



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2009-0048374
 (43) 공개일자 2009년05월13일

- | | |
|--|--|
| (51) Int. Cl. A61K 8/73 (2006.01) A61K 8/49 (2006.01) A61Q 5/10 (2006.01) (21) 출원번호 10-2008-0110876 (22) 출원일자 2008년11월10일 심사청구일자 2008년11월10일 (30) 우선권주장 0758914 2007년11월09일 프랑스(FR) | (71) 출원인 로레알 프랑스공화국, 파리 F-75008, 뤼 르와이알 14 (72) 발명자 오뒤제 마리-파스칼 프랑스 92600 아니에르 알리 루이 주베 1 (74) 대리인 유미특허법인 |
|--|--|

전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 소수성 치환기를 가진 비이온성 셀룰로스 유도체, 디아미노디아자사이클로펜텐 타입의 산화 베이스 및 산화 커플러를 포함하는 케라틴 섬유의 산화 염색용 조성물, 산화 염색 방법 및 용도

(57) 요약

본 발명은 염색에 적합한 매질 중에,

- (A) 8 - 30개의 탄소 원자를 포함하고 있는 하나 이상의 소수성 치환기를 포함하는, 1종 이상의 비이온성 셀룰로스 유도체(들);
- (B) 디아미노디아자사이클로펜텐 유도체들로부터 선택되는 1종 이상의 산화 베이스(들); 및
- (C) 1종 이상의 산화 커플러(들)를 포함하는, 케라틴 섬유, 특히 체모 등의 인간 켈라틴 섬유용 염색 조성물에 관한 것이다.

본 발명은 또한 상기 조성물을 이용하여 케라틴 섬유를 염색하는 방법 및 케라틴성 섬유를 염색함에 있어서의 상기 조성물의 용도에 관한 것이다.

특허청구의 범위

청구항 1

켈라틴 섬유용 염색 조성물로서,

염색에 적합한 매질 중에,

(A) 8 - 30개의 탄소 원자를 포함하고 있는 하나 이상의 소수성 치환기를 포함하는, 1종 이상의 비이온성 셀룰로스 유도체(들);

(B) 디아미노디아자사이클로펜텐 유도체들과 그의 부가 염으로부터 선택되는, 1종 이상의 산화 베이스(들); 및

(C) 1종 이상의 산화 커플러(들)를 포함하는 염색 조성물.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 셀룰로스의 비이온성 유도체가 8 - 30개의 탄소 원자를 포함하고 있는 1종 이상의 소수성 치환기(들)로 치환된 하이드록시에틸셀룰로스인 것을 특징으로 하는 염색 조성물.

청구항 3

제1항 또는 제2항에 있어서, 상기 소수성 치환기는 C₁₀-C₂₂ 알킬기인 것을 특징으로 하는 염색 조성물.

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한항에 있어서, 상기 소수성 치환기가 세틸기인 것을 특징으로 하는 염색 조성물.

청구항 5

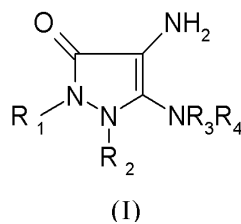
제1항 내지 제4항 중 어느 한항에 있어서, 소수성 치환 수준이 폴리머 총 중량의 0.1 중량% - 10 중량%의 범위인 것을 특징으로 하는 염색 조성물.

청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한항에 있어서, 셀룰로스의 비이온성 유도체(들)(A)의 농도가 조성물 총 중량의 0.01 중량% - 10 중량%인 것을 특징으로 하는 염색 조성물.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한항에 있어서, 상기 디아미노디아자사이클로펜텐 유도체가 하기 식 (I)의 디아미노 피라졸론 유도체인 것을 특징으로 하는 염색 조성물:



상기 식에서,

R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 동일하거나 상이할 수 있으며, 서로 독립적으로,

- 수소 원자;
- OR₅, NR₆R₇ 또는 카르복시기, 설포기, 카르복사미도 CONR₆R₇ 또는 설포아미도 SO₂NR₆R₇ 기, 피페리딘 등의 지방족 헤테로사이클, 및 C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노 기로 선택적으로 치환된 아릴 중에서 선택되는 하나 이상의 기로 선택적으로 치환된, 선형 또는 분지형의 C₁-C₁₀, 바람직하게

로는 C₁-C₆의 알킬기이고;

- C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 아릴기;

- C₁-C₄ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 5 또는 6원성(ring member) 헤테로아릴기이며,

R₅, R₆ 및 R₇은 동일하거나 상이할 수 있으며,

- 수소 원자;

- 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 카르복스아미도 CONR₈R₉, 설퍼닐 SO₂R₈, 및 C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 또는 (디)(C₁-C₂)알킬아미노기 선택적으로 치환된 아릴 중에서 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 선형 또는 분지형의 C₁-C₄, 바람직하기로는 C₁-C₂ 알킬기이고;

- C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 아릴기이고;

- 카르복스아미도기 CONR₈R₉;

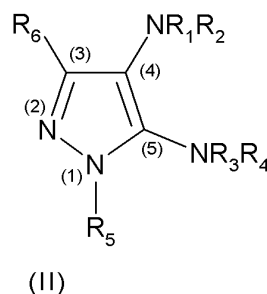
- 설퍼닐기 SO₂R₈이고,

R₈ 및 R₉는 동일하거나 상이할 수 있으며, 수소 원자; 또는 하이드록시 및 C₁-C₂ 알콕시기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 선형 또는 분지형의 C₁-C₄ 알킬기이고,

또는, R₁ 및 R₂나 R₃ 및 R₄는, 부착된 질소 원자(들)과 함께, 할로젠 원자, 아미노, (디)(C₁-C₄)알킬아미노, (디)하이드록시(C₁-C₂)알킬아미노, 하이드록시, 카르복시, 카르복스아미도, (디)(C₁-C₂)알킬카르복스아미도 및 C₁-C₂ 알콕시 기들과 하이드록시, 아미노, (디)알킬아미노, 알콕시, 카르복시 및 설퍼닐 기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 C₁-C₄ 알킬기 중에서 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환되거나 N-치환된, 5 - 7원성의, 포화 또는 불포화 헤테로사이클을 형성할 수 있으며; 이에 부착된 질소 원자와 함께, R₁ 및 R₂에 의해 형성되는 헤테로사이클, 또는 R₃ 및 R₄에 의해 형성되는 헤테로사이클은 동일하거나 다를 수 있으며, 상기 헤테로사이클을 형성하는 환의 구성 성분은 바람직하게는 탄소, 질소 및 산소 원자들로부터 선택할 수 있다.

청구항 8

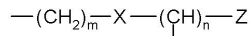
제1항 내지 제6항 중 어느 한항에 있어서, 상기 디아미노디아자사이클로펜텐 유도체가 하기 식 (II)의 디아미노 피라졸 유도체인 것을 특징으로 하는 염색 조성물:



상기 식에서,

- R₁, R₂, R₃, R₄ 및 R₅는 동일하거나 상이할 수 있으며, 수소 원자; 상기 X가 수소 원자, Na, K, 또는 NH₄이고, R 및 R'이 동일하거나 상이하게, C₁-C₄ 알킬 또는 알케닐인, OR, NHR, NRR', SR, SOR, SO₂R, COR, COOH, CONH₂, CONHR, CONRR', PO(OH)₂, SH, SO₃X, 비양이온성 헤테로사이클, Cl, Br 또는 I 중에서 선택되는 하나 이상의 치

환기로 치환되거나 치환되지 않은 C₁-C₆ 알킬 라디칼; C₂-C₄ 하이드록시알킬 라디칼; C₂-C₄ 아미노알킬 라디칼; 페닐 라디칼; 할로젠 원자나 C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 알콕시, 니트로, 트리플루오로메틸, 아미노 또는 C₁-C₄ 알킬아미노 라디칼로 치환된 페닐 라디칼; 벤질 라디칼; 할로젠 원자나 C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 알콕시, 메틸렌디옥시 또는 아미노 라디칼로 치환된 벤질 라디칼; m 및 n이 동일하거나 상이하게 0 - 3의 정수이고, X가 산소 원자 또는 NH 기이고, Y가 수소 원자 또는 C₁-C₄ 알킬 라디칼이고, Z가 n이 0일 때에는 메틸 라디칼, C₁-C₄ 알킬 라디칼, 또는 n이 1보다 클 때는 OR 또는 NR''R'''기이고, R'' 및 R'''이 동일하거나 상이하게 수소 원자 또는 C₁-C₄ 알킬 라디칼인, 라디칼



이거나; 또는 R₉는 5번 위치의 NR₇R₈ 기에 있는 질소 원자와 함께 4원성 이상의 헤테로사이클을 형성하며,

- R₆은 C₁-C₆ 알킬 라디칼; C₁-C₄ 하이드록시알킬 라디칼; C₁-C₄ 아미노알킬 라디칼; (C₁-C₄)알킬아미노(C₁-C₄)알킬 라디칼; 디(C₁-C₄)알킬아미노(C₁-C₄)알킬 라디칼; 하이드록시(C₁-C₄)알킬-아미노(C₁-C₄)알킬 라디칼; (C₁-C₄)알콕시메틸 라디칼; 페닐 라디칼; 할로젠 원자나 (C₁-C₄)알킬, (C₁-C₄)알콕시, 니트로, 트리플루오로메틸, 아미노 또는 (C₁-C₄)알킬아미노 라디칼로 치환된 페닐 라디칼; 벤질 라디칼; 할로젠 원자나 (C₁-C₄)알킬, (C₁-C₄)알콕시, 니트로, 트리플루오로메틸, 아미노 또는 (C₁-C₄)알킬아미노 라디칼로 치환된 벤질 라디칼; 티오펜, 푸란 및 피리딘으로부터 선택되는 헤테로사이클, 또는 p 및 q가 상이하거나 동일하게 1-3의 정수이고, R''이 상기와 동일하게 정의되는 -(CH₂)_p-O-(CH₂)_q-OR'' 라디칼이고,

라디칼 R₁, R₂, R₃ 및 R₄ 중 하나 이상은 수소 원자이다.

청구항 9

1종 이상의 산화제의 존재하에, 제1항 내지 제8항 중 어느 한항에 따른 염색 조성물을 원하는 색이 발색되는데 충분한 시간 동안에 케라틴 섬유에 적용하는 단계를 포함하는, 케라틴 섬유의 산화 염색 방법.

