

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7635125号
(P7635125)

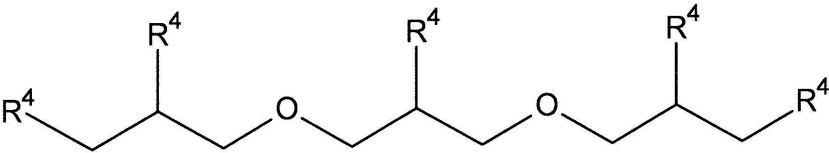
(45)発行日 令和7年2月25日(2025.2.25)

(24)登録日 令和7年2月14日(2025.2.14)

(51)国際特許分類		F I		
C 0 7 C	69/40 (2006.01)	C 0 7 C	69/40	C S P
A 6 1 K	8/39 (2006.01)	A 6 1 K	8/39	
A 6 1 Q	5/02 (2006.01)	A 6 1 Q	5/02	
A 6 1 Q	5/12 (2006.01)	A 6 1 Q	5/12	
C 0 7 C	69/44 (2006.01)	C 0 7 C	69/44	
請求項の数 10 (全64頁) 最終頁に続く				
(21)出願番号	特願2021-531696(P2021-531696)	(73)特許権者	508229301	
(86)(22)出願日	令和1年11月25日(2019.11.25)		モメンティブ パフォーマンス マテリア	
(65)公表番号	特表2022-511024(P2022-511024		ルズ インコーポレイテッド	
	A)		Momentive Performa	
(43)公表日	令和4年1月28日(2022.1.28)		nce Materials Inc.	
(86)国際出願番号	PCT/US2019/062918		アメリカ合衆国 ニューヨーク州 1 2 3	
(87)国際公開番号	WO2020/117509		0 9 ニスカユナ ボールタウン ロード	
(87)国際公開日	令和2年6月11日(2020.6.11)		2 7 5 0	
審査請求日	令和4年10月26日(2022.10.26)	(74)代理人	100087642	
(31)優先権主張番号	16/208,834		弁理士 古谷 聡	
(32)優先日	平成30年12月4日(2018.12.4)	(74)代理人	100082946	
(33)優先権主張国・地域又は機関	米国(US)		弁理士 大西 昭広	
		(74)代理人	100195693	
			弁理士 細井 玲	
		(72)発明者	スン, クンジャン	
				最終頁に続く

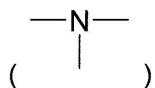
(54)【発明の名称】 繊維状アミノ酸ベースの基質、特に毛髪のトリートメントのためのポリカルボン酸化合物

(57)【特許請求の範囲】
【請求項1】
下記式を有する化合物、
【化7】



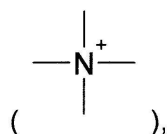
ここで R⁴ は、ヒドロキシまたは F からなる群から選択され、ここで F は、
- O - C (O) - R³ - C (O) O H、および
- N R¹ - C (O) - R³ - C (O) O H
から選択され、
ここで
R¹ は、水素、または任意選択で置換された直鎖状、環状または分岐状の、飽和、不飽和
または芳香族の炭化水素ラジカルであって、最大 1 0 0 個の炭素原子を有し、- O -、-
N H -、- C (O) -、- C (S) -、3 級アミノ基

【化 3】



および 4 級アンモニウム基

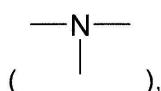
【化 4】



10

から選択される 1 つまたは複数の基を任意選択で含むものからなる群から選択され、
 R^3 は、単結合、または任意選択で置換された直鎖状、環状または分岐状の、飽和、不飽和または芳香族の炭化水素ラジカルであって、最大 100 個の炭素原子を有し、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{NH}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{C}(\text{S})-$ 、3 級アミノ基

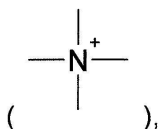
【化 5】



20

および 4 級アンモニウム基

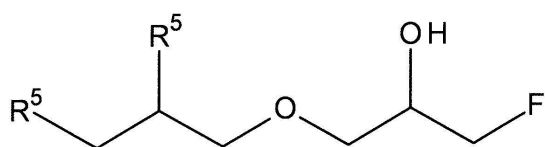
【化 6】



から選択される 1 つまたは複数の基を任意選択で含むものから選択され、
 但し R^3 は $-\text{CH}=\text{CH}-$ ではないという条件である、
 およびその塩であり、但し少なくとも 2 つの R^4 は F であるという条件である、または
 下記式を有する化合物、

30

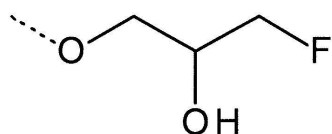
【化 8】



40

ここで R^5 の 1 つはヒドロキシであり、そして R^5 の 1 つは下記式の基であり、

【化 9】

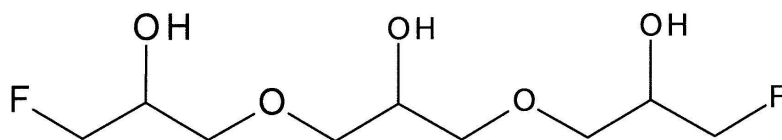


そしてここで F は前記で定義されたとおりであり、そして点線は炭素原子への結合である、
 、又は、

化合物が、以下の 2 つの異性体を含む、

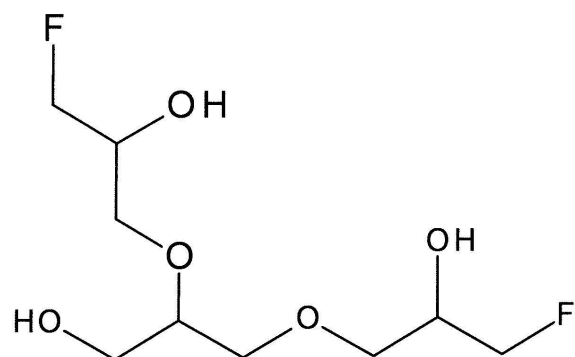
50

【化 10】



および

【化 11】

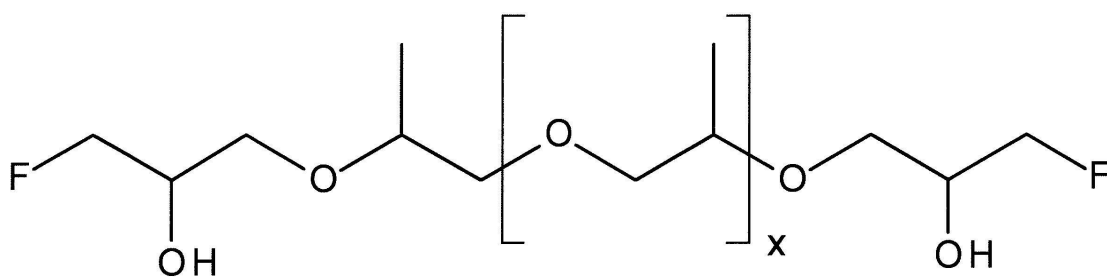


10

ここで F は前記で定義されたとおりである、又は、
下記式を有する化合物、

20

【化 12】



30

ここで x は、1 から 10 であり、そして F は前記で定義されたとおりである。

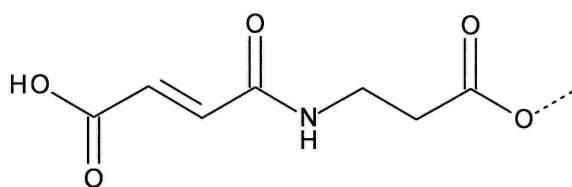
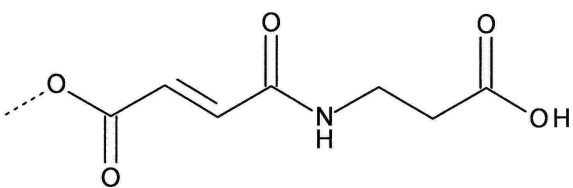
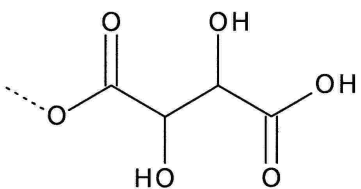
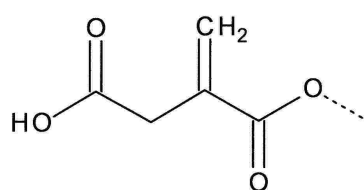
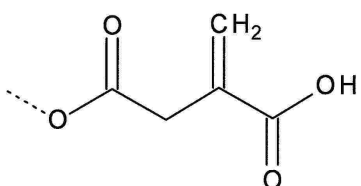
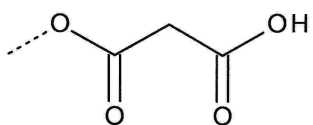
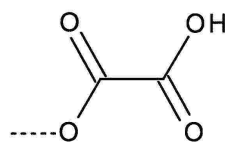
【請求項 2】

F は、下記式

40

50

【化 1 4】



10

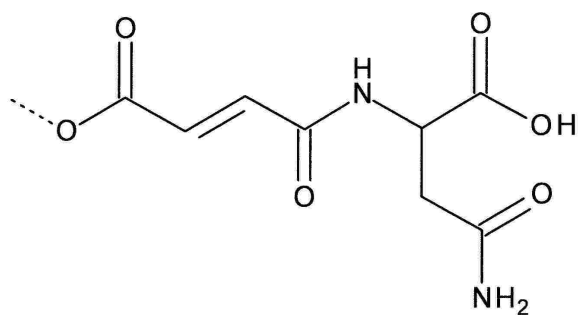
20

30

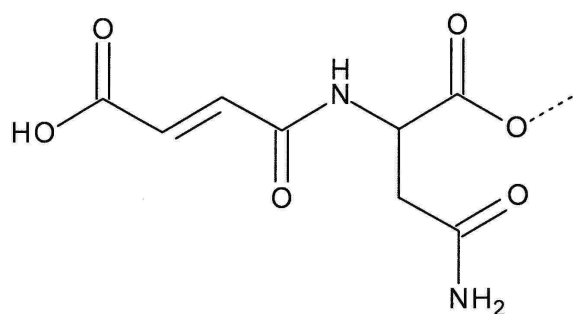
40

50

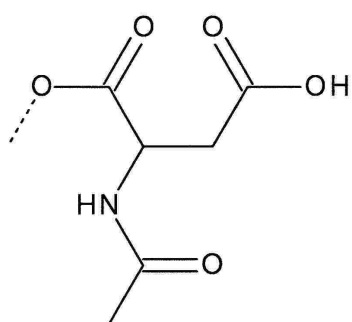
【化 1 5】



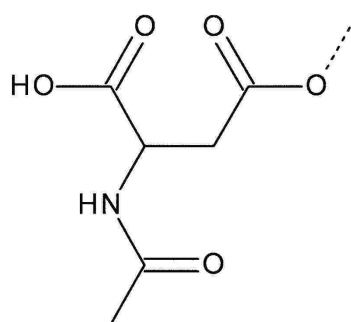
10



20



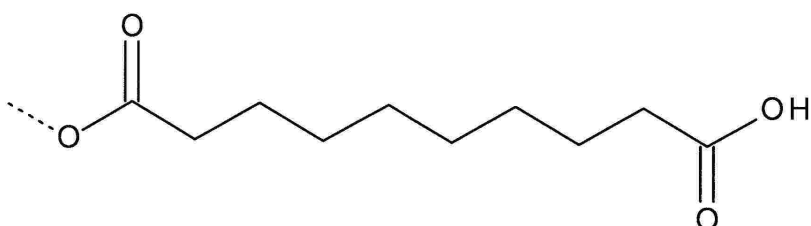
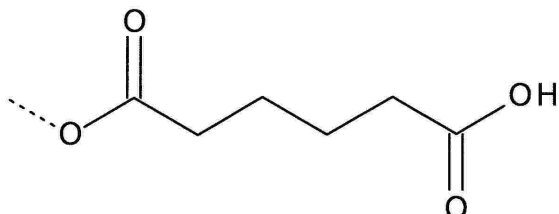
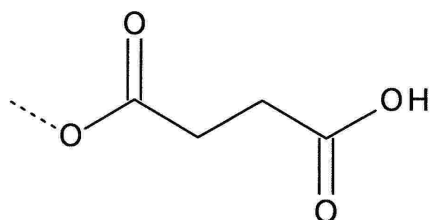
30



40

50

【化 16】



ここで上記式の点線は酸素原子への結合を表し、そしてここで少なくとも2つの基Fが存在する、

からなる群から選択される、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

以下の方法

(A) 1つまたは複数のヒドロキシル基を有し、少なくとも2つのエポキシ基を有する少なくとも1つの化合物を、少なくとも1つのジまたはトリカルボン酸化合物と反応させること、

