

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号
特許第6286030号
(P6286030)

(45) 発行日 平成30年2月28日 (2018. 2. 28)

(24) 登録日 平成30年2月9日 (2018. 2. 9)

(51) Int. Cl.	F I
A 6 1 K 8/362 (2006. 01)	A 6 1 K 8/362
A 6 1 K 8/41 (2006. 01)	A 6 1 K 8/41
A 6 1 Q 5/00 (2006. 01)	A 6 1 Q 5/00
A 6 1 Q 5/10 (2006. 01)	A 6 1 Q 5/10
A 6 1 Q 5/08 (2006. 01)	A 6 1 Q 5/08

請求項の数 79 (全 63 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2016-515948 (P2016-515948)	(73) 特許権者	516031185
(86) (22) 出願日	平成26年8月1日 (2014. 8. 1)		リクウィッド, インコーポレイテッド
(65) 公表番号	特表2016-523844 (P2016-523844A)		アメリカ合衆国 カリフォルニア 931
(43) 公表日	平成28年8月12日 (2016. 8. 12)		08, サンタ バーバラ, イースト
(86) 国際出願番号	PCT/US2014/049388		バレー ロード 1482, ナンバー7
(87) 国際公開番号	W02015/017768		01
(87) 国際公開日	平成27年2月5日 (2015. 2. 5)	(74) 代理人	100078282
審査請求日	平成28年2月5日 (2016. 2. 5)		弁理士 山本 秀策
(31) 優先権主張番号	61/861, 281	(74) 代理人	100113413
(32) 優先日	平成25年8月1日 (2013. 8. 1)		弁理士 森下 夏樹
(33) 優先権主張国	米国 (US)	(74) 代理人	100181674
(31) 優先権主張番号	61/867, 872		弁理士 飯田 貴敏
(32) 優先日	平成25年8月20日 (2013. 8. 20)	(74) 代理人	100181641
(33) 優先権主張国	米国 (US)		弁理士 石川 大輔

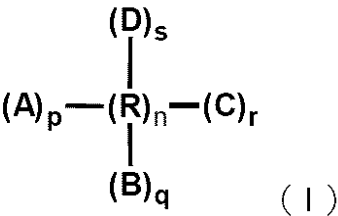
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 毛髪および皮膚を回復させるための方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

毛髪を処置するための方法であって、該毛髪は、2つ以上の遊離チオール基を含み、
(a) 該毛髪に、式Iの結合剤であって、
【化7】



式中、
A、B、C、およびDは、それぞれ1つ以上の電荷を有する該遊離チオール基と反応することができる、反応性部分であり、A、B、C、およびDのそれぞれの反応性部分は、ビニルスルホン、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、およびイタコネート基からなる群から選択される部分を独立して含有し、

Rは、2つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、そして $n = 1 \sim 10$ であり、

該電荷の合計はゼロであり、

該反応性部分は、該リンカーにイオン結合し、

p、q、r、およびsの各出現は、独立して、 $0 \sim 25$ の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2以上である、結合剤を含む製剤を、該遊離チオール基に共有結合するのに十分な量で適用することを含む、

方法。

【請求項2】

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素－硫黄（C－S）共有結合を形成する、請求項1に記載の方法。

10

【請求項3】

A、B、C、およびDは、同一である、請求項1～2のいずれかに記載の方法。

【請求項4】

A、B、C、およびDのうちの少なくとも1つは、他の前記反応性部分とは異なる、請求項1～2のいずれかに記載の方法。

【請求項5】

前記リンカーは、多官能性分子であり、該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸（ $-\text{COOH}$ ）、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^1$ 、カルボキシレート（ $-\text{COO}^-$ ）、第一級アミド（例えば、 $-\text{CONH}_2$ ）、第二級アミド（例えば、 $-\text{CONHR}^1$ ）、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{SR}^1$ 、および $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^1\text{R}^2$ 、スルフィニル基（例えば、 $-\text{SOR}^1$ ）、ならびにスルホニル基（例えば、 $-\text{SOOR}^1$ ）を含む1つ以上の置換基で独立して置換されており、

20

R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、 R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは $=\text{O}$ もしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、およびジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されている、請求項1～4のいずれかに記載の方法。

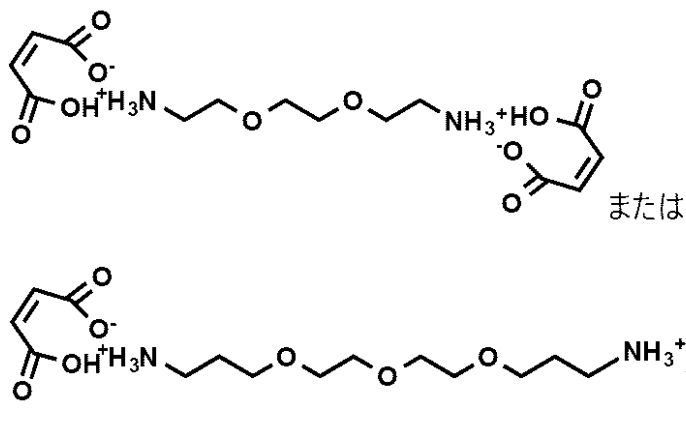
30

【請求項6】

前記結合剤は、

40

【化 8】



10

である、請求項 1 ～ 5 のいずれかに記載の方法。

【請求項 7】

前記製剤は、1 つ以上の美容上許容される賦形剤をさらに含み、
 該 1 つ以上の賦形剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、キレート剤、香料、保
 存剤、酸化防止剤、キレート剤、毛髪着色剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、
 軟化剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、毛髪固定剤、被膜形成剤、乳化剤、乳濁剤、噴射
 剤、液体ビヒクル、担体、塩、pH 調節剤、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤
 、静電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、およびこれらの組み合わせからなる群から選択
 される、請求項 1 ～ 6 のいずれかに記載の方法。

20

【請求項 8】

前記結合剤は、前記製剤の 0.01 重量% ～ 50 重量% の範囲の量で存在する、請求項
 7 に記載の方法。

【請求項 9】

前記結合剤は、前記製剤の 3 重量% である、請求項 7 ～ 8 のいずれかに記載の方法。

【請求項 10】

前記賦形剤は、前記製剤の 10 重量% ～ 90 重量% の範囲の量で存在する、請求項 7 ～
 9 のいずれかに記載の方法。

30

【請求項 11】

前記製剤は、ゲル、クリーム、ローション、シャンプー、またはコンディショナーの形
 態である、請求項 1 ～ 10 のいずれかに記載の方法。

【請求項 12】

ステップ (a) は、1 回以上反復される、請求項 1 ～ 11 のいずれかに記載の方法。

【請求項 13】

ステップ (a) は、前記製剤の 1 回目の適用の 1 分～20 分後に反復される、請求項 1
 ～ 12 のいずれかに記載の方法。

【請求項 14】

(b) 前記毛髪のすすぎ、シャンプー、および／またはコンディショニングを行うこと
 をさらに含み、ステップ (b) は、ステップ (a) の後に生じる、請求項 1 ～ 13 のい
 ずれかに記載の方法。

40

【請求項 15】

ステップ (b) は、ステップ (a) の後、10 秒～30 分以内に行われる、請求項 14
 に記載の方法。

【請求項 16】

前記毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる還元
 剤を含む第 1 の製剤を適用するステップをさらに含み、
 該ステップは、前記結合剤を含む前記製剤を適用する前に行われる、請求項 1 ～ 15 のい

50

ずれかに記載の方法。

【請求項 17】

前記還元剤は、チオグリコール酸ならびにその誘導体塩およびエステル、チオ乳酸ならびにその誘導体塩およびエステル、システインおよびその誘導体、システアミンおよびその誘導体、無機亜硫酸塩、メタ重亜硫酸ナトリウム、他の無機重亜硫酸塩、ジチオスレイトール、ジチオエリスリトール、ならびに有機ホスフィンからなる群から選択される、請求項 16 に記載の方法。

【請求項 18】

前記チオールは、少なくとも 1 週間結合したままである、請求項 1 ～ 17 のいずれかに記載の方法。

10

【請求項 19】

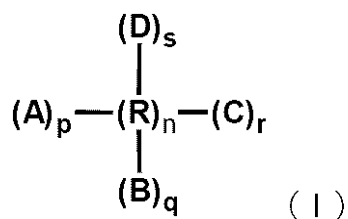
前記結合剤の分子量は、500 ダルトン未満である、請求項 1 ～ 18 のいずれかに記載の方法。

【請求項 20】

毛髪中または皮膚上の遊離チオール基に共有結合する結合剤と、水性溶媒と、1 つ以上の保存剤、安定剤、もしくはそれらの組み合わせとからなり、

該結合剤は、式 I によって表され、

【化 9】



20

式中、

A、B、C、および D は、それぞれ 1 つ以上の電荷を有する該遊離チオール基と反応することができる、反応性部分であり、A、B、C、および D のそれぞれの反応性部分は、ビニルスルホン、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、およびイタコネート基からなる群から選択される部分を独立して含有し、

30

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、そして $n = 1 \sim 10$ であり、

該電荷の合計はゼロであり、

該反応性部分は、該リンカーにイオン結合し、

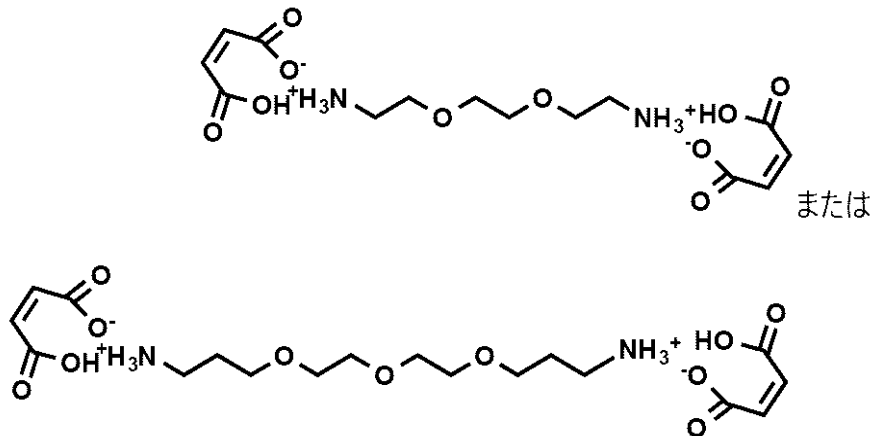
p、q、r、および s の各出現は、独立して、0 ～ 25 の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2 以上である、製剤。

【請求項 21】

前記結合剤は、

40

【化 1 0】



10

である、請求項 2 0 に記載の製剤。

【請求項 2 2】

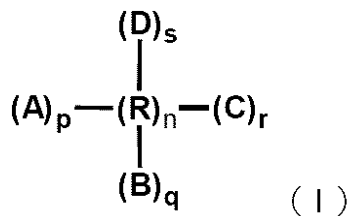
毛髪を着色するための方法であって、

(a) 毛髪着色剤と該毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる還元剤とを含む、第 1 の製剤を適用することと、

(b) 該毛髪に、式 I の結合剤であって、

【化 1 1】

20



式中、

A、B、C、および D は、それぞれ 1 つ以上の電荷を有する該遊離チオール基と反応することができる、反応性部分であり、A、B、C、および D のそれぞれの反応性部分は、ビニルスルホン、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、およびイタコネート基からなる群から選択される部分を独立して含有し、

30

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、そして $n = 1 \sim 10$ であり、

該電荷の合計はゼロであり、

該反応性部分は、該リンカーにイオン結合し、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0 ～ 25 の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2 以上である、結合剤を含む第 2 の製剤を、該遊離チオール基に共有結合する

40

のに十分な量で適用することと、

を含む、

方法。

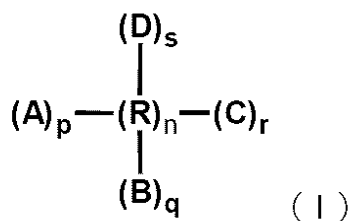
【請求項 2 3】

毛髪をハイライト処理するための方法であって、

(a) 毛髪を明るくするための脱色剤を含む第 1 の製剤を適用することと、

(b) 該毛髪に、式 I の結合剤であって、

【化 1 2】



式中、

A、B、C、およびDは、それぞれ1つ以上の電荷を有する遊離チオール基と反応することができる、反応性部分であり、A、B、C、およびDのそれぞれの反応性部分は、ビニルスルホン、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、およびイタコネート基からなる群から選択される部分を独立して含有し、

Rは、2つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、そして $n = 1 \sim 10$ であり、

該電荷の合計はゼロであり、

該反応性部分は、該リンカーにイオン結合し、

p、q、r、およびsの各出現は、独立して、0～25の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2以上である、結合剤を含む第2の製剤を、遊離チオール基に共有結合するのに十分な量で適用することと、を含む、方法。

【請求項 2 4】

ステップ (a) および (b) は、同時に行われる、請求項 2 2 または 2 3 に記載の方法。

【請求項 2 5】

ステップ (a) および (b) は、順次に行われ、ステップ (a) がステップ (b) の前に行われる、請求項 2 2 または 2 3 に記載の方法。

【請求項 2 6】

ステップ (a) の前に、前記第 1 の製剤および前記第 2 の製剤と一緒に混合される、請求項 2 4 に記載の方法。

【請求項 2 7】

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素－硫黄 (C－S) 共有結合を形成する、請求項 2 2～2 6 のいずれかに記載の方法。

【請求項 2 8】

A、B、C、およびDは、同一である、請求項 2 2～2 7 のいずれかに記載の方法。

【請求項 2 9】

A、B、C、およびDのうちの少なくとも1つは、他の前記反応性部分とは異なる、請求項 2 2～2 7 のいずれかに記載の方法。

【請求項 3 0】

前記リンカーは、多官能性分子であり、

該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸 ($-\text{COOH}$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^1$ 、カルボキシレート ($-\text{COO}^-$)、第一級アミド (例えば、 $-\text{CONH}_2$)、第二級アミド (例えば、 $-\text{CONHR}^1$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{SR}^1$ 、および $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^1\text{R}^2$ 、スルフィニル基 (例えば、 $-\text{SOR}^1$)、ならびにスルホニル基 (例えば、 $-\text{SOOR}^1$) を含む1つ以上の置換基で独立して置換されており、

10

20

30

40

50

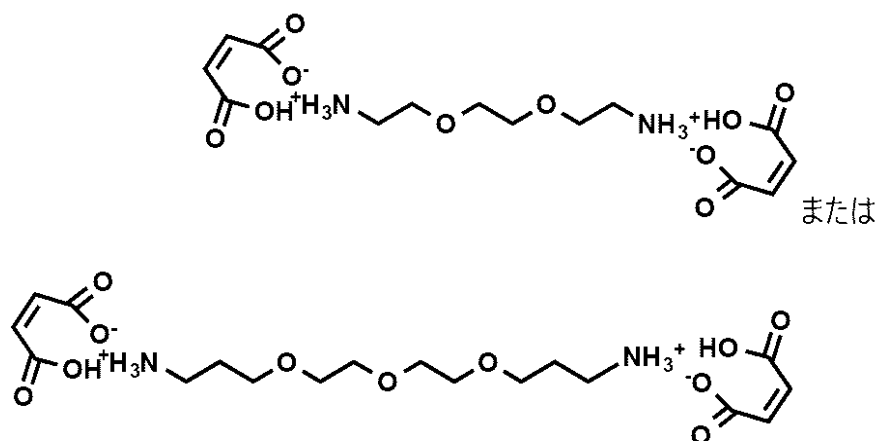
R¹ および R² は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、R¹ および R² のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは=Oもしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、およびジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される、1つ以上の置換基で独立して置換されている、

請求項 22～29 のいずれかに記載の方法。

【請求項 31】

前記結合剤は、

【化 13】



である、請求項 22～30 のいずれかに記載の方法。

【請求項 32】

前記第 2 の製剤は、1つ以上の美容上許容される賦形剤をさらに含み、該 1つ以上の賦形剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、キレート剤、香料、保存剤、酸化防止剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、軟化剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、毛髪固定剤、被膜形成剤、乳化剤、乳濁剤、噴射剤、液体ビヒクル、担体、塩、pH 調節剤、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤、静電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される、請求項 22～31 のいずれかに記載の方法。

【請求項 33】

前記結合剤は、前記第 2 の製剤の 0.01 重量%～50 重量%の範囲の量で存在する、請求項 32 に記載の方法。

【請求項 34】

前記結合剤は、前記第 2 の製剤の 2.5～3 重量%の範囲の量で存在する、請求項 31～33 のいずれかに記載の方法。

【請求項 35】

前記賦形剤は、前記第 2 の製剤の 10 重量%～99.99 重量%の範囲の量で存在する、請求項 31～34 のいずれかに記載の方法。

【請求項 36】

前記第 2 の製剤は、ゲル、クリーム、ローション、シャンプー、またはコンディショナ

一の形態である、請求項 22～35 のいずれかに記載の方法。

【請求項 37】

ステップ (b) は、1 回以上反復される、請求項 22～36 のいずれかに記載の方法。

【請求項 38】

(c) 前記毛髪のすすぎ、シャンプー、および／またはコンディショニングを行うことをさらに含み、ステップ (c) は、ステップ (b) の後に生じる、請求項 22～37 のいずれかに記載の方法。

【請求項 39】

ステップ (c) は、ステップ (b) の後、10 秒～30 分以内に行われる、請求項 38 に記載の方法。

10

【請求項 40】

前記着色剤は、ハイライト処理剤、パーマネント着色剤、デミパーマネント着色剤、およびセミパーマネント着色剤からなる群から選択される、請求項 22～39 のいずれかに記載の方法。

【請求項 41】

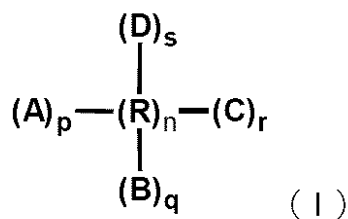
(a) 毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる還元剤と、を含む、第 1 の製剤と、

(b) 毛髪中の遊離チオール基に共有結合するのに十分な量の結合剤を含む、第 2 の製剤と、を含む、

該結合剤は、式 I によって表され、

20

【化 14】



式中、

A、B、C、および D は、それぞれ 1 つ以上の電荷を有する該遊離チオール基と反応することができる、反応性部分であり、A、B、C、および D のそれぞれの反応性部分は、ビニルスルホン、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、およびイタコネート基からなる群から選択される部分を独立して含有し、

30

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、そして $n = 1 \sim 10$ であり、

該電荷の合計はゼロであり、

該反応性部分は、該リンカーにイオン結合し、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0～25 の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2 以上である、

40

キット。

【請求項 42】

シャンプー、コンディショナー、使用説明書、デベロッパー、混合容器、臭気除去剤、手袋、またはそれらの組み合わせをさらに含む、請求項 41 に記載のキット。

【請求項 43】

前記第 1 の製剤は、脱色製剤、ストレート処理製剤、ウェーブ処理製剤、カール処理製剤、または着色製剤である、請求項 41～42 のいずれかに記載のキット。

【請求項 44】

A、B、C、および D は同一である、請求項 41～43 のいずれかに記載のキット。

【請求項 45】

50

A、B、C、およびDのうちの少なくとも1つは、他の前記反応性部分とは異なる、請求項41～44のいずれかに記載のキット。

【請求項46】

前記リンカーは、多官能性分子であり、

該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸 ($-\text{COOH}$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^1$ 、カルボキシレート ($-\text{COO}^-$)、第一級アミド (例えば、 $-\text{CONH}_2$)、第二級アミド (例えば、 $-\text{CONHR}^1$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{SR}^1$ 、および $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^1\text{R}^2$ 、スルフィニル基 (例えば、 $-\text{SOR}^1$)、ならびにスルホニル基 (例えば、 $-\text{SOOR}^1$) からなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されており、

R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、 R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは $=\text{O}$ もしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、ならびにジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されている、

請求項41～45のいずれかに記載のキット。

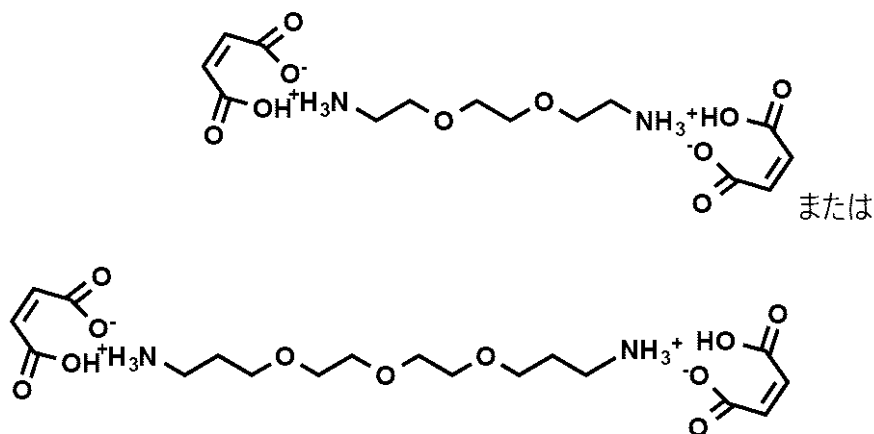
【請求項47】

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素-硫黄 ($\text{C}-\text{S}$) 共有結合を形成する、請求項41～46のいずれかに記載のキット。

【請求項48】

前記結合剤は、

【化15】

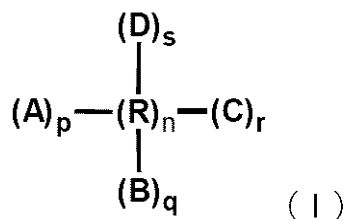


である、請求項41～47のいずれかに記載のキット。

【請求項49】

前記第2の製剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、香料、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、毛髪着色剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、軟化剤、浸透剤

【化 17】



式中、

10

A、B、C、およびDは、それぞれ1つ以上の電荷を有する該遊離チオール基と反応することができる、反応性部分であり、A、B、C、およびDのそれぞれの反応性部分は、ビニルスルホン、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、およびイタコネート基からなる群から選択される部分を独立して含有し、

Rは、2つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、そして $n = 1 \sim 10$ であり、

該電荷の合計はゼロであり、

該反応性部分は、該リンカーにイオン結合し、

p、q、r、およびsの各出現は、独立して、0～25の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2以上である、シャンプーまたはコンディショナー。

20

【請求項61】

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素－硫黄（C－S）共有結合を形成する、請求項60に記載のシャンプーまたはコンディショナー。

【請求項62】

A、B、C、およびDは、同一である、請求項60～61のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

【請求項63】

A、B、C、およびDのうちの少なくとも1つは、他の前記反応性部分とは異なる、請求項60～61のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

30

【請求項64】

前記リンカーは、多官能性分子であり、

該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸（ $-\text{COOH}$ ）、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^1$ 、カルボキシレート（ $-\text{COO}-$ ）、第一級アミド（例えば、 $-\text{CONH}_2$ ）、第二級アミド（例えば、 $-\text{CONHR}^1$ ）、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{SR}^1$ 、および $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^1\text{R}^2$ 、スルフィニル基（例えば、 $-\text{SOR}^1$ ）、ならびにスルホニル基（例えば、 $-\text{SOOR}^1$ ）からなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されており、

40

R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、

R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは $=\text{O}$ もしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキル

50

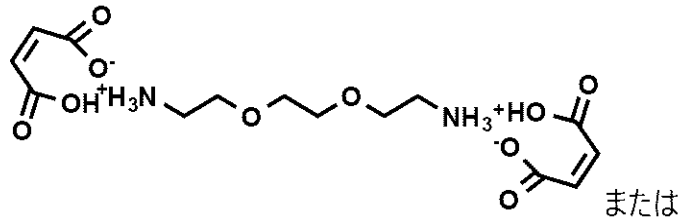
で任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアリール、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、ならびにジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されている、

請求項60～63のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

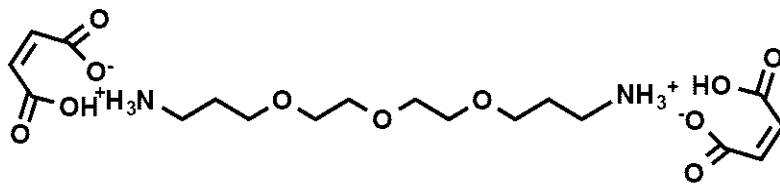
【請求項65】

前記結合剤は、

【化18】



10



20

である、請求項60～64のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

【請求項66】

1つ以上の美容上許容される賦形剤をさらに含み、該1つ以上の賦形剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、香料、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、毛髪着色剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、軟化剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、毛髪固定剤、被膜形成剤、乳化剤、乳濁剤、噴射剤、液体ビヒクル、担体、塩、pH調節剤、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤、静電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、およびこれらの組み合わせからなる群から選択される、請求項60～65のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

30

【請求項67】

前記結合剤は、前記製剤の0.01重量%～50重量%の範囲の量で存在する、請求項66に記載のシャンプーまたはコンディショナー。

【請求項68】

前記結合剤は、前記製剤の2.5～3重量%の範囲の量で存在する、請求項66～67のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

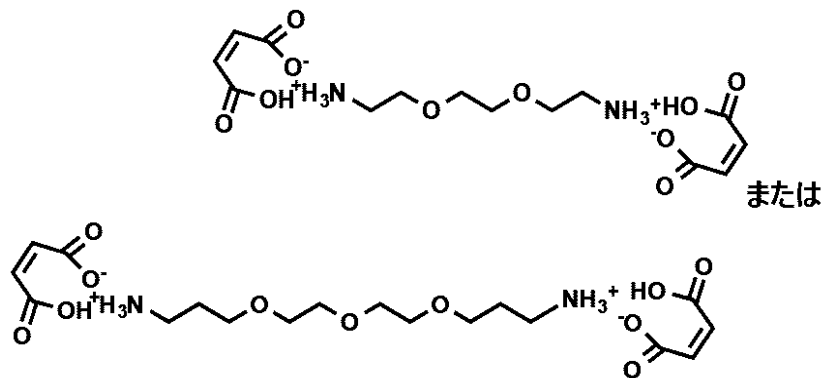
【請求項69】

薬剤と、水性溶媒と、1つ以上の保存剤、安定剤、またはそれらの組み合わせとからなる毛髪または皮膚を処置するための製剤であって、

該薬剤が

40

【化 1 0 2】

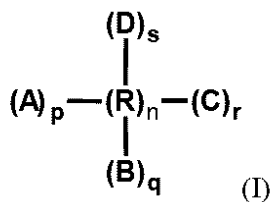


である、製剤。

【請求項 7 0】

薬剤の有効量を含むシャンプーであって、
該薬剤は、式 I によって表され、

【化 1 0 3】



式中、

A、B、C、および D は、それぞれ 1 つ以上の電荷を有する反応性部分であり、A、B、C、および D のそれぞれの反応性部分は、ビニルスルホン、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、およびイタコネート基からなる群から選択される部分を独立して含有し、

30

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、そして $n = 1 \sim 10$ であり、

該電荷の合計はゼロであり、

該反応性部分は、該リンカーにイオン結合し、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0 ～ 25 の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2 以上である、シャンプー。

【請求項 7 1】

A、B、C、および D は、同一である、請求項 7 0 に記載のシャンプー。

【請求項 7 2】

A、B、C、および D のうちの少なくとも 1 つは、他の前記反応性部分とは異なる、請求項 7 0 に記載のシャンプー。

40

【請求項 7 3】

前記リンカーは、多官能性分子であり、

該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸 ($-COOH$)、 $-C(O)R^1$ 、 $-C(O)OR^1$ 、カルボキシレート ($-COO^-$)、第一級アミド (例えば、 $-CONH_2$)、第二級アミド (例えば、 $-CONHR^1$)、 $-C(O)NR^1R^2$ 、 $-NR^1R^2$ 、 $-NR^1S(O)_2R^2$ 、 $-NR^1C(O)R^2$ 、 $-S(O)_2R^2$ 、 $-SR^1$ 、および $-S(O)_2NR^1R^2$ 、スルフィニル基 (例えば、 $-SOR^1$)、ならびにス

50

ルホニル基（例えば、 $-SOOR^1$ ）からなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されており、

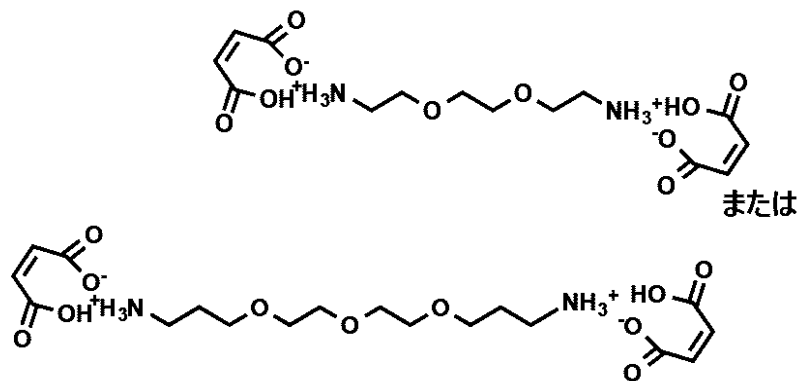
R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、

R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは $=O$ もしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、ならびにジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されている、請求項70～72のいずれかに記載のシャンプー。

【請求項74】

前記薬剤が

【化104】



である、請求項70～73のいずれかに記載のシャンプー。

【請求項75】

1つ以上の美容上許容される賦形剤をさらに含み、

該1つ以上の賦形剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、香料、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、毛髪着色剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、軟化剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、毛髪固定剤、被膜形成剤、乳化剤、乳濁剤、噴射剤、液体ビヒクル、担体、塩、pH調節剤、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤、静電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、およびこれらの組み合わせからなる群から選択される、請求項70～74のいずれかに記載のシャンプー。

【請求項76】

前記薬剤は、前記製剤の0.01重量%～50重量%の範囲の量で存在する、請求項75に記載のシャンプー。

【請求項77】

前記薬剤は、前記製剤の2.5～3重量%の範囲の量で存在する、請求項75～76のいずれかに記載のシャンプー。

【請求項78】

前記製剤は、コンディショナーである、請求項69に記載の毛髪または皮膚を処置するための製剤。

【請求項79】

前記結合剤は、前記第2の製剤の1重量%～25重量%の範囲の量で存在する、請求項

33に記載の方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

関連出願の相互参照

本出願は、2014年5月19日に出願された米国仮出願第62/000,340号の非仮出願である。本出願はまた、2013年8月1日に米国仮出願第61/861,281号および2013年10月2日に米国仮出願第61/885,898号の非仮出願である、2014年4月21日に米国特許出願第14/257,056号に対する優先権を主張する。本出願はまた、2013年8月1日に米国仮出願第61/861,281号、2013年8月20日に米国仮出願第61/867,872号、および2013年11月12日に米国仮出願第61/903,239号の非仮出願である、2014年4月21日に米国特許出願第14/257,089号に対する優先権も主張する。本出願はまた、2013年8月1日に米国仮出願第61/861,281号および2013年10月2日に米国仮出願第61/885,898号の非仮出願である、2014年4月21日に米国特許出願第14/257,076号に対する優先権も主張する。これらの開示は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる。

10

【0002】

(技術分野)

20

本発明は、概して、毛髪または皮膚を処置するため、特に、毛髪中または皮膚上のジスルフィド結合を修復するための組成物および方法に関する。

【背景技術】

【0003】

毛髪は、アミノ酸構築ブロックから構成される多数の長いタンパク質鎖からなる。これらの鎖、すなわちポリマーは、1)水素結合、2)酸および塩基の基間の塩架橋、ならびに3)ジスルフィド結合によって互いに結合している。水は、水素結合を可逆的に切断する。これにより、濡れた毛髪は形状付けおよびセットが容易となる。水が蒸発すると、新しい位置で水素結合が形成され、毛髪をこのセット状態に保持する。pHが1.0~2.0等の強酸性溶液では、水素結合および塩架橋の両方が切断される。ジスルフィド結合は、しかしながら、このような条件下においても依然として毛髪中のタンパク質鎖と一緒に保持することができる。

30

【0004】

8.5という弱アルカリ性のpHでは、一部のジスルフィド結合が切断される(Dombrink et al., Chem Matters, 1983, page 8)。弱アルカリ性のシャンプーでの洗浄を繰り返すと、切断されるジスルフィド結合の数が増えることにより毛髪を損傷する。これにより、毛髪束の毛小皮または外表面がザラザラになり、毛髪が一般的に湿って絡まった状態、一般的に扱いにくい状態のままとなる。これは、「枝毛」の一因である。毛髪は乾燥すると、乾燥した状態、荒れた状態、または縮れた状態のままとなることが多い。さらに、荒れた毛髪は光を不均一に捉え、毛髪を艶がなくくすんだように見せる。毛髪はまた、乾燥の際に静電気レベルが上昇したままとなり、これが、櫛通りを妨げ、一般に「はね毛(fly-away hair)」と呼ばれる状態をもたらす得る。

40

【0005】

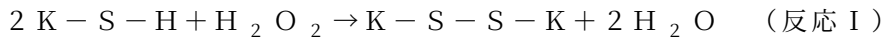
ジスルフィド結合はまた、熱または種々の還元処置剤の使用に起因して破断される。哺乳動物の毛髪のウェーブ処理およびストレート処理を行うための現在の組成物および方法は、毛髪のシスチンジスルフィド結合を切断するために、チオグリコール酸(特にアンモニウム塩としてのもの)等の還元剤を使用する。ジスルフィド結合が切断されると、毛髪は、最終的なスタイル(例えば、ストレート、ウェーブ、またはカール)を構築する応力下に置かれ、ジスルフィド結合が再構築される。還元された結合を復元するための酸化は

50

、単純に毛髪を大気中の酸素に晒すことによって達成され得るが、この酸化ステップは非常に遅く、ほとんど実用的なものではない。一般に、過酸化水素または臭素酸ナトリウムが、酸化剤として使用される。しかしながら、新たに形成されるジスルフィド結合は、毛髪の新しい形状を維持する応力を受け、したがって、容易に切断され、結果として時間とともに毛髪スタイルの逆行をもたらす。さらに、毛髪スタイリングプロセスにおける過酸化物の使用は、毛髪の損傷、毛髪からの非天然の着色の除去、および／または毛髪を縮れた状態にすることをもたらし得る。さらに、酸化処置後であっても、いくつかの潜在的な遊離チオールが毛髪中に残存し得る。

【0006】

毛髪のスタイリングプロセスで用いられる過酸化物での処置は、以下の反応をもたらす
:



式中、Kは、毛髪中のケラチンを表す。しかしながら、反応（反応I）が生じるために2つのK-S-H基が存在しない場合は、以下の反応が起こると考えられ、これにより毛髪の損傷がもたらされる。



【0007】

ケラチンはまた、皮膚の主要な構成要素でもある。ケラチンのジスルフィド架橋の損傷により、皮膚は不健康またはカサカサに見えるようになり得る。ケラチンのジスルフィド架橋を維持することにより、皮膚を健康に保ち、ヒビ割れおよび分裂を防ぐ。

【0008】

これらの問題を緩和するために、リーブオン製品およびリンスオフ製品等、シャンプー後の毛髪コンディショナーの適用を含む種々のアプローチが開発されている。典型的に、コンディショニングリンスにより、特に、毛小皮が絡まっている毛髪の損傷部分に、油性コーティングを戻すが、これは、コンディショナーがこれらの部分に最もよく付着するためである。しかしながら、コンディショナーの量が多すぎるかまたは重すぎると、毛髪がよりベタベタになるため、汚れが付着し、シャンプー処置の必要回数を増やすことになる場合が多い。典型的に、コンディショナーは毛髪中の遊離チオールには結合しない。

【0009】

Kingらの国際公開第WO93/08787号およびNapoli oneらの同第WO95/01152号等、カチオン性ポリマーを使用してコアセルベートを形成して、コンディショニングの利点を毛髪に提供することが既知である。広く使用されるカチオン性付着ポリマーは、カチオン性置換基で修飾されている、グアーガムポリマー等の中性ポリマーを含む。十分な電荷密度および分子量を有するカチオン性グアーポリマーの選択により、シャンプーまたはボディーウォッシュに組み込まれた際にコンディショニング剤の十分な付着がもたらされる。しかしながら、比較的高レベルのこのようなカチオン性グアーポリマーが、一般に、毛髪または皮膚上に付着する必要がある。さらに、このようなカチオン性グアーポリマーは、比較的高費用である。結果として、カチオン性グアーポリマーの組み込みは、そのようなシャンプー組成物の製造費用を増加させ得る。さらに、これらのシャンプー組成物は、典型的に、湿式毛髪コンディショニングには有用であるが、満足
40
できる乾燥した毛髪の滑らかな感触を提供することができない。さらに、これらのコンディショナーは、毛髪中の遊離チオールには結合しない。

【0010】

Baileyらの米国特許第5,656,265号は、還元剤で毛髪を処置した後に使用するための毛髪スタイリングコンディショニングプロセスを開示する。このプロセスは、毛髪を、求電子性基および少なくとも1つの疎水性基を有する化合物と接触させることを伴う。Baileyによると、求電子性基がチオール基と反応して、毛髪上に複数の疎水性基をもたらす。しかしながら、これらのコンディショナーは、毛髪中の遊離チオールと一緒に結合しない。

【0011】

10

20

30

40

50

毛髪に改善されたコンディショニング利点を提供することができる、毛髪用製剤および処置の必要性が存在する。具体的には、毛髪を乾燥させたときに、持続的な潤った感触、滑らかな感触、および扱いやすさを毛髪に提供する必要性がある。毛髪中の潜在的な遊離チオールを修復する毛髪用製剤および処置の必要性も存在する。

【0012】

損傷した毛髪を修復および／または強化し、還元剤で処置した毛髪においてより強力な結合を再構築する、毛髪製剤および処置の必要性が存在する。

【0013】

また、皮膚に改善されたコンディショニングおよび／または保湿の利点を提供する、皮膚製剤および処置の必要性も存在する。特に、持続的な潤った感触および滑らかな感触を皮膚に提供する必要性が存在する。皮膚における遊離チオールを修復する皮膚製剤および処置の必要性も存在する。

10

【0014】

したがって、損傷した毛髪を修復および／または強化するための改善された組成物および方法を提供することが、本発明の目的である。

【0015】

洗浄または還元処置後に毛髪を修復および／または強化するこれらの組成物を使用するための組成物および方法を提供することも本発明の目的である。

【0016】

皮膚のコンディショニング、保湿、および／またはそれ以外の処置を行うための組成物および方法を提供することも、本発明の目的である。

20

【先行技術文献】

【特許文献】

【0017】

【特許文献1】国際公開第93／08787号

【特許文献2】国際公開第95／01152号

【特許文献3】米国特許第5,656,265号明細書

【非特許文献】

【0018】

【非特許文献1】Dombink et al., Chem Matters, 1983, page 8

30

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

【0019】

損傷した毛髪中または皮膚上の結合、例えば、ジスルフィド結合を修復するための組成物、キット、および方法が開示される。本組成物は、毛髪の乾燥または皮膚の保湿に改善されたコンディショニングの利点を提供する。具体的には、本組成物は、毛髪をベタベタにすることなく持続的な潤った感触および滑らかな感触、見た目（例えば、艶）の改善、乾燥強度（引張強度）の増加、濡れていても乾いていても毛髪を梳かす際の容易さ、毛髪の傷みの減少、ならびに縮れの減少を提供する。本組成物はまた、持続的な潤った感触および滑らかな感触を皮膚に提供する。

40

【0020】

本組成物は、毛髪中または皮膚上における1つ以上のチオールとの反応を伴い得る、1つを上回る結合事象（例えば、吸収、結合等）を通じてケラチンと相互作用する、1つ以上の化合物を含有する。本明細書において結合とは、共有結合、イオン結合、または水素結合等の形成として定義される。シャンプーおよびコンディショニングを含む通常の毛髪洗浄条件下において、形成される共有結合は、還元または加水分解を受けにくい。結合組成物の使用により、組成物の適用後、少なくとも1週間、2週間、3週間、4週間、1カ月、または2カ月以上の間、毛髪の修復された結合がそれらの遊離チオール状態に逆転することを予防する。

50

【0021】

毛髪スタイリング、例えば、パーマネント毛髪ウェーブ処理、毛髪カール処理、および毛髪ストレート処理の改善された方法もまた、提供される。結合組成物は、毛髪が洗浄されるとき毎回、または1日1回、1週間に1回、1週間に2回、2週間に1回、1カ月に1回、1カ月おき、またはより少ない頻度の間隔で、適用され得る。好ましくは、結合組成物は、所望される結果を達成するために、週1回または月1回適用される。

【0022】

パーマネント毛髪ウェーブ処理、毛髪カール処理、またはストレート処理の従来的な方法は、還元処置後にジスルフィド結合を再構築するために過酸化水素を使用する。このプロセスは、一般に、完了に約3日かかる。本明細書に開示される方法は、結合剤を使用して毛髪を修復し、これらの結合剤は、それらが毛髪に適用されるのと同日に個体の毛髪から洗い落とされる。いくつかの実施形態において、結合剤および遊離チオール基は、炭素-硫黄共有結合を形成する。温度および湿度等、同じ条件下において、結合剤で処置した毛髪は、未処置の同じ毛髪と比較して、その以前の状態に戻るのにより長い時間がかかる。結合剤は、反応性官能基が表面に結合する、1つ以上の反応性基を含有し得る。

10

【0023】

一実施形態において、結合剤は、リンカーまたはスペーサーならびに2つ以上の反応性官能基を含有し、反応性官能基は、リンカーもしくはスペーサーに共有結合する。他の実施形態において、結合剤は、2つ以上の反応性官能基とともに塩を形成するスペーサーまたはリンカーを含有する。他の実施形態において、結合剤は、反応性官能基が毛髪の表面または毛髪上の官能基と相互作用する、1つ以上の反応性基を含有する。

20

【発明を実施するための形態】

【0024】

I. 定義

「毛髪」という用語は、1本もしくは1本超の毛髪、ならびに皮脂 (an oil from a body) 等の毛髪の天然の構成要素を指す。毛髪はまた、一度も処理されたことのない毛髪、または処理された毛髪、例えば、毛髪ウェーブ処理もしくは毛髪ストレート処理製剤に曝露されている毛髪を指す。

【0025】

例えば、本明細書に記載される結合剤または組成物の「有効量」とは、所望される用量レジメンの一部として適用されたときに、毛髪中の遊離チオールに結合する、組成物または製剤中の結合剤の量である。

30

【0026】

「薬学的に許容される」および「美容的に許容される」は互換的に使用され、適切な医学的判断の範囲内で、過剰な毒性、刺激、アレルギー反応、または妥当な利益/危険性比に相応する他の問題もしくは合併症を有することなく、ヒトおよび動物の組織と接触しての使用に好適である、化合物、材料、組成物、および/または剤形を指す。より具体的には、薬学的に許容されるとは、皮膚、頭皮、または毛髪と接触した状態での使用に好適である材料、化合物、または組成物を指す。薬学的に許容される材料は、当業者に既知である。

40

【0027】

「シャンプー」とは、本明細書に使用されるとき、一般に、毛髪を洗浄するための洗剤または石鹼を含有する、毛髪に適用される液体または半固体の製剤を指す。

【0028】

「コンディショナー」とは、本明細書に使用されるとき、概して、毛髪を柔らかくする、毛髪を滑らかにする、および/または毛髪の艶を変化させるために、毛髪に適用される製剤 (例えば、液体、クリーム、ローション、ゲル、半固体) を指す。

【0029】

「類似体」および「誘導体」は、本明細書において互換的に使用され、親化合物と同じ中核を有するが、結合順序、1つ以上の原子および/もしくは原子団の存在もしくは不在

50

、ならびにそれらの組み合わせが親化合物とは異なる、化合物を指す。誘導体は、例えば、中核に存在する1つ以上の置換基が親化合物とは異なり得、これには、1つ以上の原子、官能基、または基礎構造 (structure) が含まれ得る。一般に、誘導体は、少なくとも理論上は、化学的および／または物理的プロセスによって親化合物から形成されることが想定され得る。

【0030】

「求電子性基」または「求電子性部分」は、互換的に使用され、電子に対する親和性を有するか、または電子を求引する、1つ以上の官能基または官能性部分を指す。

【0031】

「マイケル受容体」とは、本明細書に使用されるとき、求核付加反応に関与する一種の求電子性基または部分である。マイケル受容体は、 α 、 β -不飽和カルボニル含有基または部分、例えば、ケトンであり得るか、またはそれを含有し得る。他のマイケル受容体は、 π 結合、例えば、他の π 結合含有電子求引性基、例えば、ニトロ基、ニトリル基、およびカルボン酸基に共役した、二重または三重結合等を含む。

【0032】

「アルキル」は、本明細書に使用されるとき、直鎖アルキル、アルケニル、もしくはアルキニル基、分岐鎖アルキル、アルケニル、もしくはアルキニル基、シクロアルキル、シクロアルケニル、もしくはシクロアルキニル (脂環式) 基、アルキル置換シクロアルキル、シクロアルケニル、もしくはシクロアルキニル基、およびシクロアルキル置換アルキル、アルケニル、もしくはアルキニル基を含む、飽和または不飽和脂肪族基のラジカルを指す。別途示されない限り、直鎖または分岐鎖アルキルは、30個以下の炭素原子をその骨格に有し (例えば、直鎖では C_1-C_{30} 、分岐鎖では C_3-C_{30})、より好ましくは20個以下の炭素原子、より好ましくは12個以下の炭素原子、および最も好ましくは8個以下の炭素原子を有する。いくつかの実施形態において、鎖は、1~6個の炭素を有する。同様に、好ましいシクロアルキルは、3~10個の炭素原子をそれらの環構造に有し、より好ましくは5、6、または7個の炭素を環構造に有する。上で提供された範囲は、最小値と最大値との間のすべての値を含む。

【0033】

「アルキル」という用語は、「非置換アルキル」および「置換アルキル」の両方を含み、この後者は、水素を置き換える1つ以上の置換基を炭化水素骨格中の1つ以上の炭素に有するアルキル部分を指す。そのような置換基には、ハロゲン、ヒドロキシル、カルボニル (カルボキシル、アルコキシカルボニル、ホルミル、もしくはアシル等)、チオカルボニル (チオエステル、チオアセテート、もしくはチオホルメート (thioformate) 等)、アルコキシル、ホスホリル、ホスフェート、ホスホネート、ホスフィネート、アミノ、アミド、アミジン、イミン、シアノ、ニトロ、アジド、スルフヒドリル、アルキルチオ、サルフェート、スルホネート、スルファモイル、スルホンアミド、スルホニル、ヘテロシクリル、アラルキル、または芳香族もしくはヘテロ芳香族部分が挙げられるが、これらに限定されない。