청구항 10

제1항 내지 제8항 중 어느 한항에 따른 염색 조성물이 들어 있는 하나 이상의 제1 구획 및 1종 이상의 산화제가 들어 있는 하나 이상의 제2 구획을 포함하는, 다구획 장치.

명세서

발명의 상세한 설명

기술 분야

<1> 본 발명은 하나 이상의 특정 소수성 기(들)를 가지도록 변형된 1종 이상의 셀룰로스 비이온성 유도체(들), 디아미노디아자사이클로펜텐 타입의 1종 이상의 염료(들) 및 1종 이상의 산화 커플러(들)를 포함하는, 케라틴 섬유, 특히 체모와 같은 인간 케라틴 섬유의 산화 염색용 조성물에 관한 것이다.

<2> 또한, 본 발명은 상기 조성물의 케라틴 섬유의 염색 용도 및 상기 조성물을 이용하는 염색 방법에 관한 것이다.

배경 기술

<3> 일반적으로 오르쏘- 또는 파라-페닐렌디아민, 오르쏘- 또는 파라-아미노페놀 및 헤테로사이클 화합물과 같이, 산화 베이스로서 알려져 있는 산화 염료 전구체를 포함하고 있는 염색 조성물을 이용하여, 케라틴 섬유, 특히 인간 체모를 염색하는 것은 공지되어 있다. 이들 산화 베이스들은 산화제와 조합하여 산화 축합 반응에 의해 색을 띠는 화합물이 될 수 있는, 무색이거나 희미한 색상의 화합물이다.

<4> 이들 산화 베이스를 커플러(coupler) 또는 컬러 변형제(colouring modifier)와 조합하여, 수득되는 색조를 변화시킬 수 있는 것으로 알려져 있으며, 상기 컬러 변형제는 특히 방향족 메타-디아민, 메타-아미노페놀, 메타-디페놀 및 인돌 화합물과 같은 특정 헤테로사이클 화합물로부터 선택된다.

- <5> 산화 베이스 및 커플러로 사용되는 다양한 분자들로, 다양한 색상을 획득할 수 있다.
- <6> 이들 산화 염료로 인해 획득되는 "영구" 발색은 또한 특정한 몇가지의 요건을 충족시켜야 한다.
- <7> 즉, 독성 문제가 없어야 하며, 색조를 원하는 강도로 획득할 수 있어야 하며, 광, 나쁜 기상, 세정, 영구적인 웨이브, 발한 및 마찰과 같은 외부 요인에 대해 우수한 정착성을 보여야 한다.
- <8> 또한, 염료는 백색 체모를 피복할 수 있어야 하며, 마지막으로 가능한 비선택적이어야, 즉 일반적으로 끝 부분과 뿌리 부분 간에 다르게 반응하는(즉, 손상된), 동일한 케라틴 섬유 가닥에서의 발색 차이를 가능한 최소화할 수 있어야 한다.
- <9> 아울러, 획득되는 조성물은 우수한 레올로지(rheological) 특성을 지녀야 하며, 동시에 우수한 발색 특성이 보존되어야 한다. 특히, 이들 조성물은 염색할 부위 이외의 부위나 얼굴에 특히 산화제와 혼합한 다음 적용하였을 때, 상기 얼굴이나 그외 부위에는 염색되지 않아야 한다.
- <10> 파라-페닐렌디아민 산화 베이스와, 소수성 기(들)를 가지도록 변형된 하이드록시셀룰로스와 같은 하나 이상의 비이온성 양쪽 친매성 폴리머를 조합하여, 염색력을 향상시키는 방법은 이미 WO 98/03150에 공지되어 있다.
- <11> 그러나, 이들 조성물은 전술한 조건들을 전부 만족시키지는 않으며, 특히 염색 특징 측면, 구체적으로 선택성 및 정착성 측면에서 개선될 수 있다.

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

- <12> 본 발명의 목적은 제조 및 적용이 용이하며, 레올로지 특성이 우수하며, 케라틴 섬유에 가해질 수 있는 다양한 공격을 견디는 진하고, 비교적 비선택적인 발색을 형성하는, 특히 크림 형태의, 안정적인 체모 염색 조성물을 획득하는 것이다.

과제 해결수단

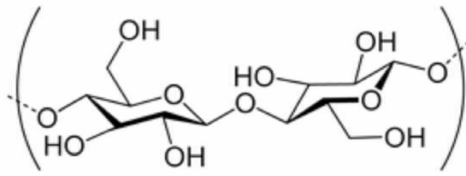
- <13> 이러한 목적은 케라틴 섬유용 염색 조성물, 특히 염색에 적합한 매질 중에,
- <14> (A) 8 - 30개의 탄소 원자를 포함하고 있는 하나 이상의 소수성 치환기(들)를 포함하는, 1종 이상의 비이온성 셀룰로스 유도체(들);
- <15> (B) 1종 이상의, 디아미노디아자사이클로펜텐 유도체들 및 그 부가 염으로부터 선택되는, 산화 베이스(들); 및
- <16> (C) 하나 이상의 산화 커플러(들)를 포함하는, 체모와 같은 인간의 케라틴 섬유용 염색 조성물을 과제로 하는 본 발명에 의해 달성된다.
- <17> 본 발명에 따른 염색 조성물은 특히 하기 특징을 가진다:
- <18> - 경시적으로 안정적인, 크림에 상응하는 점성을 가진 조성물을 획득가능하며,
- <19> - 이를 산화 조성물과 쉽게 혼합할 수 있다는 점이 두드러지며,
- <20> - 획득되는 크림의 레올로지 품질이 우수하며(혼합물로서 크림의 우수한 점성),
- <21> - 염색할 때 산화 조성물과 혼합한 후 적용하기 쉽다(머리에 사용시의 품질).
- <22> 또한, 본 발명에 따른 조성물은 다양하고, 섹체적이며, 강력하고, 심미적이고, 전체 케라틴 섬유, 특히 체모와 같은 인간 케라틴 섬유에 대해 일정한 비교적 비선택적인 색조를 가진 색을 발색시킬 수 있으며, 섬유에 가해질 수 있는 다양한 공격에 매우 저항적인, 조성물을 획득가능하다.
- <23> 본 발명의 다른 과제는 본 발명에 따른 화장품 조성물을 사용하는, 케라틴 섬유의 염색 방법이다.
- <24> 본 발명의 또다른 과제는 케라틴 섬유, 특히 체모 등의 인간 케라틴을 염색하기 위한 상기 화장품 조성물의 용도에 관한 것이다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

- <25> 본 발명의 다른 특징, 측면, 과제 및 이점은 하기 설명과 실시예를 통해 명확해질 것이다.

<26> 별도로 언급되어 있지 않은 한, 본 발명의 내용에 기재된 수치 범위의 한정은 이들 범위에 포함된다.

<27> 용어 "셀룰로스 유도체(들)"는, 하나 이상의 하이드록시기(들)가 치환될 수 있는, 하기 구조식을 가지는 1종 이상의 셀로바이오스(cellobiose)를 포함하는 하나 (또는 그 이상의) 화합물(들)을 의미한다.



<28>

<29> 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)를 가진 셀룰로스 비이온성 유도체(들)(A)는 본래 조합성 양쪽 친매성 폴리머이다. 실제, 이는 친수성 유닛과 소수성 유닛을 포함하고 있으며, 서로 또는 다른 분자와 가역적으로, 특히 이의 소수성 체인의 존재로 인해 상호작용 및 결합할 수 있다.

<30> 바람직하기로는, 본 발명의 셀룰로스 유도체는 8 - 30개의 탄소 원자를 포함하고 있는 하나 이상의 소수성 치환기(들)를 포함하는 셀룰로스 에테르이다.

<31> 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)가 있는 비이온성 셀룰로스 유도체(들)는 일반적으로 반응성 하이드록시 작용기 전체 또는 일부가 8 - 30개의 탄소 원자, 바람직하기로는 10 - 22개의 탄소 원자, 더 바람직하기로는 16개의 탄소 원자를 포함하고 있는 하나 이상의 소수성 체인(들)으로 치환되는 양상으로, 셀룰로스의 수용성 비이온성 에테르로부터 제조된다. 본 발명의 셀룰로스 유도체의 제조에 관여되는 반응 단계들은 당업자들에게 공지되어 있다.

<32> 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)가 있는 비이온성 셀룰로스 유도체를 제조하기 위해 선택되는 셀룰로스의 비이온성 에테르는, 충분히 수용성인, 즉 25°C의 물에 1 중량%의 농도로 용해되었을 때 실질적으로 투명한 용액이 되는, 예컨대 메틸, 하이드록시에틸 또는 하이드록시프로필 기(들) 수준의 비이온성 치환을 가지는 것이 바람직하다.

<33> 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)가 있는 비이온성 셀룰로스 유도체를 제조하기 위해 선택되는 셀룰로스의 비이온성 에테르는, 비교적 낮은 평균 분자량, 800,000 g/mol 미만, 바람직하기로는 50,000 - 700,000 g/mol, 더 바람직하기로는 200,000 - 600,000 g/mol 범위의 평균 분자량을 가지는 것이 바람직하다.

<34> 바람직하기로는, 본 발명의 셀룰로스 유도체는 8 - 30개의 탄소 원자를 포함하고 있는 하나 이상의 소수성 치환기(들)를 포함하는 하이드록시에틸셀룰로스이다.

<35> 본 발명에 사용되는 비이온성 셀룰로스 유도체는, 에테르, 에스테르 또는 우레탄 결합, 바람직하기로는 에테르 결합을 통해 셀룰로스 에테르 기질에 부착될 수 있는, 하나 이상의 지방족 또는 방향족, 포화 또는 불포화된, 선형, 분지형 또는 사이클형의 C₈-C₃₀ 탄화수소 체인(들)으로 치환된다.

<36> 일 예로, 본 발명에 따른 비이온성 셀룰로스 유도체의 치환기로서 사용되는 소수성 치환기(들)는 C₈-C₃₀, 바람직하기로는 C₁₀-C₂₂, 알킬, 아릴알킬 또는 알킬아릴 기이다.

<37> 바람직하기로는, 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)는 포화된 알킬 체인이다.