(B) 1つまたは複数のヒドロキシル基を有し、少なくとも1つのエポキシ基を有する少なくとも1つの化合物を、少なくとも1つのジまたはトリカルボン酸化合物と反応させ、続いて反応生成物を少なくとも1つの酸無水物との反応に供すること、

(C) 少なくとも1つのポリヒドロキシ化合物を、少なくとも1つの酸無水物と反応させること、

(D) 少なくとも1つのポリアミン化合物を、少なくとも1つの酸無水物と反応させること、

からなる群から選択される、請求項1または2に記載の化合物の製造のための方法。

【請求項4】

請求項1または2に記載の化合物を含む水性組成物。

【請求項5】

重量パーセントが水性組成物の全重量に関する下記組成物を有する、請求項4に記載の水性組成物。

10

20

30

40

50

【表 1】

成分	重量%
請求項1または2に記載の少なくとも1つの化合物	0.05から30
炭化水素またはシリコーンベースの界面活性剤	0から15
水	100%まで加えられる適量
希釈剤/溶剤	0から95
タンパク質	0から15
皮膚軟化剤/脂肪性物質	0から15
防腐剤	0から5
肌保護成分	0から15
コンディショニング剤	0から15
酸化剤	0から15
還元剤	0から15
タンニン	0から15
金属塩	0から15
染毛剤	0から15
さらなる助剤	0から15

【請求項 6】

請求項 1 または 2 に記載の少なくとも 1 つの化合物、または請求項 4 または 5 に記載の少なくとも 1 つの水性組成物を含む化粧品組成物。

【請求項 7】

ヘアトリートメントで使用するための、請求項 6 に記載の化粧品組成物。

【請求項 8】

ヘアシャンプー組成物、ヘアケア組成物、ヘアコンディショニング組成物、毛髪強化組成物、毛髪着色または染色組成物、毛髪色深化組成物、毛髪 通り性改善組成物、縮れ防止組成物、ヘアリンスオフおよびリーブオン組成物から選択される、請求項 6 に記載の化粧品組成物。

【請求項 9】

請求項 6 に記載の化粧品組成物を提供するステップ、および前記化粧品組成物を毛髪に適用するステップを含む、毛髪のトリートメントのための方法。

【請求項 10】

毛髪のトリートメントのための、請求項 1 または 2 に記載の化合物、または請求項 4 または 5 に記載の水性組成物の使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、ポリカルボン酸化合物、それを含む水性組成物、それを含む化粧品組成物、

特にヘアケア組成物の使用、およびそれらの毛髪トリートメントのための使用、ならびに前記化粧品組成物の使用を含む繊維状アミノ酸ベースの基質、特に毛髪トリートメントのための方法に関する。

【背景技術】

【0002】

毛髪は一般的にまっすぐ、波状、カールし、ねじれ、またはよじれていることがあり得る。ヒトの毛髪には、キューティクル（いくつかの同心円状の層の薄い最も外側のシェル）、皮質（髪の本体）、およびより大きな直径の髪の場合は髄質（薄い、中心核）の3つの主要な形態学的構成要素が含まれる。キューティクルおよび皮質は、髪毛の機械的特性、つまり、波状、カール、またはねじれを有する傾向をもたらす。まっすぐな髪毛は円形の断面を持つロッドに似ており、波状の髪毛は楕円形の断面に圧縮されているように見え、カールした髪毛はさらに細長い楕円形の断面に圧縮されているように見え、ねじれた髪毛の断面はさらに平坦でありえる。

10

【0003】

毛髪の主成分は、架橋された α ヘリックスタンパク質ケラチンである。ケラチンは、上皮細胞、例えば、ヒトの皮膚と毛髪、羊毛、羽毛、および爪に特に見られる中間径フィラメントタンパク質である。分子量が約45–60 kDaの α ヘリカルタイプIおよびIIケラチン中間径フィラメントタンパク質（KIF）は、分子量が20–30 kDaのケラチン関連タンパク質（KAP）のアモルファスマトリックスに埋め込まれており（M.A. Rogers, L. Langbein, S. Praetzel-Wunder, H. Winter, J. Schweizer, J. Int Rev Cytol. 2006;251:209-6）、シスチンによって提供される分子内および分子間ジスルフィド結合の両方が、細胞骨格を維持する細胞骨格タンパク質ネットワークに寄与する。ジスルフィド架橋に加えて、毛髪タンパク質に見られるさまざまなアミノ酸を対にするイオン結合または塩橋が、髪毛の外向きの形状に寄与する。

20

【0004】

毛髪は、コンディショニング、輝き、およびUV保護ならびに色の保持などの1つまたは複数の美容上の利点を提供する官能化シリコーンで処理できることが当技術分野で知られている。通常、これらのシリコーンは繊維表面（キューティクル）に物理的に付着しており、したがって毛髪の外観の原因となる。それらは、繰り返しの洗浄プロセスによって部分的または完全に除去され得る。付着したシリコーンは、毛髪の表面特性、すなわち滑らかさと摩擦を大幅に改善するが、それらは繊維の形状、機械的特性およびリリース特性に大きく影響を与えることはない。

30

【0005】

代替のヘアトリートメント方法が利用可能であるが、これらはしばしば不快で規制された物質の使用を伴う。

【0006】

伝統的には、永久的な毛髪の成形および毛髪矯正のためのアルデヒドに基づく製剤が開発されていた。このいわゆるブラジリアンケラチン成形法には、最も頻繁にホルムアルデヒドが使用される（US 2012-0031420）。その根本原理は、ホルムアルデヒドとケラチンベースのアミノ基とアミド基の間の架橋反応（H. Puchtler, Histochemistry, 82(1985), pp. 201-204）、またはホルムアルデヒドと-SH基の間の架橋反応（US 2009-0211593）である。

40

【0007】

グリセロール、脂肪酸、およびコハク酸をベースにした混合エステルは、食品関連用途の乳化剤として広く使用されている（JP 2017176006、JP 2013051916、JP 2008011739、JP 2006075137、WO 2014077385）。グリセロール、脂肪酸、およびコハク酸をベースにしたこれらの混合エステルはまた、潤滑剤として提案されている（GB 635708、DE 2904164）。それらは、化粧品配合物中の乳化剤としても知られている（CN 104069033、WO 9410971、EP 650717、US 5489429、EP 2363387）。

50

【0008】

グリセロール、フタル酸またはテレフタル酸およびコハク酸をベースにした混合エステルは、電気絶縁用の架橋ポリマーを生成する（US 1098766、GB 1427057）。

【0009】

アルキル／アルケニルコハク酸およびグリセロールをベースにした界面活性エステルは、潤滑剤（FR 1370420）、洗浄配合物（SU 187917）、防錆剤（GB 429915）、繊維コーティング（GB 766273）の添加剤として使用される。

【0010】

グリセロール1, 2, 3-トリス（メチルコハク酸塩）は、インスリン刺激剤として知られている（L. Ladriere et al, Molecular to Cellular Biochemistry (1999), 198 (1&2), 35-139; L. Ladriere et al, Medical Science Research (1999), 27(5), 303-304; L. Ladriere et al, Molecular Genetics and Metabolism (1999), 67(3), 254-260）。

10

【0011】

エトキシ化グリセロールおよびコハク酸のエステルは、GB 313892に記載されている。

【0012】

グリセロール-コハク酸エステルは、GB 755321、GB 474630、GB 358491に記載されている。これは写真（GB 429915）および農薬製剤（JP 57154101）で利用できる。

20

【0013】

制御された送達目的のための超分岐グリセロール-コハク酸コポリマーも記載されている（T. Zhang et al, Abstracts 44th Central Regional Meeting of the American Chemical Society, Mount Pleasant, MI, May 15-17 (2013), CERM-6; N. R. Luman et al, Chemistry - A European Journal (2003), 9(22), 5618-5626; G. P. Andrews et al, ACS Symposium Series (2003), 834 8NMR Spectroscopy of Polymers in Solution and in the solidstate), 216-227）。

【0014】

中間体としてグリセロール-コハク酸コポリマーを使用する複合材料も記載されている（S. Hirose, Pacificchem 2010, Int. Chem Congr. of the Pacific Basin Soc., Honolulu, HI, December 15-20 (2010), AGRO 56; A. H. Fawcett et al, J. Pol. Sci., Part A: Polymer Chemistry (1994), 32(5), 815-827）。

30

【0015】

グリセロールおよびジアセチル酒石酸のエステルは、食品添加物として知られている（WO 2017071663、JP 2017063619、CN 105815536、TW 2011143630、JPH 07170904）。

これらのジアセチル酒石酸グリセロールエステルは、カプセル化（CN 106490571）および可塑剤配合物（CN 104892976）でも知られている。

酒石酸と脂肪酸およびグリセロールの混合エステルは、食品添加物としても知られている（JP 2009273441、GB 924050、GB 1087783、GB 881714）。

40

それらはまた、他の用途、すなわち、樹脂（KR 20040054557）、仕上げ（JPH 04353600、GB 388367）、アルキド配合物（GB 954086、GB 498818）、潤滑剤（GB 643025）、写真（GB 577998）、化粧品（EP 2363387）に提案されている。

酒石酸グリセロールエステルは、すなわち、樹脂（GB 320041、GB 479905）、繊維の修飾（GB 497846、GB 541047）、または乳化剤の中間体（WO 2010017651）として提案された。

【0016】

50

化粧品用途向けの Si-O-C 結合シリコーン-アミノ酸縮合物は、JP 2001114647 および US 5854319 に記載されている。

DE 10036522 および DE 10036532 は、 Si-C 結合アミノ酸修飾シリコーンを記載している。

WO 2012084826 および US 6664342 は、アスパラギン酸修飾シリコーンを記載している。

JP 2004269459 は、環状アミノ酸構造を有するアスパラギン酸修飾シリコーン誘導体について記載している。

【0017】

繊維状アミノ酸ベースの基質、特に毛髪処理用の効果的な化合物であって、簡単に費用効果の高い方法で合成でき、配合が容易でそして使用が容易であり、他の性能成分の存在下でも長期的に安定した配合物が得られ、そして毛髪の強化、毛髪の色保持、毛髪の色強化、毛髪の色深化、毛髪の色保護、毛髪成形、すなわち、毛髪のカールと矯正、毛髪コンディショニング、毛髪の滑らかさまたは柔らかさ、毛髪矯正、そして毛髪の扱いやすさの改善、特に毛髪の通り性の改善のために有用である化合物の必要性が存在する。特に、強い刺激性の助剤を使用せずに人工的な毛髪の色保持に関する利点を達成する必要がある。

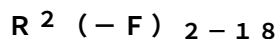
【0018】

本発明者らは、新規なポリカルボン酸化合物およびそれを含む水性組成物が上記の必要性を満たすのに適していることを見出した。したがって、本発明は、新規なポリカルボン酸化合物、それを含む水性組成物、それを含む化粧品組成物、特にヘアケア組成物、およびそれらの毛髪トリートメントへの使用、および前記化粧品組成物の使用を含む毛髪トリートメントの方法を提供し、該ポリカルボン酸化合物は、簡単に費用効果の高い方法で合成でき、配合および使用が容易であり、そして毛髪の強化、毛髪の色保持、毛髪の色増大、毛髪の色深化、毛髪の色保護、毛髪成形、すなわち毛髪のカールと矯正、ヘアコンディショニング、毛髪の滑らかさまたは柔らかかにすること、毛髪矯正、そして毛髪の扱いやすさの改善、特に毛髪の通り性の改善に有用である。特に、新規のポリカルボン酸化合物およびそれを含む水性組成物は、強い刺激性の助剤の使用を回避する。

【発明の概要】

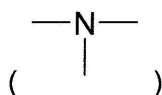
【0019】

本発明によれば、下記式の化合物およびその塩が提供され、



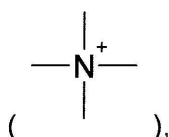
ここで R^2 は、二価から十八価の、任意選択で置換された炭化水素ラジカルであって、最大 100 個の炭素原子を有し、そして $-\text{O}-$ 、 $-\text{NH}-$ 、 $-\text{C}(\text{O})-$ 、 $-\text{C}(\text{S})-$ 、3 級アミノ基

【化 1】



および 4 級アンモニウム基

【化 2】



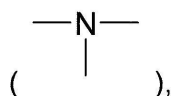
から選択される 1 つまたは複数の基を任意選択で含み得るものから選択され、そして F は、