【0034】

炭素の数が別途指定されない限り、本明細書に使用される「低級アルキル」は、上に定義されるものだが、1~10個の炭素、より好ましくは1~6個の炭素原子をその骨格構造に有する、アルキル基を意味する。同様に、「低級アルケニル」および「低級アルキニル」は、類似の鎖長を有する。好ましいアルキル基は、低級アルキルである。

【0035】

アルキル基はまた、炭素骨格内に1つ以上のヘテロ原子を含有し得る。例としては、酸素、窒素、硫黄、およびこれらの組み合わせが挙げられる。ある特定の実施形態において、アルキル基は、1~4個のヘテロ原子を含有する。

【0036】

「アルケニル」および「アルキニル」は、本明細書に使用されるとき、長さが類似 (例えば、 C_2-C_{30}) の1つ以上の二重または三重結合を含有し、上述のアルキル基に可

10

20

30

40

50

能性のある置換を有する不飽和脂肪族基を指す。

【0037】

「アリール」は、本明細書に使用されるとき、5、6、および7員の芳香環を指す。この環は、炭素環式、複素環式、縮合炭素環式、縮合複素環式、炭素二環式 (b i c a r b o c y c l i c)、複素二環式 (b i h e t e r o c y c l i c) 環系であり得、任意でアルキルに関して上述のように置換される。広義に、「Ar」は、本明細書に使用されるとき、0～4個のヘテロ原子を含み得る5、6、および7員の単環式芳香族基を含む。例としては、ベンゼン、ピロール、フラン、チオフェン、イミダゾール、オキサゾール、チアゾール、トリアゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリダジン、およびピリミジンが挙げられるが、これらに限定されない。環構造にヘテロ原子を有するアリール基はまた、「ヘテロアリール」、「アリール複素環」、または「複素芳香族」と称され得る。芳香環は、1つ以上の環位において、上述のような置換基、例えば、ハロゲン、アジド、アルキル、アラルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、ヒドロキシル、アルコキシル、アミノ、ニトロ、スルフヒドリル、イミノ、アミド、ホスホネート、ホスフィネート、カルボニル、カルボキシル、シリル、エーテル、アルキルチオ、スルホニル、スルホンアミド、ケトン、アルデヒド、エステル、ヘテロシクリル、芳香族もしくは複素芳香族部分、パーフルオロアルキル、およびシアノで置換され得る。「Ar」という用語はまた、2つ以上の炭素が2つの隣接する環に共通している（この環は「縮合環」である）、2つ以上の環式環を有する多環式環系を含み、ここで、環のうちの少なくとも1つが芳香族であり、例えば、他方の環式環は、シクロアルキル、シクロアルケニル、シクロアルキニル、アリール、および／もしくは複素環であり得るか、または両方の環が芳香族である。

【0038】

「アルキルアリール」は、本明細書に使用されるとき、アリール基（例えば、芳香族または複素芳香族基）で置換されたアルキル基を指す。

【0039】

「複素環」または「複素環式」は、本明細書に使用されるとき、3～10個の環原子、および好ましくは5～6個の環原子を含有し、炭素と、それぞれが非ペルオキシドの酸素、硫黄、およびN (Y) から選択される1～4個のヘテロ原子とを含有し（式中、Yは不在であるか、またはH、O、(C₁₋₄) アルキル、フェニル、もしくはベンジルである）、任意に1つ以上の二重または三重結合を含有し、1つ以上の置換基で任意に置換される、単環式または二環式環の環炭素または窒素によって結合される環式ラジカルを指す。「複素環」という用語はまた、置換および非置換ヘテロアリール環を包含する。複素環式環の例としては、ベンズイミダゾリル、ベンゾフラニル、ベンゾチオフラニル、ベンゾチオフェニル、ベンゾオキサゾリル、ベンゾオキサゾリニル、ベンズチアゾリル、ベンズトリアゾリル、ベンズテトラゾリル、ベンズイソオキサゾリル、ベンズイソチアゾリル、ベンズイミダゾリニル、カルバゾリル、4aH-カルバゾリル、カルボリニル、クロマニル、クロメニル、シノリニル、デカヒドロキノリニル、2H, 6H-1, 5, 2-ジチアジニル、ジヒドロフロ [2, 3-b] テトラヒドロフラニル、フラニル、フラザニル、イミダゾリジニル、イミダゾリニル、イミダゾリル、1H-インダゾリル、インドレニル (i n d o l e n y l)、インドリニル、インドリジニル、インドリル、3H-インドリル、イサチノイル (i s a t i n o y l)、イソベンゾフラニル、イソクロマニル、イソインダゾリル、イソインドリニル、イソインドリル、イソキノリニル、イソチアゾリル、イソオキサゾリル、メチレンジオキシフェニル、モルホリニル、ナフチリジニル、オクタヒドロイソキノリニル、オキサジアゾリル、1, 2, 3-オキサジアゾリル、1, 2, 4-オキサジアゾリル、1, 2, 5-オキサジアゾリル、1, 3, 4-オキサジアゾリル、オキサゾリジニル、オキサゾリル、オキシインドリル (o x i n d o l y l)、ピリミジニル、フェナントリジニル、フェナントロリニル、フェナジニル、フェノチアジニル、フェノキサチニル (p h e n o x a t h i n y l)、フェノキサジニル、フタラジニル、ピペラジニル、ピペリジニル、ピペリドニル、4-ピペリドニル、ピペロニル、プテリジニル、

プリニル、ピラニル、ピラジニル、ピラゾリジニル、ピラゾリニル、ピラゾリル、ピリダジニル、ピリドオキサゾール、ピリドイミダゾール、ピリドチアゾール、ピリジニル、ピリジル、ピリミジニル、ピロリジニル、ピロリニル、2H-ピロリル、ピロリル、キナゾリニル、キノリニル、4H-キノリジニル、キノキサリニル、キヌクリジニル (quinclidinyl)、テトラヒドロフラニル、テトラヒドロイソキノリニル、テトラヒドロキノリニル、テトラゾリル、6H-1, 2, 5-チアジアジニル、1, 2, 3-チアジアゾリル、1, 2, 4-チアジアゾリル、1, 2, 5-チアジアゾリル、1, 3, 4-チアジアゾリル、チアントレニル、チアゾリル、チエニル、チエノチアゾリル (thienothiazolyl)、チエノオキサゾリル (thienoxazolyl)、チエノイミダゾリル (thienoimidazolyl)、チオフェニル、およびキサンテニルが挙げられるがこれらに限定されない。

10

【0040】

「ヘテロアリアル」は、本明細書に使用されるとき、炭素および、非ペルオキシド酸素、硫黄、およびN (Y) からそれぞれ選択される1, 2, 3または4個のヘテロ原子 (式中、Yは、不在であるか、またはH、O、(C₁-C₈) アルキル、フェニル、もしくはベンジルである) を含有する5または6個の環原子を含有する単環式芳香環を指す。ヘテロアリアル基の非限定的な例としては、フリル、イミダゾリル、トリアゾリル、トリアジニル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、ピラゾリル、ピロリル、ピラジニル、テトラゾリル、ピリジル (またはそのN-オキシド)、チエニル、ピリミジニル (またはそのN-オキシド)、インドリル、イソキノリル (またはそのN-オキシド)、キノリル (またはそのN-オキシド) 等が挙げられる。「ヘテロアリアル」という用語は、それに由来する約8~10個の環原子のオルト縮合二環式複素環のラジカル、特に、ベンズ誘導体またはプロピレン、トリメチレン、またはテトラメチレンジラリカルをそこに縮合することによって導出されるものを含み得る。ヘテロアリアルの例としては、フリル、イミダゾリル、トリアゾリル、トリアジニル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、ピラキソリル (pyraxolyl)、ピロリル、ピラジニル、テトラゾリル、ピリジル (またはそのN-オキシド)、チエニル、ピリミジニル (またはそのN-オキシド)、インドリル、イソキノリル (またはそのN-オキシド)、キノリル (またはそのN-オキシド) 等が挙げられるがこれらに限定されない。

20

【0041】

「ハロゲン」は、本明細書に使用されるとき、フッ素、塩素、臭素、またはヨウ素を指す。

30

【0042】

本明細書に使用される「置換される」という用語は、本明細書に記載される化合物のすべての許容される置換基を指す。最も広義としては、許容される置換基には、有機化合物の非環式および環式、分岐鎖および非分岐鎖、炭素環式および複素環式、芳香族および非芳香族の置換基が含まれる。例示的な置換基には、ハロゲン、ヒドロキシル基、または任意の数の炭素原子、好ましくは1~14個の炭素原子を含有する任意の他の有機族を含むがこれらに限定されず、任意に、直鎖、分岐鎖、または環式の構造形式にグループ分けされる酸素、硫黄、または窒素族等の1つ以上のヘテロ原子が含まれる。代表的な置換基には、アルキル、置換アルキル、アルケニル、置換アルケニル、アルキニル、置換アルキニル、フェニル、置換フェニル、アリール、置換アリール、ヘテロアリアル、置換ヘテロアリアル、ハロ、ヒドロキシル、アルコキシ、置換アルコキシ、フェノキシ、置換フェノキシ、アロキシ、置換アロキシ、アルキルチオ、置換アルキルチオ、フェニルチオ、置換フェニルチオ、アリールチオ、置換アリールチオ、シアノ、イソシアノ、置換イソシアノ、カルボニル、置換カルボニル、カルボキシル、置換カルボキシル、アミノ、置換アミノ、アミド、置換アミド、スルホニル、置換スルホニル、スルホン酸、ホスホリル、置換ホスホリル、ホスホニル、置換ホスホニル、ポリアリール、置換ポリアリール、C₃-C₂₀ 環式、置換C₃-C₂₀ 環式、複素環式、置換複素環式、アミノ酸、ペプチド、およびポリペプチド基が挙げられる。

40

50

【0043】

窒素等のヘテロ原子は、水素置換基および／またはヘテロ原子の原子価を満たす本明細書に記載される有機化合物の任意の許容される置換基を有し得る。「置換」または「置換される」には、そのような置換が、置換された原子および置換基の許容される原子価に従うこと、および置換が安定な化合物、すなわち、再配置、環化、除去等による変換を自発的に行わない化合物をもたらすこと、という暗黙の条件を含むことが理解される。

【0044】

「ポリマー」は、本明細書に使用されるとき、10を上回るモノマー単位を含有する分子を指す。

【0045】

「水溶性」は、本明細書に使用されるとき、一般に、25℃で少なくとも10、50、100、125、150、200、225、または250gが1Lの水中に可溶であることを意味する。

【0046】

本明細書に使用される「結合剤」は、本明細書に使用されるとき、共有、イオン、または水素結合などを毛髪と形成する分子を指すことを意味し、一般に、遊離チオールと少なくとも1つの共有結合を形成することを含む。

【0047】

I I. 結合剤

本明細書に開示される製剤は、毛髪または皮膚を処置することに関係する。具体的には、本製剤は、毛髪または皮膚における潜在的なジスルフィド結合を再構築し得る。加えて、本製剤はまた、毛髪中の遊離アミンと反応して、コンディショニング効果を提供することができる。

【0048】

本製剤は、1つ以上の結合剤（本明細書において「化合物」または「活性剤」とも称される）を含有する。

【0049】

結合剤は、ヒトの毛髪、皮膚、および／またはヒトの頭皮に対して安全かつ有効であると考えられ、火傷、痒み、および／もしくは発赤等の望ましくない副作用、または類似の有害な反応を引き起こすことなく個体の毛髪に投与され得る、1つ以上の薬学的に許容される担体および／または賦形剤と組み合わせられ得る。本製剤はさらに、製剤を、中性pH、または約pH3～約pH12、好ましくはpH5～pH8の範囲のpHにする賦形剤を含有し得る。

【0050】

結合剤は、典型的に、製剤の約0.01重量%～約50重量%、好ましくは製剤の約約1重量%～約25重量%、より好ましくは約1重量%～約15重量%、最も好ましくは約1重量%～約10重量%の範囲の量で存在する。典型的には、結合剤は、製剤の約2.5～3重量%である。

【0051】

結合剤は、6～8のpHかつ約25～30℃、好ましくは約25℃の温度で、少なくとも2、3、4、5、6、8、9、10、11、または12カ月以上の期間、水溶液中において安定である。貯蔵期間に関して本明細書に使用される「安定な」とは、反応性部分の少なくとも40、45、50、55、60、65、70、75、80、85、90、または95%が無傷であること、または反応性部分が水と反応する限り、結果として得られる生成物もまた求電子性であることを意味する。

【0052】

a. 結合剤

結合剤は、チオールと反応することができる少なくとも2つの反応性部分を含有する。結合剤は、任意に、2つ以上の反応性部分の間にリンカーを含有する。リンカーは、反応性部分と2つ以上のイオン結合を形成する。反応性部分は、毛包上のチオール基と反応す

10

20

30

40

50

ると、安定な、例えば、加水分解的に安定な結合を形成する。「安定な」とは、毛包上のチオール基の間に形成された結合に関して使用されるとき、結合が、約 5℃～約 100℃、好ましくは約 20℃～約 75℃、より好ましくは約 20℃～約 50℃、より好ましくは約 25℃～約 40℃、最も好ましくは約 25℃～約 30℃の温度において pH 6～8 で水に曝露したときに、少なくとも 1 週間、2 週間、3 週間、4 週間、1 カ月、または 2 カ月以上の間、無傷なままであることを意味する。いくつかの実施形態において、温度は、約 25℃である。結合反応が、室温程度、例えば、約 15℃～約 35℃、好ましくは約 20℃～約 30℃、より好ましくは約 22℃～約 27℃で生じることまた、好ましい。

【0053】

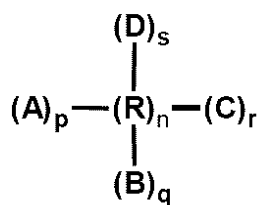
結合剤は、典型的に、低分子量を有し、水性または溶媒の送達系と適合性がある。いくつかの実施形態において、本化合物は、水溶性である。本化合物が合理的な速度で毛髪内外に拡散することができるため、低分子量が好ましい。10,000 Da、8,000 Da、6,000 Da、5,000 Da、4,000 Da、3,000 Da、2,000 Da、または 1,000 Da 未満の分子量が好ましい。いくつかの実施形態において、従来の水性毛髪ケア系において十分な拡散速度を達成するために、分子量は、1500 Da 未満、好ましくは 800 Da 未満、最も好ましくは 500 ダルトン未満である。

【0054】

i. 式 I によって定義される結合剤

いくつかの実施形態において、結合剤は、式 I による構造を有し、

【化 1】



式 I

式中、

A、B、C、および D は、1 つ以上の電荷を有する反応性部分であり、

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、電荷は、反応性部分上の電荷とは逆のものであり、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0～25、好ましくは 0～10、より好ましくは 0～2 の整数である。p + q + r + s の合計は、2 以上である。

【0055】

反応性部分は、リンカーの任意の原子に存在し得る。いくつかの実施形態において、反応性部分は同一である。いくつかの実施形態において、反応性部分のうちの 1 つ以上は、異なる。

【0056】

いくつかの実施形態において、反応性部分は負に荷電しており、リンカーまたはスペーサーは正に荷電した部分を有する。他の実施形態において、反応性部分は正に荷電しており、リンカーまたはスペーサーは負に荷電した部分を有する。一般に、式 I の結合剤の電荷の合計はゼロであるが、化学量論的不均衡が存在する場合がある。

【0057】

ii. リンカー

結合剤上の反応性部分は、好ましくは、リンカーによって連結される。「リンカー」という用語は、本明細書に使用されるとき、1 つ以上の多官能性、例えば、二官能性分子、三官能性分子、四官能性分子等を指し、これらは、2 つ以上の反応性部分にイオン結合するのに使用され得、結合剤の反応特性を妨げるものではない。反応性部分は、リンカーの

任意の部分に結合し得る。

【0058】

リンカーは、単一の原子、例えばヘテロ原子（例えば、OもしくはS）、原子群、例えば官能基（例えば、アミン、 $-C(=O)-$ 、 $-CH_2-$ ）、または複数の原子群、例えばアルキレン鎖であり得る。好適なリンカーには、酸素、硫黄、炭素、ホウ素、窒素、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、エーテル、アミン、およびポリマーが挙げられるが、これらに限定されない。

【0059】

リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸（ $-COOH$ ）、 $-C(O)R^1$ 、 $-C(O)OR^1$ 、カルボキシレート（ $-COO^-$ ）、第一級アミド（例えば、 $-CONH_2$ ）、第二級アミド（例えば、 $-CONHR^1$ ）、 $-C(O)NR^1R^2$ 、 $-NR^1R^2$ 、 $-NR^1S(O)_2R^2$ 、 $-NR^1C(O)R^2$ 、 $-S(O)_2R^2$ 、 $-SR^1$ 、および $-S(O)_2NR^1R^2$ 、スルフィニル基（例えば、 $-SOR^1$ ）、ならびにスルホニル基（例えば、 $-SOOR^1$ ）を含む1つ以上の置換基で独立して置換されており、 R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、 R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは $=O$ もしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、およびジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されている。

【0060】

いくつかの実施形態において、リンカーは、アルコキシ、エーテル、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、またはポリマーであり得る。いくつかの実施形態において、リンカーはポリマーではない。

【0061】

i i i. ポリマー結合剤

結合剤は、ポリマーであり得る。この形態では、リンカーは、そこに2つ以上の反応性部分がイオン結合した、ポリマー骨格を形成するか、またはポリマー骨格である。任意で、ポリマー結合剤は、式Iによる構造を有し得る。いくつかの形態において、ポリマー中のモノマー単位の各出現に関して、0、1、2、3、4、またはそれより多い反応性部分が、モノマーとイオン結合し得る。ポリマー中の各モノマー単位上の反応性部分は、同じかまたは異なり得る。

【0062】

いくつかの実施形態において、少なくとも1つの反応性部分が、各モノマー単位上に存在する。あるいは、反応性部分は、交互のモノマー単位上に存在し得る。いくつかの実施形態において、反応性部分は、ポリマー中の最低限の割合のモノマー単位上に存在する。例えば、少なくとも1つの反応性部分が、ポリマー中の0.1%、1%、5%、10%、15%、20%、25%、30%、35%、40%、45%、50%、55%、60%、65%、70%、75%、80%、85%、90%、95%、または100%のモノマー

単位上に存在し得る。反応性部分は、モノマー上の任意の原子上に存在し得る。

【0063】

ポリマー

ポリマーは、反応性部分A～Dのうちの1つ以上により、末端（および／またはポリマー骨格内）が官能化され得る。ポリマー中の1つ以上のモノマーは、1つ以上の反応性部分A～Dが当該技術分野で既知の技法を使用して導入され得る（例えば、イオン結合し得る）ように、官能化され得る。イオン結合した部分については、塩が、典型的にはその状態で生成される。

【0064】

広範な種類のポリマーおよびポリマーを形成するための方法が、ポリマー科学の分野で既知である。ポリマーは、分解性または非分解性ポリマーであり得る。ポリマーは、天然または非天然（合成）ポリマーであり得る。ポリマーは、ホモポリマーまたは2つ以上のモノマーを含むコポリマーであり得る。配列に関して、コポリマーは、ランダム、ブロックであり得るか、またはランダムおよびブロック配列の組み合わせを含み得る。ポリマーは、いくつかの実施形態においては直鎖ポリマー、分岐鎖ポリマー、または超分岐鎖／樹状ポリマーであり得る。ポリマーはまた、結合した粒子または表面官能化無機粒子として存在し得る。好適なポリマーには、ポリ（酢酸ビニル）、スチレンとアクリル酸アルキルとのコポリマー、および酢酸ビニルとアクリル酸とのコポリマー、ポリビニルピロリドン、デキストラン、カルボキシメチルセルロース、ポリエチレングリコール、ポリアルキレン、ポリアクリレート、およびポリメタクリレート；ポリ酸無水物；ポリオルトエステル；ポリスチレン（PS）、ポリ（エチレンーコマーレイン酸無水物）、ポリ（エチレンマレイン酸無水物ーコーロードーパミン）、ポリ（エチレンマレイン酸無水物ーコーフェニルアラニン）、ポリ（エチレンマレイン酸無水物ーコーチロシン）、ポリ（ブタジエンーコマーレイン酸無水物）、ポリ（ブタジエンマレイン酸無水物ーコーロードーパミン）（pBMA D）、ポリ（ブタジエンマレイン酸無水物ーコーフェニルアラニン）、ポリ（ブタジエンマレイン酸無水物ーコーチロシン）、ポリ（ビスカルボキシフェノキシプロパンーコーセバシン酸無水物）（ポリ（CCP：SA））、アルギネート；ならびにポリ（フマル酸無水物ーコーセバシン酸無水物（p[FA：SA]））、p[FA：SA]のコポリマー、ポリアクリレート、およびポリアクリルアミド、ならびにこれらのコポリマー、ならびにこれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。いくつかの実施形態において、ポリマーリンカーは、好ましくは、水溶性である。

【0065】

ポリマーリンカーに関して、モノマーの数は、典型的には、1個以上、例えば、1～10個（例えば、オリゴマー）、または10個を上回る（例えば、ポリマー）、例えば、10～1000個以上である。

【0066】

i v. チオールと反応する反応性部分

結合剤は、チオールと反応して共有結合を形成する、少なくとも2つの反応性部分を含有する。反応性部分は、毛髪中または皮膚上のチオール基と反応して、安定な共有結合を形成することができる。反応性部分は、典型的に、リンカーとともに塩を形成することができる求電子性部分である。あるいは、反応性部分は、フリーラジカル形成部分であり得る。

【0067】

結合剤は、少なくとも2つの反応性部分を含有する。しかしながら、結合剤は、3、4、5、6、または6個より多い反応性部分を含有してもよい。

【0068】

反応性部分とチオール基との間の反応は、反応性部分が毛髪中または皮膚上のチオール基と接触したときに、室温および室圧で開始し得る。いくつかの実施形態において、反応は、熱、触媒、塩基性条件、またはフリーラジカル開始剤といった、開始要素を必要とし得る。反応性部分とチオールとの間の反応の速度は、温度、pHの変化、および／または

1つ以上の賦形剤、例えば触媒の添加によって増加させることができるが、しかしながら、これは、通常は要求されない。

【0069】

結合剤上の2つ以上の反応性部分は、同じであり得る。いくつかの実施形態において、2つ以上の反応性部分は異なる。

【0070】

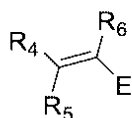
いくつかの実施形態において、反応性部分は、共役付加反応を受け得る。反応性部分は、独立して、マイケル受容体、スクシンイミジル含有基、マレイミド含有基、アズラクトン、ベンゾオキサジノン誘導体、ビニルスルホン、ビニルスルホキシイミン、ビニルスルホネート、ビニルホスホネート、ベンゾオキサジノン、イソシアネート、エポキシド、脱離基を含有する求電子性部分、求電子性チオール受容体、アクリルもしくはアクリレート基、メタクリルもしくはメタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、イタコネート基、ビニルエーテル基、アリルエーテル基、アリルエステル基、ビニルエステル基、スルホネート基、ホスホネート基、スルホキシド基、スルホンアミド基、スリフィンイミド基 (sulfonimide group)、スルフィンアミド基 (sulfonamide group)、スルホンイミデート基 (sulfonimidate group)、またはスルホンイミドアミド基であり得るか、またはそれらを含み得る。

