチアゾリン(および)メチルイソチアゾリン(Euxyl(商標)K120 保存剤、Schülke Inc.)	0.05
12	シクロペンタシロキサン(Cyclopentasiloxane)(Dow Corning(商標)DC245 デカメチルシクロペンタシロキサンコンディション調整剤)	2.0
F相		
13	ポリクアテルニウム47(Merquat(商標)2001 コンディション調整剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	0.5
14	水(脱イオン水希釈剤)	2.0
15	クエン酸(50%水溶液 重量/重量)	pH8.5~9.0となる適量

¹セチルアルコールとステアリルアルコールの30/70(重量/重量)ブレンド

【0220】

A相およびB相の構成材料を別々の容器において合わせた。各相を、穏やかにかき混ぜながら均質になるまで70~75℃に加熱した。次いで、継続してかき混ぜながらおよそ5分間かけてA相をB相に加えて、均質なエマルションを得た。エマルションを攪拌しながら50℃に冷ました。C相は、毛髪直毛化補助剤化合物を脱イオン水に溶解させること

により調製した。必要に応じて、水を40～45に加熱して、補助剤の水相への溶解を促進してもよい。補助剤化合物が完全に溶解したら、C相をA B相エマルションに加え、均質になるまで混合した。次いで、D相の構成材料をA B C相エマルションに加え、均質になるまで混合した。E相は、ポリクアテルニウム構成材料を脱イオン水に溶解させた後、溶液をA B C D相エマルションに加え、均質になるまでよく混合することにより調製した。

【0221】

A B C D E相エマルションにF相(クエン酸)を加えてpHを8.5～9.0の範囲にすることにより、補助剤クリームエマルションの最終pHを調整した。Brookfield回転スピンドル粘度計、Model RVT(Brookfield Engineering Laboratories, Inc.)を、5番のスピンドルを使用して、毎分約20回転(rpm)で用いることにより、約25の周囲室温で1分間Brookfield粘度を測定し、約7,200mPa·sであると評価された。10

【0222】

毛髪直毛化剤構成材料は、エチレンカーボネートをプロピレンカーボネート希釈剤に溶解させ、エチレンカーボネートが溶解するまで穏やかに攪拌しながら40に加熱することにより調製した。構成材料の量を表3に示す。

【表3】

表3
(部分2毛髪直毛化剤)

構成材料	重量%
エチレンカーボネート	75
プロピレンカーボネート	25

20

【0223】

毛髪束の調製

毛髪直毛化クリームを毛髪束に適用する前に、各束を、アルカリ性pHのクレンジングシャンプーでシャンプー洗浄した。アルカリ性クレンジングシャンプーは、表4に示す構成材料で配合を行った。

【表4】

表4

構成材料	INCI名	商品名	重量%
A相			
1	水(脱イオン水)	希釈剤	100となる適量
2	コカミドMEA	Amidex(商標)CME 非イオン界面活性剤(Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	2.0
B相			
3	トリオレイン酸PEG-120メチルグルコース(および)プロピレングリコール(および)水	Glucamate(商標)LT 増粘剤(活性成分37~43%)、Lubrizol Advanced Materials, Inc.	1.0
4	コカミドプロピルベタイン	Chembetaine(商標)CAD 両性界面活性剤(活性成分34~36%)、Lubrizol Advanced Materials, Inc.	2.0
5	ラウレス硫酸ナトリウム	Sulfochem(商標)ES-2PK アニオン界面活性剤(活性成分27.5%)、Lubrizol Advanced Materials, Inc.	25.0
C相			
6	メチルクロロイソチアゾリン(および)メチルイソチアゾリン	Euxyl(商標)K120 保存剤、Schülke Inc.	0.05
D相			
7	水酸化ナトリウム18%水溶液(重量/重量)	pH調整剤	所望のpHとなる適量
E相			
8	塩化カリウム	粘度調整剤	0.65

10

20

30

40

50

【0224】

加熱した脱イオン水(75)にコカミドMEA界面活性剤を均質になるまで攪拌しながら溶解させることにより、A相を調製した。A相に、B相構成材料を、各構成材料が溶解し、均質に混合されるまで攪拌しながら、表に挙げた順序で加える。混合した後、混合を続けながら、A B相を周囲室温(23)に冷ます。C相をA B相に加え、よく混合する。D相(水酸化ナトリウム)を加えて最終pHを9~9.5の範囲にすることにより、組成物のpHを調整した。次いで、E相をA B C D相に加え、よく混合する。Brookfield回転スピンドル粘度計、Model RVT(Brookfield Engineering Laboratories, Inc.)を、5番のスピンドルを使用して、毎分約20回転(rpm)で用いることにより、約23の周囲室温で1分間、アルカリ性シャンプーのBrookfield粘度を測定し、12,000mPa·sであると判明した。

【0225】

アルカリ性シャンプー(2.5g)を各毛髪束につけ、30秒間束にやさしく揉み込んだ後、温かい水道水(35~38)を流しかけながら60秒間十分にすすいだ。洗髪された各毛髪束を、相対湿度50%の条件下、室温(23)で一晩かけて乾かした。次いで、乾かした毛髪束を、水道水(35~38)を流しかけながら30秒間かけて湿らせた。各束を、手袋をはめた人差し指と中指で挟み、束を根元の端から毛先へと指の間でや

さしくしごくことにより、余分な水を除去した。各束を2枚の紙タオルの間に挟み、手で軽く押して余分な水を吸い取った。

クリーム処理

【0226】

上で調製した毛髪束それぞれに、部分1を部分2と合わせることにより調整した毛髪直毛化クリーム配合物2gを均等に適用し、各束全体に十分に揉み込んだ。クリームを20分間毛髪と接触させた後、束を目の細かい櫛ですいて、余分な製品を除去した。次いで、束をドライヤー乾燥し、櫛ですいて束を撫でつけた後、平型アイロンで熱処理して、毛髪を熱的にまっすぐにした。

【0227】

溶液浸漬試験に用いた平型アイロンプロトコールを使用して、各束に、2~2.3cm/秒の滑動スピードで10回平型アイロンをかける。平型アイロンの温度は、210に設定した。

【0228】

平型アイロンでの熱による直毛化に続いて、2~3gの中和/コンディション調整クリームマスクを各毛髪束に適用する。中和マスクを各毛髪束に均等に揉み込んだ後、残留するマスクがすすぎ落とされるまで、束を温水(30~35)で十分にすすいだ。クリームマスクは、表5に示す構成材料および量で配合を行った。

【表5】

表5

構成材料	重量%
A相	
セスキステアリン酸PEG-20メチルグルコース(Glucamate(商標)SSE-20乳化剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	0.25
ステアリン酸グリセリル(乳化剤)	1.0
ステアラミドプロピルジメチルアミン(界面活性剤)	1.0
ヒドロキシステアリン酸イソステアリル(Schercemol(商標)SHS皮膚軟化剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	2.0
イソステアリン酸イソステアリル(Schercemol(商標)1818皮膚軟化剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	3.0
セバシン酸ジイソプロピル(Schercemol(商標)DIS皮膚軟化剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	4.0
セテアリルアルコール(乳化剤)	4.0
B相	
EDTAナトリウム(キレート剤)	0.10
ラウリルメチルグルセス-10ヒドロキシプロピルジモニウムクロリド(Gluquat(商標)125湿潤剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.00
ソルビトール(70%)(湿潤剤)	2.50
メチルグルセス-20(Glucam(商標)E20湿潤剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	3.00
水(脱イオン水)	100となる適量
C相	
ポリクアテルニウム47(Merquat(商標)2001コンディション調整剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.0
水(脱イオン水)	3.0
D相	
メチルクロロイソチアゾリン(および)メチルイソチアゾリン(Euxyl(商標)K120保存剤、Schülke Inc)	0.05
E相	
クエン酸50%(pH調整剤)50%水溶液重量/重量) ¹	0.45 ¹

¹組成物全体のpH 3.2~3.8

【0229】

A相およびB相の構成材料を別々の容器において合わせ、攪拌しながら70~75℃に加熱した。A相とB相を合わせ、温度を70~75℃に保ちながら、均質になるまで混合した。A B相を攪拌しながら50℃に冷ました。C相は、ポリクアテルニウム47構成材料を脱イオン水に溶解させることにより調製した。次いで、攪拌し、温度を50℃に保ちながら、C相をA B相に合わせた。次いでD相をA B C相に加え、均質になるまで混合した。E相を加えて、組成物の最終pHを調製した。

【0230】

マスク処理に続いて、まっすぐになった毛髪束それぞれを、溶液浸漬試験で述べたプロトコールに従うシャンプー洗髪堅牢度について評価した。結果を表 6 に示す。

【表 6】

表 6

実施例番号	EC (重量%)	PC (重量%)	L-アルギニン (重量%)	平型アイロンスピード (cm/秒)	シャンプーサイクル	タイプ評定 ⁴	評価
18	10.0	3.3	5.0	2.3	3	IV	C
19	12.0	4.0	3.0	2.3	24	II	R
20	12.0	4.0	8.0 ³	2.3	24	II	R
21	14.0	4.7	6.0	2.3	30	II	R
22	16.0	5.3	4.0	2.3	30	I	S
23	16.0	5.3	4.0	4.6	3	IV	C
24	16.5	5.5	8.5 ³	2.3	30	I	S
25	18.0	6.0	7.0	2.3	30	I	S
26	20.0	6.7	5.0	2.3	24	I	S
27	20.0	6.7	5.0	2.3	30	I	S
28	22.0	7.3	3.0	2.3	24	I	S
29	25.0	8.3	5.0	2.3	30	I	S
30	27.0	9.0	3.0	2.3	30	I	S
31 ^{1,2}	0	0	0	2.3	1	IV	C
32 ¹	15.0	5.0	0	2.3	30	IV	C
33 ¹	20.0	6.7	0	2.3	30	IV	C
34 ¹	25.0	8.3	0	2.3	30	I-II	S
35 ¹	30.0	10	0	2.3	30	I	S

¹比較²クリーム基剤のみ(活性成分なし)³クリーム基剤に含まれた 11.0 重量% の L-アルギニン⁴Shape Variability and Classification of Human Hair: A Worldwide Approach, Human Biology, 79 卷 3 号、2007 年 6 月に従って分類した。

EC=エチレンカーボネート

PC=プロピレンカーボネート

C=縮毛

R=緩い

S=直毛

【0 2 3 1】

結果は、接触時間、滑動速度、および熱活性化型薬剤の濃度の選択により、直毛化が実現できることを示している。グアニジン部分を含む化合物を含めることで、配合者は、毛髪直毛化活性成分（たとえば、エチレンカーボネート）の使用を実質的により少なくすることが可能になる。より低濃度の活性成分を利用すると、緩んだ毛髪形状を実現することができる。実験番号 5 および 6 の比較から示されるとおり、滑動速度は、まっすぐな毛髪形状の実現において重要な要素である。

【0 2 3 2】

クレアチンを含有する補助剤クリームは、表 7 に示す構成材料および量で配合を行った。

10

20

30

40

【表7】

表7
(部分1 補助剤クリーム)

構成材料	INCI名	重量%
A相		
1	セテアレス-20(乳化剤)	0.3
2	ワセリン(皮膚軟化剤)	1.5
3	セスキステアリン酸メチルグルコース (Glucate(商標)SS 乳化剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.7
4	ステアリン酸グリセリル(乳化剤)	2.0
5	流動パラフィン(皮膚軟化剤)	2.0
6	セテアリルアルコール ¹ (乳化剤/コンディション調整剤)	4.5
B相		
7	水(脱イオン水希釈剤)	100となる適量
8	メチルグルセス-20(Glucam(商標)E-20 湿潤剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.5
9	クレアチニン	7.5
C相		
10	メチルクロロイソチアゾリン(および) メチルイソチアゾリン(Euxyl(商標)K120 保存剤、Schülke Inc.)	0.05
11	シクロペンタシロキサン(Dow Corning(商標)DC245 デカメチルシクロペンタシロキサン コンディション調整剤)	2.0
D相		
12	ポリクアテルニウム 47(Merquat(商標)2001 コンディション調整剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	0.5
13	水(脱イオン水希釈剤)	2.0