$-\text{O}-\text{C}(\text{O})-\text{R}^3-\text{C}(\text{O})\text{OH}$ 、および

—NR¹—C(O)—R³—C(O)OHから選択され、
基FはR²の炭素原子に結合し
ここで

R¹は、水素、または任意選択で置換された直鎖状、環状または分岐状の、飽和、不飽和
または芳香族の炭化水素ラジカルであって、最大100個の炭素原子を有し、そして—O—
—NH—、—C(O)—、—C(S)—、3級アミノ基

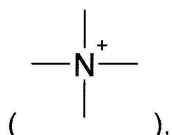
【化3】



10

および4級アンモニウム基

【化4】

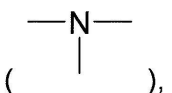


から選択される1つまたは複数の基を任意選択で含むものから選択され、

R³は、単結合、または任意選択で置換された直鎖状、環状または分岐状の、飽和、不飽
和または芳香族の炭化水素ラジカルであって、最大100個の炭素原子を有し、—O—、
—NH—、—C(O)—、—C(S)—、3級アミノ基

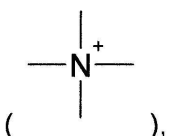
20

【化5】



および4級アンモニウム基

【化6】



30

から選択される1つまたは複数の基を任意選択で含むものから選択され、

但しR³は—C=C—ではないという条件である。

【0020】

本発明の化合物は、毛髪のカラートリートメントに特に有用であり、これは好ましくは
、毛髪の着色または毛髪の色を含むすべての種類の処理、例えば、ヘアカラーの適用、ヘ
アカラー深化、増大または保護、ヘアカラーの保持などを含む。本発明の化合物は、以下
でより詳細に概説されるように、特に毛髪の形状処理にも有用であり、これは、毛髪の形
状に影響を与えるあらゆる種類の処理、特に、毛髪の強化、毛髪矯正、毛髪カール、一般
に毛髪の取り扱いの改善を意味する。

40

【0021】

本発明の化合物の塩は、例えば、アルカリ金属塩、例えば、ナトリウムまたはカリウム
塩、アルカリ土類金属塩、例えば、カルシウム、マグネシウムまたはストロンチウム塩、
またはアルミニウムまたは亜鉛塩、あるいはアンモニウムに由来する、または1から20個
の炭素原子を有する有機1級、2級または3級アミン、例えば、エチルアミン、ジエチル
アミン、トリエチルアミン、エチルジイソプロピルアミン、モノエタノールアミン、ジエ
タノールアミン、トリエタノールアミン、ジシクロヘキシルアミン、ジメチルアミノエタ

50

ノール、ジエチルアミノエタノール、トリス（ヒドロキシメチル）アミノメタン、プロカイン、ジベンジルアミン、N-メチルモルホリン、アルギニン、リジン、1,2-エチレンジアミン、N-メチルピペリジン、N-メチル-グルカミン、N,N-ジメチル-グルカミン、N-エチル-グルカミン、1,6-ヘキサンジアミン、グルコサミン、サルコシン、セリノール、2-アミノ-1,3-プロパンジオール、3-アミノ-1,2-プロパンジオール、4-アミノ-1,2,3-ブタントリオールに由来するアンモニウム塩、または、1から20個の炭素原子を有する4級アンモニウムイオン、例えばテトラメチルアンモニウム、テトラエチルアンモニウム、テトラ（n-プロピル）アンモニウム、テトラ（n-ブチル）アンモニウム、N-ベンジル-N,N-トリメチルアンモニウム、コリンまたはベンザルコニウムを有する塩を含み得る。本発明の化合物の塩は、特に、様々な既知の方法を介して本発明の化合物を適切な塩基と反応させることによって調製することができる。

10

【0022】

基Fは、

*-O-C(O)-R³-C(O)OH、および

*-NR¹-C(O)-R³-C(O)OH

から選択される式のものであり、

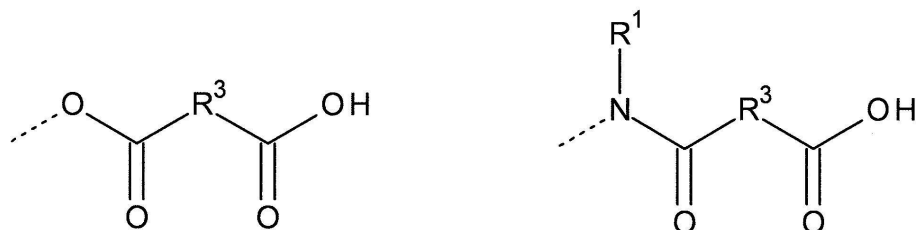
ここでアスタリスクで記された結合は、R²の炭素原子に結合する。

【0023】

基Fは、次のように表すこともでき

20

【化7】



ここで点線はR²の炭素原子に結合する。

30

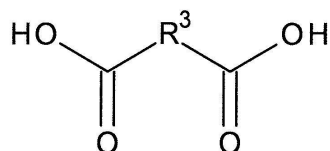
【0024】

好ましい基Fは、*-O-C(O)-R³-C(O)OHである。

【0025】

R³が不斉構造を有する場合、基礎となるジカルボン酸が

【化8】



40

部分R²をもたらす化合物と反応する場合、2つの異性体が形成され得、そしてそのような異性体は、それらが明示的に言及されていなくても、本発明の範囲に含まれる。

【0026】

本発明の好ましい実施形態では、基R¹、R²およびR³の任意選択の置換基は、ヒドロキシル、アミノおよびハロゲン、好ましくはヒドロキシルおよびアミノからなる群から選択され、そして置換基の数は最大5、好ましくは1から4であり得る。

【0027】

本発明の好ましい実施形態では、R¹は、水素、n-、イソ-、またはtert.-C₁-C₂₂-アルキル、C₂-C₂₂-アルコキシアルキル、C₅-C₃₀-シクロアルキル、C₆-C₃₀-アリール、C₆-C₃₀-アリール（C₁-C₆）アルキル、C₆-C₃₀

50

ーアルキルアリアル、 C_2-C_{22} ーアルケニル、 C_2-C_{22} ーアルケニルオキシアルキルであって、任意にてそれぞれヒドロキシルおよびハロゲンで置換することができ、そして任意にて1つまたは複数のエーテル基(ーOー)を含み得るもの、好ましくは水素または n ー、イソー、またはtert.ー C_1-C_{22} ーアルキルからなる群から選択される。最も好ましい R^1 は水素である。

【0028】

本発明の好ましい実施形態では、 R^2 は、二価から十価、より好ましくは二価から六価、さらにより好ましくは二価の、好ましくは脂肪族の炭化水素ラジカルであって、2から30個の炭素原子、より好ましくは2から20個の炭素原子、さらにより好ましくは2から15個の炭素原子を有し、そして任意にて、ーOー、ーNHー、ーC(O)ー、ーC(S)ーから選択される1つまたは複数の基を含み得るものから選択され、ここで R^2 は、任意にて1つまたは複数のヒドロキシル基で置換され得る。

10

【0029】

本発明の好ましい実施形態では、 R^2 は、2から18、好ましくは2から12、より好ましくは2から10、さらにより好ましくは2から8、例えば2から6、具体的には2または3または4の原子価を有する。

【0030】

本発明の好ましい実施形態では、 R^2 は、

ー 二価から十八価、好ましくは二価から六価のヒドロカルビル基、より好ましくは二価のヒドロカルビル基であって、アルカンジエー、トリーおよびテトラオール、例えば、1,6ヘキサンジオール、トリメチロールプロパン、およびペンタエリスリトールなどの3つより多い炭素原子を有する脂肪族ポリオールに由来するもの、

20

ー 二価から十八価、好ましくは二価から六価のヒドロカルビル基、より好ましくは二価のヒドロカルビル基であって、少なくとも1つのエーテル基を含み、そして任意にて1つまたは複数のヒドロキシル置換基を有し、エチレンオキシド、プロピレンオキシド、および／またはブチレンオキシドベースのポリエーテルなどのポリアルキレンオキシドに由来する、例えば、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、テトラエチレングリコール、およびペンタエチレングリコールなどのポリエチレングリコールに由来する、またはジプロピレングリコール(例えば、2,2'ーオキシジエー1ープロパノール、1,1'ーオキシジエー2ープロパノール、および2-(2ーヒドロキシプロポキシ)ー1ープロパノールに由来する)、トリプロピレングリコール、テトラプロピレングリコール、ペンタプロピレングリコールなどのようなポリプロピレングリコールに由来する、混合エチレンオキシドおよびブチレンオキシドベースのコポリエーテルに由来する、混合プロピレンオキシドおよびブチレンオキシドベースのコポリエーテルに由来する、および混合エチレンオキシドおよびプロピレンオキシドおよびブチレンオキシドベースのコポリエーテルに由来するもの、

30

ー 二価から十八価、好ましくは二価から六価のヒドロカルビル基、より好ましくは二価のヒドロカルビル基であって、任意にて少なくとも1つのエーテル基を含み、そして任意にて1つまたは複数のヒドロキシル置換基を有し、ジグリセロール、トリグリセロール、テトラグリセロール、ペンタグリセロール、ヘキサグリセロール、およびグリセロールの統計的に分布したオリゴマー縮合生成物などのオリゴグリセロールに由来するもの、

40

ー 二価から十八価、好ましくは二価から六価のヒドロカルビル基、より好ましくは二価のヒドロカルビル基であって、ジグリシジルエーテル、グリセロールジグリシジルエーテル、およびグリセロールトリグリシジルエーテルなどの少なくとも1つのグリシドキシ基を含む化合物に由来するもの、

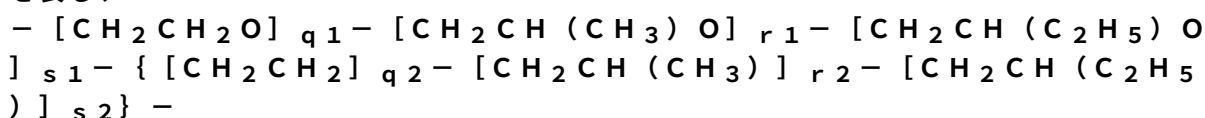
ー 二価から十八価、好ましくは二価から六価のヒドロカルビル基、より好ましくは二価のヒドロカルビル基であって、少なくとも1つのエーテル基を含み、そして任意にて1つまたは複数のヒドロキシル置換基を有し、ポリオールアルキレンオキシド付加生成物、例えば、エチレングリコール、1,2プロピレングリコール、グリセロール、トリメチロールプロパン、ペンタエリスリトール、ソルビトール、およびスクロースなどのポリオール

50

へのエチレンオキシドおよび／またはプロピレンオキシドの付加生成物に由来するもの、
 ー 二価から十八価、好ましくは二価から六価のヒドロカルビル基、より好ましくは二価のヒドロカルビル基であって、少なくとも1つのエーテル基を含み、そして任意にて1つまたは複数のヒドロキシルおよび／またはアミノ置換基を有し、ポリアミンアルキレンオキシド付加生成物、例えば、エチレンジアミン、ジエチレントリアミンへのエチレンオキシドおよび／またはプロピレンオキシドの付加生成物に由来する、またはエタノールアミンのアルキレンオキシド付加生成物に由来するもの、

ー 二価から十八価、好ましくは二価から六価のヒドロカルビル基、より好ましくは二価のヒドロカルビル基であって、少なくとも1つのエステル基を含み、そして1つまたは複数のヒドロキシル置換基を有し、例えば、ポリエステルに由来する、好ましくは二価から六価のカルボン酸、例えばマレイン酸、コハク酸、アジピン酸、セバシン酸、イタコン酸、酒石酸、トリメリット酸の、エチレンオキシド、プロピレンオキシド、ブチレンオキシド、およびグリシドール、ジグリシジルエーテル、グリセロールジグリシジルエーテル、グリセロールトリグリシジルエーテルなどの少なくとも1つのグリシドキシ基を含む化合物などのアルキレンオキシドへの縮合、特に、コハク酸、マレイン酸および酒石酸のグリセロールジグリシジルエーテルへの縮合生成物に由来するもの、

ー さらに、 R^2 は、好ましくはポリアルキレンオキシ基、好ましくは下記一般式のものを表し、



ここで

$q1 = 0$ から 49 、好ましくは 0 から 10 、より好ましくは 1 から 10 、さらにより好ましくは 1 から 5 、

$r1 = 0$ から 32 、好ましくは 0 から 10 、より好ましくは 1 から 10 、さらにより好ましくは 1 から 5 、

$s1 = 0$ から 24 、好ましくは 0 から 10 、より好ましくは 1 から 10 、さらにより好ましくは 1 から 5 、

$q2 = 0$ または 1 、

$r2 = 0$ または 1 、

$s2 = 0$ または 1 、そして

$$\Sigma (q2 + r2 + s2) = 1、$$

但しそのようなポリアルキレンオキシド基の炭素原子の合計は 2 から 100 、好ましくは 2 から 50 、より好ましくは 2 から 30 、さらにより好ましくは 2 から 20 、具体的には 2 から 15 である、