<38> 바람직한 예로, 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)는 세틸기이다.

<39> 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)를 가지고 있는 비이온성 셀룰로스 유도체는, 25°C의 물에 폴리머 1 중량%의 농도에서 측정하였을 때, 바람직하기로는 100 - 100,000 mPa.s의 점성, 바람직하기로는 200 - 20,000 mPa.s의 점성을 보이며, 이러한 점성은 3번 스핀들이 장착된 Brookfield LVT 점성계를 이용하여 6 rpm에서 통상적으로 결정된 것이다.

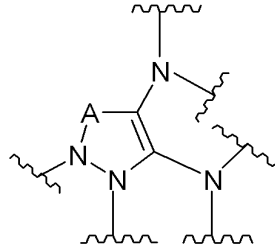
<40> 본 발명에 따라 사용되는 셀룰로스의 친수성 비이온성 유도체의 소수성 치환 정도는, 폴리머의 총 중량에 바람직하기로는 0.1 중량% - 10 중량%, 바람직하기로는 0.1 중량% - 1 중량%, 특히 바람직하기로는 0.4 중량% - 0.8 중량%이다.

<41> 본 발명의 조성물에 사용될 수 있는 소수성 치환기(들)가 있는 비이온성 셀룰로스 유도체들 중에서, 바람직하게

는 Aqualon/Hercules사의 상표 Natrosol Plus Grade 330 CS 및 Polysurf 67 CS(INCI: 세틸 하이드록시에틸셀룰로오스)로 시판되는 세틸 하이드록시에틸셀룰로오스이다.

<42> 본 발명에 따른 조성물의 소수성 치환기(들)를 가지고 있는 비이온성 셀룰로스 유도체(들)의 농도는, 조성물의 총 중량 대비 바람직하기로는 0.01 중량% - 10 중량%, 특히 0.05 중량% - 3 중량%, 더 바람직하기로는 0.1 중량% - 1 중량%이다.

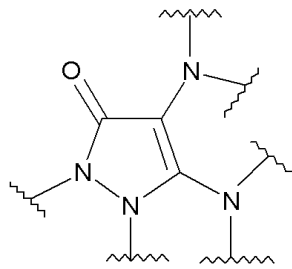
<43> 용어 "디아미노디아자사이클로펜텐 유도체(들)"은 하기 구조의 그것 (또는 그것들)의 분자 구조를 포함하는 1종 (또는 그 이상)의 화합물(들)을 의미한다:



<44> A는 수소 원자 또는 다른 치환기를 가지고 있는 카르보닐기 또는 탄소 원자이다.

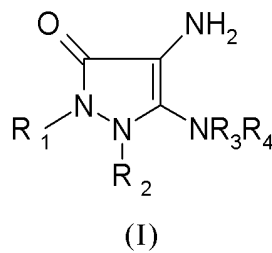
<45> 바람직하기로는, 디아미노디아자사이클로펜텐 유도체는 디아미노피라졸론 유도체 또는 디아미노피라졸 유도체이다.

<46> 용어 "디아미노피라졸론 유도체(들)"은 하기 구조의 그것 (또는 그것들)의 분자 구조를 포함하는 1종 (또는 그 이상)의 화합물(들)을 의미한다:



<47> 디아미노피라졸론 유도체들은 4,5-디아미노피라졸-3-온 또는 2,3-디아미노피라졸-1-온의 유도체들이다.

<48> 본 발명에 따른 디아미노피라졸론 유도체(들)는 하기 일반식(I)인 것이 바람직하다:



<49> 상기 식에서,

<50> R₁, R₂, R₃ 및 R₄는 동일하거나 상이할 수 있으며, 서로 독립적으로,

<51> - 수소 원자;

<52> - OR₅, NR₆R₇ 또는 카르복시기, 설폰기, 카르복사미도 CONR₆R₇ 또는 설폰아미도 SO₂NR₆R₇ 기, 피페리딘 등의 지방족 헤테로사이클, 및 C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노 기로 선택적으로 치환된 아릴 중에서 선택되는 하나 이상의 기로 선택적으로 치환된, 선형 또는 분지형의 C₁-C₁₀, 바람직하기로는 C₁-C₆의 알킬기이고;

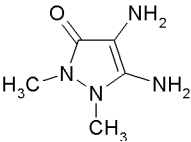
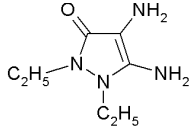
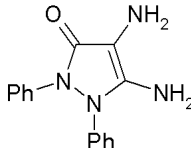
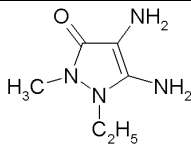
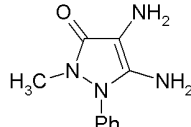
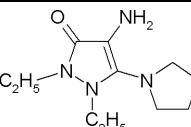
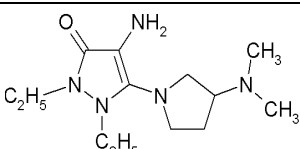
- <56> - C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 아릴기;
- <57> - C₁-C₄ 알킬 및 C₁-C₂ 알콕시 기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 5 또는 6원성(ring member) 헤테로아릴기이며,
- <58> R₅, R₆ 및 R₇은 동일하거나 상이할 수 있으며,
- <59> - 수소 원자;
- <60> - 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 카르복스아미도 CONR₈R₉, 설포닐 SO₂R₈, 및 C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 또는 (디)(C₁-C₂)알킬아미노기로부터 선택적으로 치환된 아릴 중에서 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 선형 또는 분지형의 C₁-C₄, 바람직하기로는 C₁-C₂ 알킬기이고;
- <61> - C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 아릴기이고;
- <62> - 카르복스아미도기 CONR₈R₉;
- <63> - 설포닐기 SO₂R₈이고,
- <64> R₈ 및 R₉는 동일하거나 상이할 수 있으며, 수소 원자; 또는 하이드록시 및 C₁-C₂ 알콕시기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 선형 또는 분지형의 C₁-C₄ 알킬기이고,
- <65> 또는, R₁ 및 R₂나 R₃ 및 R₄는, 부착된 질소 원자(들)과 함께, 할로겐 원자, 아미노, (디)(C₁-C₄)알킬아미노, (디)하이드록시(C₁-C₂)알킬아미노, 하이드록시, 카르복시, 카르복스아미도, (디)(C₁-C₂)알킬카르복스아미도 및 C₁-C₂ 알콕시 기들과 하이드록시, 아미노, (디)알킬아미노, 알콕시, 카르복시 및 설포닐 기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 C₁-C₄ 알킬기 중에서 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환되거나 N-치환된, 5 - 7원성의, 포화 또는 불포화 헤테로사이클을 형성할 수 있으며; 이에 부착된 질소 원자와 함께, R₁ 및 R₂에 의해 형성되는 헤테로사이클, 또는 R₃ 및 R₄에 의해 형성되는 헤테로사이클은 동일하거나 다를 수 있으며, 상기 헤테로사이클을 형성하는 환의 구성 성분은 바람직하게는 탄소, 질소 및 산소 원자들로부터 선택할 수 있다.
- <66> 특정 일 예에서, R₁ 및 R₂는 동일하거나 상이할 수 있으며, 서로 독립적으로,
- <67> - 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)-알킬아미노 기로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 C₁-C₆ 알킬기; 및
- <68> - 페닐, 메톡시페닐, 에톡시페닐 또는 벤질 기이다.
- <69> 바람직하기로는, R₁ 및 R₂는 동일하거나 상이할 수 있으며, 서로 독립적으로, 메틸, 에틸, 2-하이드록시에틸, 3-하이드록시프로필, 2-하이드록시프로필 및 페닐 기들로부터 선택될 수 있다.
- <70> 다른 예로, R₁ 및 R₂는, 이에 부착된 질소 원자와 함께, 할로겐 원자, 아미노, (디)(C₁-C₄)알킬-아미노, (디)하이드록시(C₁-C₂)알킬아미노, 하이드록시, 카르복시, 카르복스아미도, (디)(C₁-C₂) 알킬카르복스아미도 및 C₁-C₂ 알콕시 기들과 하이드록시, 아미노, (디)알킬아미노, 알콕시, 카르복시 및 설포닐 기들로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 C₁-C₄ 알킬기 중에서, 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 포화 또는 불포화된, 5 또는 6원성 환을 형성한다.
- <71> 바람직하기로는, R₁ 및 R₂는 이에 부착된 질소 원자와 함께, C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 카르복시, 카르복스아미도, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노 기들로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 피라졸리딘 또는 피리다졸리딘 환을 형성한다.