¹セチルアルコールとステアリルアルコールの 30/70(重量/重量)ブレンド

組成物の pH=6.5~7.0

【0233】

A相およびB相の構成材料を別々の容器において合わせ、攪拌しながら70~75に加熱した。A相とB相を合わせ、温度を70~75に保ちながら、均質になるまで混合した。A B相を攪拌しながら50に冷ました。C相は、ポリクアテルニウム47構成材料を脱イオン水に溶解させることにより調製した。次いで、攪拌し、温度を50に保ちながら、C相をA B相に合わせた。次いでD相をA B C相に加え、均質なクリーム状のエマルションが得られるまで混合した。

【0234】

クリーム毛髪直毛化配合物は、表8に示す、A相をB相構成材料と均質に混合することにより調製した。

10

20

30

40

【表8】

表8

構成材料		重量%	
A相			
補助剤クリーム(7.5 重量% クレアチニン)		40	66.67
B相			
EC/PC 溶液(75 重量%EC)		36.0	33.33
水(脱イオン水希釈剤)		24.0	--

EC=エチレンカーボネート

PC=プロピレンカーボネート

【0235】

毛髪束を調製し、処理し、上記実施例18～35に記載のとおりに評価した。結果を表9に示す。

【表9】

表9

実施例番号	EC (重量%)	PC (重量%)	クレアチニン	平型アイロン スピード (cm/秒)	シャンプー サイクル	タイプ 評定 ³	評価
36	27.0	9	3.0	2.3	24	I	S
37	25.0	8.3	5.0	2.3	24	I	S

【0236】

クレアチニンエチルエステル塩酸塩を含有する補助剤クリームは、表10に示す構成材料および量で配合を行った。

【表10】

表 10
(部分 1 補助剤クリーム)

構成材料	INCI名	重量%
A 相		
1	セテアレス-20(乳化剤)	0.3
2	ワセリン(皮膚軟化剤/乳化剤)	1.5
3	セスキステアリン酸メチルグルコース(Glucate(商標)SS 乳化剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.7
4	ステアリン酸グリセリル(乳化剤)	2.0
5	流動パラフィン(皮膚軟化剤)	2.0
6	セテアリルアルコール ¹ (乳化剤/コンディション調整剤)	4.5
B 相		
7	水(脱イオン水希釈剤)	100 となる適量
8	メチルグルセス-20(Glucam(商標)E-20 湿潤剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	1.5
9	水酸化ナトリウム(18%水溶液 重量/重量)	9.2
C 相		
10	クレアチンエチルエステル HCl	7.5
11	水(脱イオン水希釈剤)	30.0
D 相		
12	メチルクロロイソチアゾリン(および)メチルイソチアゾリン(Euxyl(商標)K120 保存剤、Schülke Inc.)	0.05
13	シクロペントシロキサン(Dow Corning(商標)DC245 デカメチルシクロペントシロキサンコンディション調整剤)	2.0
E 相		
14	ポリクアテルニウム 47(Merquat(商標)2001 コンディション調整剤、Lubrizol Advanced Materials, Inc.)	0.5
15	水(脱イオン水希釈剤)	2.0

¹セチルアルコールとステアリルアルコールの 30/70(重量/重量)ブレンド
組成物の pH=6.5~7.0

10

20

30

40

50

【0237】

A 相および B 相の構成材料を別々の容器において合わせ、攪拌しながら 70~75℃ に加熱した。A 相と B 相を合わせ、温度を 70~75℃ に保ちながら、均質になるまで混合した。A B 相を攪拌しながら 50℃ に冷ました。C 相の構成材料を均質になるまで混合し、次いで、攪拌し、温度を 50℃ に保ちながら、A B 相エマルションに混ぜ込んだ。次いで D 相を A B C 相エマルションに加え、均質になるまで混合した。ポリクアテルニウム 47 構成材料を脱イオン水に溶解させることにより E 相を調製し、次いで A B C D エマルションに加え、均質なクリーム状のエマルションが得られるまで混合した。

【0238】

クリーム毛髪直毛化配合物は、表11に示す、A相をB相構成材料と均質に混合することにより調製した。

【表11】

表11

構成材料	重量%		
A相			
補助剤クリーム(7.5重量% クレアチンエチルエステル HCl)	40	66.67	
B相			
EC/PC 溶液(75重量%EC)	36.0	33.33	
水(脱イオン水希釈剤)	24.0	--	

EC=エチレンカーボネート

PC=プロピレンカーボネート

【0239】

毛髪束を調製し、処理し、上記実施例18～37に記載のとおりに評価した。結果を表12に示す。

【表12】

実施例番号	EC (重量%)	PC (重量%)	クレアチニン	平型アイロン スピード (cm/秒)	シャンプー サイクル	タイプ 評定 ³	評価
38	27.0	9	3.0	2.3	24	I	S
39	25.0	8.3	5.0	2.3	24	I	S

【0240】

実施例中、または別な形で明確に示す場合を除き、材料の量、反応条件、分子量、炭素原子の数などを指定する、当記述におけるすべての数量は、「約」という語で修飾されると理解される。別段指摘しない限り、本明細書で言及する各化学物質または組成物は、異性体、副生物、誘導体、および商用銘柄に存在するものと通常理解される他の材料を含有することもある、商用銘柄の材料であると解釈すべきである。しかし、各化学的構成材料の量は、別段指摘しない限り、商用材料中に存在してもよいのが通例であるいかなる溶媒または希釈油も除外して示される。本明細書に記載の、量、範囲、および比の上限および下限は、独立して組み合わせてもよいと理解される。同様に、開示する技術の各要素についての範囲および量が、他の要素のいずれかについての範囲または量と一緒に使用されてもよい。本明細書で使用するとき、「本質的にからなる」という表現では、検討中の組成物の基本的かつ新奇な特徴に実質的に影響を及ぼさない物質を含めることが容認される。本明細書で使用するとき、属(またはリスト)の一部は、請求項から除外されてもよい。

【0241】

上記開示および他の特色および機能の変形形態またはその代替形態が組み合わされて、他の多くの異なる系または用途になってもよいことが理解されるものとする。現在予見または予期されない、その中の種々の代替、変更、変形、または改良が、後に当業者によってなされる場合もあり、それらも、以下の特許請求の範囲に含まれるものとする。

【手続補正書】

【提出日】平成28年7月7日(2016.7.7)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

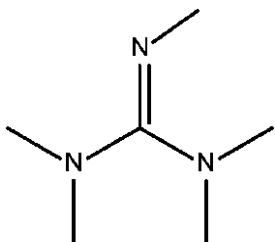
【請求項1】

毛髪をまっすぐにするまたは弛緩させるための組成物であって、

(a) 毛髪直毛化剤としてのエチレンカーボネート、

(b) ラジカル：

【化22】



によって表されるグアニジン部分を含む化合物から選択される、グアニジン誘導体ならびに／またはその有機塩および無機塩から選択される、少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤化合物と

を含む熱活性化型組成物を含み、前記組成物は、チオール基を含むすべての化合物を含まない、組成物。

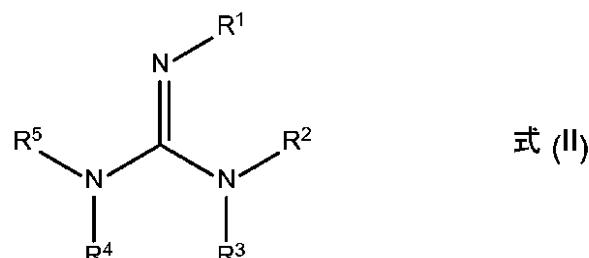
【請求項2】

前記グアニジン部分が、直鎖状または環状化合物中に存在する、請求項1に記載の組成物。

【請求項3】

前記グアニジン部分を含む化合物が、式(II)：

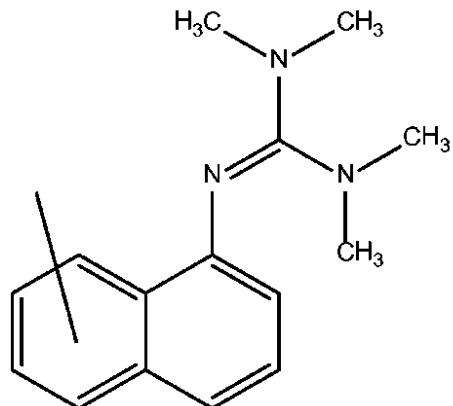
【化23】



[式中、R¹、R²、R³、R⁴、およびR⁵は、独立に、水素原子、直鎖または分岐状C₁～C₈アルキル、直鎖または分岐状C₂～C₄アルケニル、フェニル、ベンジルを表し、前記直鎖または分岐状C₁～C₄アルキル(たとえば、メチル、エチル、プロピル、ブチル)、前記直鎖または分岐状C₂～C₄アルケニル、前記フェニル、および前記ベンジル基は、ハロ(たとえば、プロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ)、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、ヒドロキシル、メチル、メトキシ、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、および-SO₃Hから選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されていてもよく、R¹、R²、R³、R⁴、およびR⁵のいずれか2つは、これらが結合している窒素原子と一緒に、2～4個の炭素原子を含み、C(O)、N、O、およびSから選択される1個または2個の(環)ヘテロ原子を必要に応じて含む、単環式または二環式の4～9員環を形成しており、前記炭素原子は、

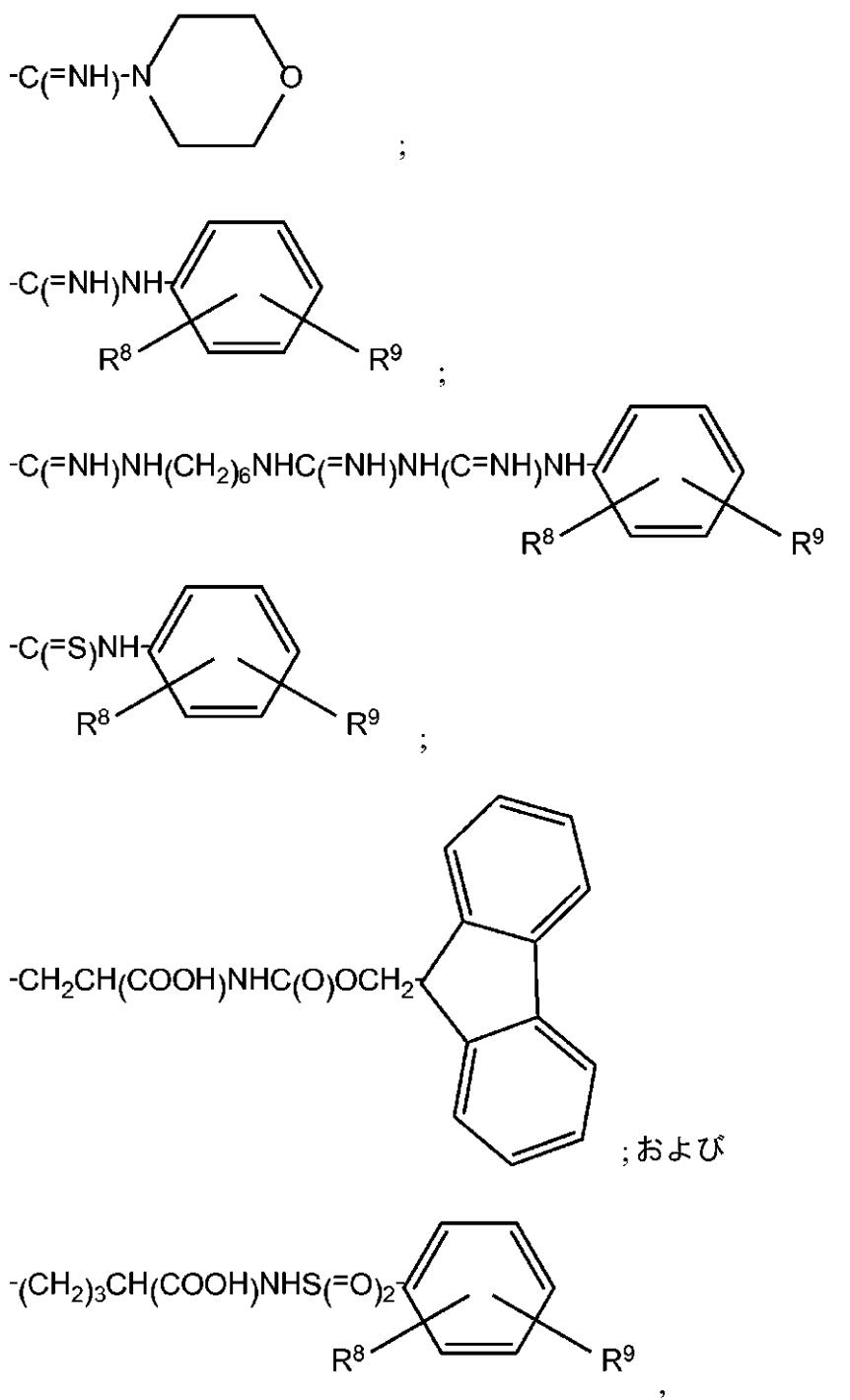
ヒドロキシルおよびアミノから選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されており、