ー 下記一般式のオリゴグリセロールに由来する二価ヒドロカルビル基、



ここで

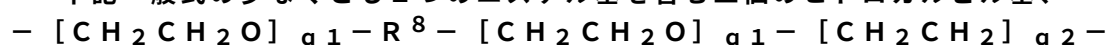
$t1 = 0$ から 32 、好ましくは 0 から 10 、より好ましくは 1 から 10 、さらにより好ましくは 1 から 5 、具体的には 1 および 2 、

$t2 = 1$ 、

$R^7 = OH$ または F 、ここで F は上記で定義されたとおりであり、好ましくは $-O-C(O)-R^3-C(O)-OH$ であり、

但し炭素原子の合計は 2 から 100 、好ましくは 2 から 50 、より好ましくは 2 から 30 、さらにより好ましくは 2 から 20 、具体的には 2 から 15 である、および

ー 下記一般式の少なくとも1つのエステル基を含む二価のヒドロカルビル基、



ここで $q1$ は同じでも異なってもよく、そして上記で定義されたとおりであり、そして $q2 = 1$ 、

および

$\text{— [CH}_2\text{CH (R}^7\text{) CH}_2\text{O] }_{t1}\text{—R}^8\text{— [CH}_2\text{CH (R}^7\text{) CH}_2\text{O] }_{t1}\text{— [CH}_2\text{CH (R}^7\text{) CH}_2\text{)] }_{t2}\text{—}$

ここで $t1$ 、 $t2$ 、および R^7 は上記で定義されたとおりであり、そして

R^8 は、 —C (O) C (O) O— 、 $\text{—C (O) (CH}_2\text{)}_{1-8}\text{C (O) O—}$ 、例えばコハク酸、アジピン酸、セバシン酸に由来するもの、または $\text{—C (O) (CH}_2\text{)}_{1-8}\text{C (O) O—}$ 、即ち、フタルおよびテレフタル酸に由来するもの、 $\text{—C (O) CH=CHC (O) O—}$ 、 $\text{—C (O) C (=CH}_2\text{) —CH}_2\text{C (O) O—}$ 、 $\text{—C (O) CH (OH) CH (OH) C (O) O—}$ から選択され、

但し R^2 の炭素原子の合計は 2 から 100、好ましくは 2 から 50、より好ましくは 2 から 30、さらにより好ましくは 2 から 20、具体的には 2 から 15 であるという条件である、

からなる群から選択される。

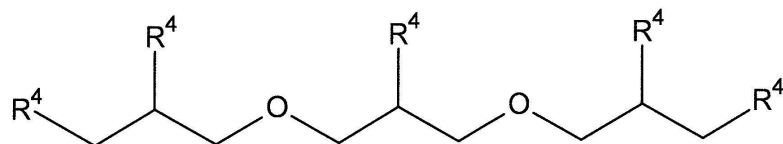
【0031】

本発明の好ましい実施形態では、 R^2 は、1 から 5 などの 1 つまたは複数の基 —O— を含む。これらの基 —O— は好ましくはエーテル基であるが、カルボニル基と一緒にエステル基を形成することもできる。好ましくは、これらの基 R^2 は、1 つまたは複数のヒドロキシル基で置換されている。

【0032】

本発明の好ましい実施形態では、本発明による化合物は下記式を有し、

【化9】

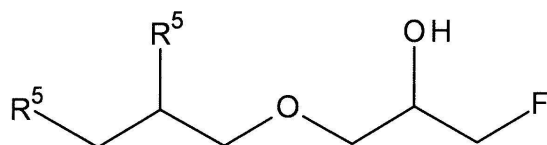


ここで R^4 は、ヒドロキシまたは F からなる群から選択され、ここで F は上記で定義されたとおりであり、但し R^4 の少なくとも 2 つが F であるという条件である。

【0033】

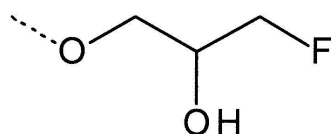
本発明の好ましい実施形態では、本発明による化合物は、下記式を有し、

【化10】



ここで R^5 の 1 つはヒドロキシであり、そして R^5 の 1 つは下記式の基であり、

【化11】



そしてここで F は上記で定義されたとおりであり、点線は炭素原子への結合である。

【0034】

本発明の好ましい実施形態では、本発明による化合物は、以下の 2 つの異性体の混合物であり、

10

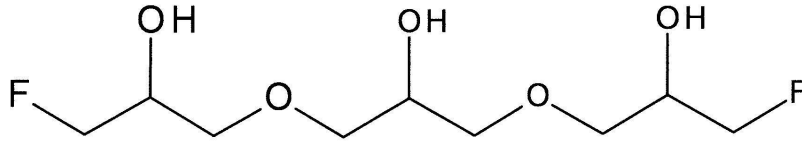
20

30

40

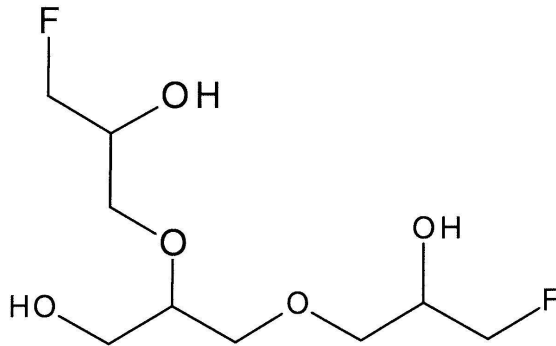
50

【化 1 2】



および

【化 1 3】



10

ここで F は上記で定義されたとおりである。

20

【0035】

本発明によるグリセロール部分含有化合物の前駆体の例は、グリシジル官能性 Denacol タイプ EX-313、EX-314、EX-421、EX 512、EX 521 (Nagase) である。

【0036】

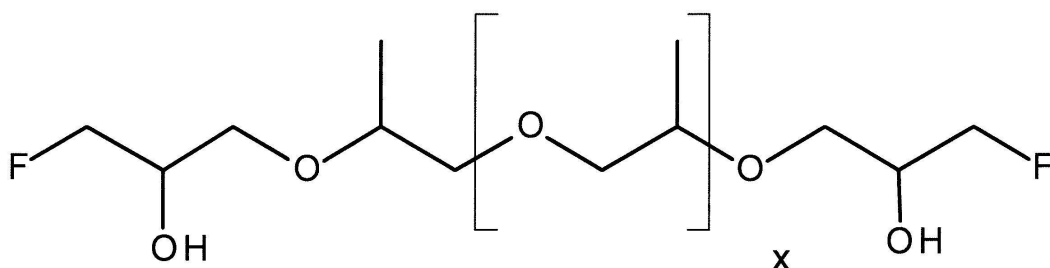
本発明によるトリメチロールプロパン、ペンタエリスロールおよびネオペンチルグリコール部分含有化合物の前駆体の例は、グリシジル官能性 Denacol タイプ EX-321、EX-411 および EX-211 (Nagase) である。

【0037】

本発明の好ましい実施形態において、本発明による化合物は、以下の式を有し、

30

【化 1 4】



40

ここで x は 1 から 10、好ましくは 1 から 5 であり、そして F は上記で定義されたとおりである。

【0038】

本発明によるプロピレングリコール部分含有化合物の前駆体の例は、グリシジル官能性 Denacol タイプ EX-920、EX-921 (Nagase) である。

【0039】

本発明によるエチレングリコール部分含有化合物の前駆体の例は、グリシジル官能性 Denacol タイプ EX-821、EX-830、EX-832、EX-841、EX-850、EX-851、EX-861 (Nagase) である。

【0040】

50

本発明の好ましい実施形態において、 R^3 は、単結合、および直鎖状、環状または分岐状の、飽和、不飽和または芳香族炭化水素ラジカルであって、最大18個、好ましくは最大12個、より好ましくは最大10個の炭素原子を有し、そして $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-C(O)-$ から選択された1つまたは複数の基を任意選択で含むものからなる群から選択され、そしてここで R^3 は、ヒドロキシル基、アミノ基、およびカルボキシ基から選択される1つまたは複数の基によって任意選択で置換される。

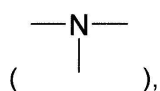
【0041】

R^3 が芳香族炭化水素ラジカルである場合、好ましくはそれはヒドロキシル置換基を有さず、より好ましくは R^3 は非置換炭化水素ラジカルである。

【0042】

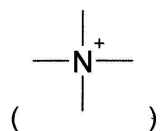
好ましくは、 R^3 は、脂肪族基、すなわち、任意選択で置換された直鎖状、環状または分岐状の、飽和または不飽和炭化水素ラジカルであって、最大100個の炭素原子を有し、 $-O-$ 、 $-NH-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(S)-$ 、3級アミノ基

【化15】



および4級アンモニウム基

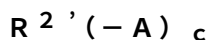
【化16】



から選択される1つまたは複数の基を任意選択で含むものから選択され、但し R^3 は $-CH=CH-$ ではないという条件である。

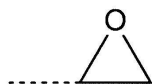
【0043】

本発明の好ましい実施形態では、 R^3 はジカルボン酸に由来する。本明細書および本発明の文脈において、「に由来する」とは、特に、それらの化合物を反応させて本発明の化合物に到達することによって化合物から形式的に形成される残基を意味するものとする。例えば、 R^3 がジカルボン酸に由来する実施形態を考慮すると、そのような場合、ジカルボン酸に由来する R^3 は、例えば、下記式のポリオールまたはポリエポキシドまたはポリアミンの



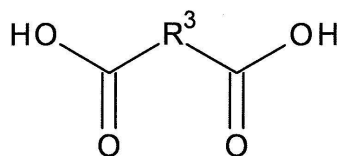
ここでAは、OHおよび／またはエポキシ基および／またはアミノ基、好ましくはOHおよび／またはエポキシ基、好ましくは下記式のエポキシ基であり、

【化17】



そしてここで $c = 2$ から18、好ましくは $c = 2$ から10、より好ましくは $c = 2$ から8、より好ましくは $c = 2$ から4であり、ジカルボン酸との反応により

【化18】



10

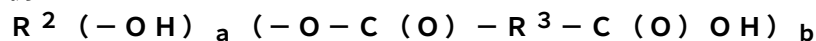
20

30

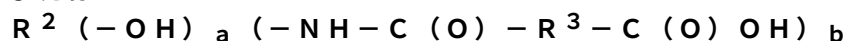
40

50

例えば、



または



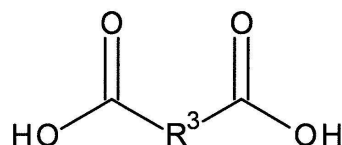
ここで $b \geq 2$ および $a + b = 2$ から 18、好ましくは $b = 2$ から 6、より好ましくは $b = 2$ から 4、より好ましくは $b = 2$ 、および $a + b$ = 好ましくは 2 から 8、より好ましくは $a + b = 2$ から 6 である、