【0071】

マイケル受容体

「マイケル受容体」とは、本明細書に使用されるとき、以下の構造を有する少なくとも1つのマイケル受容体官能基を有する化合物または部分である：

【化2】



式中、Eは、 $-\text{C}(=\text{O})\text{R}_3$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{OR}_3$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{NHR}_3$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{S}(\text{O})\text{R}_3$ 、または $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}_3$ 、であり、用いた R_3 、 R_4 、 R_5 、および R_6 は独立して、水素、あるいはアルキル、置換アルキル、アルケニル、置換アルケニル、アルキニル、置換アルキニル、フェニル、置換フェニル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、ハロ、ヒドロキシル、アルコキシ、置換アルコキシ、フェノキシ、置換フェノキシ、アロキシ、置換アロキシ、アルキルチオ、置換アルキルチオ、フェニルチオ、置換フェニルチオ、アリールチオ、置換アリールチオ、シアノ、イソシアノ、置換イソシアノ、カルボニル、置換カルボニル、カルボキシル、置換カルボキシル、アミノ、置換アミノ、アミド、置換アミド、スルホニル、置換スルホニル、スルホン酸、ホスホリル、置換ホスホリル、ホスホニル、置換ホスホニル、ポリアリール、置換ポリアリール、 $\text{C}3-\text{C}20$ 環式、置換 $\text{C}3-\text{C}20$ 環式、複素環式、置換複素環式、アミノ酸、ペプチド、およびポリペプチド基から選択されるが、これらに限定されない基または群である。ある特定の実施形態において、 R_3 と、 R_4 、 R_5 、または R_6 のうちの1つとが、一緒に環を形成し得る。

【0072】

いくつかの好適なマイケル受容体には、上述の構造のうちの一部またはすべてが、エステル結合を通じてマイケル受容体分子に結合される（メタ）アクリル酸、フマル酸、もしくはマレイン酸の残基、それらの置換された形態、またはそれらの組み合わせである、分子が挙げられるが、これらに限定されない。

【0073】

リンカーは、 R_3 、 R_4 、 R_5 、または R_6 を介してマイケル受容体に結合される。いくつかの実施形態において、 R_3 、 R_4 、 R_5 、または R_6 は、リンカーであり得る。

【0074】

ビニルスルホン

求核試薬による攻撃に関するビニルスルホンの化学は、それらが、いずれの望ましくない副生成物ももたらすことなく1, 4-型マイケル付加を受け得るという点で、 α , β -不飽和ケトンのものに類似である。

【0075】

ビニルスルホキシイミン

ビニルスルホキシイミンの化学は、ビニルスルホンに類似である。N-トシルスルホキシイミン基は、フェニルスルホンよりも電子求引性であり、したがって、ビニル基は、求核試薬の攻撃を受けやすい。N-置換基を使用して、ビニル基の求電子性電位を変化させることができる。

10

【0076】

脱離基を含有する求電子性部分

反応性部分は、脱離基を有する求電子試薬であり得る。求電子試薬は、本明細書に使用されるとき、電子に対する親和性を有するか、または電子を求引する、1つ以上の官能基または官能性部分を指す。好適な求電子試薬には、エステル部分($-(CO)-O-R$ 、式中、Rは低級アルキル等である)、カルボニル部分($-C(O)-$)、カルボン酸または炭酸($-COOH$ もしくは $-O-COOH$)、カーボネート部分($-O-(CO)-O-R$ 、式中、Rは低級アルキル等である)、ウレタン部分($-O-(CO)-NH-R$ 、式中、Rは、H、低級アルキル等である)、置換ウレタン部分($-O-(CO)-NR'-R$ 、式中、R'は、非水素置換基、例えばアルキル、アリール、アルカリール(alkaryl)等である)、アミド部分($-(CO)-NH-R$ 、式中、Rは、H、低級アルキル等である)、置換アミド部分($-(CO)-NR'-R$ 、式中、R'は前に定義された通りである)、チオエステル部分($-(CO)-S-R$ 、式中、Rは、H、低級アルキル等である)、スルホン酸エステル部分($-S(O)_2-O-R$ 、式中、Rは、H、低級アルキル等である)等が挙げられるが、これらに限定されない。他の求電子試薬が、有機化学およびポリマー科学の分野の当業者に既知である、および/または関連する教本および文献を参照することにより容易に見出され得る。

20

【0077】

求電子試薬は、好ましくは、脱離基を含有する。好適な脱離基は、当該技術分野で周知であり、例えば、“Advanced Organic Chemistry,” Jerry March, 5th Ed., pp. 445-448, John Wiley and Sons, N. Y.を参照されたい。脱離基の例としては、ハロゲン、スルホニルオキシ、任意に置換されたアルキルスルホニルオキシ、任意に置換されたアルケニルスルホニルオキシ、任意に置換されたアリールスルホニルオキシが挙げられるが、これらに限定されない。脱離基の具体的な例には、クロロ、ヨード、ブロモ、フルオロ、メタンスルホニルオキシ(メシルオキシ)、トシルオキシ、トリフルイルオキシ、ニトロフェニルスルホニルオキシ(ノシルオキシ)、ブロモフェニルスルホニルオキシ(ブロシルオキシ)、ヒドロキシル、カルボキシレート、カーボネート、ホスフェート、ホスホネート、ホスフィネート、ホスホニウム、ウレタン、尿素、アミド、イミド、アミン、アンモニウム、スルホナト、 $-N_3$ 、 CN 、 $RO-$ 、 NH_2O- 、 $NHRO-$ 、 $N(R^4)_2O-$ 、 R^4CO_2- 、 R^4OCO_2- 、 R^4NCO_2- 、 R^4S- 、 $R^4C(S)O-$ 、 R^4CS_2- 、 $R^4SC(O)S-$ 、 $R^4SCS_2-R^4SCO_2-$ 、 $R^4OC(S)O-$ 、 R^4OCS_2- 、 R^4SO_2- 、 R^4SO_3- 、 R^4OSO_2- 、 R^4OSO_3- 、 R^4PO_3- 、 R^4OPO_3- 、N-イミダゾリル基、N-トリアゾリル基、N-ベンゾトリアゾリル基、ベンゾトリアゾリルオキシ基、イミダゾリルオキシ基、N-イミダゾリノン基、N-イミダゾロン基、N-イミダゾリンチオン基、N-イミダゾリンチオン基、N-スクシンイミジル基、N-フタルイミジル基、N-スクシンイミジルオキシ基、N-フタルイミジルオキシ基、 $-ON=C(CN)R^4$ 、および2-ピリジルオキシ基が挙げられる。R⁴は、好ましくは、アルキル基またはアリール基である。

30

40

50

【0078】

好ましくは、脱離基は反応性部分から除去され、その結果、反応性部分とチオール基との間の反応に悪影響を及ぼす、または皮膚もしくは毛髪との接触に好適でない材料もしくは化合物を形成する、副生成物の形成をもたらすことがない。

【0079】

いくつかの実施形態において、脱離基はハロゲンである。

【0080】

求電子性チオール受容体

求電子性チオール受容体は、本明細書に使用されるとき、チオール基の硫黄原子がチオール受容体に共有結合するようになるように、チオール基と反応する、化学部分を指す。チオール受容体は、当該技術分野で周知である。Koval (Reactions of Thiols, Russian Journal of Organic Chemistry, 2007, 43:319-349) は、複数の求電子性チオール受容体を開示しており、この開示は、参照により本明細書に組み込まれる。

【0081】

求電子性チオール受容体には、上に列挙されたものに加えて、式 $Y-CH_2-CO-$ (式中、Yは脱離基である) を有する α -置換アセチル基が挙げられるが、これに限定されない。脱離基の例としては、クロライド、ブロミド、ヨージド、メシレート、トシレート等が挙げられるが、これらに限定されない。チオール受容体が α -置換アセチル基である場合、受容体への共有結合後のチオール付加物は、結合 $-S-CH_2-$ を形成する。

【0082】

フリーラジカル形成基

結合剤は、チオールと反応する少なくとも2つのフリーラジカル形成基を含有し得る。結合剤上のフリーラジカル形成基は、同じであり得る。あるいは、フリーラジカル形成基は、異なってもよい。好適なフリーラジカル形成基には、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、イタコネート基、ビニルエーテル基、アリルエーテル基、アリルエステル基、およびビニルエステル基が挙げられるが、これらに限定されない。例えば、好適な結合剤には、ジメタクリル酸エチレングリコール、ジアクリル酸ジエチレングリコール、メタクリル酸アリル、トリアクリル酸トリメチロールプロパン、トリアリルアミン、テトラアリルオキシエチレン、ならびにジおよびトリアクリレート、アクリレート基ならびに、さらなるエチレン性不飽和基を含む混合アクリレートが挙げられる。結合剤の他の例としては、N, N'-メチレンビスアクリルアミドおよびN, N'-メチレンビスメタクリルアミド、ポリオールの不飽和モノもしくはポリカルボン酸のエステル、例えば、ジアクリレートもしくはトリアクリレート、例えば、ジアクリル酸ブタンジオール、ジメタクリル酸ブタンジオール、ジアクリル酸エチレングリコール、ジメタクリル酸エチレングリコール、ならびにさらにはトリアクリル酸トリメチロールプロパン、ならびにアリル化合物、例えば、アリル(メタ)アクリレート、シアヌル酸トリアリル、マレイン酸ジアリル、ポリアリルエステル、テトラアリルオキシエタン、トリアリルアミン、テトラアリルエチレンジアミン、リン酸およびさらにはビニルリン酸誘導体のアリルエステル、ペンタエリスリトールジアリルエーテル、ペンタエリスリトールトリアリルエーテル、ペンタエリスリトールテトラアリルエーテル、ポリエチレングリコールジアリルエーテル、エチレングリコールジアリルエーテル、グリセロールジアリルエーテル、グリセロールトリアリルエーテル、ポリアリルエーテル(ソルビトールに基づく)、ならびにさらにはこれらのエトキシ化バリアントが挙げられる。結合剤の他の例としては、3~15-tuplyエトキシ化グリセロールの、3~15-tuplyエトキシ化トリメチロールプロパンの、3~15-tuplyエトキシ化トリメチロールエタンのジおよびトリアクリレート、特に、2~6-tuplyエトキシ化グリセロールのまたは2~6-tuplyエトキシ化トリメチロールプロパンの、3-tuplyプロポキシ化グリセロールの、3-tuplyプロポキシ化トリメチロールプロパンの、およびさらには3-tuply混合エトキシ

ル化もしくはプロポキシ化グリセロールの、3-*t u p l y*混合エトキシ化もしくはプロポキシ化トリメチロールプロパンの、15-*t u p l y*エトキシ化グリセロールの、15-*t u p l y*エトキシ化トリメチロールプロパンの、40-*t u p l y*エトキシ化グリセロールの、40-*t u p l y*エトキシ化トリメチロールエタンの、ならびにさらには40-*t u p l y*エトキシ化トリメチロールプロパンのジおよびトリアクリレート、ジメチルアクリル酸エチレングリコール、ジアクリル酸ジエチレングリコール、メタクリル酸アリル、トリアクリル酸トリメチロールプロパン、トリアリルアミン、テトラアリルオキシエタン、N, N'-メチレンビスアクリルアミド、N, N'-メチレンビスメタクリルアミド、ジアクリル酸ブタンジオール、ジメタクリル酸ブタンジオール、トリアクリル酸トリメチロールプロパン、シアヌル酸トリアリル、マレイン酸ジアリル、ポリアリルエステル、テトラアリルエチレンジアミン、ペンタエリスリトールジアリルエーテル、ペンタエリスリトールトリアリルエーテル、ペンタエリスリトールテトラアリルエーテル、ポリエチレングリコールジアリルエーテル、エチレングリコールジアリルエーテル、グリセロールジアリルエーテル、グリセロールトリアリルエーテル、3~15-*t u p l y*エトキシ化グリセロールのジおよびトリアクリレート、3~15-*t u p l y*エトキシ化トリメチロールプロパンのジおよびトリアクリレート、ならびに3~15-*t u p l y*エトキシ化トリメチロールエタンのジおよびトリアクリレートが挙げられる。本明細書に使用されるとき、「*t u p l y*」とは、エトキシ化鎖内のモノマー単位の数

10

【0083】

20

反応性フリーラジカル部分は、1つ以上の開始剤の存在を必要とし得る。好適な開始剤には、過酸化物、ヒドロペルオキシド、過酸化水素、過硫酸塩、アゾ化合物、および酸化還元開始剤が挙げられるがこれらに限定されない。好適な有機過酸化物には、アセチルアセトンペルオキシド、メチルエチルケトンペルオキシド、*t e r t*-ブチルヒドロペルオキシド、クメンヒドロペルオキシド、*t e r t*-アミルペルピバレート、*t e r t*-ブチルペルピバレート、*t e r t*-ブチルペルネオヘキサノエート、*t e r t*-ブチルペルイソブチレート、*t e r t*-ブチルペル-2-エチルヘキサノエート、*t e r t*-ブチルペルイソノナノエート、*t e r t*-ブチルペルマレーンエート、*t e r t*-ブチルペルベンゾエート、ジ(2-エチルヘキシル)ペルオキシジカーボネート、ジシクロヘキシルペルオキシジカーボネート、ジ(4-*t e r t*-ブチルシクロヘキシル)ペルオキシジカーボネート、ジミリスチルペルオキシジカーボネート、ジアセチルペルオキシジカーボネート、アリルペルエステル、クミルペルオキシネオデカノエート、*t e r t*-ブチルペル-3, 5, 5-トリメチルヘキサノエート、アセチルシクロヘキシルスルホニルペルオキシド、ジラウリルペルオキシド、ジベンゾイルペルオキシド、および*t e r t*-アリルペルネオデカノエートが挙げられるが、これらに限定されない。好適なアゾ化合物には、2, 2'-アゾビスイソブチロニトリル、2, 2'-アゾビス(2, 4-ジメチルバレロニトリル)、および2, 2'-アゾビス(4-メトキシ-2, 4-ジメチルバレロニトリル)、好ましくは水溶性のアゾ開始剤、例えば、限定されないが、2, 2'-アゾビス{2-[1-(2-ヒドロキシエチル)-2-イミダゾリン-2-イル]プロパン}ジヒドロクロリド、2, 2'-アゾビス-(2-アミジノプロパン)ジヒドロクロリド、2, 2'-アゾビス[2-(2-イミダゾリン-2-イル)プロパン]ジヒドロクロリド、および2, 2'-アゾビス[2-(5-メチル-2-イミダゾリン-2-イル)プロパン]ジヒドロクロリドが挙げられる。酸化還元開始剤については、酸化成分は、上述のペルオキシ化合物のうちの少なくとも1つであり、還元成分は、例えば、アスコルビン酸、グルコース、ソルボース、重亜硫酸アンモニウム、亜硫酸アンモニウム、チオ硫酸アンモニウム、次亜硫酸アンモニウム、ピロ亜硫酸アンモニウム、硫化アンモニウム、アルカリ金属重亜硫酸塩、アルカリ金属亜硫酸塩、アルカリ金属チオ硫酸塩、アルカリ金属次亜硫酸塩、アルカリ金属ピロ亜硫酸塩、アルカリ金属硫化物、またはヒドロキシメチルスルホキシ酸ナトリウムである。

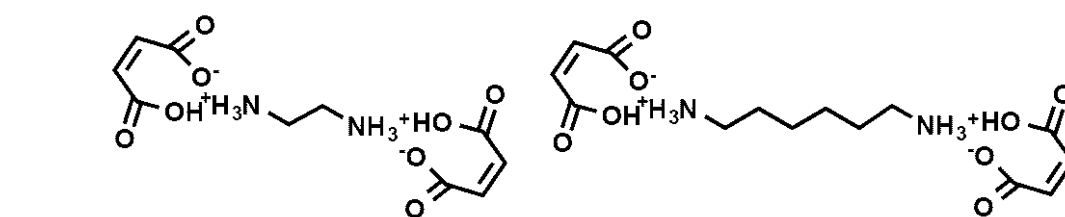
30

40

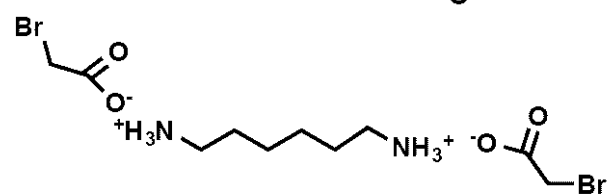
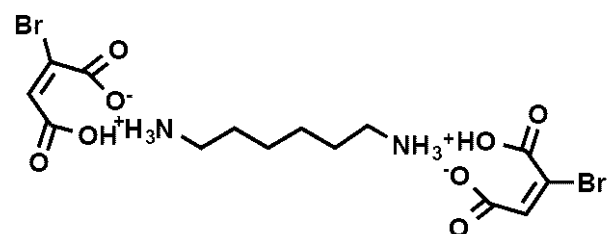
【0084】

50

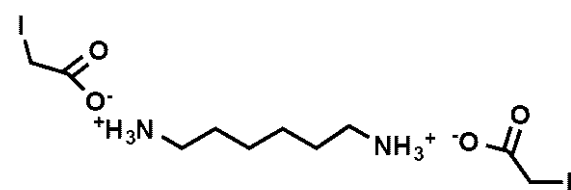
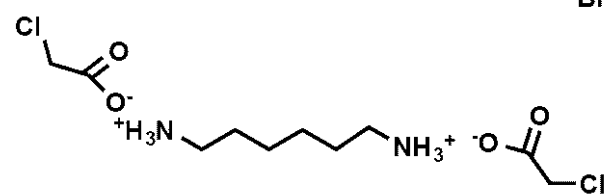
いくつかの実施形態において、分子は、
【化 3】



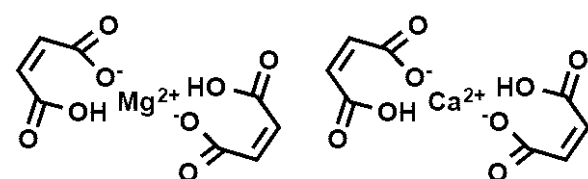
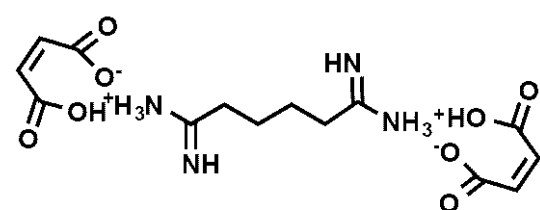
10



20

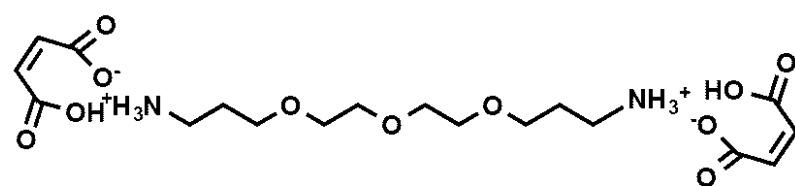
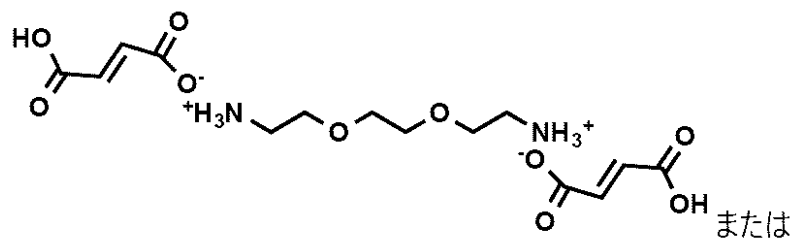
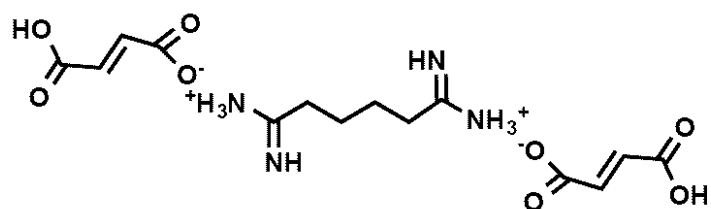


30



40

【化 4】



10

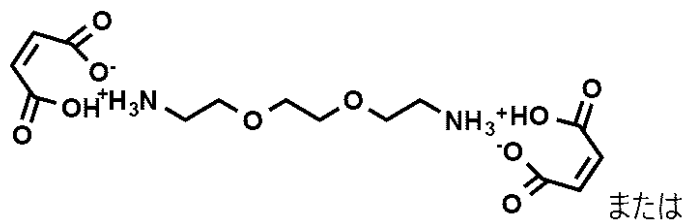
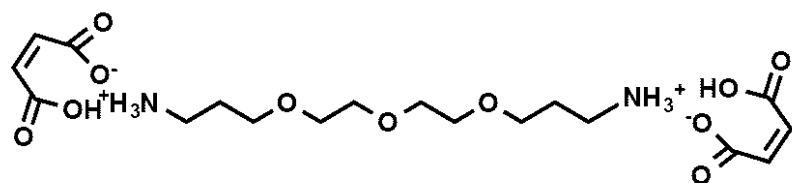
20