R^1 が、水素原子、 $-C(O)OC(CH_3)_3$ 、またはラジカル
【化24】



を表すとき、 R^2 、 R^3 、 R^4 、および R^5 は、独立に、水素原子；アミノ、ニトロ、シアノ、アセチル、クロロアセチル、カルボキシル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、メトキシ、エトキシ、1,2,4-トリアゾリル、シクロペンチル、シクロヘキシル、 $-C(O)CH=CHC(O)OH$ 、 $-CH_2(CO)OCH_3$ 、 $-CH_2C(O)OCH_2CH_3$ 、 $-C(O)OC(CH_3)_3$ 、チアゾリドニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、 $-C(=NH)NH_2$ 、 $-C(=NH)-NR^6R^7$ [式中、 R^6 および R^7 は、独立に、水素原子、またはヒドロキシル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、およびカルボキサミドから選択される1つもしくは2つの置換基によって必要に応じて置換されている直鎖もしくは分岐状C₁～C₄アルキルラジカルを表す]、または

【化 2 5】



[式中、R⁸およびR⁹は、独立に、ハロ(たとえば、ブロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ)、メチル、メトキシ、トリフルオロメチル、およびトリフルオロメトキシを表す]から選択されるラジカルを表す]

によって表され、必要に応じて、

(c) 少なくとも1種の美容上許容される賦形剤

であり、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して)第1の態様では約10～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、第5の態様では約22～約30重量%の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5:1

～約10：1、第2の態様では約3：1～約9：1、第3の態様では約5：1～約8：1、第4の態様では約6：1～約7：1の範囲である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項4】

式(Ⅰ)においてAが0である、請求項1に記載の組成物。

【請求項5】

前記毛髪直毛化剤が、第1の態様では約95:5～約5:95、第2の態様では約80:20～約20:80、第3の態様では約75:25～25:75、第4の態様では約50:50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 6】

前記式(II)において、R¹、R²、およびR³が、水素原子を表し、R⁴およびR⁵が、これらが結合している窒素原子と一緒に、ピロリジン、ピペリジン、ピラゾール、チアゾリドン、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、または1,2,4-トリアゾール環を表し、前記環は、ヒドロキシリ、アミノ、およびカルボキシリ基から選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されている、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

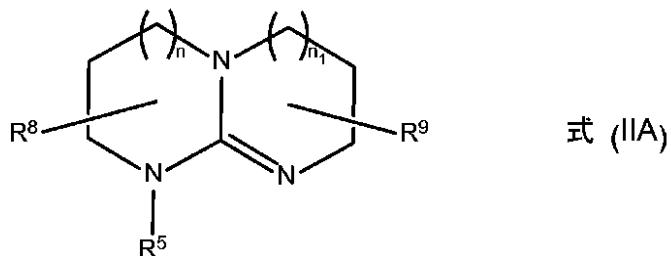
【請求項 7】

式(II)において、R¹およびR²が、水素原子を表し、R⁵が、水素原子またはメチルを表し、R³およびR⁴は、一緒にになって、-CH₂-CH₂-および-CH₂-O-から選択される二価ラジカルを表してもよく、これらが結合している窒素原子と一緒にになったとき、5員環を表す、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 8】

前記補助剤が、式（IIA）：

【化 2 7】



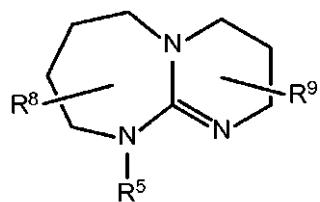
[式中、R⁵は、上で規定したとおりであり、R⁸およびR⁹は、必要に応じて存在し、存在するとき、R⁸およびR⁹の1つまたは2つは、同じまたは異なる環炭素原子に結合していてもよく、独立に、C₁～C₅アルキル、ヒドロキシル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、およびSO₃Hを表し、nおよびn₁は、独立に、0、1、または2を表す]によって表される少なくとも1種の化合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 9】

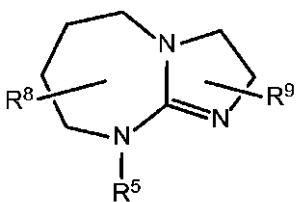
前記補助剤が、次のとおりの式 (I I B) 、 (I I C) 、 (I I D) 、 (I I E) 、 および (I I F) :

【化28】

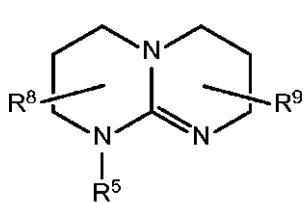
II B



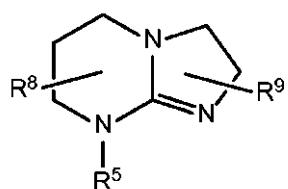
II C



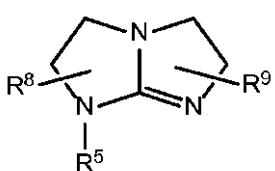
II D



II E



II F



[式中、R⁵、R⁸、およびR⁹は、前に規定したとおりである]によって表される少なくとも1種の化合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項10】

R⁵が水素原子を表し、R⁸およびR⁹が存在しない、請求項7に記載の組成物。

【請求項11】

前記補助剤が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジン硝酸塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硝酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、シアノグアニジン、ニトログアニジン、1-メチル-3-ニトログアニジン、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジフェニルグアニジン、1,3-ジ-o-トリルグアニジン、メチル4-グアニジノ-2-メトキシベンゾエート塩酸塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン硫酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン硫酸塩、1-オクチルグアニジンヘミ硫酸塩、1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、N-tert-ブトキシカルボニルグアニジン(N-Bocグアニジン)1,3-ビス(tert-ブトキシカルボニル)グアニジン(ジ-Bocグアニジン)、カルバミン酸、N,N'-[(1,1-ジメチルエトキシ)カルボニル]カルボンイミドイル]ビス-、C,C'-ビス(1,1-ジメチルエチル)エステル(N,N',N"-トリ-Bocグアニジン)、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、4-グアニジン安息香酸、4-グアニジン安息香酸塩、4-グアニジノ-2-メトキシ安息香酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1-o-トリルビグアニド、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-(

3 - クロロ - 4 - フルオロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (2 - クロロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (4 - クロロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (2 - フルオロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (3 - フルオロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (4 - フルオロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (2, 3 - ジクロロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (4 - ジクロロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (2, 5 - ジクロロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (3, 4 - ジクロロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (3, 5 - ジクロロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (2, 4 - ジフルオロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - (2, 5 - ジフルオロフェニル) ビグアニド塩酸塩、1 - [4 - (トリフルオロメチル) フェニル] ビグアニド塩酸塩、1 - [3, 5 - ジ - (トリフルオロメチル) フェニル] ビグアニド塩酸塩、1 - [4 - (トリフルオロメトキシ) フェニル] ビグアニド塩酸塩、1 - フェニルビグアニド、1 - フェニルビグアニド炭酸塩、1, 1' - ヘキサメチレンビス[5 - (4 - クロロフェニル) ビグアニド]、1, 1' - ヘキサメチレンビス(5 - [p - クロロフェニル] ビグアニド) 二塩酸塩、[({ [アミノ(イミノ)メチル] アミノ} カルボチオイル) アミノ] ベンゼン、N - シクロヘキシルグアニジン塩酸塩、N - ベンジルグアニジン塩酸塩、N - ベンジル - N - メチルグアニジンヘミ硫酸塩、1, 1, 3, 3 - テトラメチルグアニジン、1, 1, 3, 3 - テトラメチルグアニジン塩酸塩、2 - tert - ブチル - 1, 1, 3, 3 - テトラメチルグアニジン、2 - tert - ブチル - 1, 1, 3, 3 - テトラメチルグアニジン塩酸塩、4 - モルホリンカルボキシミドイルグアニジン塩酸塩、L - アルギニン、D - アルギニン、DL - アルギニン、アルギニン酸、N - トシリ - L - アルギニン、N - アミジノ - N - (2, 3 - ジヒドロキシプロピル) グリシン、N - アミジノタウリン、2 - イミノ - 1 - イミダゾリジン酢酸、1 - (2, 2 - ジエトキシエチル) グアニジン、(2S) - 3 - カルバムイミドアミド - 2 - { [(9H - フルオレン - 9 - イルメトキシ) カルボニル] アミノ} プロパン酸、1, 8 - ビス(テトラメチルグアニジノ) ナフタレン、1H - ピラゾール - 1 - カルボキサミジン塩酸塩、5 - ヒドロキシ - 3 - メチル - 1H - ピラゾール - 1 - カルボキシミドアミド、3, 5 - ジアミノ - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 1 - カルボキシミドアミド塩酸塩、2 - グアニドン - 4 - チアゾリドン、2 - グアニジノベンゾイミダゾール、2 - グアニジノベンゾオキサゾール、2 - グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10 - オクタヒドロピリミド [1, 2 - a] [1, 3] ジアゼピン(Ht bu)、2, 5, 6, 7, 8, 9 - ヘキサヒドロ - 3H - イミダゾ [1, 2 - a] [1, 3] ジアゼピン(Ht bd)、1, 5, 7 - トリアザビシクロ[4.4.0]デカ - 5 - エン(Hh pp)、3, 3, 9, 9 - テトラメチル - 1, 2, 7 - トリアザビシクロ[4.4.0]デカ - 5 - エン(HTMh pp)、3, 3, 9, 9 - テトラエチル - 1, 2, 7, - トリアザビシクロ[4.4.0]デカ - 5 - エン(HTEth pp)、1, 5, 7 - トリアザビシクロ[4.3.0]ノナ - 6 - エン(Ht bn)、1, 4, 6 - トリアザビシクロ[3.3.0]オクタ - 4 - エン(Ht bo)、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 12】

前記毛髪直毛化剤(a)が、第1の態様では約95:5~約5:95、第2の態様では約80:20~約20:80、第3の態様では約75:25~約25:75、第4の態様では約50:50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択され、前記補助剤(b)が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸水素塩、3 - グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチニエチルエステル、L - アルギニン、1, 5, 7 - トリアザビシクロ[4.4.0]デカ - 5 - エン、およびこれらの混合物から選択されるグアニジン部分を含む化合物であり、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比が、第1の態様では重量で約1.5:1~約10:1、第2の態様では約3:1~約9:1、第3の態様では約5:1~約8:1、第4の態様では約6:1~約7:1の範囲である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 3】

前記少なくとも 1 種の美容上許容される賦形剤 (c) が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH 調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 4】

前記希釈剤が、水、プロピレンカーボネート、アルコール、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 5】

前記組成物が、界面活性剤、乳化剤、皮膚軟化剤、湿潤剤、コンディション調整剤、増粘剤、およびこれらの混合物から選択される化合物を含む、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 6】