を形成することに起因する。

【0044】

本発明の好ましい実施形態では、 R^3 は、以下の式のジカルボン酸に由来し、

【化19】



ここで R^3 は上記で定義されたとおりであり、例えば任意選択で置換された脂肪族、飽和または不飽和または芳香族ジカルボン酸、例えば、シュウ酸（エタン二酸）、マロン酸（プロパン二酸）、コハク酸（ブタン二酸）、グルタル酸（ペンタン二酸）、アジピン酸（ヘキサン二酸）、ピメリン酸（ヘプタン二酸）、スベリン酸（オクタン二酸）、アゼライン酸（ノナン二酸）、セバシン酸（デカン二酸）、ウンデカン二酸、ドデカン二酸、ブラシル酸（トリデカン二酸）、タプシン酸（ヘキサデカン二酸）、グルタコン酸（ペント-2-エン二酸）、シトラコン酸（(2Z)-2-メチルブト-2-エン二酸）、メサコン酸（(2E)-2-メチル-2-ブテン二酸）、イタコン酸（2-メチリデンブタン二酸）、タルトロン酸（2-ヒドロキシプロパン二酸）、メソキサリン酸（オキソプロパン二酸）、リンゴ酸（ヒドロキシブタン二酸）、酒石酸（2,3-ジヒドロキシブタン二酸）、オキサロ酢酸（オキソブタン二酸）、アスパラギン酸（2-アミノブタン二酸）、 α -ヒドロキシグルタル酸（2-ヒドロキシペンタン二酸）、アラビナリン酸（2,3,4-トリヒドロキシペンタン二酸）、アセトンジカルボン酸（3-オキソペンタン二酸）、 α -ケトグルタル酸（2-オキソペンタン二酸）、グルタミン酸（2-アミノペンタン二酸）、ジアミノピメリン酸（(2R,6S)-2,6-ジアミノヘプタン二酸）、サッカリン酸（(2S,3S,4S,5R)-2,3,4,5-テトラヒドロキシヘキサン二酸）、フタル酸（ベンゼン-1,2-ジカルボン酸）、イソフタル酸（ベンゼン-1,3-ジカルボン酸）、テレフタル酸（ベンゼン-1,4-ジカルボン酸）、ジフェン酸（2-(2-カルボキシフェニル)安息香酸）、2,6-ナフタレンジカルボン酸、ノルボルネンジカルボン酸、ノルボルナンジカルボン酸、およびトリメリット酸に由来し、または R^3 は脂肪族または芳香族トリカルボン酸に由来し、ここで R^3 はカルボキシル基（COOH）で置換されており、例えば、クエン酸（2-ヒドロキシプロパン-1,2,3-トリカルボン酸）、イソクエン酸（1-ヒドロキシプロパン-1,2,3-トリカルボン酸）、アコニット酸（(シスまたはトランス)プロブ-1-エン-1,2,3-トリカルボン酸）、プロパン-1,2,3-トリカルボン酸；トリメシン酸（ベンゼン-1,3,5-トリカルボン酸）に由来する。好ましいジカルボン酸には、コハク酸、アジピン酸、イタコン酸、酒石酸、無水マレイン酸や無水コハク酸などのカルボン酸無水物と、 β -アラニンやアスパラギンなどのアミノ酸およびアミノ酸誘導体との反応生成物、すなわち、N-アセチルアスパラギン酸、N-マレオイル- β -アラニン（(E)-4-(2-カルボキシエチルアミノ)-4-オキソブト-2-エン酸）、N-マレオイル-アスパラギン（4-アミノ-2-[[(E)-4-ヒドロキシ-4-オキソブト-2-エノイル] アミノ]-4-オキソブタン酸）などが含まれる。上記のように、不斉ジカルボン酸は異性体の形成をもたらすことがあり得、これらはすべて本発明の範囲に含まれる。

10

20

30

40

50

【0045】

毛髪の色を深化に最も好ましいのは、コハク酸および酒石酸である。髪の色を保持（より低い色の損失値）に最も好ましいのは、コハク酸、酒石酸、N-アセチルアスパラギン酸およびN-マレオイル-β-アラニン（（E）-4-（2-カルボキシエチルアミノ）-4-オキソブト-2-エン酸である。

【0046】

また、コハク酸無水物、イタコン酸無水物などのようなジカルボン酸の無水物を使用して、例えば、上記で定義した式 $R^{2'}(-A)_c$ のヒドロキシルおよび／またはアミノ官能性化合物と反応させることができる。

【0047】

本発明の好ましい実施形態では、Fは、以下の式からなる群から選択され、

10

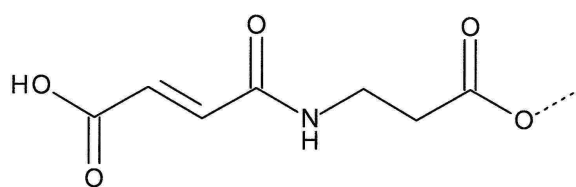
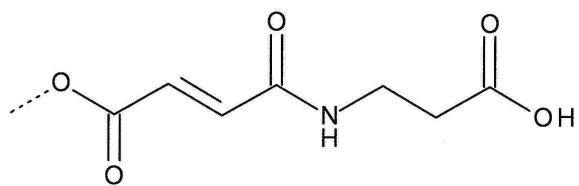
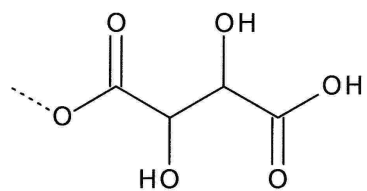
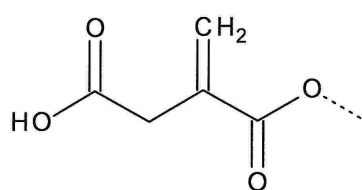
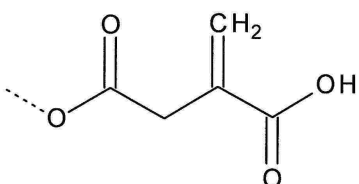
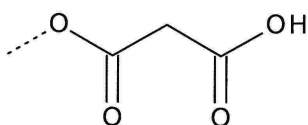
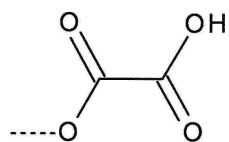
20

30

40

50

【化 20】



10

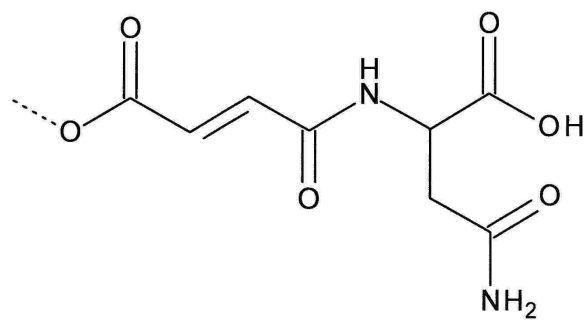
20

30

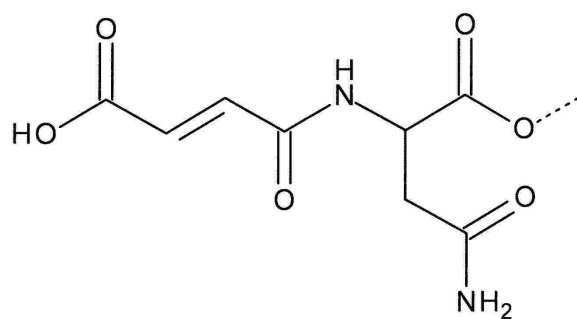
40

50

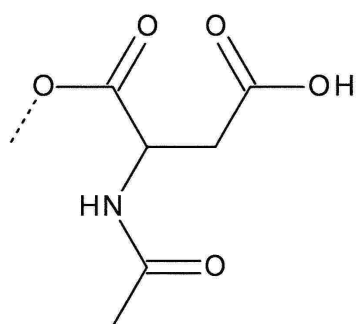
【化 2 1】



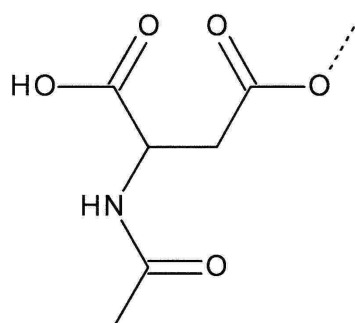
10



20



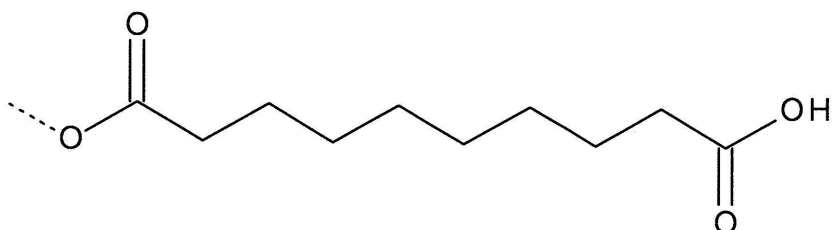
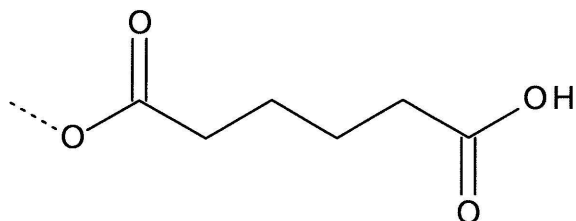
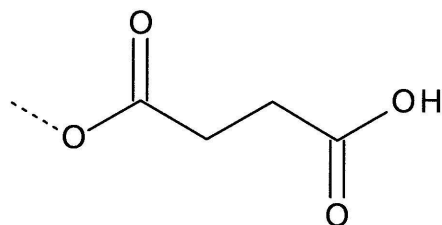
30



40

50

【化 2 2】



ここで上記の式の点線は酸素原子への結合を表し、そしてここで少なくとも2つの基Fが存在する。

【0048】

本発明のさらに好ましい実施形態において、 R^2 は、単糖、二糖、オリゴ糖、および多糖などの炭水化物（糖）、または糖アルコールに由来しない。炭水化物または糖類は、炭素（C）、水素（H）、および酸素（O）原子で構成される生体分子であり、通常、水素－酸素の原子比は2：1（水のように）であり、したがって実験式 $C_m(H_2O)_n$ （ m は n とは異なり得る）を有する。それらはまた、デオキシリボースを含み、そして構造的に、特にアルドースおよびケトースを含み、これらに由来する残基は、したがって、好ましくは R^2 から除外される。糖アルコール（多価アルコール、ポリアルコール、アルジトールまたはグリシトールとも呼ばれる）は、典型的にはポリオールクラスを含む糖に由来する有機化合物であり、一般に、例えば、エチレングリコール、グリセロール、エリスリトール、トレイトール、アラビトール、キシリトール、リビトール、マンニトール、ソルビトール、ガラクトール、フシトール、イジトール、イノシトールなどを含む。（例えば以下を参照：https://en.wikipedia.org/wiki/Sugar_alcohol）。特に、エチレングリコールおよびグリセロールに由来する R^2 は、好ましくは除外される。

【0049】

本発明のさらなる実施形態は、本発明による化合物の製造のための方法に関し、この方法は、以下のプロセス

(A) 少なくとも1つのジカルボン酸またはトリカルボン酸化合物と、1つまたは複数のヒドロキシル基を任意選択で有し得る少なくとも2つのエポキシ基を有する少なくとも1つの化合物と反応させること、

(B) 少なくとも1つのジカルボン酸またはトリカルボン酸化合物と、1つまたは複数のヒドロキシル基を任意選択で有し得る少なくとも1つのエポキシ基を有する少なくとも1つの化合物を反応させ、続いて反応生成物を少なくとも1つの酸無水物との反応に供すること、

10

20

30

40

50

(C) 少なくとも1つの酸無水物と、少なくとも1つのポリヒドロキシ化合物を反応させること、

(D) 少なくとも1つの酸無水物と、少なくとも1つのポリアミン化合物を反応させること、

からなる群から選択される。

【0050】

本発明のさらなる実施形態は、本発明による1つまたは複数の化合物を含む水性組成物に関する。

【0051】

本発明による水性組成物の好ましい実施形態では、それは少なくとも1つの界面活性剤を含む。本発明による水性組成物のさらに好ましい実施形態において、それは、金属塩、好ましくは、 Zn^{2+} 、 Fe^{2+} および／または Fe^{3+} 塩を含む。

【0052】

本発明による水性組成物の好ましい実施形態において、本発明による化合物に対する前記界面活性剤および／または金属塩の重量比は、少なくとも0.06であり、より好ましくは0.06から5であり、より好ましくは0.06から3であり、さらにより好ましくは0.1から3であり、具体的には0.1から1である。

【0053】

本発明による水性組成物の好ましい実施形態では、任意選択の界面活性剤は、水性組成物の、約0.05%から約15%、好ましくは約0.05%から約5%、さらにより好ましくは約0.1%から約5%、具体的には0.1から3%の重量の量で存在する。

【0054】

本発明による水性組成物の好ましい実施形態において、それは、水性組成物の重量に基づいて、好ましくは0.05から30%、より好ましくは0.5から30%、より好ましくは1から30%、さらにより好ましくは0.1から20重量%、より好ましくは0.5から15重量%、より好ましくは1から10重量%の本発明による化合物を含む。

【0055】

本発明による水性組成物の好ましい実施形態において、界面活性剤は、カチオン性、非イオン性、ベタインおよびアニオン性界面活性剤から選択され、好ましくは1から20、好ましくは7から20、より好ましくは8から20の範囲のHLB値を有する。

【0056】

より好ましくは界面活性剤は、炭化水素ベースまたはシリコンベースの乳化剤から選択される。

【0057】

カチオン性界面活性剤は、好ましくは、最大50個の炭素原子を有する1級、2級、または3級アミン化合物およびそれらの塩、最大50個の炭素原子を有するアミドアミン化合物およびその塩、例えば、ベヘナミドプロピルジメチルアミンおよび4級アンモニウム化合物であって、そのアルキル基に最大50個の炭素原子、好ましくは最大20個の炭素原子を有するもの、例えば、テトラアルキルアンモニウム化合物、例えば、ヘキサデシルトリメチルアンモニウム塩、ジメチルジオクタデシルアンモニウム塩、ジステアリルジメチルアンモニウム塩、セトリモニウム塩、セチルピリジニウム塩、アルキルベンジルジメチルアンモニウム塩、例えば、ベンザルコニウム塩、ベンゼトニウム塩、少なくとも1つの4級アンモニウム基および少なくとも1つのエステル基を有するエステルクアットから選択される。