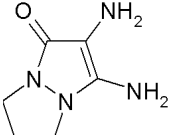
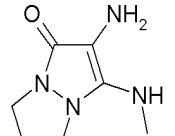
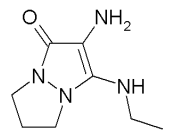
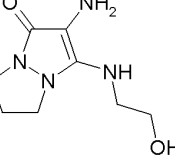
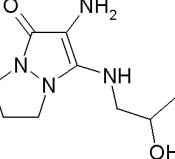
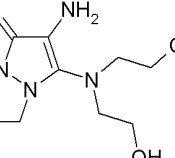
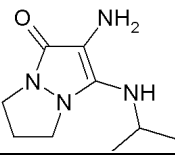
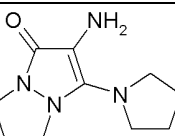
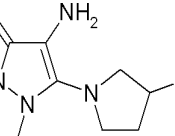
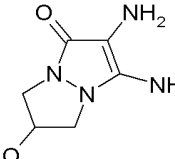
- <72> 바람직하기로는, R₁ 및 R₂는 이에 부착된 질소 원자와 함께, C₁-C₄ 알킬, 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 카르복시, 카르복스아미도, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)알킬아미노 기들로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 피라졸리딘 또는 피리다졸리딘 환을 형성한다.
- <73> 보다 이롭게는, R₁ 및 R₂는 이에 부착된 질소 원자와 함께, 피라졸리딘, 피리다졸린 또는 피리다졸리딘 환을 형성한다.
- <74> R₃ 및 R₄는 동일하거나 또는 상이할 수 있으며, 특히 수소 원자; 하이드록시, C₁-C₂ 알콕시, 아미노 및 (디)(C₁-C₂)-알킬아미노 기들과 피페리딘 등의 지방족 헤테로사이클 중에서 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된, 선형 또는 분지형의, C₁-C₆ 알킬기; 및 하이드록시, 아미노 및 C₁-C₂ 알콕시 기들로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 페닐기이다.
- <75> 바람직하게는, R₃ 및 R₄는 동일하거나 또는 상이할 수 있으며, 수소 원자, 메틸, 에틸, 이소프로필, 2-하이드록시에틸, 3-하이드록시프로필, 2-하이드록시프로필, 2-카르복시에틸, 2-디메틸아미노에틸, 피롤리딘-1-일, 3-하이드록시피롤리딘-1-일, 4-피페리딘-1-일, 4-메틸피페리딘-1-일 및 3-디메틸아미노피페리딘-1-일 기들 중에서 선택된다.
- <76> 일 특정 예에서, R₃ 및 R₄ 기는 수소 원자이다.
- <77> 다른 예로, R₃ 및 R₄는 이에 부착된 질소 원자와 함께, 헤테로사이클들, 피롤리딘, 피페리딘, 호모피페리딘, 피페라진 및 호모피페라진으로부터 선택되는 5 - 7원성의 환을 형성하며; 상기 환은 하기 기들로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 치환 또는 N-치환될 수 있다: 하이드록시, 아미노, (디)(C₁-C₂)-알킬아미노, (디)하이드록시(C₁-C₂)알킬아미노, 카르복시, 카르복스아미도, (디)(C₁-C₂)알킬카르복스아미도, 및 하이드록시, 아미노 및 C₁-C₂ (디)알킬아미노 기들로부터 선택되는 하나 이상의 기(들)로 선택적으로 치환된 C₁-C₄ 알킬.
- <78> 특히, R₃ 및 R₄는 이에 부착된 질소 원자와 함께, 피롤리딘, 2,5-디메틸피롤리딘, 피롤리딘-2-카르복시산, 3-하이드록시피롤리딘-2-카르복시산, 4-하이드록시피롤리딘-2-카르복시산, 2,4-디카르복시피롤리딘, 3-하이드록시-2-하이드록시메틸피롤리딘, 2-카르복스아미도피롤리딘, 3-하이드록시-2-카르복스아미도피롤리딘, 2-(디에틸카르복스아미도)피롤리딘, 2-하이드록시메틸피롤리딘, 3,4-디하이드록시-2-하이드록시메틸피롤리딘, 3-하이드록시피롤리딘, 3,4-디하이드록시피롤리딘, 3-아미노피롤리딘, 3-메틸아미노피롤리딘, 3-디메틸아미노피롤리딘, 4-아미노-3-하이드록시피롤리딘, 3-하이드록시-4-(2-하이드록시에틸)아미노피롤리딘, 피페리딘, 2,6-디메틸피페리딘, 2-카르복시피페리딘, 2-카르복스아미도피페리딘, 2-하이드록시메틸피페리딘, 3-하이드록시-2-하이드록시메틸피페리딘, 2-하이드록시피페리딘, 3-하이드록시피페리딘, 4-하이드록시피페리딘, 3-하이드록시메틸피페리딘, 호모피페리딘, 2-카르복시호모피페리딘, 2-카르복스아미도호모-피페리딘, 호모피페라진, N-메틸호모피페라진 및 N-(2-하이드록시에틸)호모피페라진으로부터 선택되는, 5 - 7원성의 환을 형성한다.
- <79> 바람직하기로는, R₃ 및 R₄는 이에 부착된 질소 원자와 함께, 피롤리딘, 3-하이드록시피롤리딘, 3-아미노피롤리딘, 3-디메틸아미노피롤리딘, 피롤리딘-2-카르복시산, 3-하이드록시피롤리딘-2-카르복시산, 피페리딘, 하이드록시피페리딘, 호모피페리딘, 1,4-디아제판, N-메틸호모피페라진 및 N-β-하이드록시에틸호모피페라진으로부터 선택되는, 5 - 7원성의 환을 형성한다.
- <80> 본 발명의 보다 더 바람직한 예로서, R₃ 및 R₄는 이에 부착된 질소 원자와 함께, 피롤리딘, 3-하이드록시피롤리딘, 3-아미노피롤리딘 또는 3-디메틸아미노피롤리딘 등의 5원성 환을 형성한다.
- <81> 식 (I)의 화합물은, 선택적으로, 예컨대 HCl, HBr, HI, H₂SO₄ 또는 H₃PO₄ 등의 무기 강산, 또는 예컨대 아세트산, 락트산, 타르타르산, 시트르산, 숙신산, 벤젠설폰산, 파라-톨루엔설폰산, 포름산 또는 메탄설폰산 등의 유기 산과 염화될 수 있다.
- <82> 또한, 상기 화합물은 용매화물 형태, 예컨대 수화물이거나, 또는 에탄올 또는 이소프로판올 등의 선형 또는 분지형의 알코올의 용매화물 형태일 수 있다.
- <83> 식 (I)의 유도체들의 예로, 하기 화합물 및 그의 부가 염을 들 수 있다:

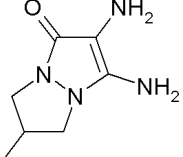
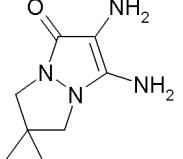
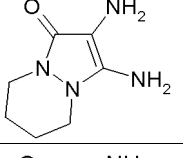
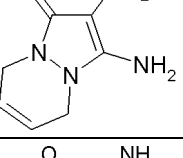
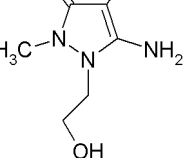
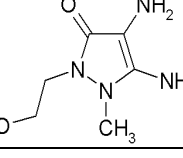
- <84> 4,5-디아미노-1,2-디메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <85> 4-아미노-5-메틸아미노-1,2-디메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <86> 4-아미노-5-디메틸아미노-1,2-디메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <87> 4-아미노-5-(2-하이드록시에틸)아미노-1,2-디메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <88> 4-아미노-5-(피롤리딘-1-일)-1,2-디메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <89> 4-아미노-5-(피페리딘-1-일)-1,2-디메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <90> 4,5-디아미노-1,2-디-(2-하이드록시에틸)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <91> 4-아미노-5-메틸아미노-1,2-디-(2-하이드록시에틸)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <92> 4-아미노-5-디메틸아미노-1,2-디-(2-하이드록시에틸)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <93> 4-아미노-5-(2-하이드록시에틸)아미노-1,2-디-(2-하이드록시에틸)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <94> 4-아미노-5-(피롤리딘-1-일)-1,2-디-(2-하이드록시에틸)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <95> 4-아미노-5-(피페리딘-1-일)-1,2-디-(2-하이드록시에틸)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <96> 4,5-디아미노-1,2-디에틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <97> 4,5-디아미노-1,2-디페닐-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <98> 4,5-디아미노-1-에틸-2-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <99> 4,5-디아미노-2-에틸-1-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <100> 4,5-디아미노-1-페닐-2-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <101> 4,5-디아미노-2-페닐-1-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <102> 4,5-디아미노-1-(2-하이드록시에틸)-2-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <103> 4,5-디아미노-2-(2-하이드록시에틸)-1-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <104> 2,3-디아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <105> 2-아미노-3-메틸아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <106> 2-아미노-3-디메틸아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <107> 2-아미노-3-에틸아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <108> 2-아미노-3-이소프로필아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <109> 2-아미노-3-(2-하이드록시에틸)아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <110> 2-아미노-3-(2-하이드록시프로필)아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <111> 2-아미노-3-비스(2-하이드록시에틸)아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <112> 2-아미노-3-(피롤리딘-1-일)-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <113> 2-아미노-3-(3-하이드록시피롤리딘-1-일)-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <114> 2-아미노-3-(피페리딘-1-일)-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <115> 2,3-디아미노-6-하이드록시-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <116> 2,3-디아미노-6-메틸-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <117> 2,3-디아미노-6,6-디메틸-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;
- <118> 2,3-디아미노-5,6,7,8-테트라하이드로-1H,6H-피리다지노[1,2-a]피라졸-1-온;
- <119> 2,3-디아미노-5,8-디하이드로-1H,6H-피리다지노[1,2-a]피라졸-1-온;

- <120> 4-아미노-5-디메틸아미노-1,2-디에틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <121> 4-아미노-1,2-디에틸-5-에틸아미노-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <122> 4-아미노-1,2-디에틸-5-이소프로필아미노-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <123> 4-아미노-1,2-디에틸-5-(2-하이드록시에틸아미노)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <124> 4-아미노-5-(2-디메틸아미노에틸아미노)-1,2-디에틸-1,2-디하이드로-피라졸-3-온;
- <125> 4-아미노-5-[비스(2-하이드록시에틸)아미노]-1,2-디에틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <126> 4-아미노-1,2-디에틸-5-(3-이미다졸-1-일-프로필아미노)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <127> 4-아미노-1,2-디에틸-5-(3-하이드록시피롤리딘-1-일)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <128> 4-아미노-5-피롤리딘-1-일-1,2-디에틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <129> 4-아미노-5-(3-디메틸아미노피롤리딘-1-일)-1,2-디에틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;
- <130> 4-아미노-1,2-디에틸-5-(4-메틸피페라진-1-일)피라졸리딘-3-온;
- <131> 일부는 화학 구조식의 명칭을 기재하기 위해 하기에 나타낸다:

<132>

| | |
|---|--|
|  | 4,5-디아미노-1,2-디메틸-1,2-디하이드로-피라졸-3-온 |
|  | 4,5-디아미노-1,2-디에틸-1,2-디하이드로-피라졸-3-온 |
|  | 4,5-디아미노-1,2-디페닐-1,2-디하이드로-피라졸-3-온 |
|  | 4,5-디아미노-1-에틸-2-메틸-1,2-디하이드로-피라졸-3-온 |
|  | 4,5-디아미노-1-페닐-2-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온 |
|  | 4-아미노-5-(피롤리딘-1-일)-1,2-디에틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온 |
|  | 4-아미노-5-(3-디메틸아미노피롤리딘-1-일)-1,2-디에틸-1,2-디하이드로 피라졸-3-온 |

| | |
|---|---|
|  | <p>2,3-디아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로 [1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-메틸아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-에틸아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-(2-하이드록시에틸)아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-(2-하이드록시프로필)아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-비스(2-하이드록시에틸)아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-이소프로필아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-(피롤리딘-1-일)-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2-아미노-3-(3-하이드록시피롤리딘-1-일)-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |
|  | <p>2,3-디아미노-6-하이드록시-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온</p> |

| | |
|---|---|
|  | 2,3-디아미노-6-메틸-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온 |
|  | 2,3-디아미노-6,6-디메틸-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온 |
|  | 2,3-디아미노-5,6,7,8-테트라하이드로-1H,6H-피리다지노[1,2-a]피라졸-1-온 |
|  | 2,3-디아미노-5,8-디하이드로-1H,6H-피리다지노-[1,2-a]피라졸-1-온 |
|  | 4,5-디아미노-1-(2-하이드록시에틸)-2-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온 |
|  | 4,5-디아미노-2-(2-하이드록시에틸)-1-메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온 |