である。

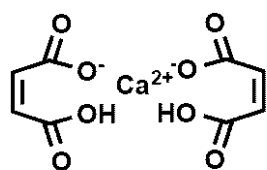
【 0 0 8 5 】

いくつかの実施形態において、結合剤は、構造

【化 5】



30



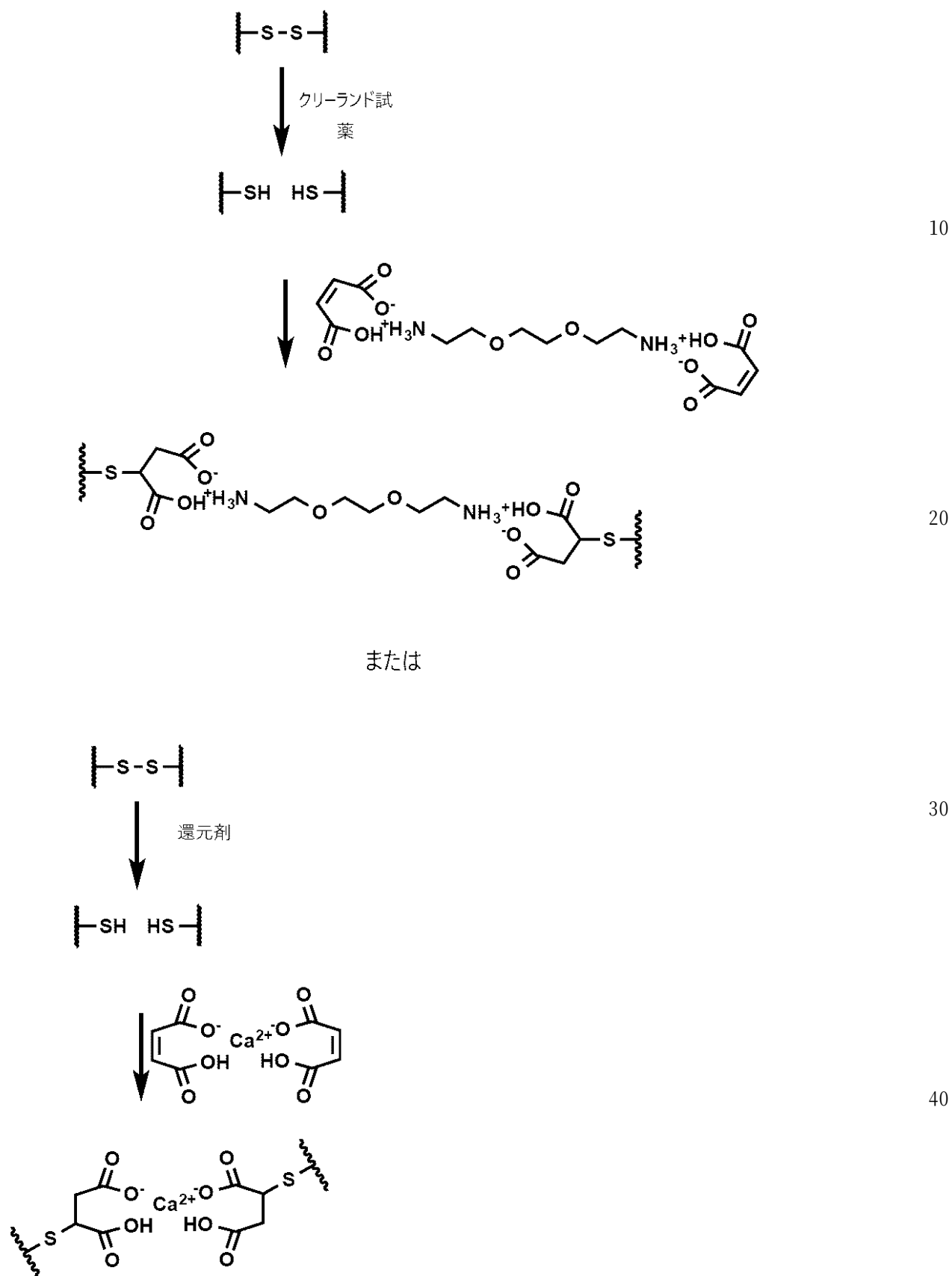
40

を有する。

【 0 0 8 6 】

毛包上のチオール基との反応は、次の通りである。

【化 6】



【0087】

他の薬剤には、酸含有求電子試薬、例えば、アクリル酸およびブロモ酢酸、ならびに類似の化合物が挙げられるがこれらに限定されない。

【0088】

b. 賦形剤

本製剤は、典型的に、1つ以上の美容上許容される賦形剤を含有する。美容上許容される賦形剤には、水、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、日焼け止め剤、ビタミン、染料、毛髪着色剤、タンパク質、アミノ酸、植物抽出物等の天然の抽出物、保水剤、芳香剤、香料、油、軟化剤、滑沢剤、バター、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、ポリマー、樹脂、毛髪固定剤、被膜形成剤、界面活性剤、洗浄剤、乳化剤、乳濁剤、揮発性物質、噴射剤、液体ビヒクル、担体、塩、pH調節剤（例えば、クエン酸）、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤、静電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、吸収剤、およびそれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。

10

【0089】

本製剤は、少なくとも2つ以上の美容上許容される賦形剤を含有し得る。いくつかの形態において、本製剤は、結合剤、水、ならびに任意で保存剤および／または芳香剤を含有する。

【0090】

毛髪を処置するための製剤は、任意の好適な物理的形態であり得る。好適な形態には、低から中等度の粘度の液体、ローション、ミルク、ムース、スプレー、ゲル、クリーム、シャンプー、コンディショナー等が挙げられるが、これらに限定されない。上で列挙されたもの等の好適な賦形剤は、製剤の使用形態（例えば、毛髪スプレー、クリーム、コンディショナー、またはシャンプー）に応じて、毛髪ケア製剤に含まれるかまたはそこから除外される。

20

【0091】

皮膚を処置するための製剤は、任意の好適な物理的形態であり得る。好適な形態には、低から中等度の粘度の液体、ローション、ミルク、ムース、スプレー、ゲル、クリーム、軟膏等が挙げられるが、これらに限定されない。上で列挙されたもの等の好適な賦形剤は、製剤の使用形態（例えば、ローション、ゲル、軟膏、またはクリーム）に応じて、皮膚製剤に含まれるかまたはそこから除外される。

【0092】

薬学的賦形剤は、典型的に、製剤の約10重量%～約99.99重量%、好ましくは約40重量%～約99重量%、より好ましくは約80重量%～約99重量%の量で存在する。

30

【0093】

i. 界面活性剤

界面活性剤は、水の表面張力を低減させることができ、皮膚または毛髪の全体またはその上で製剤が滑るようにする、界面活性剤である。界面活性剤はまた、洗剤および石鹸も含む。界面活性剤は、両性、アニオン性、またはカチオン性であり得る。本製剤に使用され得る好適な界面活性剤には、3-アミノプロパンスルホン酸、アーモンドアミド (almond amide)、アーモンドアミドプロピルベタイン (almond amidopropyl betaine)、アーモンドアミドプロピルアミンオキシド (almond amidopropylamine oxide)、水素化獣脂グルタミン酸アルミニウム (aluminum hydrogenated tallow glutamate)、ラノリン脂肪酸アルミニウム (aluminum lanolate)、硫酸アミノエチル (aminoethyl sulfate)、ラウリルグルタミンアミノプロピル (aminopropyl lauryl glutamine)、 C_{12-15} アルキル硫酸アンモニウム、 C_{12-15} パレス硫酸アンモニウム、 C_{12-16} アルキル硫酸アンモニウム、 C_{9-10} ペルフルオロアルキルスルホン酸アンモニウム (C_{9-10} perfluoroalkylsulfonate)、カプリレス硫酸アンモニウム (ammonium capryleth sulfate)、カプリレス-3硫酸アンモニウム (ammonium capryleth-3 sulfate)、モノグリセリド硫酸アンモニウム (ammonium monoglyceride sulf

40

50

ate)、硫酸アンモニウム、イソチオン酸アンモニウム (ammonium isothionate)、ココイルサルコシン酸アンモニウム、クメンスルホン酸アンモニウム、ジメチコンコポリオール硫酸アンモニウム、ドデシルベンゼンスルホン酸アンモニウム、イソステアリン酸アンモニウム、ラウレス硫酸アンモニウム、ラウレスー12硫酸アンモニウム、ラウレスー5硫酸アンモニウム、ラウレスー6カルボン酸アンモニウム、ラウレスー7硫酸アンモニウム、ラウレスー8カルボン酸アンモニウム、ラウレスー9硫酸アンモニウム、ラウロイルサルコシン酸アンモニウム、ラウリル硫酸アンモニウム、ラウリルスルホコハク酸アンモニウム、ミレス硫酸アンモニウム、ミリスチル硫酸アンモニウム、ノノキシノールー30硫酸アンモニウム、ノノキシノールー4硫酸アンモニウム、オレイン酸アンモニウム、パーム核硫酸アンモニウム (ammonium palm kernel sulfate)、ポリアクリル酸アンモニウム、ステアリン酸アンモニウム、トール酸アンモニウム (ammonium tallate)、キシレンスルホン酸アンモニウム、キシレンスルホン酸アンモニウム、amp-イソステアロイルゼラチン/ケラチンアミノ酸/リジンヒドロキシプロピルトリモニウムクロリド、amp-イソステアロイル加水分解コラーゲン、杏仁油PEG-6エステル (apricot kernel oil PEG-6 ester)、杏子アミド (apricot amide)、杏子アミドプロピルベタイン (apricot amidopropyl betaine)、アラキデスー20、アボカダミド、アボカダミドプロピルベタイン、ババスアミド、ババスアミドプロピルベタイン、ババスアミドプロピルアミンオキシド、ベヘナルコニウムクロリド、ベヘナミド、ベヘナミド、ベヘナミドプロピルベタイン、ベヘナミンオキシド、ラウレス硫酸ナトリウム、ラウリル硫酸ナトリウム、ラウリルアルコールもしくはセテアレスー20のポリオキシエーテル、またはこれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。

【0094】

好適なアニオン性界面活性剤には、カルボン酸イオン、スルホン酸イオン、および硫酸塩イオンを含有するものが挙げられるがこれらに限定されない。アニオン性界面活性剤の例としては、長鎖アルキルスルホン酸およびアルキルアリールスルホン酸のナトリウム、カリウム、アンモニウム、例えば、ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム；スルホコハク酸ジアルキルナトリウム、例えばドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム；スルホコハク酸ジアルキルナトリウム、例えば、ビスー(2-エチルチオキシル)ースルホコハク酸ナトリウム；ならびに硫酸アルキル、例えば、ラウリル硫酸ナトリウムが挙げられる。カチオン性界面活性剤には、第四級アンモニウム化合物、例えば、塩化ベンザルコニウム、塩化ベンゼトニウム、臭化セトリモニウム、塩化ステアリルジメチルベンジルアンモニウム、ポリオキシエチレン、およびココナッツアミンが挙げられるがこれらに限定されない。非イオン性界面活性剤の例としては、モノステアリン酸エチレングリコール、ミリスチン酸プロピレングリコール、モノステアリン酸グリセリル、ステアリン酸グリセリル、オレイン酸ポリグリセリルー4、ソルビタンアシレート、スクロースアシレート、ラウリン酸PEG-150、モノラウリン酸PEG-400、モノラウリン酸ポリオキシエチレン、ポリソルベート、ポリオキシエチレンオクチルフェニルエーテル、PEG-1000セチルエーテル、ポリオキシエチレントリデシルエーテル、ポリプロピレングリコールブチルエーテル、ポロキサマー401、ステアロイルモノイソプロパノールアミド、およびポリオキシエチレン水素化獣脂アミドが挙げられる。両性界面活性剤の例としては、N-ドデシルーβ-アラニン、N-ラウリルーβ-イミノジプロピオン酸ナトリウム、ミリストアンホ酢酸塩 (myristoamphoacetate)、ラウリルベタイン、およびラウリルスルホベタインが挙げられる。

【0095】

1つを上回る界面活性剤が、製剤中に含まれてもよい。

【0096】

界面活性剤は、任意に、製剤の約0.1重量%～約15重量%、好ましくは製剤の約1重量%～約10重量%の範囲の量で含まれる。

【0097】

i i. 軟化剤

軟化剤は、皮膚を湿潤もしくは刺激に対して保護する、柔らかくする、落ち着かせる、コーティングする、滑らかにする、保湿する、保護する、および／または清浄する、材料を指す。製剤での使用に好適な軟化剤には、シリコン化合物（例えば、ジメチコン、シクロメチコン、ジメチコンコポリオール、またはシクロペンタシロキサンとジメチコン／ビニルジメチコン架橋ポリマーの混合物、シクロペンタシロキサンのポリシリコン）、ポリオール、例えば、ソルビトール、グリセリン、プロピレングリコール、エチレングリコール、ポリエチレングリコール、カプリルグリコール、ポリプロピレングリコール、1, 3-ブタンジオール、ヘキシレングリコール、イソプレングリコール、キシリトール；パルミチン酸エチルヘキシル；トリグリセリド、例えば、カプリル／カプリントリグリセリド、ならびに脂肪酸エステル、例えば、イソノナン酸セテアシルまたはパルミチン酸セチルが挙げられるが、これらに限定されない。特定の実施形態において、軟化剤は、ジメチコン、アミドジメチコン、ジメチコノール、シクロペンタシロキサン、PEG-7ジメチコンパンテニルリン酸カリウム、またはこれらの組み合わせである。1つを上回る軟化剤が、製剤中に含まれてもよい。

10

【0098】

軟化剤は、任意に、製剤の約0.5重量％～約15重量％、好ましくは製剤の約1重量％～約10重量％の範囲の量で含まれる。

【0099】

i i i. 乳化剤

本製剤はまた、1つ以上の乳化剤を含有し得る。好適な乳化剤には、不飽和エステルとスルホン酸スチレンモノマーとのコポリマー、セテアシルアルコール、グリセリルエステル、セテアシルアルコールのポリオキシエチレングリコールエーテル、ステアリン酸、ポリソルベート-20、セテアレス-20、レシチン、ステアリン酸グリコール、ポリソルベート-60、もしくはポリソルベート-80、またはこれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。1つを上回る乳化剤が、製剤中に含まれてもよい。

20

【0100】

乳化剤は、任意に、製剤の約0.05重量％～約15重量％、好ましくは製剤の約0.1重量％～約10重量％の範囲の量で含まれる。

30

【0101】

i v. 保存剤

1つ以上の保存剤が、製剤中での微生物の成長を防ぐために製剤中に含まれ得る。好適な保存剤には、グリセリン含有化合物（例えば、グリセリンもしくはエチルヘキシルグリセリンもしくはフェノキシエタノール）、ベンジルアルコール、パラベン（メチルパラベン、エチルパラベン、プロピルパラベン、ブチルパラベン、イソブチルパラベン等）、安息香酸ナトリウム、エチレンジアミン四酢酸（EDTA）、ソルビン酸カリウム、および／またはグレープフルーツ種子抽出物、あるいはそれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。1つを上回る保存剤が、製剤中に含まれてもよい。他の保存剤は美容業界で既知であり、サリチル酸、DMDMヒダントイン、ホルムアルデヒド、クロロフェニシム（Chlorphenism）、トリクロサン、イミダゾリジニル尿素、ジアゾリジニル尿素、ソルビン酸、メチルイソチアゾリノン、デヒドロ酢酸ナトリウム、デヒドロ酢酸、クオタニウム-15、ステアラルコニウムクロリド、ピリチオン亜鉛、メタ亜硫酸ナトリウム、2-ブロモ-2-ニトロプロパン、ジグルコン酸クロルヘキシジン、ポリアミノプロピルビグアニド、塩化ベンザルコニウム、亜硫酸ナトリウム、サリチル酸ナトリウム、クエン酸、ニーム油、精油（種々の）、乳酸、およびビタミンE（トコフェール）が挙げられる。

40

【0102】

保存剤は、任意に、製剤の約0.1重量％～約5重量％、好ましくは製剤の約0.3重量％～約3重量％の範囲の量で含まれる。好ましくは、本製剤は、パラベン不含である。

50

【0103】

v. コンディショニング剤

1つ以上のコンディショニング剤が、本製剤に含まれ得る。好適なコンディショニング剤には、シリコーン系剤（例えば、シリコーンクオタニウム-8）、パンテノール、加水分解コムギおよび／またはダイズタンパク質、アミノ酸（例えば、コムギアミノ酸）、コメヌカ蠟、メドウフォーム種子油、マンゴー種子油、ブドウ種子油、ホホバ種子油、スイートアーモンド油、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、アロエ葉抽出物、アロエベラ葉液汁、フィタントリオール、パンテノール、パルミチン酸レチニル、メト硫酸ベヘントリモニウム（*behentrimonium methosulfate*）、シクロペンタシロキサン、クオタニウム-91、ステアラミドプロピルジメチルアミン、ならびにこれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。

10

【0104】

コンディショニング剤（複数可）は、任意に、製剤の約0.1重量%～約5重量%、好ましくは製剤の約0.3重量%～約3重量%の範囲の量で含まれる。

【0105】

vi. 希釈剤

希釈剤は、本明細書に使用されるとき、結合剤を希釈する物質（複数可）を指す。水は、好ましい希釈剤である。製剤は、典型的に、1重量パーセントを上回る水、好ましくは5重量パーセントを上回る水、より好ましくは50重量%を上回る水、および最も好ましくは80重量%を上回る水を含有する。エチルアルコールおよびイソプロピルアルコール等のアルコールが、毛髪もしくは皮膚の浸透を強化するため、および／または臭気を低減するために、低濃度（製剤の約0.5重量%）で使用されてもよい。

20

【0106】

vii. 粘度調節剤

本製剤は、粘度上昇剤等、1つ以上の粘度調整剤を含有し得る。このような剤のクラスには、粘性液体、例えばポリエチレングリコール、半合成ポリマー、例えば半合成セルロース誘導体、合成ポリマー、例えばカルボマー、ポロキサマー、およびポリエチレンイミン（例えば、PEI-10）、天然ポリマー、例えばアカシア、トラガカント、アルギン酸塩（例えば、アルギン酸ナトリウム）、カラゲナン、植物ガム、例えば、キサンタンガム、ワセリン、蠟、粒子会合コロイド（*particulate associate colloid*）、例えばベントナイト、コロイド状二酸化ケイ素、および微結晶セルロース、界面活性剤、例えばPPG-2ビドロキシエチルココ／イソステアラミド、乳化剤、例えばジステアレス-75 IPDI、ならびに塩、例えば塩化ナトリウム、ならびにこれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。

30

【0107】

viii. 酸化防止剤

本製剤は、1つ以上の酸化防止剤を含有し得る。例としては、トコフェリル、BHT、アスコルビン酸、チャノキ葉抽出物、パルミチン酸アスコルビル、リン酸アスコルビルマグネシウム、カロテノイド、レスベラトロール、クエン酸トリエチル、アルブチン、コウジ酸、アスコルビン酸テトラヘキシデシル（*tetrahexydecyl ascorbate*）、スーパーオキシジスムターゼ、亜鉛、メタ重亜硫酸ナトリウム、リコピン、ユビキノン、およびそれらの組み合わせが挙げられるが、これらに限定されない。

40

【0108】

ix. 乳濁剤

本製剤は、1つ以上の乳濁剤を含有し得る。乳濁剤は、製剤を不透明にするために製剤に添加される。好適な乳濁剤には、ジステアリン酸グリコールおよびエトキシ化脂肪アルコールが挙げられるが、これらに限定されない。

【0109】

c. 製剤の形態

i. スプレー

50

本製剤は、スプレーの形態であり得る。スプレーは、典型的には、結合剤と美容上許容される担体とを含む。いくつかの実施形態において、担体は、水または水とアルコールとの混合物である。スプレー製剤は、任意に、酸化防止剤、日焼け止め剤、ビタミン、タンパク質、ペプチド、植物抽出物、保水剤、油、軟化剤、滑沢剤、増粘剤、毛髪コンディショニング剤、ポリマー、および／または界面滑沢剤を含む。好ましくは、スプレー製剤は保存剤を含む。いくつかの実施形態において、本製剤は芳香剤を含む。いくつかの実施形態において、本製剤は界面活性剤を含む。いくつかの実施形態において、本製剤は、水、芳香剤、保存剤、および結合剤を含有する。いくつかの実施形態において、本製剤は、水、芳香剤、保存剤、および結合剤を含有する。いくつかの実施形態において、本製剤は、水、保存剤、芳香剤、結合剤、および静電防止剤を含有する。いくつかの実施形態において、本製剤は、水、保存剤、芳香剤、結合剤、および毛髪コンディショニング剤を含有する。いくつかの実施形態において、本製剤は、水、保存剤、芳香剤、結合剤、および界面活性剤を含有する。

10

【0110】

毛髪スプレー製剤は、エアロゾルディスペンサーまたはポンプスプレーディスペンサーを含む容器から分注され得る。このようなディスペンサーは当該技術分野で既知であり、種々の製造業者から市販入手可能である。

【0111】

噴射剤

毛髪スプレー製剤が加圧エアロゾル容器から分注されるとき、組成物を容器から出すために噴射剤が使用され得る。好適な噴射剤には、液化化可能ガスまたはハロゲン化噴射剤が挙げられるがこれらに限定されない。好適な噴射剤の例としては、ジメチルエーテルおよび炭化水素噴射剤、例えば、プロパン、*n*-ブタン、*i*sobutan、CFC、およびCFC-置換噴射剤が挙げられる。噴射剤は、単独でか、または混和して使用されてもよい。

20

【0112】

噴射剤の量は、製剤の約10重量%～約60重量%の範囲に及び得る。噴射剤は、2つの区画を有する容器にあるように、毛髪修復剤と別個であってもよい。他の好適なエアロゾルディスペンサーは、噴射剤が圧縮した空気（これは、使用前にポンプまたは同等のデバイスを使用してディスペンサーに充填され得る）であることを特徴とするものである。従来の非エアロゾルポンプスプレーディスペンサー、すなわち、アトマイザーもまた、毛髪ストレート処理製剤を毛髪に適用するために使用され得る。

30

【0113】

i i. コンディショナー

本製剤は、コンディショナーの形態であり得る。コンディショナーは、典型的に、好適な担体中に結合剤を含む。加えて、コンディショナーには、多糖類由来のカチオン性ポリマー、例えば、カチオン性セルロース誘導体、カチオン性デンプン誘導体、カチオン性グアー誘導体、およびカチオン性イナゴマメガム誘導体、合成カチオン性ポリマー、これらの剤の混合物または組み合わせが含まれ得る。本製剤は、他の合成もしくは天然ポリマーまたは生物学的調製プロセスにより導出されたポリマー（これらは、例えばカチオン性基もしくは中性基で適宜官能化される）を含み得る。これらのポリマーは、組成物に対して安定化もしくはストレート処理の作用、および／またはコンディショニング作用（皮膚もしくは毛髪の表面上に付着）を有し得る。

40

【0114】

結合剤は、任意の好適な濃度で含まれ得る。コンディショナー中の結合剤の典型的な濃度は、少量、例えばおおよそ0.01重量%、好ましくは少なくとも0.1重量%から、大量、例えば最大50重量%の範囲に及ぶ。好ましくは、コンディショナーは、0.1重量%～5重量%、より好ましくは0.1重量%～3重量%の範囲の濃度で、結合剤を含有する。より高い濃度の結合剤がコンディショナー中に存在してもよいが、一般には、所望の結果を達成するために必要ではない。

50

【0115】

i i i. シャンプー

毛髪修復剤は、シャンプーの形態であり得る。シャンプーは、典型的に、好適な担体中に結合剤を含む。結合剤は、任意の好適な濃度で含まれ得る。シャンプー中の結合剤の典型的な濃度は、少量、例えばおおよそ0.01重量%、好ましくは少なくとも0.1重量%から、大量、例えば最大50重量%の範囲に及ぶ。好ましくは、シャンプーは、0.1重量%～5重量%、より好ましくは0.1重量%～3重量%の範囲の濃度で結合剤を含有する。より高い濃度の結合剤がシャンプー中に存在してもよいが、一般には、所望の結果を達成するために必要ではない。

【0116】

加えて、シャンプーは、約0.5%～約20%の界面活性材料を含み得る。シャンプー組成物中に用いられる界面活性剤は当該技術分野で周知であり、例えば、Gallagherらへの米国特許第6,706,258号およびGearryらへの米国特許第7,598,213号に開示される。

【0117】

i v. クリーム

本製剤は、クリームの形態であり得る。クリームは、典型的に、好適な担体中に結合剤を含む。結合剤は、任意の好適な濃度で含まれ得る。クリーム中の結合剤の典型的な濃度は、少量、例えばおおよそ0.01重量%、好ましくは少なくとも0.1重量%から、大量、例えば最大50重量%の範囲に及ぶ。好ましくは、クリームは、0.1重量%～5重量%、より好ましくは0.1重量%～3重量%の範囲の濃度で結合剤を含有する。より高い濃度の結合剤がクリーム中に存在してもよいが、一般には、所望の結果を達成するために必要ではない。

【0118】

加えて、クリームは、油、毛髪コンディショニング剤、および／または増粘剤を含み得る。クリームはまた、芳香剤、植物抽出物、および／または界面活性剤を含み得る。クリームは、チューブ、タブ、瓶、または他の好適な容器にパッケージ化され得る。