【0058】

さらに好ましくは、カチオン性乳化剤の例は、4級アンモニウム基またはアミノ基含有の直鎖状または分岐状のC8からC50、好ましくはC8から40、より好ましくはC8からC30のアルキル、脂肪アルコールおよび脂肪酸ベースの乳化剤、すなわち、1つまたは2つの脂肪酸部分、脂肪アミン、およびエトキシ化／プロポキシ化脂肪アミンを含む脂肪酸ベースのエステルクアットである。

10

20

30

40

50

【0059】

好ましくは、カチオン性界面活性剤は、モノロングアルキルトリショートアルキル4級化アンモニウム塩またはジロングアルキルージショートアルキル4級化アンモニウム塩であり、ここで1つまたは2つのアルキル置換基は、約8から約30個の炭素原子の脂肪族基、または最大約30個の炭素原子を有する芳香族、アルコキシ、ポリオキシアルキレン、アルキルアミド、ヒドロキシアルキル、アリールまたはアルキルアリール基から選択され；他のアルキル基は、約1から約8個の炭素原子の脂肪族基、または最大約8個の炭素原子を有する芳香族、アルコキシ、ポリオキシアルキレン、アルキルアミド、ヒドロキシアルキル、アリールまたはアルキルアリール基から独立して選択され；そして対イオンは、ハロゲン（例えば、塩化物、臭化物）、酢酸塩、クエン酸塩、乳酸塩、グリコレート、リン酸塩、硝酸塩、スルホン酸塩、硫酸塩、アルキル硫酸塩、グルタミン酸塩、およびアルキルスルホン酸塩ラジカルから選択されるものなどの塩形成アニオンである。脂肪族基は、炭素および水素原子に加えて、エーテル結合、およびアミノ基などの他の基を含み得る。より長い鎖の脂肪族基、例えば、約8個以上の炭素のものは、飽和または不飽和であり得る。

10

【0060】

好ましくは、1つのアルキル基は、約8から約30個の炭素原子、より好ましくは約14から約26個の炭素原子、さらにより好ましくは約14から22個の炭素原子のアルキル基から選択され；他のアルキル基は、 $-CH_3$ 、 $-C_2H_5$ 、 $-C_2H_4OH$ 、 $-CH_2C_6H_5$ 、およびそれらの混合物からなる基から独立して選択され；そして対イオンは、 Cl^- 、 Br^- 、 $CH_3OSO_3^-$ 、およびそれらの混合物からなる群から選択される。そのようなモノロングアルキル4級化アンモニウム塩は、それらの乳化能力に加えて、マルチロングアルキル4級化アンモニウム塩と比較して、濡れた毛髪の滑りやすさおよび滑る感触を改善することができると考えられている。また、モノロングアルキル4級化アンモニウム塩は、アミンまたはアミン塩カチオン性界面活性剤と比較して、改善された疎水性および乾燥した毛髪の滑らかな感触を提供できると考えられている。

20

【0061】

そのようなモノロングアルキル4級化アンモニウム塩カチオン性界面活性剤の非限定的な例には、例えば、Clariantから商品名Genamine KDMP、Croda製の商品名INCROQUAT TMC-80、およびSanyo Kaseiから商品名ECONOL TM22で入手可能なベヘニルトリメチルアンモニウムクロリド；例えば、Nikko Chemicalsから商品名CA-2450で入手可能なステアリルトリメチルアンモニウムクロリド；例えば、Nikko Chemicalsから商品名CA-2350で入手可能なセチルトリメチルアンモニウムクロリド；Feixiangから入手可能なベヘニルトリメチルアンモニウムメチルサルフェート；水素化獣脂アルキルトリメチルアンモニウムクロリド；ステアリルジメチルベンジルアンモニウムクロリド；およびステアロイルアミドプロピルジメチルベンジルアンモニウムクロリドが含まれる。

30

【0062】

好ましくは、カチオン性界面活性剤は、アルキル鎖に10から18個の炭素原子を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのモノエステルおよびジエステルクアット（クアット＝4級アンモニウムカチオン含有化合物）である。市販されている例は、Arquad PCSV-60 PGおよびArmocare VGH70 (Akzo Nobel) である。

40

【0063】

カチオン性界面活性剤の詳細は、US 2013/259820に開示されている。

【0064】

本発明の水性組成物は、好ましくは、組成物の、約0.05%から約15%、好ましくは約0.05%から約5%、さらにより好ましくは約0.1%から約5%、具体的には0.1から約3%の重量での量、あるいは0重量%のカチオン性界面活性剤を含む。

【0065】

非イオン性乳化剤の好ましい例は、エチレンオキシド（EO）、プロピレンオキシド（

50

P O) およびブチレンオキシド (B O) 含有の直鎖状または分岐状の C 8 から C 5 0、好ましくは C 8 から 4 0、より好ましくは C 8 から C 2 4 の脂肪アルコールおよび脂肪酸ベースの乳化剤、ならびに糖類ベースの乳化剤、すなわちアルキルグリコシド、アルコキシル化脂肪酸ソルビタンエステルおよび脂肪酸グルカミドである。別の種類の好ましい非イオン性界面活性剤は、半極性アミンオキシド、ホスフィンオキシド、およびスルホキシドである。

【0066】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に 1 0 から 1 8 個の炭素原子および 5 から 8 0 個の E O 単位を有する飽和または不飽和の天然アルコールベースのエトキシレートである。市販の例は、Genapol C、LA、V、O、および T タイプ (Clarissant) である。

10

【0067】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に 1 1 から 1 7 個の炭素原子および 5 から 1 0 0 個の E O 単位を有する直鎖状または分岐状のオキソアルコールベースのエトキシレートである。市販の例は、Genapol UD、OA、OX、X、LCN タイプ (Clarissant) である。

【0068】

好ましい非イオン性界面活性剤は、飽和または不飽和アルコールベースのブロックエトキシレート-プロポキシレートであってアルキル鎖に 1 0 から 1 8 個の炭素原子および 2 から 2 0 個の E O 単位を有するものである。市販の例は、Genapol EP タイプ (Clarissant) である。

20

【0069】

好ましい非イオン性界面活性剤は、5 から 7 0 重量%の E O 単位を含むエトキシレート-プロポキシレートブロックコポリマーである。市販の例は、Genapol PF および PH タイプ (Clarissant) である。

【0070】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に 1 0 から 1 8 個の炭素原子および 5 から 1 0 0 個の E O 単位を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのエトキシレートである。市販の例は、Genagen O および S タイプ (Clarissant) である。

【0071】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に 1 0 から 1 8 個の炭素原子および 5 から 8 0 個の E O 単位を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのヒマシ油エトキシレートである。市販の例は、Emulsogen HCO および EL タイプ (Clarissant) である。

30

【0072】

好ましい非イオン性界面活性剤は、飽和または不飽和の脂肪酸誘導体化オリゴグリセリンである。好ましい例は、脂肪酸誘導体化ジグリセリン、トリグリセリン、またはテトラグリセリン、すなわち、アルキル鎖に 1 0 から 1 8 個の炭素原子を有し、任意にて 5 から 1 0 0 E O 単位を有するジグリセリンのモノエステルまたはジエステルである。市販の例は、Hostacerine タイプ (Clarissant) である。

40

【0073】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に 1 0 から 1 8 個の炭素原子およびソルビタン環に結合した 5 から 5 0 個の E O 単位を有する飽和または不飽和の脂肪酸ソルビタンエステルベースのエトキシレートである。市販の例は、Emulsogen 4156 (Clarissant) である。

【0074】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に 8 から 1 8 個の炭素原子および 1 から 1 0 個のグリコシル単位を有する飽和または不飽和アルコールベースのグリコシドである。市販の例は、Plantacare 818up および 1200up (BASF) である。

50

【0075】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に8から18個の炭素原子を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのグルカミド、好ましくは脂肪酸N-メチルグルカミドである。市販の例は、MEGA-10タイプ(Avanti)である。

【0076】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に8から18個の炭素原子を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのアルカノールアミド、好ましくは脂肪酸ベースのエタノールアミドである。市販の例は、Aminon Cタイプ(Kao)である。

【0077】

好ましい非イオン性界面活性剤は、アルキル鎖に8から30個の炭素原子を有する脂肪アミンまたは脂肪酸アミドベースのアミンオキシドである。市販の例は、Tomamine AOタイプ(Air products)とおよびGenamine oxタイプ(Clariant)である。

10

【0078】

本発明の水性組成物は、好ましくは、組成物の、約0.05%から約15%、好ましくは約0.05%から約5%、さらにより好ましくは約0.1%から約5%、具体的には0.1から約3%の重量の量、あるいは0重量%の任意選択の非イオン性界面活性剤を含む。

【0079】

ベタイン乳化剤の好ましい例は、カルボベタイン、スルホベタイン、ホスファトベタインおよびホスホナトベタイン基含有の、直鎖状または分岐状のC8からC50、好ましくはC8から40、より好ましくはC8からC30のアルキル、脂肪アルコールおよび脂肪酸ベースの乳化剤、すなわちココアミドプロピルカルボベタインである。

20

【0080】

好ましくは、本発明による組成物で使用するのに適したベタイン界面活性剤には、シャンプーまたは他のパーソナルケア洗浄で使用することが知られているものが含まれる。それらは、脂肪族ラジカルが直鎖または分岐鎖であり得る脂肪族2級および3級アミンの誘導体として広く記載されている界面活性剤を含み、そしてここで脂肪族置換基の1つは、約8から約30個の炭素原子を含み、そして1つは、カルボキシ、スルホネート、サルフェート、ホスフェート、またはホスホネートなどのアニオン性基を含む。本発明の配合物で使用するための例示的な両性界面活性剤には、ココアンフォアセテート、ココアンフォ

30

【0081】

好ましいカルボベタイン界面活性剤は、アルキル鎖に10から18個の炭素原子を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのサルコシドである。市販の例は、Medialan LD(Clariant)である。

40

【0082】

好ましいカルボベタイン界面活性剤は、アルキル鎖に10から18個の炭素原子を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのアミドプロピルベタインである。市販の例は、Genagen CAB(Clariant)である。

【0083】

好ましいスルホベタイン界面活性剤は、アルキル鎖に10から18個の炭素原子を有する飽和または不飽和脂肪酸ベースのタウリドである。市販の例は、Hostapon CT(Clariant)である。

【0084】

ベタイン界面活性剤の詳細は、US2015/011449に開示されている。

50

【0085】

本発明の組成物は、好ましくは、組成物の、約0.05%から約15%、好ましくは約0.05%から約5%、さらにより好ましくは約0.1%から約5%、具体的には0.1から3%の重量の量、あるいは0重量%の任意選択のベタイン界面活性剤を含む。

【0086】

アニオン性乳化剤の好ましい例は、カルボキシレート、サルフェート、スルホネート、ホスフェートおよびホスホネート基を含む、直鎖状または分岐状のC8からC50、好ましくはC8から40、より好ましくはC8からC24アルキル、脂肪アルコールおよび脂肪酸ベースの乳化剤、すなわち、1または2つの脂肪酸部分を含むC8からC24脂肪酸カルボキシレート、C8からC24脂肪酸ポリエーテルカルボキシレート、C8からC24脂肪酸ポリエーテルサルフェート、C8からC24マレイン酸付加生成物、C8からC24脂肪アルコールサルフェート、C8からC24スルホネート、C8からC40ホスフェートである。