前記組成物が、噴射剤を含む、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 7】

前記組成物が、液体、クリーム、ムース、ゲル、スプレー、ローション、またはポマードの形態である、前記請求項のいずれかに記載の組成物。

【請求項 1 8】

毛髪をまっすぐにするための系であって、以下の少なくとも 2 種の別個の構成材料、すなわち、

i) 毛髪直毛化剤としてのエチレンカーボネートを含み、グアニジン部分を含む化合物 (b) を含有しない、第 1 の構成材料、

i i) 前記請求項のいずれかに記載のグアニジン部分を含む化合物 (b) から選択される少なくとも 1 種の毛髪直毛化補助剤を含み、前記毛髪直毛化化合物 (a) を含有しない、第 2 の構成材料

を含み、

i i i) 前記第 1 の構成材料 (a) および前記第 2 の構成材料 (b) は、他方と無関係に、前記請求項のいずれかに記載の美容上許容される賦形剤 (c) を必要に応じて含有し、前記第 1 の毛髪構成材料 (a) および前記第 2 の構成材料 (b) は、混ぜ合わせるのに適し、混合した後、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して) 第 1 の態様では約 10 ~ 約 70 重量%、第 2 の態様では約 12 ~ 約 50 重量%、第 3 の態様では約 15 ~ 約 40 重量%、第 4 の態様では約 20 ~ 約 35 重量%、第 5 の態様では約 22 ~ 約 30 重量% の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比は、第 1 の態様では重量で約 1.5 : 1 ~ 約 10 : 1、第 2 の態様では約 3 : 1 ~ 約 9 : 1、第 3 の態様では約 5 : 1 ~ 約 8 : 1、第 4 の態様では約 6 : 1 ~ 約 7 : 1 の範囲であり、前記構成材料は、チオール基を含むすべての化合物を含まない、系。

【請求項 1 9】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項 1 8 に記載の系。

【請求項 2 0】

前記毛髪直毛化剤が、第 1 の態様では約 95 : 5 ~ 約 5 : 95、第 2 の態様では約 80 : 20 ~ 約 20 : 80、第 3 の態様では約 75 : 25 ~ 25 : 75、第 4 の態様では約 50 : 50 の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項 1 9 に記載の系。

【請求項 2 1】

前記グアニジン部分を含む化合物 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、ア

ミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-アミジノ-N-(2,3-ヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2,2-ジエトキシエチル)グアニジン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3,5-ジアミノ-1H-1,2,4-トリアゾール-1-カルボキシミドアミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2,3,4,6,7,8,9,10-オクタヒドロピリミド[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbu)、2,5,6,7,8,9-ヘキサヒドロ-3H-イミダゾ[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbd)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(Hhpp)、3,3,9,9-テトラメチル-1,2,7,トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTMhpp)、3,3,9,9-テトラエチル-1,2,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTEthpp)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.3.0]ノナ-6-エン(Htbn)、1,4,6-トリアザビシクロ[3.3.0]オクタ-4-エン(Htbo)、および/またはこれらの混合物から選択される、請求項18から20のいずれかに記載の系。

【請求項22】

前記グアニジン部分を含む化合物(b)が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸水素塩、3-グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチニンエチルエステル、L-アルギニン、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、および/またはこれらの混合物から選択される、請求項18から20のいずれかに記載の系。

【請求項23】

前記第1の構成材料(a)が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤(c)を含む、請求項18から21のいずれかに記載の系。

【請求項24】

前記第2の構成材料(b)が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤(c)を含む、請求項18から22のいずれかに記載の系。

【請求項 25】

前記第1の構成材料(a)と前記第2の構成材料(b)とが、混ぜ合わせられると、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物となる、請求項18から24のいずれかに記載の系。

【請求項 26】

前記熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物がクリームの形態である、請求項25に記載の系。

【請求項 27】

毛髪をまっすぐにするための熱により活性化可能な組成物を調製するためのキットであつて、

i) 第1の容器に収容された毛髪直毛化構成材料(a)であつて、前記構成材料は、前記請求項のいずれかに記載の毛髪直毛化化合物から選択される少なくとも1種の毛髪直毛化剤を含み、前記第1の構成材料(a)は、グアニジン部分を含む化合物を含まない、毛髪直毛化構成材料(a)と、

i i) 第2の容器に収容された毛髪直毛化補助剤構成要素(b)であつて、前記構成要素は、前記請求項のいずれかに記載のグアニジン部分を含む化合物から選択される少なくとも1種の補助剤を含み、前記第2の構成材料(b)は、前記毛髪直毛化剤を含まない、毛髪直毛化補助剤構成要素(b)

とを含み、

i i i) 前記第1の構成材料(a)および前記第2の構成材料(b)は、他方と無関係に、前記請求項のいずれかに記載の美容上許容される賦形剤(c)を必要に応じて含有し、前記第1の毛髪直毛化剤構成材料(a)および前記第2の補助剤構成材料(b)は、混合するのに適し、混合した後、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して)第1の態様では約10～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、第5の態様では約22～約30重量%の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記毛髪直毛化補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5：1～約10：1、第2の態様では約3：1～約9：1、第3の態様では約5：1～約8：1、第4の態様では約6：1～約7：1の範囲であり、前記容器は、使用のためのキットの形態で一緒に包装される、キット。

【請求項 28】

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項27に記載のキット。

【請求項 29】

前記毛髪直毛化剤が、第1の態様では約95：5～約5：95、第2の態様では約80：20～約20：80、第3の態様では約75：25～25：75、第4の態様では約50：50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、請求項28に記載のキット。

【請求項 30】

前記グアニジン部分を含む化合物(b)が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1，3-ジアミノグアニジン塩酸塩、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1，1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1，1-ジエチルグアニジン塩酸塩、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグア

ニジノプロピオン酸、N - (2 - ヒドロキシエチル) グアニジン、N - (3 - ヒドロキシプロピル) グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N - メチルビグアニド塩酸塩、N - エチルビグアニド塩酸塩、N - プロピルビグアニド塩酸塩、N - ブチルビグアニド塩酸塩、1 , 1 - ジメチルビグアニド塩酸塩、1 - フェニルビグアニド、1 , 1 , 3 , 3 - テトラメチルグアニジン塩酸塩、2 - tert - ブチル - 1 , 1 , 3 , 3 - テトラメチルグアニジン塩酸塩、L - アルギニン、D - アルギニン、DL - アルギニン、アルギニン酸、N - アミジノ - N - (2 , 3 - ジヒドロキシプロピル) グリシン、N - アミジノタウリン、2 - イミノ - 1 - イミダゾリジン酢酸、1 - (2 , 2 - ジエトキシエチル) グアニジン、1H - ピラゾール - 1 - カルボキサミジン塩酸塩、5 - ヒドロキシ - 3 - メチル - 1H - ピラゾール - 1 - カルボキシミドアミド、3 , 5 - ジアミノ - 1H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 1 - カルボキシミドアミド塩酸塩、2 - グアニドン - 4 - チアゾリドン、2 - グアニジノベンゾイミダゾール、2 - グアニジノベンゾオキサゾール、2 - グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2 , 3 , 4 , 6 , 7 , 8 , 9 , 10 - オクタヒドロピリミド [1 , 2 - a] [1 , 3] ジアゼピン (Htbu) 、2 , 5 , 6 , 7 , 8 , 9 - ヘキサヒドロ - 3H - イミダゾ [1 , 2 - a] [1 , 3] ジアゼピン (Htbd) 、1 , 5 , 7 - トリアザビシクロ [4 . 4 . 0] デカ - 5 - エン (Hhpp) 、3 , 3 , 9 , 9 - テトラメチル - 1 , 2 , 7 , トリアザビシクロ [4 . 4 . 0] デカ - 5 - エン (HTMhpp) 、3 , 3 , 9 , 9 - テトラエチル - 1 , 2 , 7 - トリアザビシクロ [4 . 4 . 0] デカ - 5 - エン (HTEhpp) 、1 , 5 , 7 - トリアザビシクロ [4 . 3 . 0] ノナ - 6 - エン (Htbn) 、1 , 4 , 6 - トリアザビシクロ [3 . 3 . 0] オクタ - 4 - エン (Htbo) 、および / またはこれらの混合物から選択される、請求項 27 から 29 のいずれかに記載のキット。

【請求項 31】

前記グアニジン部分を含む化合物 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸水素塩、3 - グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、L - アルギニン、1 , 5 , 7 - トリアザビシクロ [4 . 4 . 0] デカ - 5 - エン、および / またはこれらの混合物から選択される、請求項 27 から 30 のいずれかに記載のキット。

【請求項 32】

前記第1の組成物が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤を含む、請求項 27 から 31 のいずれかに記載のキット。

【請求項 33】

前記第2の組成物が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤を含む、請求項 27 から 32 のいずれかに記載のキット。

【請求項 34】

前記第1の組成物と前記第2の組成物とが、混合されると、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物となる、請求項 27 から 33 のいずれかに記載のキット。

【請求項 35】

前記熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物がクリームの形態である、請求項 34 に記載のキット。

【請求項 36】

毛髪をまっすぐにする方法であって、
(i) 前記請求項のいずれかに記載の、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を用意するステップと、

(i) 前記熱により活性化可能な組成物で毛髪線維をコーティングするステップと、
(i i) コーティングされた毛髪線維を、ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり少なくとも185の温度に設定された加熱装置と接触させるステップと
を含む方法。

【請求項37】

毛髪をまっすぐにする方法であって、
(i) 前記請求項のいずれかに記載の、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を用意するステップと、

(i i) 前記熱により活性化可能な組成物で毛髪線維をコーティングするステップと、
(i i i) 前記コーティングされた線維を、一態様では少なくとも15~60分間、別の態様では少なくとも20~45分間、別の態様では少なくとも25~30分間静置するステップと、

(i v) 前記コーティングされた毛髪線維を、根本から毛先へと櫛ですくステップと、

(v) 前記櫛がけされた毛髪線維を乾燥させるステップと、

(v i) 前記コーティングされた毛髪線維を、前記ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり少なくとも185の温度に設定された加熱装置と接触させるステップと、

(v i i) 前記熱処理された毛髪線維にマスク組成物を適用するステップと、

(v i i i) 前記コンディション調整された毛髪線維をすすぎ洗浄するステップと、

(i x) 必要に応じて、前記コンディション調整された毛髪線維をシャンプー洗浄およびすすぎ洗浄するステップと、

(x i) まっすぐになった毛髪を乾燥させるステップと
を含む方法。

【請求項38】

前記加熱装置が、一態様では約185~250、別の態様では約190~約240、さらなる態様では約200~約230、またさらなる態様では約205~約215の範囲の温度に加熱される、請求項36または37に記載の方法。

【請求項39】

前記加熱装置が、一態様では少なくとも5回の反復動作で、別の態様では少なくとも10回の反復動作で、さらに別の態様では少なくとも12回の反復動作で、さらなる態様では少なくとも15回の反復動作で、同じ毛髪線維に沿って根元から毛先へと引き寄せられる、請求項36から38に記載の方法。

【請求項40】

前記加熱装置が、一態様では約1cm/秒、別の態様では約2cm/秒、さらに別の態様では約2.5cm/秒、さらなる態様では約3cm/秒、またさらなる態様では約3.5cm/秒、追加の態様では約4cm/秒の滑動速度で毛髪線維に沿って引き寄せられる、請求項39に記載の方法。

【請求項41】

前記毛髪マスクのpHが、一態様では約2~約5、別の態様では約2.5~約4.5、さらなる態様では約3~約4の範囲である、請求項36から38に記載の方法。

【請求項42】

前記加熱装置が平型アイロンである、請求項36から39に記載の方法。

【請求項43】

ホルムアルデヒドを含まない、毛髪をまっすぐにするまたは緩めるための請求項1から35に記載の熱により活性化可能な組成物。

【請求項44】

前記熱により活性化可能な組成物が、ホルムアルデヒドを含まない、請求項36から40に記載の方法。

【請求項45】

毛髪をまっすぐにするまたは緩めるための、熱活性化型組成物であって、

(a) エチレンカーボネートと、

(b) グアニジン、L-アルギニン、グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチニエチルエステル、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、およびこれらの塩、ならびにこれらの混合物から選択される補助剤化合物とを含み、前記組成物中のエチレンカーボネートの量は、(組成物の総重量に対して)約10~約35重量%の範囲であり、前記組成物中のエチレンカーボネート対前記補助剤化合物の重量比は、約2:1~約10:1の範囲である、熱活性化型組成物。