【0119】

v. 液体結合剤

いくつかの実施形態において、使用時に第2の製剤、例えば、着色またはハイライト処理剤と混合される、液体結合剤が提供される。これらの実施形態において、液体結合剤は、典型的には上述のもの等の希釈剤である好適な担体中に任意の好適な濃度の結合剤を含有し得る。結合剤の濃度は、適切な最終体積および最終濃度の結合剤を有する混合物を提供するのに好適なものである。

【0120】

例えば、液体結合剤は、約5重量%～約50重量%以上の範囲の濃度の結合剤を含有し得る。好ましい実施形態において、液体結合剤は、約20重量%の結合剤を含有する。

【0121】

「ハイライト処理」および「脱色する」という用語は、本明細書に同義に使用される。ハイライト処理用途については、使用の前に、十分な量の液体結合剤が、十分な量のハイライト処理剤と混合されて、所望の濃度の結合剤を有するハイライト処理混合物が形成される。ハイライト処理混合物中の結合剤の典型的な濃度は、少量、例えばおおよそ少なくとも0.01重量%、好ましくは少なくとも0.1重量%から、大量、例えば最大50重量%の範囲に及ぶ。好ましくは、ハイライト処理混合物は、0.1重量%～5重量%、より好ましくは0.1重量%～3重量%の範囲の濃度で結合剤を含有する。より高い濃度の結合剤がハイライト処理混合物中に存在してもよいが、一般には、所望の結果を達成するために必要ではない。

【0122】

あるいは、遊離チオール基に共有結合するのに有効な量の2つの別個の製剤、例えば、

10

20

30

40

50

脱色剤を含有する第1の製剤（すなわち、ハイライト処理製剤）と、結合剤を含有する第2の製剤（すなわち、結合製剤）とが適用される。毛髪中に遊離チオール基を産生するハイライト処理製剤がまず適用され得る。続いて、遊離チオール基に結合する第2の製剤が適用され得る。

【0123】

III. キット

毛髪を処置するためのキットは、典型的に、毛髪中の潜在的な遊離チオール基に共有結合するのに有効な量の結合剤を含有する結合製剤を含有する。

【0124】

キットの使用のための説明書もまた、典型的に提供される。

10

【0125】

キットはさらに、本明細書において還元製剤とも称される、毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる製剤を含有し得る。

【0126】

a. 還元製剤

第1の製剤は、還元製剤であり得る。還元製剤は、毛髪中のジスルフィド結合を還元し、遊離チオール基を産生することができる還元剤を含有する。還元製剤は、所望される毛髪スタイリング処置（毛髪ウェーブ処理または毛髪ストレート処理など）、毛髪の手触り、ユーザの皮膚の敏感さ等に応じて異なり得る。

【0127】

20

還元剤を含有する製剤およびそれらの選択は、美容業界の当業者に周知である。好適な還元剤には、チオグリコール酸ならびにチオグリコール酸の塩およびエステル、チオ乳酸ならびにチオ乳酸の塩およびエステル、システインチオグリセロール、チオグリコール酸ヒドラジド、チオグリコールアミド、モノチオグリコール酸グリセロール、メタ重亜硫酸ナトリウム、β-メルカプトプロピオン酸、N-ヒドロキシエチルメルカプトアセトアミド、N-メチルメルカプトアセトアミド、β-メルカプトエチルアミン、β-メルカプロプロピオンアミド、2-メルカプトエタンスルホン酸、ジメルカプトアジピン酸、ジチオスレイトール、ホモシステインチオラクトン、システイン誘導体、システアミンをマレイン酸無水物-アルキルビニルエーテルコポリマーに付加することによって形成されるポリチオール誘導体、無機亜硫酸塩、無機重亜硫酸塩、システアミンおよびその誘導体、ジチオエリスリトール、有機ホスフィン、ならびに日本の縮毛矯正剤が挙げられるが、これらに限定されない。

30

【0128】

いくつかの実施形態において、キットは還元製剤を含み、これは、酸性パーマ、アルカリ性パーマ、中性pHを有するパーマ、または緩衝アルカリ性ウェーブ処理ローションを用いるパーマ等、パーマメント毛髪ウェーブ処理および毛髪カール処理のための還元剤を含有する。そのような還元剤には、チオグリコール酸ならびにその誘導体塩およびエステル、チオ乳酸ならびにその誘導体塩およびエステル、システインおよびその誘導体、システアミンおよびその誘導体、無機亜硫酸塩、および無機重亜硫酸塩、例えばメタ重亜硫酸ナトリウム、ジチオスレイトール、ジチオエリスリトール、有機ホスフィン、ならびに日本

40

【0129】

他の実施形態において、キットは、毛髪をストレート処理するための還元剤を含有する、還元製剤を含有する。そのような還元剤には、無機重亜硫酸塩、例えばメタ重亜硫酸ナトリウム、無機亜硫酸塩、およびチオグリコール酸アンモニウム、ジチオスレイトール、ジチオエリスリトール、有機ホスフィン、ならびに日本の縮毛矯正剤が挙げられるが、これらに限定されない。

【0130】

還元製剤中の還元剤の量は、当業者によって理解されるように、有効な毛髪ウェーブ処理、毛髪カール処理、または毛髪ストレート処理に十分な数のジスルフィド結合を破断す

50

るのに十分なものである。

【0131】

b. 着色製剤

第1の製剤は、着色処置剤であり得る。第1の製剤は、毛髪に適用する前に一緒に混合され得る2つ以上の構成要素として製剤化され得る。例えば、第1の製剤は、染料前駆体および酸化剤等の2つの構成要素の形態であり得る。典型的に、毛髪着色製剤は、毛髪中のジスルフィド結合を還元し、遊離チオール基を産生することができる還元剤を含有する。好適な還元剤には、チオグリコール酸、チオ乳酸、ジヒドロリボ酸塩、チオグリセロール、メルカプトプロピオン酸、重亜硫酸ナトリウム、重亜硫酸アンモニウム、ホルムアルデヒドスルホキシル酸亜鉛、ホルムアルデヒドスルホキシル酸ナトリウム、メタ重亜硫酸ナトリウム、水素化ホウ素カリウム、ペグ化チオール、およびヒドロキノンが挙げられるが、これらに限定されない。第1の製剤中の還元剤の量は、当業者によって理解されるように、毛髪着色成分の有効な拡散に十分な数のジスルフィド結合を破断するのに十分なものである。

10

【0132】

第1の製剤の構成要素は、所望される毛髪着色処置（例えば、セミパーマネント（semi-permanent）、デミパーマネント（demi-permanent）、またはパーマネント毛髪着色のため等）、毛髪の手触り、ユーザの皮膚の敏感さ等に応じて異なり得る。様々な毛髪着色処置、毛髪の手触り、および毛髪感受性のための毛髪着色製剤が、当業者に既知である。

20

【0133】

c. 結合製剤

結合製剤は、毛髪中の遊離チオールに結合するのに有効な量の結合剤を含有する。結合剤を含有する好適な製剤は、上述の通りである。結合製剤は、任意の好適な形態であり得る。好適な形態には、低から中等度の粘度の液体、ローション、ミルク、ムース、スプレー、ゲル、クリーム、シャンプー、コンディショナー等が挙げられるが、これらに限定されない。結合製剤は好適な容器中に存在し、これは製剤の形態に依存する。

【0134】

一実施形態において、結合製剤は、2つ以上の別個の成分として提供される。例えば、結合剤は密封パッケージ中の乾燥粉末として提供され得、賦形剤はバイアルまたは他の容器中に提供され得る。結合剤と賦形剤との好適な混合容器が提供され得る。

30

【0135】

任意で、結合剤は、シャンプーまたはコンディショナーと事前混合される。

【0136】

いくつかの実施形態において、結合製剤（または第2の製剤）は、第1の製剤（還元製剤または毛髪着色処置剤）と混合され、この混合物が、毛髪に適用される。

【0137】

c. キット内の他の材料

キットは、任意に、シャンプーおよびコンディショナーを含有する。好適なシャンプーおよびコンディショナーには、LiQWd（登録商標）Hydrating ShampooおよびLiQWd（登録商標）Hydrating Conditionerが挙げられるが、これらに限定されない。

40

【0138】

キットは、臭気除去剤をさらに含有し得る。臭気除去剤は、還元製剤に組み込まれてもよい。あるいは、臭気除去剤は、結合製剤を毛髪から洗い落とす前後に使用するのに好適な容器中に存在する。いくつかの好適な臭気除去剤が、当業者に既知である。

【0139】

I V. 使用の方法

本明細書に開示される方法は、毛髪を遊離チオール基で処置することに関する。

【0140】

50

A. 遊離チオール基による損傷した毛髪の処置

一実施形態において、結合剤での処置の前に毛髪は損傷しており、毛髪中のチオール基は遊離チオールである。結合剤が毛髪に適用され、遊離チオールに結合し得る。好ましくは、結合剤は、少なくとも、毛髪が損傷されてから1週間以内、好ましくは3日以内、より好ましくは2日以内、最も好ましくは同日に適用される。

【0141】

a. 毛髪のすすぎまたは洗浄

任意に、毛髪は、結合剤を適用する前に、シャンプーおよび／またはコンディショニングされ得る。あるいは、毛髪は、結合剤の適用前に水ですすぐだけでもよい。

【0142】

b. 毛髪への結合剤の適用

毛髪のシャンプー、コンディショニング、および／またはすすぎに続いて、結合剤が毛髪に適用される。あるいは、毛髪は、結合剤の適用前に洗浄またはすすぎを行う必要はない。この実施形態では、結合剤は、乾燥した毛髪に適用される。

【0143】

結合剤は、日々の毛髪コンディショニング処置として使用され得る。

【0144】

典型的に、適用される結合剤の量は、毛髪に浸潤させるのに十分なものである。

【0145】

結合剤は、単回適用として毛髪に適用され得るか、または結合剤の適用は、1回以上反復されてもよい。典型的に、各適用で適用される結合剤の量は、毛髪に浸潤させるのに十分なものである。各適用で毛髪に適用される結合剤の量は、毛髪の長さおよび量に応じて、1人当たり約1～約100mLであり得る。いくつかの実施形態において、結合剤の適用は、初回適用の後、即座（例えば、約10～15秒以内）、または約1～5分の間、5分後を超える、約5～10分の間、10分後を超える、約10～20分の間反復され得る。

【0146】

c. 毛髪からの結合剤の除去

好ましくは、毛髪は、結合剤の適用の後に洗浄またはすすぎが行われる。毛髪は、最後の結合剤適用後、即座に（例えば、適用後10、15、25、30、45、60秒（1分）、2分、3分、4、または5分以内に）すすぎを行い、その後に洗浄が行われ得る。あるいは、毛髪は、毛髪への最後の結合剤適用後に、毛髪の種類に応じて、適用後約30分以内、好ましくは約5分～約20分以内、より好ましくは約10分以内に、すすぎおよび洗浄が行われ得る。

【0147】

あるいは、毛髪は、結合剤の適用後に洗浄またはすすぎを行う必要がない。

【0148】

結合剤は、毛髪中の潜在的な遊離チオールに共有結合する。チオールは、結合剤の適用後少なくとも1週間、好ましくは少なくとも1ヶ月間、結合したままである。チオールは、結合剤の適用後約2カ月以上等、より長い期間結合したままであり得る。結合反応は、安定な反応であり、その結果、チオールは、毛髪着色処置（結合反応と同時にまたはその後）に供された場合であっても、結合したままとなり得る。

【0149】

B. 還元剤による毛髪の化学処置

一実施形態において、結合剤での処置の前に、毛髪のウェーブ処理（本明細書において毛髪パーマ処理もしくはパーマネントウェーブとも称される）、カール処理、および／またはストレート処理のために使用される還元剤に、毛髪を供する。

【0150】

a. 毛髪への還元剤の適用

毛髪のウェーブ処理、カール処理、またはストレート処理における第1のステップは、

10

20

30

40

50

システインジスルフィド結合を破壊して、遊離チオール部分を形成することである。システインジスルフィド結合を破壊するためのプロセスは、還元剤の適用によるものである。還元剤を適用するプロセスは、当業者に既知である以下の通常のパーマ処理または毛髪ストレート処理手順を伴う。例えば、毛髪にパーマ処理を施すために、まず、毛髪を洗浄し、種々の寸法のパーマ用ロッドにセットする。次に、チオグリコール酸塩還元溶液もしくはローション等の還元剤を、毛髪に適用する。毛髪を指定時間セットした後、チオグリコール酸塩溶液を毛髪からすすぎ落とす。

【0151】

このプロセスにおける過酸化水素の適用は任意である。以前に化学的処置が行われている毛髪に処置を施す場合等、いくつかのプロセスでは、過酸化水素は通常は使用されない。一度も処置が施されていない毛髪にパーマ処理を行う場合等、他のプロセスにおいては、過酸化水素が添加され得る。これらの実施形態では、過酸化水素は、典型的に、還元剤をすすぎ落とした後に添加される。次いで、過酸化水素は、結合剤を添加する前に毛髪からすすぎ落とされ得る。

【0152】

b. 結合剤の適用

還元処置に続いて、結合剤またはその製剤のうちの1つ以上が、毛髪に適用される。結合剤は、典型的に、還元剤による処置と同日に適用されるが、還元剤での処置後1～2週間以内等、後から適用されてもよい。

【0153】

典型的に、適用される結合剤の量は、毛髪に浸潤させるのに十分なものである。結合剤は、一般に、所望されるレベルの毛髪ウェーブ処理、カール処理、またはストレート処理が達成された後、すすぎおよびシャンプーで毛髪から落とされる。いくつかの実施形態において、結合剤は、結合剤の最終適用後、即座に（例えば、適用後10、15、25、30、45、または60秒以内に）毛髪からすすぎ落とされる。あるいは、毛髪は、毛髪への最後の結合剤適用後に、毛髪の種類に応じて、適用後約30分以内、好ましくは約5分～約20分以内、より好ましくは約10分以内に、すすぎおよび洗浄が行われ得る。結合剤は、毛髪から適用後10、15、25、30、45、60秒以内に毛髪からすすぎ落とされ、依然として、所望されるレベルの毛髪ウェーブ処理、カール処理、またはストレート処理を達成することができる。

【0154】

結合剤は、単回適用として毛髪に適用され得るか、または結合剤の適用は、1回以上反復されてもよい。典型的に、各適用で適用される結合剤の量は、毛髪に浸潤させるのに十分なものである。いくつかの実施形態において、各適用で毛髪に適用される結合剤の量は、パーマ用ロッド1つ当たり約1～約10mLである。いくつかの実施形態において、結合剤の適用は、初回適用後、即座に（例えば、10～15秒以内に）またはおおよそ1、5、7.5、10、12.5、15、17.5、もしくは20分後に反復され得る。いくつかの実施形態において、2回目の適用は、1回目の適用の約7分～約10分後である。

【0155】

結合剤は、その適用後に毛髪からすすぎ落とされる。毛髪は、最後の結合剤適用後、即座に（例えば、適用後10～15秒以内に）すすぎおよび洗浄が行われ得る。あるいは、毛髪は、結合剤の最終適用の約10分後またはそれ以降、例えば、毛髪への結合剤の反復適用の約15～約30分後、好ましくは約20分後に、すすぎおよび洗浄が行われ得る。

【0156】

結合剤は、毛髪中の遊離チオールに共有結合する。チオールは、少なくとも1週間、2週間、3週間、4週間、1カ月、2カ月、またはそれ超、結合したままである。

【0157】

結合剤は、通常、それらが適用されるのと同日に、個体の毛髪から洗い落とされる。対照的に、過酸化水素のみを使用する（かつ架橋剤の添加を伴わない）従来のパーマは、

10

20

30

40

50

一般に、適用後少なくとも48時間は洗浄されない（従来のパーマメント処置の後48時間以内に毛髪を洗浄すると、毛髪のカール量に著しい消失をもたらす、および／または毛髪の損傷を引き起こし得る）。

【0158】

本明細書に記載される組成物は、毛髪の質、例えば、見た目（例えば、艶）および感触を改善し、乾燥強度（例えば、引張強度）を向上させ、毛髪が着色等の後続の処置に供されたときの毛髪の傷みを減少させる。

【0159】

いくつかの実施形態において、毛髪の傷みは、同じ個体の未処置の毛髪と比較して、結合剤での処置後には、5、10、15、20、25、30、35、40、45、50、55、60、65、70、または75%以上減少する。毛髪の傷みは、着色処置および他の処置中に遭遇する重大な問題である。

10

【0160】

C. 毛髪への着色製剤の適用

着色製剤は、一般に、当業者に既知である通常の毛髪着色手順の後に、個体の毛髪に適用される。典型的に、毛髪着色処置には、毛髪の天然色素および／または毛髪に存在する他の人工色素を脱色すること、および染料前駆体を毛髪中に拡散させた後、毛髪から出て拡散するには大きすぎる発色団の形成を毛幹内でもたらすカップリング反応という2つの相補的なプロセスが含まれる。毛髪着色製剤は、例えば、脱色粉末とデベロッパーとを混合することによって形成される、ハイライト製剤（highlighting formulation）であり得る。より複雑な色は、複数の前駆体および多くのカップラー（coupler）を含有し得、複数の反応を伴い得る。

20

【0161】

染料前駆体は、それぞれが異なる機能を有する複数の成分を含有し得る。第1の成分は、通常、アルカリ化剤（通常、アンモニアおよび／またはアンモニア代替物、例えば、モノエタノールアミン [MEA]）である。アルカリ化剤は、染料前駆体の拡散を補助するために毛髪繊維を膨張させることを含む、毛髪着色プロセスにおいて複数の役割を果たす。染料前駆体は、一般に、p-ジアミンおよびp-アミノフェノールを含む。前駆体は、毛幹に浸透すると、酸化されて活性中間体となる。中間体は、次いで、着色カップラー（color coupler）と反応して、洗浄抵抗性の色素を作出する。より具体的には、中間体は、酸化剤の存在下で、別の酸化染料中間体分子とカップリングして、毛幹内に大きな縮合環着色化合物を形成する。縮合環生成物は毛幹に浸透するには大きすぎるため、前駆体中間体は、カップリング反応の前に毛幹に浸透する必要がある。カップラーは、前駆体化合物の酸化によって生成された色を調整する。デミパーマメント製品とパーマメント製品との間の主な相違は、アルカリ化剤および過酸化剤濃度である。毛小皮は、デミパーマメント染料では、パーマメント着色製品と比較してあまり良好に膨張せず、染料の浸透効率が悪くなる。

30

【0162】

いくつかの着色製剤は、重亜硫酸ナトリウム等の還元剤を使用して毛髪中のジスルフィド結合を破壊し、毛髪着色染料の毛髪内へのより深い浸透を可能にしている。具体的には、本方法は、水素結合を破壊すると同時に、毛幹中のシステインのジスルフィド結合の一部を還元してチオール基にすることを伴う。還元プロセスは、毛髪の化学的および美的特徴を変化させ、これらは、望ましくない。

40

【0163】

毛髪染色プロセスの後に、シャンプーおよびコンディショニング処置、カチオン性もしくは両性界面活性剤に加えて、カチオン活性軟化剤および第四級ポリマーを含有する中和リンスまたは酸均衡シャンプー（acid balanced shampoo）が続き得る。あるいは、毛髪染色プロセスは、シャンプーおよび／またはコンディショニング処置の前に、本明細書に記載される結合剤の適用が続き得る。

【0164】

50

a. 結合製剤の適用

結合製剤は、毛髪着色製剤と同時に適用され得るか、または毛髪着色製剤の適用に続いて適用され得る。例えば、結合製剤は毛髪着色処置剤と混合され得、結合製剤と毛髪着色処置剤の両方を含有する混合物が、毛髪に適用され得る。

【0165】

あるいは、毛髪の着色に続いて、結合製剤またはその製剤が、毛髪に適用される。結合剤は典型的に着色処置剤と同日に適用されるが、還元剤での処置後1～2週間以内等、後から適用されてもよい。典型的に、適用される結合製剤（または結合製剤と毛髪着色製剤との混合物）の量は、毛髪に浸潤させるのに十分なものである。結合製剤は、単回適用として毛髪に適用され得るか、または結合剤の適用は、1回以上反復されてもよい。典型的に、各適用で適用される結合製剤の量は、毛髪に浸潤させるのに十分なものである。各適用で毛髪に適用される結合製剤の量は、毛髪の長さおよび量に応じて、1人当たり約1～約100mLであり得る。いくつかの実施形態において、結合剤の適用は、初回適用後、即座に（例えば、10～15秒以内に）またはおおよそ1、5、7.5、10、12.5、15、17.5、もしくは20分後に反復され得る。

10

【0166】

結合剤は、適用後即座に、例えば、10、15、25、30、45、もしくは60秒以内、または2、3、4、または5分以内に、毛髪からすすぎおよびシャンプーが行われ得る。あるいは、結合剤は、該結合剤を毛髪に適応した後、毛髪の種類に応じて、適用後約30分以内、好ましくは約5分～約20分以内、より好ましくは適用後約10分以内に、毛髪からすすぎ落とされ得る。

20

【0167】

結合製剤が毛髪着色処置剤と組み合わせられ、混合物として毛髪に適用される場合、混合物は毛髪着色処置に必要な間、毛髪に残される。典型的に、混合物は、おおよそ10分間適用される。混合物は、毛髪着色処置の標準的な方法に従って、例えば、混合物を適用したおおよそ10分後にすすぎおよびシャンプーを行うことにより、毛髪から除去される。

【0168】

結合製剤は、その適用後に、毛髪からすすぎ落とされる。毛髪は、最後の結合剤適用後、即座に（例えば、適用後10～15秒以内に）すすがれ、続いて洗浄され得る。好ましくは、毛髪は、最後の結合剤適用の約10分後またはそれ以降に、例えば、毛髪への結合剤の反復適用の約15分～約30分後、任意に約20分後に、すすぎおよび／または洗浄が行われる。

30

【0169】

結合剤は、毛髪中の遊離チオールに共有結合する。チオールは、少なくとも1週間、2週間、3週間、4週間、1カ月、または2カ月以上、結合したままである。

【0170】

結合剤は、通常、それらが適用されるのと同日に、個体の毛髪から洗い落とされる。対照的に、過酸化水素のみを使用する（かつ架橋剤の添加を伴わない）従来のパーマは、一般に、適用後少なくとも48時間は洗浄されない（従来のパーマメント処置の後48時間以内に毛髪を洗浄すると、毛髪のカール量に著しい消失をもたし得、および／または毛髪の損傷を引き起こし得る）。

40

【0171】

本明細書に記載される組成物は、毛髪の質、例えば、見た目（例えば、艶）および感触を改善し、乾燥強度（例えば、引張強度）を向上させ、毛髪が着色等の後続の処置に供されたときの毛髪の傷みを減少させる。

【0172】

いくつかの実施形態において、毛髪の傷みは、同じ個体の未処置の毛髪と比較して、結合剤での処置後には、5、10、15、20、25、30、35、40、45、50、55、60、65、70、75、80、85、または90%以上減少する。毛髪の傷みは、着色処置および他の処置中に遭遇する重大な問題である。

50

【実施例】

【0173】

実施例1：従来のパーマとビスマレート結合剤を使用したパーマとの比較

【0174】

概要

毛髪試料を、ヒト対象から得、1/2インチ幅のウェフトに切断した。

【0175】

還元剤：チオグリコール酸アンモニウム（ATG）をZotosによって製造されたパーマメントウェーブキットから得た。10g溶液中300mgのジチオスレイトールもまた還元剤として使用した。