【0087】

好ましくは、組成物での使用に適したアニオン性界面活性剤は、アルキルおよびアルキルエーテルサルフェートである。他の適切なアニオン性界面活性剤は、有機硫酸反応生成物の水溶性塩である。さらに他の適切なアニオン性界面活性剤は、イセチオン酸でエステル化され、水酸化ナトリウムで中和された脂肪酸の反応生成物である。シャンプー組成物に使用するための例示的なアニオン性界面活性剤には、アンモニウムラウリルサルフェート、アンモニウムラウレスサルフェート、トリエチルアミンラウリルサルフェート、トリエチルアミンラウレスサルフェート、トリエタノールアミンラウリルサルフェート、トリエタノールアミンラウレスサルフェート、モノエタノールアミンラウリルサルフェート、モノエタノールアミンラウレスサルフェート、ジエタノールアミンラウリルサルフェート、ジエタノールアミンラウレスサルフェート、ラウリックモノグリセリドソディウムサルフェート、ラウリル硫酸ナトリウム、ラウレス硫酸ナトリウム、ラウリル硫酸カリウム、ラウレス硫酸カリウム、ラウリルサルコシン酸ナトリウム、ラウロイルサルコシン酸ナトリウム、ラウリルサルコシン、ココイルサルコシン、ココイル硫酸アンモニウム、ラウロイル硫酸アンモニウム、ココイル硫酸ナトリウム、ラウロイル硫酸ナトリウム、ココイル硫酸カリウム、ラウリル硫酸カリウム、トリエタノールアミンラウリルサルフェート、トリエタノールアミンラウリルサルフェート、モノエタノールアミンココイルサルフェート、モノエタノールアミンラウリルサルフェート、トリデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム、ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム、ココイルイセチオン酸ナトリウムおよびそれらの組み合わせが含まれる。本発明のさらなる実施形態において、アニオン界面活性剤は、ラウリル硫酸ナトリウムまたはラウレス硫酸ナトリウム（ラウリルエーテル硫酸ナトリウム）である。

【0088】

好ましくは、アニオン性界面活性剤は、アルキル鎖に10から18個の炭素原子および2から30個のEO単位を有する飽和または不飽和脂肪アルコールベースのポリエーテル硫酸塩である。市販の例は、Emulsogen EPMタイプ（Clariant）である。

【0089】

好ましくは、アニオン性界面活性剤は、アルキル鎖に10から18個の炭素原子および2から30個のEO単位を有する飽和または不飽和脂肪アルコールベースのポリエーテルカルボキシレートである。市販の例は、Empicolタイプ（Huntsman）である。

【0090】

アニオン性界面活性剤の詳細は、US2015/011449に開示されている。

【0091】

石鹸には、特に脂肪酸の塩、トリグリセリドの鹸化から得られるものなどのC6からC22脂肪酸のナトリウム塩またはカリウム塩またはカルシウム塩などのアルカリまたはア

10

20

30

40

50

ルカリ土類金属塩、例えば、ラウリン酸、ミリスチン酸、パルミチン酸、ステアリン酸、オレイン酸、リノール酸、リノレン酸のアルカリまたはアルカリ土類金属塩が含まれる。

【0092】

本発明の組成物は、好ましくは、組成物の、約0.05%から約15%、好ましくは約0.05%から約5%、さらにより好ましくは約0.1%から約5%、具体的には0.1から3%の重量の量、あるいは0重量%の任意選択のアニオン性界面活性剤を含む。

【0093】

界面活性剤の詳細は、US2009-0165812に開示されている。

【0094】

シリコーンベースの乳化剤の好ましい例は、カチオン性、非イオン性、ベタインおよびアニオン性乳化剤である。

【0095】

カチオン性乳化剤の好ましい例は、シリコーン鎖の末端クアット（4級アンモニウムカチオンを含む）末端に結合したEO/PO部分を有する4級アンモニウム基含有ABAタイプの乳化剤（WO2009/042083）または 状の配置でシリコーン鎖に結合したポリエーテル部分を有する4級化乳化剤（US2008/213208）である。

【0096】

本発明の別の好ましい実施形態では、親水性ポリヒドロキシ部分ならびに親油性脂肪アルキルまたは脂肪アルキルエステル部分がシリコーン鎖に結合している（US2012/289649）。このタイプのW/O乳化剤の市販の例は、Silform（登録商標）EOF（Momentive Performance Materialsから入手可能）である。

【0097】

本発明の組成物は、好ましくは、組成物の、約0.05%から約15%、好ましくは約0.05%から約5%、さらにより好ましくは約0.1%から約5%、具体的には0.1から3%の重量の量のシリコーンベースの任意選択のカチオン性界面活性剤を含む。

【0098】

シロキサンベースの非イオン性乳化剤の好ましい例は、エチレンオキシド（EO）、プロピレンオキシド（PO）およびブチレンオキシド（BO）含有ABAタイプの乳化剤であってシリコーン鎖の末端に結合したEO/PO/BO部分を有するもの、または 状の配置でシリコーン鎖に結合したポリエーテル部分を有する乳化剤である。市販の例は、SF1540（Momentive Performance Materialsから入手可能）である。本発明の別の好ましい実施形態では、親水性ポリエーテル部分ならびに親油性アルキル鎖がシリコーン鎖に結合している（US4698178）。本発明の別の好ましい実施形態では、親水性ポリグリセロール部分、ならびにアルキルまたは脂肪アルコールエーテル/脂肪酸エステル部分が、シリコーン鎖に結合している（US2010/0266651、US2009/0062459）。本発明の別の好ましい実施形態では、アモジメチコングリセロカルバメートが使用される（Dr. Frederic Pilz, COSSMA (2010) vol.7-8 p18およびWO2013017260A1）。本発明の別の好ましい実施形態では、セチルジグリセリルトリス（トリスメチルシロキシ）シリルエチルジメチコンが使用される（http://ec.europa.eu/consumers/cosmetics/cosing/index.cfm?fuseaction=search.details_v2&id=92003）。

【0099】

後者の4種類の乳化剤は、特にW/Oエマルジョンに適している。

【0100】

本発明の組成物は、好ましくは、組成物の、約0.05%から約15%、好ましくは約0.05%から約5%、さらにより好ましくは約0.1%から約5%、具体的には0.1から3%の重量の量、あるいは0重量%の任意選択のシリコーンベースの非イオン性界面活性剤を含む。

【0101】

10

20

30

40

50

本発明の組成物は、好ましくは、組成物の、約 0.05% から約 15%、好ましくは約 0.05% から約 5%、さらにより好ましくは約 0.1% から約 5%、具体的には約 0.1 から 3% の重量の量、あるいは 0 重量% の任意選択のシリコンベースのベタインおよびアニオン性界面活性剤を含む。

【0102】

配合物の安定性を最適化するために複数の界面活性剤を使用することは、本発明の範囲内である。本発明の組成物中の任意選択の界面活性剤の総量は、好ましくは、組成物の、約 0.05% から約 15%、好ましくは約 0.05% から約 5%、さらにより好ましくは約 0.1% から約 5%、具体的には 0.1 から 3% の重量、あるいは 0 重量% の範囲である。

10

【0103】

本発明のさらなる実施形態において、水性組成物は、任意にて、以下のような追加の添加剤、

- a) 有機希釈剤または溶剤、
- b) タンパク質、好ましくはケラチン、
- c) 皮膚軟化剤または脂肪性物質、
- d) 防腐剤、
- e) 皮膚保護成分、
- f) コンディショニング剤、
- g) 酸化剤、
- h) 還元剤、
- i) タンニン、
- j) 金属塩、および
- k) pH 調整剤、増粘剤、脂質、アミノ酸、糖、香料、日焼け止め剤、ビタミン、真珠光沢剤、ゲル化剤、微量元素、封鎖剤、抗酸化剤、保湿剤、脱毛防止剤、フケ防止剤、噴射剤、セラミド、ポリマー、特にフィルム形成ポリマー、充填剤、真珠層、着色剤、特に顔料および染料、ならびにそれらの混合物から選択されるさらなる助剤を含み、但し酸化剤と還元剤が所与の組成物に同時に存在しないことを条件とする。

20

【0104】

好ましくは、本発明の水性組成物および化粧品組成物は、以下の成分を含む。

30

40

50

【表 1】

成分	重量%
請求項 1 から 13 のいずれかに記載の少なくとも 1 つの化合物	0.05 から 30、好ましくは 1 から 10
炭化水素またはシリコンベースの界面活性剤	0 から 15、好ましくは 0.05 から 5
水	100%まで加えられる適量
希釈剤/溶剤	0 から 95、好ましくは 0.1 から 95%、好ましくは 10 から 95 %、より好ましくは 20 から 95 %、さらにより好ましくは 20 から 50 %、および 50 から 95 %
タンパク質、好ましくはケラチン	0 から 15、好ましくは 0 から 10、例えば 0.01 から 5
皮膚軟化剤/脂肪性物質	0 から 15、好ましくは 0 から 10、より好ましくは 0 から 5 %、例えば 0.01 から 5 %
防腐剤	0 から 5、好ましくは 0 から 3、より好ましくは 0 から 2 %、例えば 0.01 から 2.5 %
肌保護成分	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 1 %、具体的には 0 から 0.1 %、例として 0.01 から 5 %
コンディショニング剤	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 1 %、具体的には 0 から 0.1 %、例として 0.01 から 5 %
酸化剤	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 2 %、例として 0.01 から 5 %
還元剤	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 2 %、例として 0.01 から 5 %
タンニン	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 2 %、例として 0.01 から 5 %
金属塩	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 2 %、例として 0.01 から 5 %
染毛剤	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 2 %、例として 0.01 から 5 %
さらなる助剤	0 から 15 %、好ましくは 0 から 10 %、より好ましくは 0 から 5 %、さらにより好ましくは 0 から 2 %、例として 0.01 から 5 %

ここで重量パーセントは、水性組成物の全重量に関連し、そして個々の重量範囲は、前記クラスの構成要素の単一の構成要素に関係し得るが、好ましくは、前記クラスの構成要素の各構成要素の総重量に関連する。

【0105】

希釈剤／溶剤

「希釈剤／溶剤」という用語は、本発明による少なくとも 1 つのポリオルガノシロキサン A) および／または少なくとも 1 つの有機化合物 B) および水を加えた前述の他の任意の他の成分を希釈／溶媒和するために使用できる物質を指す。適切な有機溶剤は、すなわち、2-メチル-1,3-プロパンジオール、モノおよびジアルコール、またはそれらのエーテルおよびエステル、特に、モノ-C1-C3-アルキルエーテル、エタノール、n-プロパノール、イソプロピルアルコール、tert-ブタノール、1-メトキシプロパ

ノール、1-エトキシプロパノールおよびエトキシグリコール、ジオールおよびそれらのエーテルおよびエステル、1,3-プロパンジオール、1,3-および1,4-ブタンジオール、ペンチレングリコール、ヘキシレングリコール、ジエチレングリコール、およびそれらのモノメチルおよびモノエチルエーテル、ジプロピレングリコールおよびそのモノメチルおよびモノエチルエーテル、グリセロール、ジグリセロール、ヘキサントリオール、ソルビトール、エチルカルビトール、ベンジルアルコール、ベンジルオキシエタノール、プロピレンカーボネート、N-アルキルピロリドンである。好ましい実施形態では、水／エタノール、水／イソプロピルアルコール、水／ジプロピレングリコール、および水／ジプロピレングリコールモノメチルエーテル混合物が使用される。一般に、一定量の短鎖アルコールの添加は、配合物の均一性および配合物の毛髪への浸透を改善する。ポリマー構造のタイプと適用目的に応じて、透明な配合物を得るために、一定量の酸、塩基、および／または短鎖アルコールが必要とされる。適切な酸には、例えば酢酸などのカルボン酸、塩酸、硫酸、リン酸などの無機酸または有機酸が含まれる。適切な塩基には、アンモニア水、アルカリ性水酸化物、アルカリ性炭酸塩などが含まれる。

【0106】

タンパク質／ケラチン

使用される任意選択のタンパク質、好ましくはケラチンタンパク質画分は、当技術分野で知られている方法を使用してアルカリおよび／または酵素加水分解によって生成された加水分解ケラチンを含む。ケラチン加水分解物は、約1,000-3,000の分子量である。ケラチンは、ヤギの毛（US 2007-0048235）、蹄または角粉（US 6,555,505）などのヒトまたは他の哺乳動物の供給源に由来し得る。あるいは、「ケラチンタンパク質画分」は、US 7,148,327に記載されているように、完全ではないが1つの別個のタンパク質群を主に含む、精製された形態のケラチンである。ケラチンおよびケラチン画分の詳細は、US 2009-0165812に開示されている。

【0107】

皮膚軟化剤、脂肪性物質

ヘアトリートメント配合物のさらなる任意の成分は、1つまたは複数の皮膚軟化剤である。「皮膚軟化剤」は、皮膚を湿気や刺激から保護し、柔らかくし、滑らかにし、しなやかにし、コーティングし、潤滑し、潤いを与え、保護し、および／または清める材料である。使用される皮膚軟化剤は、シリコン化合物、すなわち、ジメチコン、シクロメチコン、好ましくは、D₅およびD₆シクロシロキサン、ジメチコンコポリオールまたはシクロメチコンとジメチコン／ビニルジメチコンクロスポリマーの混合物）、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、トリリセリド、例えば、カプリル酸／カプリン酸トリグリセリド、および脂肪酸エステル、例えば、セテアリルイソノナノエートまたはセチルパルミテートの1つまたは複数を含む。皮膚軟化剤の詳細は、US 2009/0165812に開示されている。