【請求項46】

プロピレンカーボネートをさらに含み、エチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比が約80:20~約20:80の範囲である、請求項45に記載の熱活性化型組成物。

【請求項47】

前記補助剤化合物の塩が、塩酸塩、硝酸塩、リン酸塩、硫酸塩、ヘミ硫酸塩、スルファン酸塩、酢酸塩、炭酸塩、炭酸水素塩、一水和物塩、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項48】

前記補助剤化合物が、L-アルギニン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチニエチルエステル塩酸塩、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、およびこれらの混合物から選択される、前記請求項のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項49】

(c) 美容上許容される賦形剤をさらに含む、前記請求項のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項50】

前記美容上許容される賦形剤が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、タンパク質、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、およびこれらの混合物から選択される、請求項49に記載の熱活性化型組成物。

【請求項51】

前記コンディション調整剤が、シリコーン、カチオン性化合物、カチオン性ポリマー、炭化水素油、天然油、天然ろう、合成ろう、およびこれらの混合物から選択される、請求項50に記載の熱活性化型組成物。

【請求項52】

前記コンディション調整剤が、ポリクアテルニウム4、ポリクアテルニウム6、ポリクアテルニウム10、ポリクアテルニウム11、ポリクアテルニウム16、ポリクアテルニウム24、ポリクアテルニウム28、ポリクアテルニウム29、ポリクアテルニウム32、ポリクアテルニウム33、ポリクアテルニウム35、ポリクアテルニウム37、ポリクアテルニウム44、ポリクアテルニウム46、ポリクアテルニウム47、ポリクアテルニウム52、ポリクアテルニウム53、ポリクアテルニウム55、ポリクアテルニウム59、ポリクアテルニウム61、ポリクアテルニウム64、ポリクアテルニウム65、ポリクアテルニウム67、ポリクアテルニウム69、ポリクアテルニウム70、ポリクアテルニウム71、ポリクアテルニウム72、ポリクアテルニウム73、ポリクアテルニウム74、ポリクアテルニウム76、ポリクアテルニウム77、ポリクアテルニウム78、ポリクアテルニウム79、ポリクアテルニウム80、ポリクアテルニウム81、ポリクアテルニウム82、ポリクアテルニウム84、ポリクアテルニウム85、ポリクアテルニウム87、およびPEG-2-ココモニウムクロリド、デンブンヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、グアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、ヒドロキシプロピルグアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、およびカッシアヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、およびこれらの混合物から選択されるカチオン性ポリマーである、請求項50に記載の熱活性化型組成物。

【請求項53】

前記組成物が、溶液、クリーム、ムース、スプレー、ゲル、ローション、またはポマードの形態である、請求項 4 6 から 5 2 のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項 5 4】

前記組成物がホルムアルデヒドを含まない、請求項 4 6 から 5 3 のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

【請求項 5 5】

商業的に入手可能な毛髪直毛化または弛緩化組成物の効力を増強する方法であって、請求項 1 から 1 7 のいずれかに記載の毛髪直毛化構成材料を含む組成物をそれに加えるステップを含む方法。

【請求項 5 6】

前記商業的に入手可能な毛髪直毛化組成物が、ホルムアルデヒド、グリオキシロイル、カルボシステイン、グリオキシル、マロンジアルデヒド、スクシンジアルデヒド、グルタルアルデヒド；グリオキシル酸、没食子酸、酒石酸、リンゴ酸、マレイン酸、イタコン酸、シユウ酸、マロン酸、メソキサル酸、フマル酸、コハク酸、イミノ二酢酸、ガラクタル酸、アジピン酸、グルタル酸、クエン酸、イソクエン酸、1, 2, 3, 4-ブタンテトラカルボン酸から選択されるカルボン酸およびその塩；尿素、ジメチロールエチレン尿素、ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素、アルキル化ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素から選択される尿素誘導体、ならびにこれらの組合せを含む、請求項 5 5 に記載の方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0010

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0010】

上で定義した熱活性化型毛髪直毛化剤 (a) および補助剤 (b) は、1種または複数の美容上許容される賦形剤 (c) を必要に応じて含んでもよい。

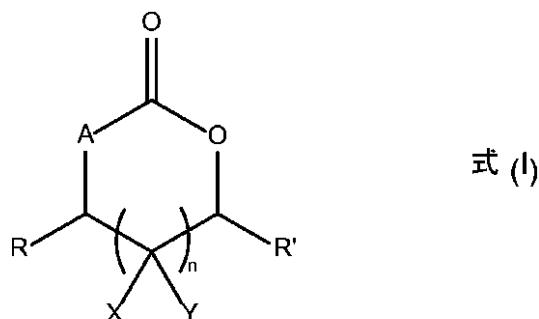
本発明は、例えば、以下を提供する。

(項目 1)

毛髪をまっすぐにするまたは弛緩させるための組成物であって、

(a) 式 (I) によって表される化合物：

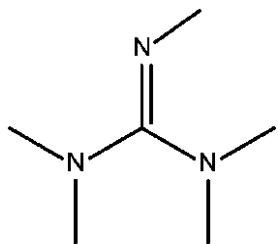
【化 21】



[式中、A は、N H および O から選択され、R および R' は、水素原子、C H 3、C H 2 C H 3、および C H 2 O H から独立に選択され、X および Y は、水素原子および C 1 ~ C 5 アルキルから独立に選択され、n = 0、または 1、または 2、または 3 である] から選択される、少なくとも 1 種の毛髪直毛化剤と、

(b) ラジカル：

【化22】



によって表されるグアニジン部分を含む化合物から選択される、グアニジン誘導体ならびに／またはその有機塩および無機塩から選択される、少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤化合物と

を含む熱活性化型組成物を含む、組成物。

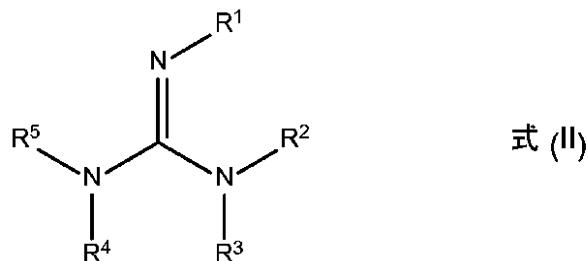
(項目2)

前記グアニジン部分が、直鎖状または環状化合物中に存在する、項目1に記載の組成物。

(項目3)

前記グアニジン部分を含む化合物が、式(II)：

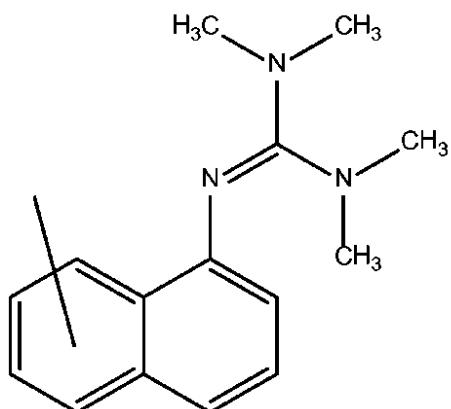
【化23】



[式中、R¹、R²、R³、R⁴、およびR⁵は、独立に、水素原子、直鎖または分岐状C₁～C₈アルキル、直鎖または分岐状C₂～C₄アルケニル、フェニル、ベンジルを表し、前記直鎖または分岐状C₁～C₄アルキル(たとえば、メチル、エチル、プロピル、ブチル)、前記直鎖または分岐状C₂～C₄アルケニル、前記フェニル、および前記ベンジル基は、ハロ(たとえば、ブロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ)、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシリル、ヒドロキシリル、メチル、メトキシ、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、および-SO₃Hから選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されていてもよく、R¹、R²、R³、R⁴、およびR⁵のいずれか2つは、これらが結合している窒素原子と一緒に、2～4個の炭素原子を含み、C(O)、N、O、およびSから選択される1個または2個の(環)ヘテロ原子を必要に応じて含む、単環式または二環式の4～9員環を形成しており、前記炭素原子は、ヒドロキシリルおよびアミノから選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されており、

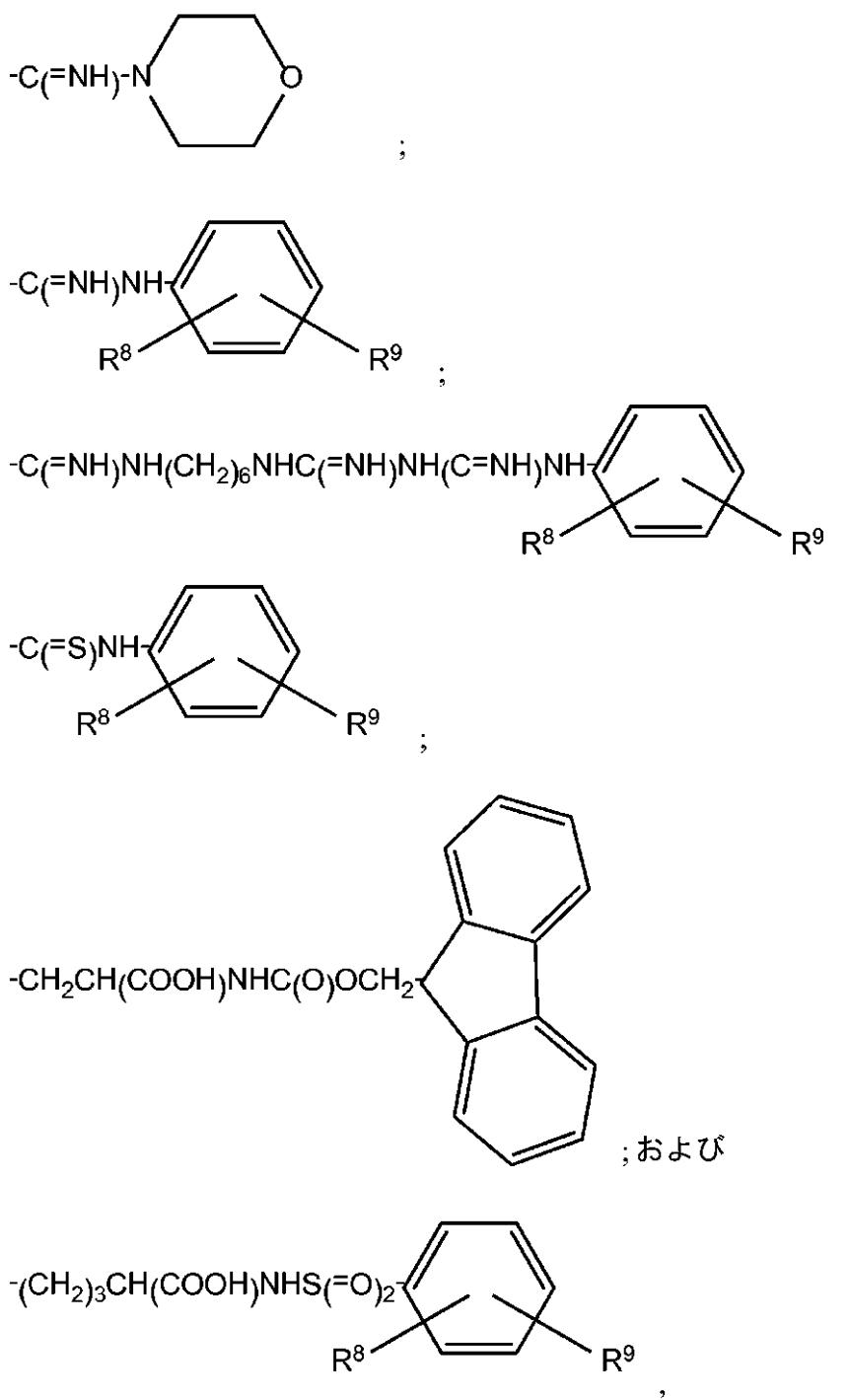
R¹が、水素原子、-C(O)OC(CH₃)₃、またはラジカル

【化24】



を表すとき、R²、R³、R⁴、およびR⁵は、独立に、水素原子；アミノ、ニトロ、シアノ、アセチル、クロロアセチル、カルボキシル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、メトキシ、エトキシ、1,2,4-トリアゾリル、シクロペンチル、シクロヘキシル、-C(O)CH=CHC(O)OH、-CH₂(CO)OCH₃、-CH₂C(O)OCH₂CH₃、-C(O)OC(CH₃)₃、チアゾリドニル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾチアゾリル、-C(=NH)NH₂、-C(=NH)-NR⁶R⁷ [式中、R⁶およびR⁷は、独立に、水素原子、またはヒドロキシル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシル、およびカルボキサミドから選択される1つもしくは2つの置換基によって必要に応じて置換されている直鎖もしくは分岐状C₁~C₄アルキルラジカルを表す]、または