10

【0176】

結合剤：10gの全溶液（水）中300mgの濃度でビスマレート結合剤2，2'-（エタン-1，2-ジイルビス（オキシ））ビス（エタン-1-アミン）ジマレートを使用した。

【0177】

方法

結合剤を使用して毛髪をパーマ処理するための方法。

【0178】

毛髪を、清浄用シャンプーで洗浄し、タオル乾燥させた後、パーマ用ロッドに巻いた。チオグリコール酸アンモニウムまたはジチオスレイトールを、次いで、毛髪に適用し、10分間～1時間毛髪につけたままにした。次いで、毛髪を30秒～1分間すすいだ後、タオルで吸い取って乾燥させた。

20

【0179】

ニードルノーズアプリーケーターで、毛髪が浸るように結合剤を毛髪に適用した。結合剤を約7.5分間毛髪につけたままにした。毛髪を結合剤に浸し（2回目）、さらに7.5分間、合計で15分間おいた。次いで、毛髪を水で約1～2分間すすいだ後、パーマロッドから外した。毛髪をパーマ用ロッドから外した後、LiQWd（登録商標）Hydrating ShampooおよびHydrating Conditionerを含む種々のサロン用シャンプーおよびコンディショナーブランドのもので毛髪をシャンプーおよびコンディショニングした。洗浄および乾燥ステップを、40回反復した。

30

【0180】

毛髪の第2の部分を、過酸化水素を結合剤の代わりに使用したことを除いて上述のようにパーマ処理した。

【0181】

結果

いずれのパーマ処理（結合剤または過酸化水素を使用）も、同じシャンプーおよびコンディショナーでの40回の洗浄および乾燥サイクルの後、全体的なカールにわずかな低下を見せただけであった。しかしながら、結合剤を使用したパーマの外観および手触りは、過酸化水素を使用したパーマと比較してより艶があり、縮れが少なかった。

40

【0182】

実施例2：従来のパーマおよび結合剤の反復適用による毛髪の傷みの比較。

方法

【0183】

2つの毛髪試料を得た。両方の試料を、実施例1に記載されるようにジチオスレイトールまたはチオグリコール酸アンモニウムで処置した。毛髪試料のうちの一方は、続いて結合剤で処置したが、他方は、過酸化水素で中和させた。このプロセスは、結合剤で処置した毛髪については同日に完了した。このプロセスは、過酸化水素（従来のパーマ）では3日で完了した。

【0184】

この手順を、各毛髪試料について、48時間の期間にわたって3回反復した。

50

【0185】

結果

目視検査すると、結合製剤で処置した第2の毛髪使用は、傷みの徴候がほとんどまたは全く見られなかった。しかしながら、過酸化水素で処置した第1の毛髪試料は、著しい傷みを見せた。

【0186】

実施例3：以前に日本の縮毛矯正剤で縮毛矯正された毛髪の損傷の程度の比較

方法

1つ目が以前に日本の縮毛矯正剤（Yuko）でストレート処理されたもので、2つ目が以前に苛性アルカリ不含の縮毛矯正剤（African Pride Miracle Deep Conditioning）でストレート処理されたものである、2つの毛髪試料を得た。試料を、結合製剤を使用して実施例1および2に記載されるように処置した。

10

【0187】

以前に苛性アルカリ不含の縮毛矯正剤（African Pride Miracle Deep Conditioning）でストレート処理された別の毛髪試料を得た。この試料を、従来の毛髪ストレートパーマ（Zotos）で処置した。

【0188】

結果

結合製剤で処置した毛髪試料には、目立った損傷は見られなかった。しかしながら、従来のパーマ剤で処置した試料は、適用中ですら著しい傷みを見せた。

20

【0189】

実施例4：結合製剤で処置した後の毛髪の艶および手触り。

概要

【0190】

一度も処理されたことのない未処置の白髪の試料をヒト対象から得た。

【0191】

結合製剤：実施例1のビスマレエート結合剤（300mg）を水（10g）中に溶解した。結果として得られた溶液を、1：1の比率でLiQWD Volumizing Conditioner（登録商標）と混合した。

30

【0192】

方法

一度も処理されたことのない白髪の部分を、LiQWD（登録商標）Hydrating Shampooで洗浄した後、タオルで吸い取って乾燥させた。次いで、毛髪を目の粗い櫛で梳かした後、目の細かい櫛で2分間梳かした。

【0193】

梳かした後、結合製剤（約4mL）を、手で毛髪試料に適用し、次いで試料をおおよそ1分間梳かした。毛髪試料を約10分間放置し、その後、水ですすぎ、次いでLiQWD（登録商標）Volumizing ShampooおよびConditionerで洗浄した後、試験した。

40

【0194】

毛髪試料を、LiQWD（登録商標）Volumizing ShampooおよびConditionerでさらに5回洗浄し、コンディショニングした。

【0195】

一度も処理されたことのない白髪の第2の部分、すなわち対照は、結合製剤を対照毛髪試料に適用しなかったことを除き、上と同一に処置した。このようにして、毛髪を梳かした後、LiQWD Volumizing Conditioner（登録商標）（結合剤なし）を、手で毛髪試料に適用した。

【0196】

結果：

50

結合製剤で処置した毛髪試料は、元の未処置試料よりも光沢があり、柔らかい手触りを有した。処置した毛髪試料は、対照試料と比較して全体的により健康な外観が得られた。

【0197】

光沢、手触り、および全体的な外観は、5回のシャンプーおよびコンディショニング処置の後、無傷なままであった。

【0198】

実施例5：結合製剤で処置した後の毛髪の艶および手触り。

概要

【0199】

高度に多孔質で梳かしにくいと示される未処置の一度も処理されたことのない金髪の試料を、ヒト対照から得た。

10

【0200】

結合製剤：実施例1のビスマレエート結合剤（300mg）を水（10g）中に溶解した。結果として得られる溶液を、1：1の比率でLiQWD Enhancing Conditioner（登録商標）と混合した。

方法

【0201】

一度も処理されたことのない金髪の部分を、LiQWD（登録商標）Hydrating Shampooで洗浄した後、タオルで吸い取って乾燥させた。次いで、毛髪を目の粗い櫛で梳かした後、目の細かい櫛で5分間梳かした。

20

【0202】

次いで、結合製剤（約7mL）を手で毛髪試料に適用した後、試料をおおよそ2分間梳かした。毛髪試料を約5分間放置した後、毛髪を結合製剤（約4mL）で再度処置した。毛髪試料をおおよそ10秒間梳かし、約5分間放置した。

【0203】

毛髪試料を水ですすいだ後、LiQWD（登録商標）Sulfate Free Enhancing ShampooおよびConditionerで洗浄した後、試験した。

【0204】

初回試験の後、試料をさらに2回LiQWD（登録商標）Sulfate Free Enhancing ShampooおよびConditionerで洗浄およびコンディショニングした。

30

【0205】

一度も処理されたことのない金髪の第2の部分、すなわち対照は、結合製剤を対照毛髪試料に適用しなかったことを除き、上と同一に処置した。このようにして、毛髪を梳かした後、LiQWD Volumizing Conditioner（登録商標）（結合剤なし）を、手で毛髪試料に適用した。

【0206】

結果：

結合製剤で処置した毛髪試料は、元の未処置試料よりも光沢があり、柔らかい手触りを有した。処置した毛髪試料は、対照試料と比較して全体的により健康な外観が得られた。

40

【0207】

光沢、手触り、および全体的な外観は、2回のシャンプーおよびコンディショニング処置の後、無傷なままであった。

【0208】

実施例6：結合製剤で処置した着色毛髪の色保持と手触り。

概要

【0209】

3つの毛髪試料をヒト対象から得、1／2インチ幅のウェフトに切断した。

【0210】

50

着色製剤：パーマメント毛髪着色製剤を、L'Oréal（登録商標）パーマメント毛髪着色サービス（20体積量の過酸化剤とともに、L'Oréal（登録商標）Majoralパーマメント着色剤10番）から得た。

【0211】

結合製剤：10gの全溶液（水）中300mgの濃度でビスマレート結合剤2，2'－（エタン－1，2－ジイルビス（オキシ））ビス（エタン－1－アミン）ジマレートをを使用した。

【0212】

方法

毛髪試料を、清浄用シャンプーで洗浄した後、タオル乾燥させた。試料を、次いで、L'Oréal（登録商標）パーマメント毛髪着色サービスで着色し、おおよそ35～40分間毛髪試料につけたままにした。

10

【0213】

続いて、第1の着色処置毛髪試料（「対照」）を、Liqwd（登録商標）Hydrating ShampooおよびConditionerで5回すすぎおよび洗浄を行った後、写真撮影した。

【0214】

結合製剤を、スプレーボトルによって第2および第3の着色処置毛髪試料に適用し、指を使ってマッサージした。結合製剤は、第2の毛髪試料では約1分間つけたままにし、第3の試料では約10分間つけたままにした。続いて、毛髪試料を、Liqwd（登録商標）Hydrating ShampooおよびConditionerですすいだ後、洗浄し（5回）、その後で試験した。

20

【0215】

結果：

結合製剤で処置した毛髪試料は、対照よりも良好な色の保持、より多くの光沢、およびより少ない縮れを見せた。結合製剤で処置した毛髪試料は、対照よりも手触りが滑らかであり、より少ない縮れおよび付加された艶により、全体的により健康的な外観が得られた。

【0216】

実施例7：従来のパーマ処理を行った毛髪と結合製剤を使用してパーマ処理を行った毛髪との着色保持の比較。

30

方法

【0217】

ヒト対象から得た1／2インチ幅の毛髪試料ウェフトを、清浄用シャンプーで洗浄した後、タオル乾燥させた。チオグリコール酸アンモニウムまたはジチオスレートールを、目の粗いおよび目の細かい櫛で数回機械的に毛髪全体に引いて、そのまま毛髪を10分～1時間放置した。毛髪を、次いで、水で30秒～1分間すすいだ後、タオル乾燥させた。

【0218】

実施例1に記載される結合製剤を、次いで、ニードルノーズアプリーケーターで、毛髪が浸るように適用し、7.5分間つけたままにした。このステップを、合計で15分反復した。次いで、毛髪を1～2分間すすぎ、シャンプーした後、Liqwd（登録商標）Hydrating ShampooおよびHydrating Conditionerを含む種々のサロン用シャンプーおよびコンディショナーブランドのものでコンディショニングした。

40

【0219】

第2の毛髪試料を、上述のようにストレート処理したが、結合製剤の代わりに過酸化水素を使用した。毛髪試料の洗浄およびコンディショニングを反復した。

【0220】

毛髪の色と比較：

Liqwd（登録商標）Hydrating ShampooおよびLiqwd（登録

50

商標) Hydrating Conditioner を使用して両方の毛髪試料を 5 回洗浄した後、試料をそれらの色の保持に関して試験した。

【0221】

結果

結合製剤で処置した毛髪試料は、過酸化水素で処置した毛髪と比較して、1 回目の洗浄前の毛髪試料により近い色の強度を呈した。

【0222】

実施例 8：結合製剤と同時に適用されるハイライト処理製剤で処置した毛髪と、ハイライト処理製剤単独で処置した毛髪との比較

実施例 1 の結合製剤は、10 g の全溶液（水）中 2400 mg の濃度でビスマレエート結合剤を含有した。

10

【0223】

2 つのヒト毛髪見本を試験した。試料は、同じ頭部から、1 インチ幅で取得し、半分に分けた。色は中等度の茶色であり、未知の業務用毛髪着色剤で以前に着色処置されているものであった。

【0224】

幅 1 / 2 インチで長さ 8 インチの見本 1 を、結合製剤と混合した従来のハイライト処理成分で色を明るくした。1 oz の Joico Verocolor Veroxide デベロッパー 20 体積量を、1 oz の Joico Verolight 粉末脱色剤と混合して、ハイライト処理製剤を形成した。次いで、9 mL の結合製剤をハイライト処理製剤に添加して、混合物を形成した。

20

【0225】

毛髪をアルミニウム箔に載せた状態で塗布用ブラシを用いて混合物を見本 1 の毛髪に適用した。次いで、箔を見本に巻きつけ、35 分間処理を進行させた。見本に 1 回すぎおよびシャンプーを行った。

【0226】

対照である幅 1 / 2 インチで長さ 8 インチの見本 2 を、結合製剤の不在下において従来のハイライト処理成分で色を明るくした。1 oz の Joico Verocolor Veroxide デベロッパー 20 体積量を、1 oz の Joico Verolight 粉末脱色剤と混合して、クリーム状の稠度を有するハイライト処理製剤を形成した。

30

【0227】

毛髪をアルミニウム箔に載せた状態で塗布用ブラシを用いてハイライト処理製剤を見本 2 の毛髪に適用した。次いで、箔を見本に巻きつけ、35 分間処理を進行させた。見本に 1 回すぎおよびシャンプーを行った。

【0228】

結果

見本 1 と見本 2 との間で毛髪の質に顕著な違いが観察された。見本 1 の毛髪は、対照である見本 2 よりも柔らかく、縮れが少なく、潤って見え、より光沢があった。

【0229】

両方の見本にさらに 5 回の洗浄およびコンディショニングを行ったが、対照である見本 2（ハイライト処理製剤単独で処置）と比較して、見本 1（ハイライト処理製剤と結合製剤との混合物で処置）には顕著な利点があった。

40

【0230】

別途定義されない限り、本明細書に使用されるすべての技術的および科学的用語は、開示される発明が属する当該技術分野の当業者によって広く理解されるものと同じ意味を有する。本明細書に引用される刊行物およびそれらが引用される材料は、参照により具体的に組み込まれる。

【0231】

当業者であれば、日常的に過ぎない実験を使用して、本明細書に記載される本発明の特定の実施形態の多数の均等物を理解するか、または解明するであろう。そのような均等物

50

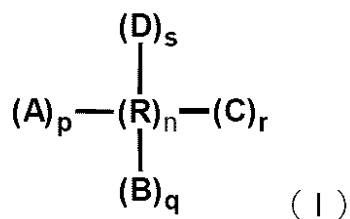
は、以下の特許請求の範囲によって包含されることが意図される。

(項目 1)

毛髪を処置するための方法であって、該毛髪は、2つ以上の遊離チオール基を含み、

(a) 該毛髪に、式 I の結合剤であって、

【化 7】



10

式中、

A、B、C、および D は、該遊離チオール基と反応し、1つ以上の電荷を有することができる、反応性部分であり、

R は、2つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、

該電荷の合計はゼロであり、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0～25 の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2 以上である、結合剤を含む製剤を、

20

該遊離チオール基に共有結合するのに十分な量で適用することを含む、方法。

(項目 2)

前記結合剤は、ポリマーであり、

前記リンカーは、該ポリマーの骨格を形成し、前記反応性部分は、該リンカーにイオン結合する、項目 1 に記載の方法。

(項目 3)

A、B、C、および D のそれぞれは、独立して、マイケル受容体、スクシンイミジル含有基、マレイミド含有基、アズラクトン、ベンゾオキサジノン誘導体、ビニルスルホン、ビニルスルホキシイミン、ベンゾオキサジノン、イソシアネート、エポキシド、脱離基を含有する求電子性部分、求電子性チオール受容体、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、イタコネート基、ビニルエーテル基、アリルエーテル基、アリルエステル基、およびビニルエステル基からなる群から選択される、項目 1 または 2 のいずれか一項に記載の方法。

30

(項目 4)

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素－硫黄 (C－S) 共有結合を形成する、項目 1～3 のいずれかに記載の方法。

(項目 5)

A、B、C、および D は、同一である、項目 1～4 のいずれかに記載の方法。

(項目 6)

40

A、B、C、および D のうちの少なくとも 1 つは、他の前記反応性部分とは異なる、項目 1～4 のいずれかに記載の方法。

(項目 7)

前記リンカーは、酸素、硫黄、炭素、ホウ素、窒素、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、エーテル、アミン、およびポリマーからなる群から選択され、該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸 ($-COOH$)、 $-C(O)R^1$ 、 $-C(O)OR^1$ 、カルボキシレート ($-COO^-$)、第一級アミド (例えば、 $-CONH_2$)、第二級ア

50

ミド（例えば、 $-\text{CONHR}_1$ ）、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{SR}^1$ 、および $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^1\text{R}^2$ 、スルフィニル基（例えば、 $-\text{SOR}^1$ ）、ならびにスルホニル基（例えば、 $-\text{SOOR}^1$ ）を含む1つ以上の置換基で独立して置換されてお

り、 R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、 R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは $=\text{O}$ もしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、およびジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される1つ以上の置換基で独立して置換されている、項目1～6のいずれかに記載の方法。

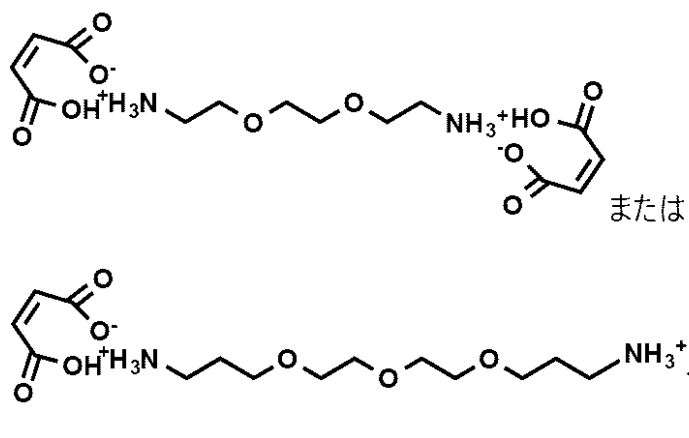
（項目8）

前記リンカーは、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、アミン、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールからなる群から選択される、項目1～7のいずれかに記載の方法。

（項目9）

前記結合剤は、

【化8】



である、項目1～8のいずれかに記載の方法。

（項目10）

前記製剤は、1つ以上の薬学的に許容される賦形剤をさらに含み、該1つ以上の賦形剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、保存剤、キレート剤、香料、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、毛髪着色剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、軟化剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、毛髪固定剤、被膜形成剤、乳化剤、乳濁剤、噴射剤、液体ビヒクル、担体、塩、pH調節剤、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤、静電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、およびこれらの組み合わせからなる群から選択される、項目1～9のいずれかに記載の方法。

（項目11）

前記結合剤は、前記製剤の約0.01重量%～約50重量%の範囲の量で存在する、項目10に記載の方法。

（項目12）

前記結合剤は、前記製剤の約 3 重量%である、項目 10～11 のいずれかに記載の方法。

(項目 13)

前記薬学的賦形剤は、前記製剤の約 10 重量%～約 90 重量%の範囲の量で存在する、項目 10～12 のいずれかに記載の方法。

(項目 14)

前記製剤は、ゲル、クリーム、ローション、シャンプー、またはコンディショナーの形態である、項目 1～13 のいずれかに記載の方法。

(項目 15)

ステップ (a) は、1 回以上反復される、項目 1～14 のいずれかに記載の方法。

10

(項目 16)

ステップ (a) は、前記製剤の 1 回目の適用の約 1 分～20 分後に反復される、項目 1～15 のいずれかに記載の方法。

(項目 17)

(b) 前記毛髪のすすぎ、シャンプー、および/またはコンディショニングを行うことをさらに含み、ステップ (b) は、ステップ (a) の後に生じる、項目 1～16 のいずれかに記載の方法。

(項目 18)

ステップ (b) は、ステップ (a) の後、約 10 秒～約 30 分以内に行われる、項目 17 に記載の方法。

20

(項目 19)

前記毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる還元剤を含む第 1 の製剤を適用するステップをさらに含み、
該ステップは、前記結合剤を含む前記製剤を適用する前に行われる、項目 1～18 のいずれかに記載の方法。

(項目 20)

前記還元剤は、チオグリコール酸ならびにその誘導体塩およびエステル、チオ乳酸ならびにその誘導体塩およびエステル、システインおよびその誘導体、システアミンおよびその誘導体、無機亜硫酸塩、メタ重亜硫酸ナトリウム、他の無機重亜硫酸塩、ジチオスレイトール、ジチオエリスリトール、有機ホスフィン、ならびに日本の縮毛矯正剤からなる群から選択される、項目 19 に記載の方法。

30

(項目 21)

前記還元剤は、酸性パーマ、アルカリ性パーマ、中性 pH を有するパーマ、または緩衝アルカリ性ウェーブ処理ローションを用いるパーマからなる群から選択される、パーマメントウェーブまたはカールに好適である、項目 19～20 のいずれかに記載の方法。

(項目 22)

前記還元剤は、毛髪ストレート処理に好適である、項目 19～21 のいずれかに記載の方法。

(項目 23)

前記チオールは、少なくとも 1 週間結合したままである、項目 1～22 のいずれかに記載の方法。

40

(項目 24)

前記結合剤の分子量は、約 500 ダルトン未満である、項目 1～23 のいずれかに記載の方法。

(項目 25)

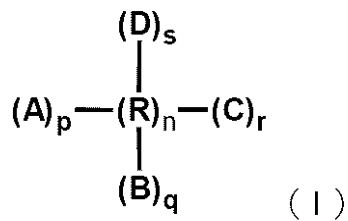
遊離チオール基と反応することができる少なくとも 2 つの反応性部分を含む結合剤と、水性溶媒と、1 つ以上の保存剤、安定剤、もしくはそれらの組み合わせとからなる、製剤。

(項目 26)

前記結合剤は、式 I によって表され、

50

【化 9】



式中、

A、B、C、およびDは、前記遊離チオール基と反応し、1つ以上の電荷を有することができる、反応性部分であり、

Rは、2つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、

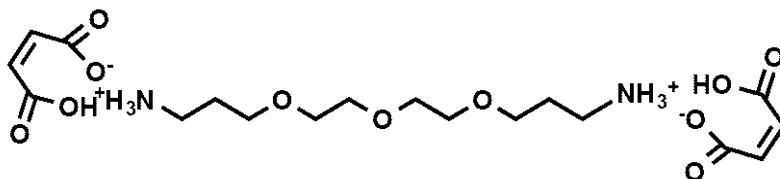
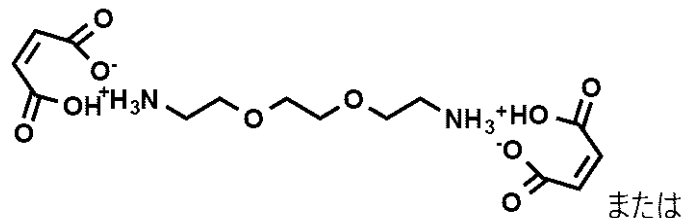
該電荷の合計はゼロであり、

p、q、r、およびsの各出現は、独立して、0～25の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2以上である、項目25に記載の製剤。

(項目27)

前記結合剤は、

【化10】



である、項目26に記載の製剤。

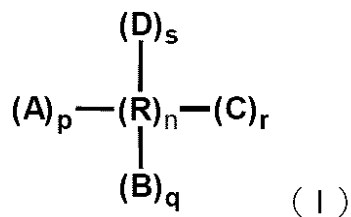
(項目28)

毛髪を着色するための方法であって、

(a) 毛髪着色剤と該毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる還元剤とを含む、第1の製剤を適用することと、

(b) 該毛髪に、式Iの結合剤であって、

【化11】



式中、

A、B、C、およびDは、該遊離チオール基と反応し、1つ以上の電荷を有することができる、反応性部分であり、

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、

該電荷の合計はゼロであり、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0 ～ 25 の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2 以上である、結合剤を含む第 2 の製剤を、