<133> 이들 화합물들 중에서, 특히 바람직한 식 (I)의 디아미노피라졸론 유도체는 다음과 같다:

<134> 2,3-디아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;

<135> 2-아미노-3-에틸아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;

<136> 2-아미노-3-이소프로필아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;

<137> 2-아미노-3-(피롤리딘-1-일)-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;

<138> 4,5-디아미노-1,2-디메틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;

<139> 4,5-디아미노-1,2-디에틸-1,2-디하이드로피라졸-3-온;

<140> 4,5-디아미노-1,2-디-(2-하이드록시에틸)-1,2-디하이드로피라졸-3-온;

<141> 2-아미노-3-(2-하이드록시에틸)아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;

<142> 2-아미노-3-디메틸아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온;

<143> 2,3-디아미노-5,6,7,8-테트라하이드로-1H,6H-피리다지노[1,2-a]피라졸-1-온

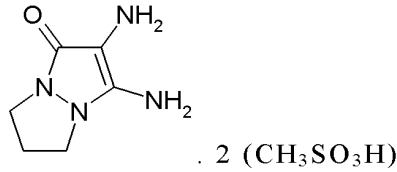
<144> 4-아미노-1,2-디에틸-5-피롤리딘-1-일-1,2-디하이드로피라졸-3-온;

<145> 4-아미노-5-(3-디메틸아미노피롤리딘-1-일)-1,2-디에틸-1,2-디하이드로-피라졸-3-온;

<146> 2,3-디아미노-6-하이드록시-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온.

<147> 특히 더 바람직한 화합물은, 2,3-디아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온 및 그 염, 예컨대

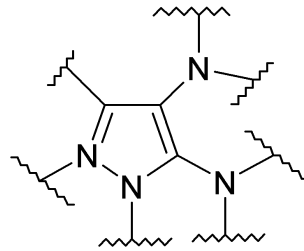
하기 식의 2,3-디아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온 디메탄 설페이트이다:



<148>

<149>

용어 "디아미노피라졸 유도체(들)"는 하기 구조의 그것 (또는 그것들)의 분자 구조를 포함하는 1종 (또는 그 이상)의 화합물(들)을 의미한다:



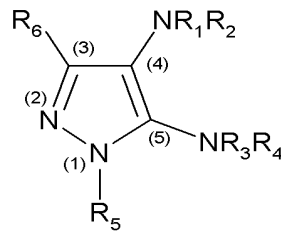
<150>

<151>

따라서, 디아미노피라졸 유도체는 4,5-디아미노피라졸의 유도체이다.

<152>

본 발명에 따른 디아미노피라졸 유도체(들)는 바람직하기로는 하기 식 (II)의 화합물이다:



(II)

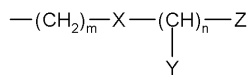
<153>

<154>

상기 식에서,

<155>

- R₁, R₂, R₃, R₄ 및 R₅는 동일하거나 상이할 수 있으며, 수소 원자; OR, NHR, NRR', SR, SOR, SO₂R, COR, COOH, CONH₂, CONHR, CONRR', PO(OH)₂, SH, SO₃X, 비양이온성 헤테로사이클, Cl, Br 또는 I 중에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되거나 치환되지 않은 C₁-C₆ 알킬 라디칼로, X는 수소 원자, Na, K, 또는 NH₄이고, R 및 R'은 동일하거나 상이하게 C₁-C₄ 알킬 또는 알케닐임; C₂-C₄ 하이드록시알킬 라디칼; C₂-C₄ 아미노알킬 라디칼; 페닐 라디칼; 할로젠 원자나 C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 알콕시, 니트로, 트리플루오로메틸, 아미노 또는 C₁-C₄ 알킬아미노 라디칼로 치환된 페닐 라디칼; 벤질 라디칼; 할로젠 원자나 C₁-C₄ 알킬, C₁-C₄ 알콕시, 메틸렌디옥시 또는 아미노 라디칼로 치환된 벤질 라디칼; 라디칼



<156>

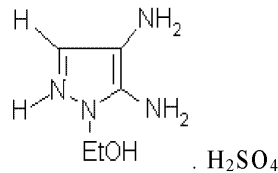
로, 여기서 m 및 n은 동일하거나 상이하게 0 - 3의 정수이며, X는 산소 원자 또는 NH 기이고, Y는 수소 원자 또는 C₁-C₄ 알킬 라디칼이고, Z는 n이 0일 때에는 메틸 라디칼, C₁-C₄ 알킬 라디칼, 또는 n이 1보다 클 때는 OR 또는 NR''R'''기이고, R'' 및 R'''는 동일하거나 상이하게 수소 원자 또는 C₁-C₄ 알킬 라디칼임; 또는 R₉는 5번 위치의 NR₇R₈ 기에 있는 질소 원자와 함께 4원성 이상의 헤테로사이클을 형성하며,

<157>

- R₆은 C₁-C₆ 알킬 라디칼; C₁-C₄ 하이드록시알킬 라디칼; C₁-C₄ 아미노알킬 라디칼; (C₁-C₄)알킬아미노(C₁-C₄)알킬 라디칼; 디(C₁-C₄)알킬아미노(C₁-C₄)알킬 라디칼; 하이드록시(C₁-C₄)알킬-아미노(C₁-C₄)알킬 라디칼; (C₁-C₄)알콕시메틸 라디칼; 페닐 라디칼; 할로젠 원자나 (C₁-C₄)알킬, (C₁-C₄)알콕시, 니트로, 트리플루오로메틸, 아미노 또는 (C₁-C₄)알킬아미노 라디칼로 치환된 페닐 라디칼; 벤질 라디칼; 할로젠 원자나 (C₁-C₄)알킬, (C₁-C₄)알콕시, 니트로, 트리플루오로메틸, 아미노 또는 (C₁-C₄)알킬아미노 라디칼로 치환된 벤질 라디칼; 티오펜, 푸란 및 피리

딘으로부터 선택되는 헤테로사이클, 또는 $-(CH_2)_p-O-(CH_2)_q-OR''$ 라디칼로, p 및 q는 상이하거나 동일하게 1-3의 정수이고, R''은 상기와 동일하며,

- <158> 라디칼 R₁, R₂, R₃ 및 R₄ 중 하나 이상은 수소 원자인 것으로 이해된다.
- <159> 식 (II)의 화합물은 HCl, HBr, HI, H₂SO₄ 또는 H₃PO₄ 등의 미네랄 강산, 또는 아세트산, 락트산, 타르타르산, 시트르산, 숙신산, 벤젠설폰산, 파라-톨루엔설폰산, 포름산 또는 메탄설폰산 등의 유기산으로 선택적으로 염화될 수 있다.
- <160> 또한, 상기 화합물은 용매화물 형태, 예컨대 수화물이거나, 또는 에탄올 또는 이소프로판올 등의 선형 또는 분지형의 알코올의 용매화물 형태일 수 있다.
- <161> 본 발명에 따라 사용할 수 있는 식 (II)의 유도체들로는, 예컨대 특허 DE-A-38 43 892, DE-A-41 33 957 및 특허 출원 WO 94/08969, WO 94/08970, FR-A-2 733 749 및 DE-A-195 43 988에 언급되어 있는 화합물, 예로 4,5-디아미노-1-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-(2-하이드록시에틸)피라졸, 4,5-디아미노-1-(4'-클로로벤질)피라졸, 4,5-디아미노-1,3-디메틸피라졸, 4,5-디아미노-3-메틸-1-페닐피라졸, 4,5-디아미노-1-메틸-3-페닐피라졸, 4-아미노-1,3-디메틸-5-하이드라지노피라졸, 1-벤질-4,5-디아미노-3-메틸피라졸, 4,5-디아미노-3-tert-부틸-1-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-tert-부틸-3-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-(β-하이드록시에틸)-3-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-에틸-3-메틸피라졸, 4,5-디아미노-1-에틸-3-(4'-메톡시페닐)피라졸, 4,5-디아미노-1-에틸-3-하이드록시메틸피라졸, 4,5-디아미노-3-하이드록시메틸-1-메틸피라졸, 4,5-디아미노-3-하이드록시메틸-1-이소프로필피라졸, 4,5-디아미노-3-메틸-1-이소프로필피라졸 및 4-아미노-5-(2'-아미노에틸)아미노-1,3-디메틸피라졸과, 그의 부가 염을 들 수 있다.
- <162> 보다 바람직하기로는, 4,5-디아미노-1-(2-하이드록시에틸)-1H-피라졸 및 그의 염, 예컨대 하기 식의 4,5-디아미노-1-(2-하이드록시에틸)-1H-피라졸 설페이트이다:



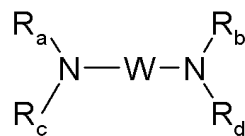
- <163>
- <164> 디아미노디아자사이클로펜텐 타입의 산화 베이스는 본 발명의 조성물에 단독으로 또는 혼합물로서 존재할 수 있다.
- <165> 디아미노디아자사이클로펜텐 타입의 산화 베이스(들)(B)는 조성물의 총 중량에 대해 0.001 중량% - 20 중량%, 바람직하기로는 0.005 중량% - 10 중량%, 더 바람직하기로는 0.01 중량% - 5 중량%이다.
- <166> 본 발명의 조성물에 존재하는 산화 커플러(들)(C)를 벤젠 커플러, 헤테로사이클 커플러 및 나프탈렌 커플러, 및 그의 부가 염으로부터 선택할 수 있다.
- <167> 본 발명에 따른 조성물에 사용할 수 있는 벤젠 커플러로, 메타-아미노페놀, 메타-페닐렌디아민 및 메타-디페놀, 및 그의 부가 염을 들 수 있다.
- <168> 바람직한 커플러들 중, 2-메틸-5-아미노페놀, 5-N-(β-하이드록시에틸)아미노-2-메틸페놀, 6-클로로-2-메틸-5-아미노페놀, 3-아미노페놀, 1,3-디하이드록시벤젠, 1,3-디하이드록시-2-메틸벤젠, 4-클로로-1,3-디하이드록시-벤젠, 2,4-디아미노-1-(β-하이드록시에틸옥시)벤젠, 2-아미노-4-(β-하이드록시에틸아미노)-1-메톡시벤젠, 1,3-디아미노벤젠, 1,3-비스-(2,4-디아미노페녹시)프로판, 3-우레이도아닐린, 3-우레이도-1-디메틸아미노벤젠, 세사몰(sesamol), 1-β-하이드록시에틸아미노-3,4-메틸렌디옥시벤젠, α-나프톨, 2-메틸-1-나프톨, 6-하이드록시-인돌, 4-하이드록시인돌, 4-하이드록시-N-메틸인돌, 2-아미노-3-하이드록시피리딘, 6-하이드록시벤조모르폴린 3,5-디아미노-2,6-디메톡시피리딘, 1-N-(β-하이드록시에틸)아미노-3,4-메틸렌디옥시벤젠 및 2,6-비스-(β-하이드록시에틸아미노)톨루엔, 및 그의 산 부가 염을 들 수 있다.
- <169> 산화 커플러(들)(C)의 농도는 일반적으로 상기 조성물의 총 중량에 대해 0.001 중량% - 20 중량%, 바람직하기로는 0.005 중량% - 10 중량%, 더 바람직하기로는 0.01 중량% - 5 중량%이다.
- <170> 또한, 본 발명의 조성물은 1종 이상의 부가적인 산화 베이스(들)를 포함할 수도 있다.

- <171> 용어 "부가적인 산화 베이스(들)"는 전술한 디아미노디아자사이클로펜텐 타입의 산화 베이스(들)(B)와는 상이한, 1종 이상의 산화 베이스(들)를 의미한다.
- <172> 예로, 상기한 부가적인 산화 베이스는 파라-페닐렌디아민, 비스페닐알킬렌디아민, 파라-아미노페놀, 비스-파라-아미노페놀, 오르쏘-아미노페놀 및 디아미노디아자사이클로펜텐 산화 베이스 이외의 헤테로사이클 베이스, 및 그의 부가 염으로부터 선택된다.
- <173> 파라-페닐렌디아민들 중에서, 예컨대 파라-페닐렌디아민, 파라-톨루일렌디아민, 2-클로로-파라-페닐렌디아민, 2,3-디메틸-파라-페닐렌디아민, 2,6-디메틸-파라-페닐렌디아민, 2,6-디에틸-파라-페닐렌디아민, 2,5-디메틸-파라-페닐렌디아민, N,N-디메틸-파라-페닐렌디아민, N,N-디에틸-파라-페닐렌디아민, N,N-디프로필-파라-페닐렌디아민, 4-아미노-N,N-디에틸-3-메틸아닐린, N,N-비스(β-하이드록시에틸)-파라-페닐렌디아민, 4-N,N-비스(β-하이드록시에틸)아미노-2-메틸아닐린, 4-N,N-비스(β-하이드록시에틸)아미노-2-클로로아닐린, 2-β-하이드록시에틸-파라-페닐렌디아민, 2-플루오로-파라-페닐렌디아민, 2-이소프로필-파라-페닐렌디아민, N-(β-하이드록시프로필)-파라-페닐렌디아민, 2-하이드록시메틸-파라-페닐렌디아민, N,N-디메틸-3-메틸-파라-페닐렌디아민, N,N-(에틸-β-하이드록시에틸)-파라-페닐렌디아민, N-(b, γ-디하이드록시프로필)-파라-페닐렌디아민, N-(4'-아미노페닐)-파라-페닐렌디아민, N-페닐-파라-페닐렌디아민, 2-β-하이드록시에틸옥시-파라-페닐렌디아민, 2-β-아세틸아미노에틸옥시-파라-페닐렌디아민, N-(β-메톡시에틸)-파라-페닐렌디아민, 4-아미노페닐피롤리딘, 2-티에닐-파라-페닐렌디아민, 2-β-하이드록시에틸아미노-5-아미노톨루엔 및 3-하이드록시-1-(4'-아미노페닐)피롤리딘, 및 그의 산 부가 염을 들 수 있다.
- <174> 전술한 파라-페닐렌디아민들 중에서, 파라-페닐렌디아민, 파라-톨루일렌디아민, 2-이소프로필-파라-페닐렌디아민, 2-β-하이드록시에틸-파라-페닐렌디아민, 2-β-하이드록시에틸옥시-파라-페닐렌디아민, 2,6-디메틸-파라-페닐렌디아민, 2,6-디에틸-파라-페닐렌디아민, 2,3-디메틸-파라-페닐렌디아민, N,N-비스(β-하이드록시에틸)-파라-페닐렌디아민, 2-클로로-파라-페닐렌디아민 및 2-β-아세틸아미노에틸옥시-파라-페닐렌디아민, 및 그의 산 부가 염이 특히 바람직하다.
- <175> 비스페닐알킬렌디아민들 중에서, 예로 N,N'-비스(β-하이드록시에틸)-N,N'-비스(4'-아미노페닐)-1,3-디아미노프로판올, N,N'-비스(β-하이드록시에틸)-N,N'-비스(4'-아미노페닐)에틸렌디아민, N,N'-비스(4-아미노페닐)테트라-메틸렌디아민, N,N'-비스(β-하이드록시에틸)-N,N'-비스(4-아미노페닐)테트라-메틸렌디아민, N,N'-비스(4-메틸아미노페닐)테트라-메틸렌디아민, N,N'-비스(에틸)-N,N'-비스(4'-아미노-3'-메틸페닐)에틸렌디아민 및 1,8-비스(2,5-디아미노페녹시)-3,6-디옥사-옥탄 및 그의 산 부가 염을 들 수 있다.
- <176> 파라-아미노페놀들 중에서, 예로 파라-아미노페놀, 4-아미노-3-메틸페놀, 4-아미노-3-플루오로페놀, 4-아미노-3-하이드록시메틸페놀, 4-아미노-2-메틸페놀, 4-아미노-2-하이드록시메틸페놀, 4-아미노-2-메톡시메틸페놀, 4-아미노-2-아미노메틸페놀, 4-아미노-2-(β-하이드록시에틸아미노메틸)페놀 및 4-아미노-2-플루오로페놀, 및 그의 산 부가 염을 들 수 있다.
- <177> 오르쏘-아미노페놀들 중에서, 예로 2-아미노페놀, 2-아미노-5-메틸페놀, 2-아미노-6-메틸페놀 및 5-아세트아미도-2-아미노페놀, 및 그의 산 부가 염을 들 수 있다.
- <178> 헤테로사이클 베이스들 중에서, 예로 피리딘 유도체들 및 피리미딘 유도체들, 및 그의 부가 염을 들 수 있다. 피리딘 유도체들 중에서, 예로 특허 GB 1 026 978 및 GB 1 153 196에 개시된 화합물, 예컨대 2,5-디아미노 피리딘, 2-(4-메톡시페닐)아미노-3-아미노피리딘, 2,3-디아미노-6-메톡시피리딘, 2-(β-메톡시에틸)아미노-3-아미노-6-메톡시피리딘 및 3,4-디아미노피리딘, 및 그의 산 부가 염을 들 수 있다.
- <179> 본 발명에 사용할 수 있는 그의 피리딘 산화 베이스로는, 예컨대 특허 출원 FR 2801308에 언급되어 있는 3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘 산화 베이스 또는 그의 부가 염이 있다. 그 예로, 피라졸로[1,5-a]피리딘-3-일아민; 2-아세틸아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-3-일아민; 2-모르폴린-4-일피라졸로[1,5-a]피리딘-3-일아민; 3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-2-카르복시산; 2-메톡시피라졸로[1,5-a]피리딘-3-일아미노; (3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-7-일)메탄올; 2-(3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-5-일)에탄올; 2-(3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-7-일)에탄올; (3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-2-일)메탄올; 3,6-디아미노피라졸로[1,5-a]피리딘; 3,4-디아미노피라졸로[1,5-a]피리딘; 피라졸로[1,5-a]피리딘-3,7-디아민; 7-모르폴린-4-일피라졸로[1,5-a]피리딘-3-일아민; 피라졸로[1,5-a]피리딘-3,5-디아민; 5-모르폴린-4-일피라졸로[1,5-a]피리딘-3-일아민; 2-[(3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-5-일)(2-하이드록시에틸)아미노]에탄올; 2-[(3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-7-일)(2-하이드록시에틸)아미노]에탄올; 3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-5-올; 3-아미노피라졸로[1,5-

a]피리딘-4-올; 3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-6-올; 3-아미노피라졸로[1,5-a]피리딘-7-올; 및 그의 산 부가 염 또는 염기 부가 염을 들 수 있다.