【化25】



[式中、R⁸およびR⁹は、独立に、ハロ(たとえば、ブロモ、クロロ、フルオロ、ヨード、およびこれらの組合せ)、メチル、メトキシ、トリフルオロメチル、およびトリフルオロメトキシを表す]から選択されるラジカルを表す]によって表され、必要に応じて、

(c)少なくとも1種の美容上許容される賦形剤

であり、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して)第1の態様では約10～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、第5の態様では約22～約30重量%の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5:1

～約10：1、第2の態様では約3：1～約9：1、第3の態様では約5：1～約8：1、第4の態様では約6：1～約7：1の範囲である、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目4)

式(I)においてAがOである、項目1に記載の組成物。

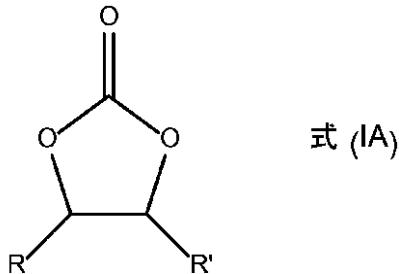
(項目5)

式(I)においてnが0である、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目6)

前記毛髪直毛化剤が、式(IA)：

【化26】



[式中、RおよびR'は、独立に、水素原子、CH₃、CH₂CH₃、およびCH₂OHから選択される]によって表される化合物である、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目7)

RおよびR'の少なくとも一方が水素原子である、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目8)

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、グリセロールカーボネート、トリメチレンカーボネート、およびこれらの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目9)

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目10)

前記毛髪直毛化剤が、第1の態様では約95：5～約5：95、第2の態様では約80：20～約20：80、第3の態様では約75：25～25：75、第4の態様では約50：50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目11)

前記式(II)において、R¹、R²、およびR³が、水素原子を表し、R⁴およびR⁵が、これらが結合している窒素原子と一緒に、ピロリジン、ピペリジン、ピラゾール、チアゾリドン、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、または1,2,4-トリアゾール環を表し、前記環は、ヒドロキシリル、アミノ、およびカルボキシリ基から選択される1つまたは2つの置換基によって必要に応じて置換されている、前記項目のいずれかに記載の組成物。

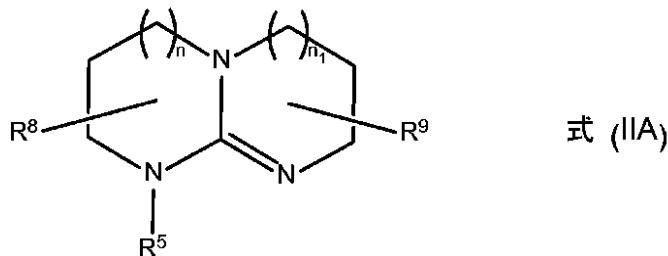
(項目12)

式(II)において、R¹およびR²が、水素原子を表し、R⁵が、水素原子またはメチルを表し、R³およびR⁴は、一緒にになって、-CH₂-CH₂-および-CH₂-O-から選択される二価ラジカルを表してもよく、これらが結合している窒素原子と一緒になったとき、5員環を表す、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目13)

前記補助剤が、式(IIA)：

【化27】



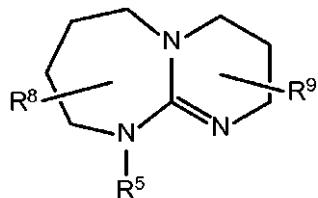
[式中、R⁵は、上で規定したとおりであり、R⁸およびR⁹は、必要に応じて存在し、存在するとき、R⁸およびR⁹の1つまたは2つは、同じまたは異なる環炭素原子に結合していてもよく、独立に、C₁～C₅アルキル、ヒドロキシリル、アミノ、ジメチルアミノ、カルボキシリル、カルボキサミド、N-メチルカルボキサミド、およびSO₃Hを表し、nおよびn₁は、独立に、0、1、または2を表す]によって表される少なくとも1種の化合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目14)

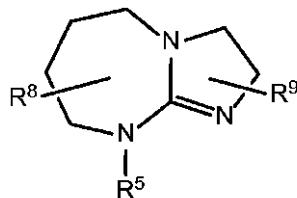
前記補助剤が、次のとおりの式(II B)、(II C)、(II D)、(II E)、および(II F)：

【化28】

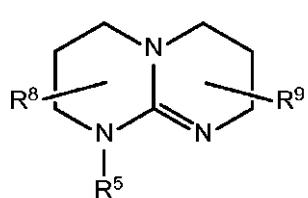
II B



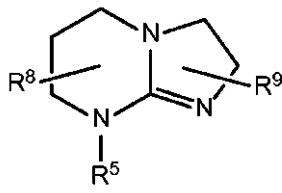
II C



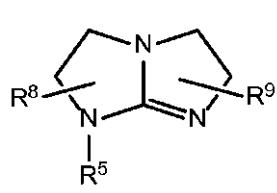
II D



II E



II F



[式中、R⁵、R⁸、およびR⁹は、前に規定したとおりである]によって表される少なくとも1種の化合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目15)

R⁵が水素原子を表し、R⁸およびR⁹が存在しない、項目12に記載の組成物。

(項目16)

前記補助剤が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジン硝酸塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグア

ニジン硝酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、シアノグアニジン、ニトログアニジン、1-メチル-3-ニトログアニジン、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジフェニルグアニジン、1,3-ジ-o-トリルグアニジン、メチル4-グアニジノ-2-メトキシベンゾエート塩酸塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン硫酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン硫酸塩、1-オクチルグアニジンヘミ硫酸塩、1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、N-tert-ブトキシカルボニルグアニジン(N-Bocグアニジン)1,3-ビス(tert-ブトキシカルボニル)グアニジン(ジ-Bocグアニジン)、カルバミン酸、N,N'-[[[(1,1-ジメチルエトキシ)カルボニル]カルボンイミドイル]ビス-、C,C'-ビス(1,1-ジメチルエチル)エステル(N,N',N"-トリ-Bocグアニジン)、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、4-グアニジン安息香酸、4-グアニジン安息香酸塩酸塩、4-グアニジノ-2-メトキシ安息香酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1-o-トリルビグアニド、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-(3-クロロ-4-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2-クロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(4-クロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(4-フルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,3-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,4-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,5-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,6-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3,4-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(3,5-ジクロロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-(2,4-ジフルオロフェニル)ビグアニド塩酸塩、1-[4-(トリフルオロメチル)フェニル]ビグアニド塩酸塩、1-[3,5-ジ-(トリフルオロメチル)フェニル]ビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1-フェニルビグアニド炭酸塩、1,1'-ヘキサメチレンビス[5-(4-クロロフェニル)ビグアニド]、1,1'-ヘキサメチレンビス(5-[p-クロロフェニル]ビグアニド)ニ塩酸塩、[({ [アミノ(イミノ)メチル]アミノ}カルボチオイル)アミノ]ベンゼン、N-シクロヘキシルグアニジン塩酸塩、N-ベンジルグアニジン塩酸塩、N-ベンジル-N-メチルグアニジンヘミ硫酸塩、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、2-tert-ブチル-1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、4-モルホリンカルボキシミドイルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-トシリ-L-アルギニン、N-アミジノ-N-(2,3-ジヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2,2-ジエトキシエチル)グアニジン、(2S)-3-カルバムイミドアミド-2-{[(9H-フルオレン-9-イルメトキシ)カルボニル]アミノ}プロパン酸、1,8-ビス(テトラメチルグアニジノ)ナフタレン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3,5-ジアミノ-1H-1,2,4-トリアゾール-1-カルボキシミドアミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2,3,4

, 6, 7, 8, 9, 10 - オクタヒドロピリミド [1, 2 - a] [1, 3] ジアゼピン (Ht b u)、2, 5, 6, 7, 8, 9 - ヘキサヒドロ - 3H - イミダゾ [1, 2 - a] [1, 3] ジアゼピン (Ht b d)、1, 5, 7 - トリアザビシクロ [4. 4. 0] デカ - 5 - エン (Hh p p)、3, 3, 9, 9 - テトラメチル - 1, 2, 7 - トリアザビシクロ [4. 4. 0] デカ - 5 - エン (HTMh p p)、3, 3, 9, 9 - テトラエチル - 1, 2, 7, - トリアザビシクロ [4. 4. 0] デカ - 5 - エン (HTEh p p)、1, 5, 7 - トリアザビシクロ [4. 3. 0] ノナ - 6 - エン (Ht b n)、1, 4, 6 - トリアザビシクロ [3. 3. 0] オクタ - 4 - エン (Ht b o)、およびこれらの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目17)

前記毛髪直毛化剤 (a) が、第1の態様では約 95 : 5 ~ 約 5 : 95 、第2の態様では約 80 : 20 ~ 約 20 : 80 、第3の態様では約 75 : 25 ~ 約 25 : 75 、第4の態様では約 50 : 50 の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択され、前記補助剤 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸水素塩、3 - グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、L - アルギニン、1, 5, 7 - トリアザビシクロ [4. 4. 0] デカ - 5 - エン、およびこれらの混合物から選択されるグアニジン部分を含む化合物であり、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比が、第1の態様では重量で約 1. 5 : 1 ~ 約 10 : 1 、第2の態様では約 3 : 1 ~ 約 9 : 1 、第3の態様では約 5 : 1 ~ 約 8 : 1 、第4の態様では約 6 : 1 ~ 約 7 : 1 の範囲である、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目18)

前記少なくとも1種の美容上許容される賦形剤 (c) が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目19)

前記希釈剤が、水、プロピレンカーボネート、アルコール、およびこれらの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目20)

前記組成物が、界面活性剤、乳化剤、皮膚軟化剤、湿潤剤、コンディション調整剤、増粘剤、およびこれらの混合物から選択される化合物を含む、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目21)

前記組成物が、噴射剤を含む、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目22)

前記組成物が、液体、クリーム、ムース、ゲル、スプレー、ローション、またはポマードの形態である、前記項目のいずれかに記載の組成物。

(項目23)

毛髪をまっすぐにするための系であって、以下の少なくとも2種の別個の構成材料、すなわち、

i) 前記項目のいずれかに記載の毛髪直毛化化合物 (a) から選択される少なくとも1種の毛髪直毛化剤を含み、グアニジン部分を含む化合物 (b) を含有しない、第1の構成材料、

i i) 前記項目のいずれかに記載のグアニジン部分を含む化合物 (b) から選択される少なくとも1種の毛髪直毛化補助剤を含み、前記毛髪直毛化化合物 (a) を含有しない、第2の構成材料

を含み、

i i i) 前記第1の構成材料 (a) および前記第2の構成材料 (b) は、他方と無関係に

、前記項目のいずれかに記載の美容上許容される賦形剤(c)を必要に応じて含有し、前記第1の毛髪構成材料(a)および前記第2の構成材料(b)は、混ぜ合わせるのに適し、混合した後、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して)第1の態様では約10～約70重量%、第2の態様では約12～約50重量%、第3の態様では約15～約40重量%、第4の態様では約20～約35重量%、第5の態様では約22～約30重量%の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記補助剤の比は、第1の態様では重量で約1.5：1～約10：1、第2の態様では約3：1～約9：1、第3の態様では約5：1～約8：1、第4の態様では約6：1～約7：1の範囲である、系。

(項目24)