該遊離チオール基に共有結合するのに十分な量で適用することと、を含む、方法。

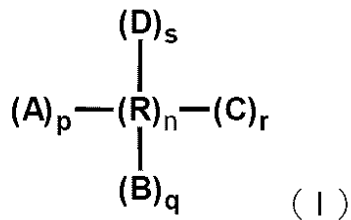
(項目 29)

毛髪をハイライト処理するための方法であって、

(a) 毛髪を明るくし、遊離チオール基を産生するための脱色剤を含む第 1 の製剤を適用することと、

(b) 該毛髪に、式 I の結合剤であって、

【化 12】



式中、

A、B、C、および D は、該遊離チオール基と反応し、1 つ以上の電荷を有することができる、反応性部分であり、

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、

該電荷の合計はゼロであり、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0 ～ 25 の整数であり、 $p + q + r + s$ の合計は、2 以上である、結合剤を含む第 2 の製剤を、

該遊離チオール基に共有結合するのに十分な量で適用することと、を含む、方法。

(項目 30)

ステップ (a) および (b) は、同時に行われる、項目 28 または 29 に記載の方法。

(項目 31)

ステップ (a) および (b) は、順次に行われ、ステップ (a) がステップ (b) の前に行われる、項目 28 または 29 に記載の方法。

(項目 32)

ステップ (a) の前に、前記第 1 の製剤および前記第 2 の製剤と一緒に混合される、項目 30 に記載の方法。

(項目 33)

前記結合剤は、ポリマーであり、前記リンカーは該ポリマーの骨格を形成し、前記反応性部分は該リンカーにイオン結合する、項目 28 ～ 32 のいずれかに記載の方法。

(項目 34)

A、B、C、および D のそれぞれは、独立して、マイケル受容体、スクシンイミジル含有基、マレイミド含有基、アズラクトン、ベンゾオキサジノン誘導体、ビニルスルホン、ビニルスルホキシイミン、ベンゾオキサジノン、イソシアネート、エポキシド、脱離基を含有する求電子性部分、求電子性チオール受容体、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、イタコネート基、ビニルエーテル基、アリルエーテル基、アリルエステル基、およびビニルエステル基からなる群から選択される、項目 28 ～ 33 のいずれかに記載の方法。

(項目 35)

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素－硫黄 (C－S) 共有結合を

10

20

30

40

50

形成する、項目 28～34 のいずれかに記載の方法。

(項目 36)

A、B、C、および D は、同一である、項目 28～35 のいずれかに記載の方法。

(項目 37)

A、B、C、および D のうちの少なくとも 1 つは、他の前記反応性部分とは異なる、項目 28～35 のいずれかに記載の方法。

(項目 38)

前記リンカーは、酸素、硫黄、炭素、ホウ素、窒素、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、エーテル、アミン、およびポリマーからなる群から選択され、

該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸 ($-\text{COOH}$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^1$ 、カルボキシレート ($-\text{COO}^-$)、第一級アミド (例えば、 $-\text{CONH}_2$)、第二級アミド (例えば、 $-\text{CONHR}_{11}$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{SR}^1$ 、および $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^1\text{R}^2$ 、スルフィニル基 (例えば、 $-\text{SOR}^1$)、ならびにスルホニル基 (例えば、 $-\text{SOOR}^1$) を含む 1 つ以上の置換基で独立して置換されてお

り、
 R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、 R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1 つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1 つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは=Oもしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1 つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、およびジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される、1 つ以上の置換基で独立して置換されている、項目 28～37 のいずれかに記載の方法。

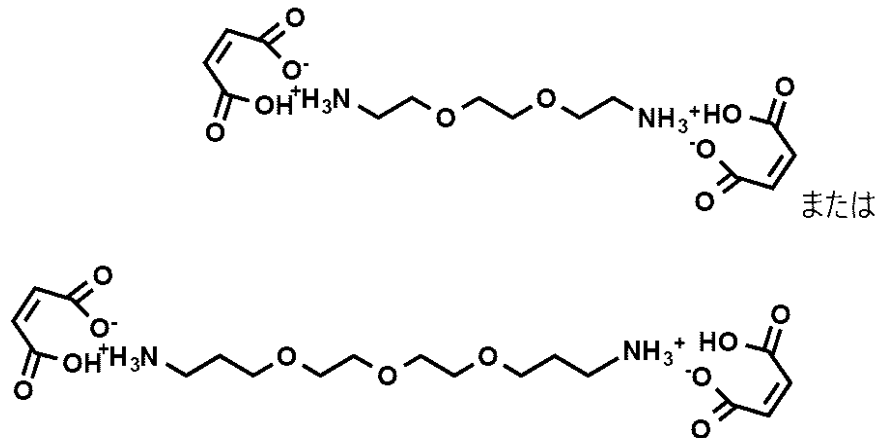
(項目 39)

前記リンカーは、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、アミン、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールからなる群から選択される、項目 28～38 のいずれかに記載の方法。

(項目 40)

前記結合剤は、

【化 1 3】



10

である、項目 2 8 ～ 3 9 のいずれかに記載の方法。

(項目 4 1)

前記第 2 の製剤は、1 つ以上の薬学的に許容される賦形剤をさらに含み、
該 1 つ以上の賦形剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、保存剤、キレート剤、
香料、保存剤、酸化防止剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、軟化剤、浸透剤、
増粘剤、粘度調整剤、毛髪固定剤、被膜形成剤、乳化剤、乳濁剤、噴射剤、
液体ビヒクル、担体、塩、pH 調節剤、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤、静
電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、およびそれらの組み合わせからなる群から選択され
る、項目 2 8 ～ 4 0 のいずれかに記載の方法。

20

(項目 4 2)

前記結合剤は、前記第 2 の製剤の約 0. 0 1 重量% ～ 約 5 0 重量%、好ましくは該第 2
の製剤の約 0. 0 1 重量% ～ 1 0 重量% の範囲の量で存在する、項目 4 1 に記載の方法。

(項目 4 3)

前記結合剤は、前記第 2 の製剤の約 2. 5 ～ 3 重量% の範囲の量で存在する、項目 4 0
～ 4 2 のいずれかに記載の方法。

(項目 4 4)

30

前記薬学的賦形剤は、前記第 2 の製剤の約 1 0 重量% ～ 約 9 9. 9 9 重量%、好ましく
は該第 2 の製剤の約 5 0 重量% ～ 約 9 0 重量% の範囲の量で存在する、項目 4 0 ～ 4 3 の
いずれかに記載の方法。

(項目 4 5)

前記第 2 の製剤は、ゲル、クリーム、ローション、シャンプー、またはコンディショナ
ーの形態である、項目 2 8 ～ 4 4 のいずれかに記載の方法。

(項目 4 6)

ステップ (b) は、1 回以上反復される、項目 2 8 ～ 4 5 のいずれかに記載の方法。

(項目 4 7)

(c) 前記毛髪のすすぎ、シャンプー、および／またはコンディショニングを行うこと
をさらに含み、ステップ (c) は、ステップ (b) の後に生じる、項目 2 8 ～ 4 6 のいづ
れかに記載の方法。

40

(項目 4 8)

ステップ (c) は、ステップ (b) の後、約 1 0 秒 ～ 約 3 0 分以内、好ましくは約 1 分
～ 約 2 0 分以内、より好ましくは約 1 0 分以内に行われる、項目 4 7 に記載の方法。

(項目 4 9)

前記着色剤は、ハイライト処理剤、パーマネント着色剤、デミパーマネント着色剤、お
よびセミパーマネント着色剤からなる群から選択される、項目 2 8 ～ 4 8 のいずれかに記
載の方法。

(項目 5 0)

50

(a) 毛髪着色剤と、毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる還元剤と、を含む、第1の製剤と、

(b) 毛髪中の遊離チオール基に共有結合するのに十分な量の結合剤を含む、第2の製剤と、を含む、

該結合剤は、チオールと反応することができる少なくとも2つの反応性部分と、任意に、該反応性部分に連結するリンカーと、を含む、キット。

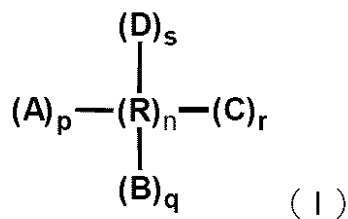
(項目51)

シャンプー、コンディショナー、使用説明書、デベロッパー、手袋、またはそれらの組み合わせをさらに含む、項目50に記載のキット。

(項目52)

前記結合剤は、式Iによって表され、

【化14】



式中、

A、B、C、およびDは、前記遊離チオール基と反応し、1つ以上の電荷を有することができる、反応性部分であり、

Rは、2つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、

該電荷の合計はゼロであり、

p、q、r、およびsの各出現は、独立して、0～25の整数であり、p + q + r + sの合計は、2以上である、項目50に記載のキット。

(項目53)

前記結合剤は、ポリマーであり、

前記リンカーは前記ポリマーの骨格を形成し、前記反応性部分は該リンカーとイオン結合する、項目52に記載のキット。

(項目54)

A、B、C、およびDのそれぞれは、独立して、マイケル受容体、スクシンイミジル含有基、マレイミド含有基、アズラクトン、ベンゾオキサジノン誘導体、ビニルスルホン、ビニルスルホキシイミン、ベンゾオキサジノン、イソシアネート、エポキシド、脱離基を含有する求電子性部分、求電子性チオール受容体、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、イタコネート基、ビニルエーテル基、アリルエーテル基、アリルエステル基、およびビニルエステル基からなる群から選択される、項目52～53のいずれかに記載のキット。

(項目55)

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素－硫黄(C－S)共有結合を形成する、項目52～54のいずれかに記載のキット。

(項目56)

前記結合剤は、

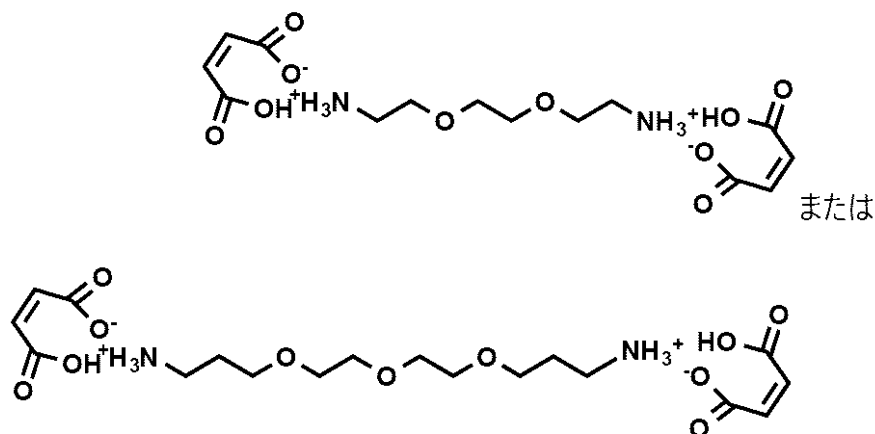
10

20

30

40

【化 1 5】



10

である、項目 5 2 に記載のキット。

(項目 5 7)

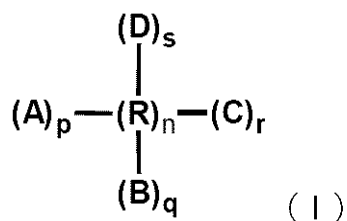
結合剤の有効量を含むシャンプーまたはコンディショナーであって、該結合剤は、毛髪上の遊離チオール基と反応することができる少なくとも 2 つの反応性部分と、任意に、該反応性部分と連結するリンカーと、を含む、シャンプーまたはコンディショナー。

(項目 5 8)

20

前記結合剤は、式 I を有し、

【化 1 6】



30

式中、

A、B、C、および D は、前記遊離チオール基と反応し、1 つ以上の電荷を有することができる、反応性部分であり、

R は、2 つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、

該電荷の合計はゼロであり、

p、q、r、および s の各出現は、独立して、0 ～ 25 の整数であり、p + q + r + s の合計は、2 以上である、項目 5 7 に記載のシャンプーまたはコンディショナー。

(項目 5 9)

前記結合剤はポリマーであり、前記リンカーは該ポリマーの骨格を形成し、前記反応性部分は該リンカーにイオン結合する、項目 5 8 に記載のシャンプーまたはコンディショナー。

40

(項目 6 0)

A、B、C、および D のそれぞれは、独立して、マイケル受容体、スクシンイミジル含有基、マレイミド含有基、アズラクトン、ベンゾオキサジノン誘導体、ビニルスルホン、ビニルスルホキシイミン、ベンゾオキサジノン、イソシアネート、エポキシド、脱離基を含有する求電子性部分、求電子性チオール受容体、アクリレート基、メタクリレート基、スチレン基、アクリルアミド基、メタクリルアミド基、マレエート基、フマレート基、イタコネート基、ビニルエーテル基、アリルエーテル基、アリルエステル基、およびビニルエステル基からなる群から選択される、項目 5 8 ～ 5 9 のいずれかに記載のシャンプーま

50

たはコンディショナー。

(項目 6 1)

前記反応性部分および前記チオール基は、反応して、炭素－硫黄 (C－S) 共有結合を形成する、項目 5 8～6 0 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

(項目 6 2)

A、B、C、および D は、同一である、項目 5 8～6 1 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

(項目 6 3)

A、B、C、および D のうちの少なくとも 1 つは、他の前記反応性部分とは異なる、項目 5 8～6 1 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

10

(項目 6 4)

前記リンカーは、酸素、硫黄、炭素、ホウ素、窒素、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、エーテル、アミン、およびポリマーからなる群から選択され、該リンカーは、任意に、水素、ハロゲン、シアノ、アルコキシ、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロシクロアルキル、ヘテロアリール、アミン、ヒドロキシ、ホルミル、アシル、カルボン酸 ($-\text{COOH}$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{R}^1$ 、 $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^1$ 、カルボキシレート ($-\text{COO}-$)、第一級アミド (例えば、 $-\text{CONH}_2$)、第二級アミド (例えば、 $-\text{CONHR}^1$)、 $-\text{C}(\text{O})\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{NR}^1\text{C}(\text{O})\text{R}^2$ 、 $-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^2$ 、 $-\text{SR}^1$ 、および $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^1\text{R}^2$ 、スルフィニル基 (例えば、 $-\text{SOR}^{11}$)、ならびにスルホニル基 (例えば、 $-\text{SOOR}^1$) からなる群から選択される 1 つ以上の置換基で独立して置換されてお

20

り、 R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素、アルキル、アルケニル、アルキニル、シクロアルキル、アリール、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールであり得、 R^1 および R^2 のそれぞれは、任意に、ハロゲン、ヒドロキシル、シアノ、ニトロ、アミノ、アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、1 つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアリールオキシで任意に置換されたアルキル、1 つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたアリール、ヒドロキシルで任意に置換されたアルキルもしくは $=\text{O}$ もしくはヘテロアリールもしくはアリールで任意に置換されたヘテロシクロアルキル、ヒドロキシルで任意に置換されたシクロアルキル、1 つ以上のハロゲンもしくはアルコキシもしくはアルキルもしくはトリハロアルキルで任意に置換されたヘテロアリール、ハロアルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシ、アルコキシ、アリールオキシ、アルコキシカルボニル、アミノカルボニル、アルキルアミノカルボニル、ならびにジアルキルアミノカルボニルからなる群から選択される 1 つ以上の置換基で独立して置換されている、項目 5 8～6 3 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

30

(項目 6 5)

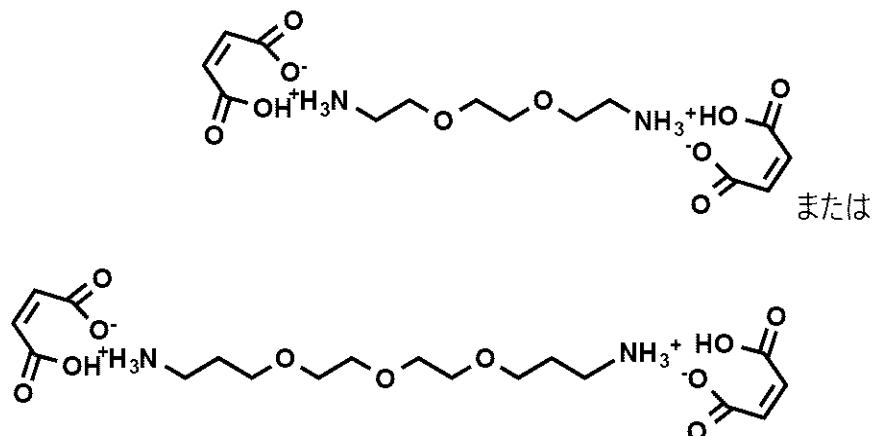
前記リンカーは、アルコキシ、エーテル、アルキル、アルケニル、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、アミン、ヘテロシクロアルキル、およびヘテロアリールからなる群から選択される、項目 5 8～6 4 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

40

(項目 6 6)

前記結合剤は、

【化 17】



10

である、項目 58～65 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

(項目 67)

1つ以上の薬学的に許容される賦形剤をさらに含み、該1つ以上の賦形剤は、水、界面活性剤、ビタミン、天然抽出物、保存剤、キレート剤、香料、保存剤、酸化防止剤、キレート剤、毛髪着色剤、タンパク質、アミノ酸、保水剤、芳香剤、軟化剤、浸透剤、増粘剤、粘度調整剤、毛髪固定剤、被膜形成剤、乳化剤、乳濁剤、噴射剤、液体ビヒクル、担体、塩、pH調節剤、中和剤、緩衝剤、毛髪コンディショニング剤、静電防止剤、縮れ防止剤、フケ防止剤、およびこれらの組み合わせからなる群から選択される、項目 58～66 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

20

(項目 68)

前記結合剤は、前記製剤の約 0.01 重量%～約 50 重量%の範囲の量で存在する、項目 67 に記載のシャンプーまたはコンディショナー。

(項目 69)

前記結合剤は、前記製剤の約 2.5～3 重量%の範囲の量で存在する、項目 67～68 のいずれかに記載のシャンプーまたはコンディショナー。

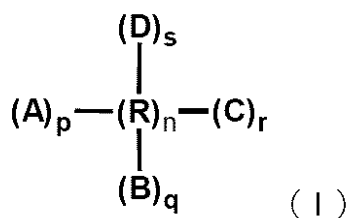
(項目 70)

30

(a) 毛髪中のジスルフィド結合を還元して遊離チオール基を産生することができる還元剤を含む還元剤と、

(b) 式 I の結合剤であって、

【化 18】



40

式中、

A、B、C、および D は、該遊離チオール基と反応し、1つ以上の電荷を有することができる、反応性部分であり、

R は、2つ以上の電荷を有するリンカーであり、該電荷は、該反応性部分上の該電荷とは逆のものであり、

該電荷の合計はゼロであり、

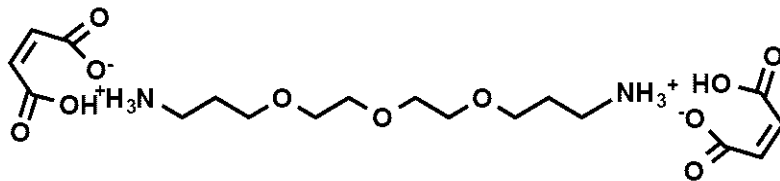
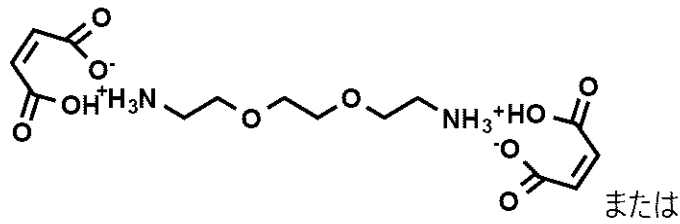
p、q、r、および s の各出現は、独立して、0～25 の整数であり、p + q + r + s の合計は、2 以上である、結合剤の有効量を含む、結合剤と、を含む、キット。

50

(項目 7 1)

前記結合剤は、

【化 1 9】



10

である、項目 7 0 に記載のキット。

(項目 7 2)

シャンプー、コンディショナー、臭気酵素除去剤、またはこれらの組み合わせをさらに含む、項目 7 0 ～ 7 1 のいずれかに記載のキット。

20

(項目 7 3)

前記還元剤は、チオグリコール酸ならびにその誘導体塩およびエステル、チオ乳酸ならびにその誘導体塩およびエステル、システインおよびその誘導体、システアミンおよびその誘導体、無機亜硫酸塩、メタ重亜硫酸ナトリウム、他の無機重亜硫酸塩、ジチオスレイトール、ジチオエリスリトール、有機ホスフィン、および日本の縮毛矯正剤からなる群から選択される、項目 7 0 ～ 7 2 のいずれかに記載のキット。

(項目 7 4)

前記還元剤は、酸性パーマ、アルカリ性パーマ、中性 pH を有するパーマ、または緩衝アルカリ性ウェーブ処理ローションを用いるパーマからなる群から選択される、パーマメントウェーブまたはカールに好適である、項目 7 0 ～ 7 3 のいずれかに記載のキット。

30

(項目 7 5)

前記還元剤は、毛髪ストレート処理に好適である、項目 6 8 ～ 7 4 のいずれかに記載のキット。

フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I
A 6 1 Q	5/02	(2006.01)
A 6 1 Q	5/12	(2006.01)
A 6 1 Q	5/04	(2006.01)

(31)優先権主張番号 61/885,898
 (32)優先日 平成25年10月2日(2013.10.2)
 (33)優先権主張国 米国(US)
 (31)優先権主張番号 61/903,239
 (32)優先日 平成25年11月12日(2013.11.12)
 (33)優先権主張国 米国(US)
 (31)優先権主張番号 14/257,089
 (32)優先日 平成26年4月21日(2014.4.21)
 (33)優先権主張国 米国(US)
 (31)優先権主張番号 14/257,056
 (32)優先日 平成26年4月21日(2014.4.21)
 (33)優先権主張国 米国(US)
 (31)優先権主張番号 14/257,076
 (32)優先日 平成26年4月21日(2014.4.21)
 (33)優先権主張国 米国(US)
 (31)優先権主張番号 62/000,340
 (32)優先日 平成26年5月19日(2014.5.19)
 (33)優先権主張国 米国(US)

早期審査対象出願

(74)代理人 230113332
 弁護士 山本 健策
 (72)発明者 プレスリー, エリック ディー.
 アメリカ合衆国 カリフォルニア 93108, サンタ バーバラ, ミラマー ビーチ 15
 20エー
 (72)発明者 ホーカー, クレグ ジェイ.
 アメリカ合衆国 カリフォルニア 93108, サンタ バーバラ, グリーンワース プレイ
 ス 1420

審査官 松本 直子

(56)参考文献 米国特許第03472243 (US, A)
 特開2010-155823 (JP, A)
 特開平02-138110 (JP, A)
 国際公開第2014/125452 (WO, A1)
 特表昭56-500886 (JP, A)
 クラレンス・R・ロビンス, 毛髪科学第4版, フレグランスジャーナル社, 2006年 7
 月10日, p.221-225
 化粧品科学ガイド第2版, フレグランスジャーナル社, 2011年 5月16日, p.256-257

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
 A 6 1 K 8/00- 8/99

A61Q 1/00- 90/00

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamIII)

DWPI (Derwent Innovation)