- <180> 피리미딘 유도체들 중에서, 예로 2,4,5,6-테트라아미노피리미딘, 4-하이드록시-2,5,6-트리아미노피리미딘, 2-하이드록시-4,5,6-트리아미노피리미딘, 2,4-디-하이드록시-5,6-디아미노피리미딘, 2,5,6-트리아미노피리미딘 등의 특허 DE 2359399; JP 88-169571; JP 05-63124; EP 0770375 또는 특허 출원 WO 96/15765에 언급된 화합물, 특허 출원 FR-A-2 750 048에 언급된 화합물 등의 피라졸로피리미딘 유도체들을 들 수 있으며, 피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민; 2,5-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민; 피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,5-디아민; 2,7-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,5-디아민; 3-아미노피라졸로[1,5-a]피리미딘-7-올; 3-아미노피라졸로[1,5-a]피리미딘-5-올; 2-(3-아미노피라졸로[1,5-a]피리미딘-7-일아미노)에탄올, 2-(7-아미노피라졸로[1,5-a]피리미딘-3-일아미노)에탄올, 2-[(3-아미노피라졸로[1,5-a]피리미딘-7-일)(2-하이드록시에틸)아미노]에탄올, 2-[(7-아미노피라졸로[1,5-a]피리미딘-3-일)(2-하이드록시에틸)아미노]에탄올, 5,6-디-메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민, 2,6-디메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민, 2,5,N7,N7-테트라메틸피라졸로[1,5-a]피리미딘-3,7-디아민, 3-아미노-5-메틸-7-이미다졸릴프로필-아미노피라졸로[1,5-a]피리미딘, 및 그의 산 부가 염, 및 호변이성체 평형(tautomeric equilibrium)이 존재할때에는 그의 호변이성체 형태를 들 수 있다.
- <181> 본 발명의 조성물에 존재하는 부가적인 산화 베이스(들)는 염색 조성물의 총 중량에 약 0.001 중량% - 10 중량%, 바람직하기로는 0.005 중량% - 6 중량%이다.
- <182> 일반적으로, 본 발명의 내용에 사용될 수 있는 산화 베이스 및 커플러의 부가 염은 특히, 하이드로클로라이드, 하이드로브로마이드, 설페이트, 사이트레이트, 숙시네이트, 타르트레이트, 락테이트, 토실레이트, 벤젠설포네이트, 포스페이트 및 아세테이트와 같은 산 부가염, 및 소듐 하이드록사이드, 포타슘 하이드록사이드, 수성 암모니아, 아민 또는 알카놀아민 등의 염기 부가 염 중에서 특히 선택된다.
- <183> 특히 바람직하기로는, 본 발명에 따른 조성물에 사용할 수 있는 부가적인 산화 베이스는 파라-페닐렌디아민 및 파라-아미노페놀, 및 그의 부가 염으로불 선택된다.
- <184> 본 발명에 따른 염색 조성물은 또한 특히 니트로벤젠 염료, 아조 직접 염료(azo direct dye), 메틴 직접 염료, 안트라퀴논 염료, 크산텐 염료 및 트리아릴메탄 염료, 및 그의 부가 염 중에서 선택할 수 있는, 1종 이상의 직접 염료(들)를 포함할 수도 있다. 이들 직접 염료는 본래 비이온성, 음이온성 또는 양이온성일 수 있다.
- <185> 본 발명에 따른 조성물에 사용되는 매질은 수계 매질 또는 물과 1종 이상의 유기 용매를 포함하는 매질이다.
- <186> 본 발명에 따른 조성물에 사용되는 유기 용매(들)는 모노하이드록시화된 알코올 및 폴리올로부터 선택될 수 있다.
- <187> 사용할 수 있는 모노하이드록시화된 알코올로는, 에탄올, 이소프로판올, tert-부탄올 또는 n-부탄올 등의 C₁-C₄ 저급 알코올, 및 그 혼합물을 들 수 있다. 사용되는 알코올은 바람직하기로는 에탄올이다.
- <188> 사용할 수 있는 폴리올로는, 프로필렌 글리콜, 폴리에틸렌 글리콜 및 글리세롤을 들 수 있다. 유기 용매로는, 또한 2-부톡시에탄올, 프로필렌 글리콜 모노메틸 에테르, 디에틸렌 글리콜 모노에틸 에테르 및 디에틸렌 글리콜 모노메틸 에테르 등의 폴리올 에테르, 또한, 벤질 알코올이나 페녹시에탄올 등의 방향족 알코올, 및 이들의 혼합물을 들 수 있다.
- <189> 본 발명에 따른 조성물내의 유기 용매(들)의 농도는 상기 조성물의 총 중량에 바람직하기로는 0 - 30 중량%, 더 바람직하기로는 0 - 20 중량%이다.
- <190> 본 발명에 따른 조성물은 또한, 본 발명의 소수성 치환기(들)를 가진 비이온성 셀룰로스 유도체와 상이한, "레올로지-조정제(rheology-adjusting agent)(들)"이라고도 하는, 1종 이상의 점증제(들)를 포함할 수 있다.
- <191> 상기 레올로지 조정제(들)는 미네랄 또는 유기 점증제, 및 특히 폴리머성 회합형 점증제(associative thickener), 지방 알코올(올레일 알코올), 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)를 가지고 있는 비이온성 셀룰로스 유도체(A)(하이드록시에틸셀룰로스, 하이드록시프로필셀룰로스, 카르복시메틸셀룰로스) 이외의 다른 셀룰로스 유도체, 및 미생물 기원의 검(잔탄 검, 스크레로글루칸 검)으로부터 선택할 수 있다.
- <192> 바람직한 레올로지 조정제(들)는 지방 알코올, 특히 C₂₀-C₂₂ 지방 알코올, 및 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)를 가지고 있는 비이온성 셀룰로스 유도체(A) 이외의 다른 셀룰로스 유도체로부터 선택된다.

- <193> 점증제(들)의 농도는 조성물의 총 중량에 대해 바람직하기로는 0.01 중량% - 20 중량%이며, 더 바람직하기로는 1 중량% - 10 중량%이다.
- <194> 본 발명에 따른 염색 조성물은 또한 체모 염색용 조성물에 통상적으로 사용되는 1종 이상의 보강제(들)를 포함할 수도 있다.
- <195> 용어 "보강제(들)"는, 양이온성, 음이온성, 비이온성, 양쪽 친매성, 또는 양성 계면활성제, 또는 이의 혼합물; 본 발명에 따른 소수성 치환기(들)를 가지고 있는 비이온성 셀룰로스 유도체(A)를 제외한, 비이온성, 양쪽 친매성, 양성, 음이온성 또는 양이온성 폴리머, 또는 이의 혼합물; 침투제; 봉쇄제(sequestering agent), 향료; 완충제; 분산제; 예컨대 변형 또는 비변형된, 휘발성 또는 비휘발성 실리콘 등의 컨디셔닝제; 막 형성제; 세라마이드, 보존제; 유타제(opacifier); 비타민; 아미노산; 올리고펩타이드; 펩타이드; 변형 또는 비변형된, 가수분해 또는 비가수분해된 단백질; 효소; 분지형 또는 비분지형의 지방산 및 알코올; 동물, 식물 또는 미네랄 왁스; 하이드록시화된 유기산; UV 차단제; 항산화제 및 자유 라디칼 소거제(free-radical scavenger); 항비듬제; 지루증-조절제; 진정제; 미네랄, 식물 또는 동물 오일; 폴리이소부텐 및 폴리(알파-올레핀); 색소; 산, 염기, 가수분해, 미네랄 필터, 펠제(pearlescent agent), 플레이크(flake); 정전기 방지제 및 환원제(reducing agent) 등의, 전술한 화합물과는 상이한, 1종 (또는 그 이상)의 첨가제(들)를 의미한다.
- <196> 상기 보강제(들)는 일반적으로 그 각각이 조성물 중량에 대해 바람직하기로는 0.01 중량% - 40 중량%, 더 바람직하기로는 0.1 중량% - 25 중량%로 존재한다.
- <197> 물론, 당업자는 본 발명에 따른 산화 염색 조성물과 본질적으로 조합되어 있는 이로온 특성들이 고려되는 첨가제(들)에 의해 나빠지거나 또는 실질적으로 나빠지지 않도록 이(또는 이들) 가능한 첨가 화합물(들)을 선택하기 위해 주의를 기울일 것이다.
- <198> 본 발명에 따른 염색 조성물의 pH는 일반적으로 약 3 -12, 바람직하기로는 약 5 - 11이다. 이는 케라틴 섬유 염색에 통상적으로 사용되는 산성화 물질(들) 또는 염기성화 물질(들)에 의해, 또는 통상적인 완충제 시스템(들)을 이용하여 원하는 수치로 조절할 수 있다.
- <199> 산성화 물질로는, 예로 하이드로클로르산, 오르쏘포스포르산, 설퍼릭산, 설펜산 및 카르복시산 등의 미네랄 또는 유기 산, 예컨대 아세트산, 타르타르산, 시트르산 및 락트산을 들 수 있다.
- <200> 염기화 물질로는, 예로 수성 암모니아, 알칼리 금속 카르보네이트, 알카놀아민, 예컨대 모노-, 다이- 및 트리에탄올아민과 그 유도체, 소듐 하이드록사이드 또는 포타슘 하이드록사이드 및 하기 식 (III)의 화합물을 들 수 있다:



(III)

- <201>
- <202> 상기 식(I)에서,
- <203> W는 하이드록시기 또는 C₁-C₄ 알킬기로 선택적으로 치환된 프로필렌 잔기이고;
- <204> R_a, R_b, R_c 및 R_d는 동일하거나 상이할 수 있으며, 수소 원자, C₁-C₄ 알킬기 또는 C₁-C₄ 하이드록시알킬기이다.
- <205> 본 발명에 따른 염색 조성물은 크림 또는 겔 형태, 또는 케라틴 섬유, 특히 인간 체모의 염색에 적합한 임의의 다른 형태 등의 다양한 형태일 수 있다.
- <206> 본 발명의 케라틴 섬유 염색 방법은, 전술한 본 발명에 따른 조성물을 바람직하게는 특히 원하는 색을 발색시키는데 충분한 시간동안 1종 이상의 산화제의 존재하에 섬유에 적용하는 방법이다. 색은 산성, 중성 또는 염기성 pH에서 나타날 수 있으며, 산화제(들)를 사용하기 바로 전에 본 발명의 조성물에 첨가하거나, 또는 이(이들)를 이것(이들)이 포함되어 있는 산화성 조성물부터 시작하여, 본 발명의 조성물과 동시에 또는 순차적으로 적용될 수 있다.
- <207> 특정 일 예에서, 본 발명에 따른 조성물은 바람직하기로는 사용시에 염색에 적합한 매질 중에서 하나 이상의 산화제를 포함하는 조성물과 혼합하는 레디-투-유즈 조성물이며, 이 산화제 (또는 이들 산화제들)는 발색되기에

충분한 양으로 존재된다. 그런 후, 수득되는 혼합물을 케라틴 섬유에 적용한다. 약 3 - 50분, 바람직하기로는 5 - 30분간 방치한 후, 케라틴 섬유를 행구고, 샴푸로 씻고 다시 행군 후 건조한다.