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、グリセロールカーボネート、トリメチレンカーボネート、およびこれらの混合物から選択される、項目23に記載の系。

(項目25)

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、項目23に記載の系。

(項目26)

前記毛髪直毛化剤が、第1の態様では約95：5～約5：95、第2の態様では約80：20～約20：80、第3の態様では約75：25～25：75、第4の態様では約50：50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、項目25に記載の系。

(項目27)

前記グアニジン部分を含む化合物(b)が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1，3-ジアミノグアニジン塩酸塩、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1，1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1，1-ジエチルグアニジン塩酸塩、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1，1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1，1，3，3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、2-tert-ブチル-1，1，3，3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-アミジノ-N-(2，3-ヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2，2-ジエトキシエチル)グアニジン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3，5-ジアミノ-1H-1，2，4-トリアゾール-1-カルボキシミドアミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2，3，4，6，7，8，9，10-オクタヒドロピリミド[1，2-a][1，3]ジアゼピン(H t b u)、2，5，6，7，8，9-ヘキサヒドロ-3H-イミダゾ[1，2-a][1，3]ジアゼピン(H t b d)、1，5，7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(H h p p)、3，3，9，9-テトラメチル-1，2，7，トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(H T)

M h p p)、3, 3, 9, 9 - テトラエチル - 1, 2, 7 - トリアザビシクロ [4. 4. 0] デカ - 5 - エン (H T E h p p)、1, 5, 7 - トリアザビシクロ [4. 3. 0] ノナ - 6 - エン (H t b n)、1, 4, 6 - トリアザビシクロ [3. 3. 0] オクタ - 4 - エン (H t b o)、および / またはこれらの混合物から選択される、項目 23 から 26 のいずれかに記載の系。

(項目 28)

前記グアニジン部分を含む化合物 (b) が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸水素塩、3 - グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、L - アルギニン、1, 5, 7 - トリアザビシクロ [4. 4. 0] デカ - 5 - エン、および / またはこれらの混合物から選択される、項目 23 から 26 のいずれかに記載の系。

(項目 29)

前記第 1 の構成材料 (a) が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH 調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤 (c) を含む、項目 23 から 27 のいずれかに記載の系。

(項目 30)

前記第 2 の構成材料 (b) が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH 調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤 (c) を含む、項目 23 から 28 のいずれかに記載の系。

(項目 31)

前記第 1 の構成材料 (a) と前記第 2 の構成材料 (b) とが、混ぜ合わせられると、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物となる、項目 23 から 30 のいずれかに記載の系。

(項目 32)

前記熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物がクリームの形態である、項目 31 に記載の系。

(項目 33)

毛髪をまっすぐにするための熱により活性化可能な組成物を調製するためのキットであって、

i) 第 1 の容器に収容された毛髪直毛化構成材料 (a) であって、前記構成材料は、前記項目のいずれかに記載の毛髪直毛化化合物から選択される少なくとも 1 種の毛髪直毛化剤を含み、前記第 1 の構成材料 (a) は、グアニジン部分を含む化合物を含まない、毛髪直毛化構成材料 (a) と、

ii) 第 2 の容器に収容された毛髪直毛化補助剤構成要素 (b) であって、前記構成要素は、前記項目のいずれかに記載のグアニジン部分を含む化合物から選択される少なくとも 1 種の補助剤を含み、前記第 2 の構成材料 (b) は、前記毛髪直毛化剤を含まない、毛髪直毛化補助剤構成要素 (b) とを含み、

iii) 前記第 1 の構成材料 (a) および前記第 2 の構成材料 (b) は、他方と無関係に、前記項目のいずれかに記載の美容上許容される賦形剤 (c) を必要に応じて含有し、前記第 1 の毛髪直毛化剤構成材料 (a) および前記第 2 の補助剤構成材料 (b) は、混合するのに適し、混合した後、前記毛髪直毛化剤は、(組成物の総重量に対して) 第 1 の態様では約 10 ~ 約 70 重量 %、第 2 の態様では約 12 ~ 約 50 重量 %、第 3 の態様では約 15 ~ 約 40 重量 %、第 4 の態様では約 20 ~ 約 35 重量 %、第 5 の態様では約 22 ~ 約 30 重量 % の範囲の量で存在し、前記毛髪直毛化剤対前記毛髪直毛化補助剤の比は、第 1 の態様では重量で約 1.5 : 1 ~ 約 10 : 1、第 2 の態様では約 3 : 1 ~ 約 9 : 1、第 3 の態様では約 5 : 1 ~ 約 8 : 1、第 4 の態様では約 6 : 1 ~ 約 7 : 1 の範囲であり、

前記容器は、使用のためのキットの形態で一緒に包装される、キット。

(項目34)

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネート、プロピレンカーボネート、ブチレンカーボネート、グリセロールカーボネート、トリメチレンカーボネート、およびこれらの組合せから選択される、項目33に記載のキット。

(項目35)

前記毛髪直毛化剤が、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、項目34に記載のキット。

(項目36)

前記毛髪直毛化剤が、第1の態様では約95:5~約5:95、第2の態様では約80:20~約20:80、第3の態様では約75:25~25:75、第4の態様では約50:50の範囲であるエチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比で存在する、エチレンカーボネートとプロピレンカーボネートの混合物から選択される、項目35に記載のキット。

(項目37)

前記グアニジン部分を含む化合物(b)が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジン酢酸塩、グアニジン硫酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジン炭酸水素塩、グアニジンリン酸塩、グアニジンスルファミン酸塩、アミノグアニジン、アミノグアニジン塩酸塩、アミノグアニジン硫酸塩、アミノグアニジン炭酸水素塩、1,3-ジアミノグアニジン塩酸塩、1-アセチルグアニジン、クロロアセチルグアニジン塩酸塩、グアニル尿素、グアニル尿素リン酸塩、フェニルグアニジン炭酸塩、フェニルグアニジン炭酸水素塩、1-メチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジメチルグアニジン塩酸塩、1-エチルグアニジン塩酸塩、1,1-ジエチルグアニジン塩酸塩、クレアチン、クレアチニン水和物、クレアチニン、クレアチニン塩酸塩、クレアチニンエチルエステル、アグマチン、アグマチン硫酸塩、グアニジノ酢酸、グアニジノコハク酸、3-グアニジノプロピオン酸、4-グアニジノ酪酸、5-グアニジノ吉草酸、ベータ-N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-メチルグアニジノプロピオン酸、N-(2-ヒドロキシエチル)グアニジン、N-(3-ヒドロキシプロピル)グアニジン、ビグアニド塩酸塩、N-メチルビグアニド塩酸塩、N-エチルビグアニド塩酸塩、N-プロピルビグアニド塩酸塩、N-ブチルビグアニド塩酸塩、1,1-ジメチルビグアニド塩酸塩、1-フェニルビグアニド、1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、2-tert-ブチル-1,1,3,3-テトラメチルグアニジン塩酸塩、L-アルギニン、D-アルギニン、DL-アルギニン、アルギニン酸、N-アミジノ-N-(2,3-ジヒドロキシプロピル)グリシン、N-アミジノタウリン、2-イミノ-1-イミダゾリジン酢酸、1-(2,2-ジエトキシエチル)グアニジン、1H-ピラゾール-1-カルボキサミジン塩酸塩、5-ヒドロキシ-3-メチル-1H-ピラゾール-1-カルボキシミドアミド、3,5-ジアミノ-1H-1,2,4-トリアゾール-1-カルボキシミドアミド塩酸塩、2-グアニドン-4-チアゾリドン、2-グアニジノベンゾイミダゾール、2-グアニジノベンゾオキサゾール、2-グアニジノベンゾチアゾール、ピロリジノホルムアミジン塩酸塩、2,3,4,6,7,8,9,10-オクタヒドロピリミド[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbu)、2,5,6,7,8,9-ヘキサヒドロ-3H-イミダゾ[1,2-a][1,3]ジアゼピン(Htbd)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(Hhpp)、3,3,9,9-テトラメチル-1,2,7,トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTEthpp)、3,3,9,9-テトラエチル-1,2,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン(HTEthpp)、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]ノナ-6-エン(Htbn)、1,4,6-トリアザビシクロ[3.3.0]オクタ-4-エン(Htbo)、および/またはこれらの混合物から選択される、項目33から36のいずれかに記載のキット。

(項目38)

前記グアニジン部分を含む化合物(b)が、グアニジン、グアニジン塩酸塩、グアニジ

ン炭酸水素塩、3-グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、L-アルギニン、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、および/またはこれらの混合物から選択される、項目33から37のいずれかに記載のキット。

(項目39)

前記第1の組成物が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤を含む、項目33から38のいずれかに記載のキット。

(項目40)

前記第2の組成物が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物、湿潤剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、帯電防止剤、縮れ防止剤、およびこれらの混合物から選択される美容上許容される賦形剤を含む、項目33から39のいずれかに記載のキット。

(項目41)

前記第1の組成物と前記第2の組成物とが、混合されると、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物となる、項目33から40のいずれかに記載のキット。

(項目42)

前記熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物がクリームの形態である、項目41に記載のキット。

(項目43)

毛髪をまっすぐにする方法であって、

(i) 前記項目のいずれかに記載の、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を用意するステップと、

(i) 前記熱により活性化可能な組成物で毛髪線維をコーティングするステップと、

(ii) コーティングされた毛髪線維を、ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり少なくとも185の温度に設定された加熱装置と接触させるステップとを含む方法。

(項目44)

毛髪をまっすぐにする方法であって、

(i) 前記項目のいずれかに記載の、熱により活性化可能な毛髪直毛化組成物を用意するステップと、

(ii) 前記熱により活性化可能な組成物で毛髪線維をコーティングするステップと、

(iii) 前記コーティングされた線維を、一態様では少なくとも15~60分間、別の態様では少なくとも20~45分間、別の態様では少なくとも25~30分間静置するステップと、

(iv) 前記コーティングされた毛髪線維を、根本から毛先へと櫛でくすぐるステップと、

(v) 前記櫛がけされた毛髪線維を乾燥させるステップと、

(vi) 前記コーティングされた毛髪線維を、前記ケラチン線維を改質するのに十分な時間にわたり少なくとも185の温度に設定された加熱装置と接触させるステップと、

(vii) 前記熱処理された毛髪線維にマスク組成物を適用するステップと、

(viii) 前記コンディション調整された毛髪線維をすすぎ洗浄するステップと、

(ix) 必要に応じて、前記コンディション調整された毛髪線維をシャンプー洗浄およびすすぎ洗浄するステップと、

(xi) まっすぐになった毛髪を乾燥させるステップと

を含む方法。

(項目45)

前記加熱装置が、一態様では約185~250、別の態様では約190~約240

、さらなる態様では約200～約230、またさらなる態様では約205～約215の範囲の温度に加熱される、項目43または44に記載の方法。

(項目46)

前記加熱装置が、一態様では少なくとも5回の反復動作で、別の態様では少なくとも10回の反復動作で、さらに別の態様では少なくとも12回の反復動作で、さらなる態様では少なくとも15回の反復動作で、同じ毛髪線維に沿って根元から毛先へと引き寄せられる、項目44または45に記載の方法。

(項目47)

前記加熱装置が、一態様では約1cm/秒、別の態様では約2cm/秒、さらに別の態様では約2.5cm/秒、さらなる態様では約3cm/秒、またさらなる態様では約3.5cm/秒、追加の態様では約4cm/秒の滑動速度で毛髪線維に沿って引き寄せられる、項目46に記載の方法。

(項目48)

前記毛髪マスクのpHが、一態様では約2～約5、別の態様では約2.5～約4.5、さらなる態様では約3～約4の範囲である、項目44または45に記載の方法。

(項目49)

前記加熱装置が平型アイロンである、項目43から46に記載の方法。

(項目50)

ホルムアルデヒドを含まない、毛髪をまっすぐにするまたは緩めるための項目1から42に記載の熱により活性化可能な組成物。

(項目51)

前記熱により活性化可能な組成物が、ホルムアルデヒドを含まない、項目43から47に記載の方法。

(項目52)

毛髪をまっすぐにするまたは緩めるための、熱活性化型組成物であって、

(a) エチレンカーボネートと、

(b) グアニジン、L-アルギニン、グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチン、クレアチンエチルエステル、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、およびこれらの塩、ならびにこれらの混合物から選択される補助剤化合物とを含み、前記組成物中のエチレンカーボネートの量は、(組成物の総重量に対して)約10～約35重量%の範囲であり、前記組成物中のエチレンカーボネート対前記補助剤化合物の重量比は、約2:1～約10:1の範囲である、熱活性化型組成物。

(項目52)

プロピレンカーボネートをさらに含み、エチレンカーボネート対プロピレンカーボネートの重量比が約80:20～約20:80の範囲である、項目52に記載の熱活性化型組成物。

(項目53)

前記補助剤化合物の塩が、塩酸塩、硝酸塩、リン酸塩、硫酸塩、ヘミ硫酸塩、スルファン酸塩、酢酸塩、炭酸塩、炭酸水素塩、一水和物塩、およびこれらの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

(項目54)

前記補助剤化合物が、L-アルギニン、グアニジン塩酸塩、グアニジン炭酸塩、グアニジノプロピオン酸、クレアチニン、クレアチンエチルエステル塩酸塩、1,5,7-トリアザビシクロ[4.4.0]デカ-5-エン、およびこれらの混合物から選択される、前記項目のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

(項目55)

(c) 美容上許容される賦形剤をさらに含む、前記項目のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

(項目56)

前記美容上許容される賦形剤が、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、タンパク質、湿潤

剤、着香剤、香料、皮膚軟化剤、界面活性剤、増粘剤、粘度調整剤、乳化剤、乳白剤、噴射剤、希釈剤、pH調整剤、緩衝剤、コンディション調整剤、およびこれらの混合物から選択される、項目55に記載の熱活性化型組成物。

(項目57)

前記コンディション調整剤が、シリコーン、カチオン性化合物、カチオン性ポリマー、炭化水素油、天然油、天然ろう、合成ろう、およびこれらの混合物から選択される、項目56に記載の熱活性化型組成物。

(項目58)

前記コンディション調整剤が、ポリクアテルニウム4、ポリクアテルニウム6、ポリクアテルニウム10、ポリクアテルニウム11、ポリクアテルニウム16、ポリクアテルニウム24、ポリクアテルニウム28、ポリクアテルニウム29、ポリクアテルニウム32、ポリクアテルニウム33、ポリクアテルニウム35、ポリクアテルニウム37、ポリクアテルニウム44、ポリクアテルニウム46、ポリクアテルニウム47、ポリクアテルニウム52、ポリクアテルニウム53、ポリクアテルニウム55、ポリクアテルニウム59、ポリクアテルニウム61、ポリクアテルニウム64、ポリクアテルニウム65、ポリクアテルニウム67、ポリクアテルニウム69、ポリクアテルニウム70、ポリクアテルニウム71、ポリクアテルニウム72、ポリクアテルニウム73、ポリクアテルニウム74、ポリクアテルニウム76、ポリクアテルニウム77、ポリクアテルニウム78、ポリクアテルニウム79、ポリクアテルニウム80、ポリクアテルニウム81、ポリクアテルニウム82、ポリクアテルニウム84、ポリクアテルニウム85、ポリクアテルニウム87、およびPEG-2-ココモニウムクロリド、デンブンヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、グアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、ヒドロキシプロピルグアーヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、およびカッシアヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、およびこれらの混合物から選択されるカチオン性ポリマーである、項目56に記載の熱活性化型組成物。

(項目59)

前記組成物が、溶液、クリーム、ムース、スプレー、ゲル、ローション、またはポマードの形態である、項目52から58のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

(項目60)

前記組成物がホルムアルデヒドを含まない、項目52から59のいずれかに記載の熱活性化型組成物。

(項目61)

商業的に入手可能な毛髪直毛化または弛緩化組成物の効力を増強する方法であって、項目1から22のいずれかに記載の毛髪直毛化構成材料を含む組成物をそれに加えるステップを含む方法。

(項目62)

前記商業的に入手可能な毛髪直毛化組成物が、ホルムアルデヒド、グリオキシロイル、カルボシステイン、グリオキシル、マロンジアルデヒド、スクシンジアルデヒド、グルタルアルデヒド；グリオキシル酸、没食子酸、酒石酸、リンゴ酸、マレイン酸、イタコン酸、シユウ酸、マロン酸、メソキサル酸、フマル酸、コハク酸、イミノニ酢酸、ガラクタル酸、アジピン酸、グルタル酸、クエン酸、イソクエン酸、1,2,3,4-ブタンテトラカルボン酸から選択されるカルボン酸およびその塩；尿素、ジメチロールエチレン尿素、ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素、アルキル化ジメチロールジヒドロキシエチレン尿素から選択される尿素誘導体、ならびにこれらの組合せを含む、項目61に記載の方法。

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No PCT/US2014/064217						
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. A61Q5/04 A61K8/49 A61K8/43 ADD.								
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC								
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) A61Q A61K								
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched								
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal, CHEM ABS Data, WPI Data								
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left; padding: 2px;">Category*</th> <th style="text-align: left; padding: 2px;">Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages</th> <th style="text-align: left; padding: 2px;">Relevant to claim No.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td style="text-align: center; padding: 2px;">X</td> <td style="padding: 2px;">WO 2006/111255 A1 (HENKEL KGAA [DE]; HOEFFKES HORST [DE]; GROSS WIBKE [DE]; KNUEBEL GEORG) 26 October 2006 (2006-10-26) page 100 ----- -/-</td> <td style="text-align: center; padding: 2px;">1,2,4-9, 16, 18-20, 22-24, 27-34, 37-42, 50,51, 54-57, 59,60</td> </tr> </tbody> </table>			Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.	X	WO 2006/111255 A1 (HENKEL KGAA [DE]; HOEFFKES HORST [DE]; GROSS WIBKE [DE]; KNUEBEL GEORG) 26 October 2006 (2006-10-26) page 100 ----- -/-	1,2,4-9, 16, 18-20, 22-24, 27-34, 37-42, 50,51, 54-57, 59,60
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.						
X	WO 2006/111255 A1 (HENKEL KGAA [DE]; HOEFFKES HORST [DE]; GROSS WIBKE [DE]; KNUEBEL GEORG) 26 October 2006 (2006-10-26) page 100 ----- -/-	1,2,4-9, 16, 18-20, 22-24, 27-34, 37-42, 50,51, 54-57, 59,60						
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C.		<input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.						
* Special categories of cited documents : "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed								
Date of the actual completion of the international search		Date of mailing of the international search report						
14 January 2015		05/02/2015						
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Authorized officer Bader, Karl Günther						

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/US2014/064217

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WO 2008/012733 A2 (PROCTER & GAMBLE [US]; WELLA AG [DE]; CASSIER THORSTEN [DE]; SCHREIBER) 31 January 2008 (2008-01-31) page 4, line 1 - line 30 page 18, line 15 - line 29 -----	3,10-15, 17,21, 25,26, 35,36, 43-49, 52,53, 58,61,62
Y	WO 2010/049434 A2 (OREAL [FR]; DIXON FELICIA [US]; PISTORIO BRADFORD [US]; ELLINGTON ANGE) 6 May 2010 (2010-05-06) paragraph [0103] - paragraph [0107] paragraph [0138] - paragraph [0182] -----	3,10-15, 17,21, 25,26, 35,36, 43-49, 52,53, 58,61,62
Y	US 2007/071702 A1 (PHILIPPE MICHEL [FR]) 29 March 2007 (2007-03-29) paragraph [0009] - paragraph [0017] -----	3,10-15, 17,21, 25,26, 35,36, 43-49, 52,53, 58,61,62
Y	US 3 966 903 A (TORII KENJI ET AL) 29 June 1976 (1976-06-29) column 2, line 30 - line 40 -----	3,10-15, 17,21, 25,26, 35,36, 43-49, 52,53, 58,61,62
Y	WO 97/07775 A1 (JOHNSON PRODUCTS CO [US]) 6 March 1997 (1997-03-06) pages 3,7 -----	3,10-15, 17,21, 25,26, 35,36, 43-49, 52,53, 58,61,62

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/US2014/064217

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 2006111255	A1	26-10-2006	DE 102005017913 A1 WO 2006111255 A1	26-10-2006 26-10-2006
WO 2008012733	A2	31-01-2008	AU 2007278089 A1 BR P10714546 A2 CA 2658737 A1 CN 101500533 A EP 1880710 A1 JP 2009544606 A US 2008075681 A1 WO 2008012733 A2	31-01-2008 17-09-2013 31-01-2008 05-08-2009 23-01-2008 17-12-2009 27-03-2008 31-01-2008
WO 2010049434	A2	06-05-2010	CN 102231974 A EP 2340010 A2 KR 20110079825 A US 2011256084 A1 WO 2010049434 A2	02-11-2011 06-07-2011 08-07-2011 20-10-2011 06-05-2010
US 2007071702	A1	29-03-2007	AR 036750 A1 AT 332168 T BR 0204100 A CA 2404808 A1 DE 60212918 T2 EP 1302194 A1 ES 2262769 T3 FR 2830442 A1 JP 2003176215 A KR 20030030852 A MX PA02009118 A US 2003133898 A1 US 2007071702 A1	29-09-2004 15-07-2006 16-09-2003 09-04-2003 08-02-2007 16-04-2003 01-12-2006 11-04-2003 24-06-2003 18-04-2003 13-12-2004 17-07-2003 29-03-2007
US 3966903	A	29-06-1976	CA 1021696 A1 DE 2421248 A1 FR 2227855 A1 GB 1418605 A IT 1046510 B JP S5710085 B2 JP S49134847 A US 3966903 A	29-11-1977 14-11-1974 29-11-1974 24-12-1975 31-07-1980 24-02-1982 25-12-1974 29-06-1976
WO 9707775	A1	06-03-1997	CA 2230224 A1 GB 2319787 A HK 1011183 A1 US 5679327 A WO 9707775 A1	06-03-1997 03-06-1998 28-04-2000 21-10-1997 06-03-1997

フロントページの続き

(81)指定国 AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,MK,MT,NL,NO,PL,PT,R0,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CZ,DE,DK,DM,D0,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IR,IS,JP,KE,KG,KN,KP,KR,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,ME,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PA,PE,PG,PH,PL,PT,QA,RO,RS,RU,RW,SA,SC,SD,SE,SG,SK,SL,SM,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US

(72)発明者 ホワード, ニール

アメリカ合衆国 オハイオ 44141-3247, クリーブランド, ブレックスビル ロード 9911

(72)発明者 ラファティー, デニス ダブリュー.

アメリカ合衆国 オハイオ 44141-3247, クリーブランド, ブレックスビル ロード 9911

(72)発明者 ゼリア, ジョセフ エー.

アメリカ合衆国 オハイオ 44141-3247, クリーブランド, ブレックスビル ロード 9911

(72)発明者 リベイロ, クラウディオ

ブラジル連邦共和国 サンパウロ セーエーペー: 01407-000, ジャルディン パウリスタ, アヴェニーダ ノーヴェ ドゥ ジューリヨ, ナンバー 3653

(72)発明者 ディアス, レベカ

ブラジル連邦共和国 サンパウロ セーエーペー: 01407-000, ジャルディン パウリスタ, アヴェニーダ ノーヴェ ドゥ ジューリヨ, ナンバー 3653

(72)発明者 バストス, ルシエネ バプティスタ

ブラジル連邦共和国 サンパウロ セーエーペー: 09195-203, ヴィーラ レオポウジナ, ルア マルチン アフォンソ デ ソウザ, 203 ベーイ ア アペーテオ 42

F ターム(参考) 4C083 AA111 AB032 AB051 AB332 AC012 AC022 AC072 AC101 AC122 AC132

AC302 AC342 AC352 AC402 AC422 AC532 AC581 AC582 AC642 AC692

AC712 AC741 AC742 AC782 AC841 AC842 AC851 AC852 AC862 AD132

AD172 AD202 AD411 AD611 BB01 BB41 BB44 BB45 BB47 BB48

BB49 CC34 DD08 DD22 DD23 DD31 DD41 EE25