- <208> 케라틴 섬유의 산화 염색에 통상적으로 사용되는 산화제로는, 예컨대 하이드로겐 페록사이드, 유레아 페록사이드, 알카리 금속 브로메이트, 퍼보레이트 및 퍼셀페이트 등의 과염(persalt), 과산(peracid) 및 옥시다제 효소, 특히 퍼옥시다제를 언급할 수 있으며, 2-전자 산화환원효소, 예 유리카제(uricase), 및 4-전자 옥시게나제, 예 락카제(laccase)가 있으며, 이들 산화환원효소는 유리카제에 대한 우르산 등의 통상적인 보조인자와 선택적으로 조합된다. 바람직한 산화제는 하이드로겐 페록사이드이다.
- <209> 또한, 산화 조성물은 전술한 바와 같이 체모 염색용 조성물에 통상적으로 사용되는 다양한 보강제를 포함할 수 있다.
- <210> 산화제를 포함하는 산화 조성물의 pH는, 즉, 염색 조성물과 혼합한 후, 케라틴 섬유에 적용되는 제조된 조성물의 pH가 바람직하게는 약 3 - 12, 선호적으로는 5 - 10가 되는 범위이다. 전술한 바와 같이, 케라틴 섬유의 염색에 일반적으로 사용되는 산성화 물질(들) 또는 염기성화 물질(들)에 의해 원하는 수치로 조정할 수 있다.
- <211> 케라틴 섬유에 최종 적용되는 레디-투-유즈 조성물은, 크림 또는 겔 형태이거나, 또는 케라틴 섬유, 특히 체모 등의 인간 케라틴 섬유의 염색에 적합한 임의의 다른 형태 등의, 다양한 형태일 수 있다.
- <212> 본 발명의 대상은 또한 전술한 바와 같은 염색 조성물이 들어 있는 하나 이상의 제1 구획 및 산화 조성물이 있는 하나 이상의 제2 구획을 포함하는, 다구획 염색 장치 또는 염색 "키트"이다. 상기 장치에는 특허 출원 FR-A-2 586 913에 개시된 기구와 같이, 체모에 원하는 혼합물을 전달하기 위한 수단이 장착될 수 있다.
- <213> 하기 실시예들은 본 발명의 설명하기 위한 것일 뿐 사실상 이들로 한정되는 것은 아니다.

<214> **실시예**

<215> **실시예 1: 본 발명에 따른 염색 조성물**

<216> 하기 조성물 1 및 2를 제조하였다.

<217>

| 염색 조성물 | 조성물 1 | 조성물 2 |
|--|-------|-------|
| 세틸 하이드록시에틸셀룰로스 (Polysurf 67, Aqualon사에서 판매) | 0.4 g | - |
| 세틸 하이드록시에틸셀룰로스 (Natosol Plus Grade 330 CS, Aqualon사에서 판매) | - | 0.4 g |
| 2,3-디아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]-피라졸-1-온, CH ₃ SO ₃ H | 1.9 g | - |
| 4,5-디아미노-1-(2-하이드록시에틸)-1H-피라졸 설페이트 | - | 1.9 g |
| 파라-아미노페놀 | 0.1 g | - |
| 4-아미노-2-하이드록시톨루엔 | 0.2 g | 1.4 g |
| 5-아미노-6-클로로-오르쏘-크레졸 | 0.8 g | 0.2 g |
| 파라-페닐렌디아민 | - | 0.3 g |
| 스테아르산 모노에탄올-아마이드 | 4.8 g | 4.8 g |
| 올레산 | 3 g | 3 g |
| 20 중량% NH ₃ 을 포함하는 수용액 | 7 g | 2.1 g |
| TiO ₂ | 0.3 g | 0.3 g |
| 모노에탄올아민 | 6.5 g | 6.3 g |
| Oleth-10 | 1.8 g | 1.8 g |
| 40 중량%의 폴리쿼터늄-6을 포함하는 수용액(Merquat 100, Ondeo사에서 판매) | 1.6 g | 1.6 g |
| 에틸렌디아민테트라아세트산 (EDTA) | 0.2 g | 0.2 g |
| 60 중량%의 헥사디메트린 클로라이드를 포함하는 수용액 (Mexomere PO, Chimex사에서 판매) | 1.2 g | 1.2 g |
| 하이드록시프로필메틸셀룰로스 | 0.2 g | 0.2 g |
| Oleth-30 | 1.5 g | 1.5 g |

| | | |
|--|-------|-------|
| Steareth-2 | 5.5 g | 5.5 g |
| C ₂₀ -C ₂₂ 알코올 (Nafol 2022 EN, Sasol사에서 판매) | 3 g | 3 g |
| 환원제 | q.s. | q.s. |
| 탈염수 q.s | 100 g | 100 g |

<218> **적용 프로토콜**

<219> 각 조성물 1 및 2를, 1.5 중량배의 pH 3의 산화 조성물(20 부피배의 하이드로겐 페록사이드 수용액)(H₂O₂ 6 중량%)로, 즉석에서 희석하였다. 이 혼합물은 쉽게 제조되며, 점성이 우수하며; 90%가 백색인 회색 체모에 체모 1 g 당 10 g 비로 30분간 용이하게 도포한다. 그런 후, 체모를 행구고, 표준 샴푸로 세정한 다음 건조한다.

<220> 모발의 색은 육안으로 평가한다. 90%가 백색인 본래 회색 체모에 처리한 후 수득한 결과는 다음과 같다:

| | 색조 |
|-------|-----------|
| 조성물 1 | 진한 구릿빛 |
| 조성물 2 | 진한 구릿빛 적색 |

<222> 이러한 색상은 특히 선택성 및 정착성 측면에서 양호한 특성을 가진다. 또한, 이는 강도가 양호하다. 수득되는 조성물은 경시적으로 안정적이다.

<223> **실시예 2: 비교예**

<224> 본 발명에 따른 조성물 3 및 비교 조성물 4를 제조하였다.

| 염색 조성물 | 조성물 3 (본 발명) | 조성물 4 (비교) |
|---|-----------------|---------------|
| 30 mol의 에틸렌옥사이드를 포함하는 옥시에틸렌화된 올레오세틸 알코올 | 1.5 g | 1.5 g |
| 2,3-디아미노-6,7-디하이드로-1H,5H-피라졸로[1,2-a]피라졸-1-온 디메탄설포네이트 | 1 g | 1 g |
| 스테아르아마이드 모노에탄올아민, 모노에탄올아민, 스테아르산 (96:2:2) | 5 g | 5 g |
| 메틸렌비스(4-사이클로헥실-이소시아네이트)(SMDI)/데실 엔딩을 가진 폴리에틸렌 글리콜의 폴리머, 수성 글리콜 용액 중에 용액 총 중량에 대해 활성 물질(am)을 35 중량%로 포함함 | - | 0.45 g am |
| 소듐 설파이트 | 0.5 g | 0.5 g |
| 에틸렌디아민테트라아세트산 (EDTA) | 0.2 g | 0.2 g |
| 순수 모노에탄올아민 | 1.05 g | 1.05 g |
| 1-메틸-2-하이드록시-4-아미노벤젠 | 0.36 g | 0.36 g |
| 에리쓰르브산(또는 D-이소아스코르브산) | 0.5 g | 0.5 g |
| C ₁₄ /C ₁₆ 알킬 치환기를 가지고 있는 하이드록시에틸셀룰로스 | 0.45 g am | - |
| 수성 암모니아(암모니아의 20 중량% 기준 농도) | 10 g | 10 g |
| 2 mol의 에틸렌옥사이드를 포함하는 옥시에틸렌화된 스테아릴 알코올 | 5.5 g | 5.5 g |
| 올레산 | 3 g | 3 g |
| 탈염수 | qs 100 g | qs 100 g |

<226> **적용 프로토콜**

<227> 각 조성물 3 및 4를, 1.5 중량배의 산화 조성물(20 부피배의 하이드로겐 페록사이드 수용액)(H₂O₂ 6 중량%)로, 즉석에서 희석하였다.

<228> 각 혼합물을, 90%가 백발인 천연(NW) 및 영구-웨이브한(PW) 모발 타래에 모발 g 당 혼합물 15 g의 비로 적용한다. 주위 온도에서 30분간 둔 후, 모발 타래를 행구고, 표준 샴푸로 세정하고, 다시 행구어 건조하였다.

<229> CIE L*a*b* 시스템에서 Konica Minolta CM-2600d 분광비색계를 이용하여 비색을 측정하였다. L* a* b* 시스템에서, L*은 수득되는 색의 진하기이고, L*이 낮을수록 발색되는 색은 진해진다. 색도는 a* 및 b* 값에 의해 측정되며, a*는 녹색/적색 색 축에서의 값을 나타내며, b*는 파랑/노란 색 축에서의 값을 나타낸다.

<230> 각 조성물에서, 발색 선택성을 평가한다. 발색 선택성은 천연 모발과 영구-웨이브를 가한 모발 간에 색상 차이이다. 천연 모발은 모발의 뿌리 부분의 성질을 나타내며, 영구-웨이브를 가한 모발은 모발 끝 부분의 성질을 나타낸다.

<231> 선택성은 ΔE에 의해 측정되며, 이는 천연 모발과 영구-웨이브한 모발 간의 발색 차이를 의미하며, 하기 식으로 구한다:

$$\Delta E = \sqrt{(L^* - L_0^*)^2 + (a^* - a_0^*)^2 + (b^* - b_0^*)^2}$$

<232> 식에서,
 <233>

<234> L*, a* 및 b*는 염색된 영구-웨이브한 모발의 매개변수이고,

<235> L₀*, a₀* 및 b₀*는 염색된 천연 모발의 매개변수이다.

<236> ΔE 값이 낮을수록 선택성도 낮아져, 모발 가닥에서 발색은 더 일정하다.

<237> **결과**

| | 모발 타입 | L* | a* | b* | ΔE |
|-------|----------|-------|-------|-------|-------|
| 조성물 3 | NW 염색 | 43.68 | 21.04 | 31.14 | 13.19 |
| | PW 염색 | 39.04 | 31.56 | 37.61 | |
| 조성물 4 | NW 염색 | 48.28 | 21.78 | 34.65 | 16.15 |
| | BP 염색 | 33.78 | 24.16 | 27.96 | |

<239> 본 발명에 따른 조성물 3은 천연 모발에 대해 진한 발색과 낮은 선택성을 보였다.