【0108】

本発明で使用するすることができる、周囲温度で液体であり、しばしば油と呼ばれる脂肪性物質としては、動物由来の炭化水素ベースのオイル、例えばペルヒドロスクアレン、炭化水素ベースの植物油、例えば4から10個の炭素原子を含む脂肪酸の液体トリグリセリド、例として、ヘプタン酸またはオクタン酸トリグリセリド、またはひまわり油、トウモロコシ油、大豆油、グレープシードオイル、ゴマ油、アプリコットオイル、マカダミアオイル、ヒマシ油、アボカドオイル、カプリル酸／カプリン酸トリグリセリド、ホホバオイル、シアバター；鉱物または合成由来の直鎖状または分岐状炭化水素、例えば、流動パラフィンおよびその誘導体、ワセリン、ポリデセン、水素化ポリイソブテン、例えば、Parleam（登録商標）；合成エステルおよびエーテル、特に脂肪酸、例として、プルセリンオイル、ミリスチン酸イソプロピル、パルミチン酸2-エチルヘキシル、ステアリン酸

2-オクチルドデシル、2-オクチルドデシルエルケート、イソステアリルイソステアレ-
ート、ヒドロキシ化エステル、例として、乳酸イソステアリル、ヒドロキシステアリン
酸オクチル、ヒドロキシステアリン酸オクチルドデシル、リンゴ酸ジイソステアリル、ク
エン酸トリイソセチル、脂肪アルコールヘプタノエート、オクタノエートおよびデカノエ
ート；ポリオールエステル、例として、プロピレングリコールジオクタノエート、ネオペ
ンチルグリコールジヘプタノエート、ジエチレングリコールジイソノナノエート、ペンタ
エリスリトールエステル、12から26個の炭素原子を有する脂肪アルコール、例として
、オクチルドデカノール、2-ブチルオクタノール、2-ヘキシルデカノール、2-ウン
デシルペンタデカノール、オレイルアルコール、部分的炭化水素ベースおよび／またはシリ
コーンベースのフルオロオイル、シリコーンオイル、例として、周囲温度（25℃）で
液体またはペースト状の、揮発性または不揮発性の、直鎖状または環状のポリジメチルシ
ロキサン（PDMS）、例えば、シクロメチコン、ジメチコンであって、任意選択でフェ
ニル基を含むもの、例として、フェニルトリメチコン、フェニルトリメチルシロキシジ
フェニルシロキサン、ジフェニルメチル-ジメチルトリシロキサン、ジフェニルジメチコ
ーン、フェニルジメチコン、ポリメチルフェニルシロキサン；それらの混合物について
言及することができる。適切な脂肪性物質の詳細は、WO2012-038334に開示
されている。

10

【0109】

防腐剤

任意にて、1つまたは複数の防腐剤をヘアトリートメント配合物に含めることができる
。そのような防腐剤の例には、1つまたは複数のグリセリン含有化合物（例えば、グリセ
リンまたはエチルヘキシルグリセリンまたはフェノキシエタノール）、乳酸、ベンジルア
ルコール、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を
含まれる。好ましい実施形態では、毛髪矯正配合物はパラベンを含まない。防腐剤の詳細
は、US2009/0165812に開示されている。

20

【0110】

皮膚保護剤

任意にて、ヘアトリートメント配合物は、1つまたは複数の皮膚保護剤を含む。皮膚保
護剤は、微生物または有機／無機化学物質の望ましくない伝達を防ぐ1つまたは複数の薬
剤を含む。皮膚保護剤の詳細は、例えば、US2009/0165812に開示されてい
る。

30

【0111】

コンディショニング剤

任意にて、1つまたは複数のコンディショニング剤をヘアトリートメント配合物に含め
ることができる。1つの好ましい実施形態では、シリコーンベースのコンディショニング
剤が組み込まれている。好ましくは、材料は、10から1,000,000 mPa・sの
範囲のPDMSグレード、C2からC18-アルキル誘導体化シリコーン、ジメチコノ
ール、ポリエーテル修飾シリコーン、アミノ基、または4級化アンモニウム基含有シリコ
ーンである。それらはまた、上記で定義されたような官能基FAを有するポリオルガノシロ
キサンから選択され得る。これらのシリコーンは、そのままの材料、有機溶液、エマルジ
ョン、またはマイクロエマルジョンとして組み込むことができる。

40

【0112】

コンディショニング剤を含む4級アンモニウム基（クアット）の好ましい例は、 α ， ω -
クアット基末端シリコーン（US4891166）、クアット基末端T型シリコーン（
US2008027202）、 α ， ω -シリコーンブロック末端クアット（WO02/1
0256）および 状の配置でクアット基を含み、任意選択で追加の部分、すなわち、ポリ
エーテルまたは芳香族構造を含むシリコーン（US2008213208、US509
8979、US5153294、US5166297、US2006188456）であ
る。他の好ましい例は、クアット基／シリコーンブロックベースのコポリマー（EP28
2720、US6240929、US6730766、DE102004002208）

50

である。別の好ましい実施形態では、クアット基／シリコーンブロック／親水性ブロックベースのコポリマーが使用される（WO 02／10257およびWO 02／10259、US 7563856、US 7563857、US 20110039948、US 2007106045、US 2005255073、WO 2004069137）。他の好ましい例は、クアット基／シリコーンブロックベースのコポリマーおよびクアット基／シリコーンブロック／親水性ブロックベースのコポリマーであって末端単官能性シリコーン部分を有するものである（WO 2013148629、WO 2013148635、WO 2013148935）。本発明の別の好ましい実施形態では、ペンディングアミノ基を有するクアット基末端シリコーンが使用される（DE 10253152）。他の好ましい例は、シリコーンベタイン（DE 10036522、DE 10036532）である。4級アンモニウム基含有シロキサンの市販の例は、Silsoft SilkおよびSilsoft Q（Momentive Performance Materialsから入手可能）である。

【0113】

上記のシリコーンベースのコンディショニング剤は、特に、毛髪に滑らかで絹のような感触を与える。

【0114】

あるいは、炭化水素ベースのコンディショニング剤を含めることができる。アミノおよび／または4級アンモニウム基を含むこれらのカチオンタイプの材料の詳細は、例えば、米US 2009／0000638およびWO 2012／027369に開示されている。

【0115】

酸化剤

任意にて、1つまたは複数の酸化剤をヘアトリートメント配合物に含めることができる。好ましくは、酸化剤には、有機酸化剤、すなわちベンゾキノン、ヒドロキノンおよびアミノキノンを含む他のキノン誘導体、ならびに適切な有機過酸化物が含まれる。有機酸化剤の詳細は、US 2012／0031420およびWO 2012／027369に開示されている。

【0116】

過酸化水素は、好ましい無機酸化剤である。ペルサルフェートは、それらのナトリウムカリウムおよびアンモニウム塩の形態で、単独で、または使用直前に過酸化水素と組み合わせて使用することもできる。他の可能な酸化剤には、過炭酸ナトリウム、過ホウ酸ナトリウム、過ホウ酸マグネシウム、二酸化マグネシウムおよび二酸化バリウムが含まれる。これらの酸化剤の詳細は、US 6544499に開示されている。

【0117】

還元剤

酸化剤および還元剤が所与の配合物中に同時に存在しないという条件で、任意にて1つまたは複数の還元剤をヘアトリートメント配合物に含めることができる。好ましい還元剤は、チオグリコール酸およびチオ乳酸、ならびにそれらの塩、特にアンモニウムおよびエタノールアミン塩である。さらに有用なチオ化合物は、特にシステインまたはその塩酸塩、ホモシステイン、システアミン、N-アセチルシステイン、チオグリセロール、エタンジオールモノチオグリコレート、1,2-プロピレングリコールモノチオグリコレート（WO 93／1791も参照）、1-3-プロパンジオールモノチオグリコレートまたはそれから生じる異性体混合物、1,3-ブタンジオールおよび1,4-ブタンジオールモノチオグリコレートおよびそれらからの異性体混合物、ジ、トリ、テトラエチレングリコールなどのポリエチレングリコール、モノチオグリコレート、グリセロールモノチオラクトレートおよびさらなるチオ酸およびそれらのエステル、ならびにそれらの混合物である。これらの有機還元剤の詳細は、US 2009／0000638に開示されている。

【0118】

基本的に無機還元硫黄化合物の使用も可能である。還元組成物で使用するための代表的な例には、美容上許容される塩（例えば、アルカリ金属（例えば、ナトリウムおよびカリ

10

20

30

40

50

ウム) およびアンモニウム塩)、エステル(例えば、亜硫酸塩、亜硫酸水素塩、亜硫酸水素塩、メタ重亜硫酸塩、次亜硫酸塩、次亜硫酸塩およびピロ亜硫酸塩の低級アルキルアミン(例えば、トリエタノールアミン(TEA)、モノエタノールアミン(MEA)およびアミノメチルプロパノール(AMP))が含まれる。したがって、適切な還元剤の特定の例には、メタ重亜硫酸ナトリウム、メタ重亜硫酸カリウム、亜硫酸ナトリウム、亜硫酸カリウム、チオ硫酸ナトリウム、チオ硫酸カリウム、重亜硫酸アンモニウム、亜硫酸アンモニウム、メタ重亜硫酸アンモニウム、MEA亜硫酸塩、MEAメタ重亜硫酸塩、亜硫酸水素カリウム、亜硫酸水素ナトリウム、硫酸水素アンモニウム、ヒドロサルファイトナトリウム、ヒドロサルファイトカリウム、ヒドロサルファイトアンモニウム、無水亜硫酸ナトリウム、亜硫酸二アンモニウム、二硫酸二カリウム、ピロ亜硫酸二カリウム、AMP亜硫酸、AMPメタ重亜硫酸、TEA亜硫酸、TEAメタ重亜硫酸、酸性亜硫酸ナトリウム、次亜硫酸ナトリウム、ピロ亜硫酸ナトリウム、およびチオ硫酸ナトリウム五水和物が含まれる。これらの無機還元剤の詳細は、WO2012/027369に開示されている。

【0119】

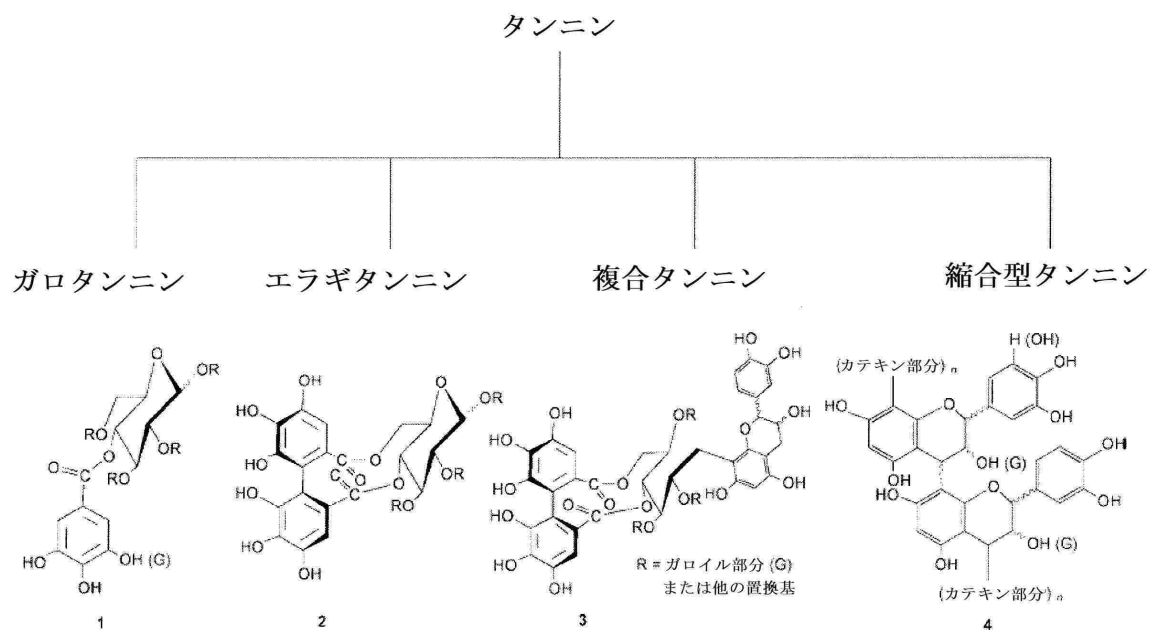
あるいは、ケラチンが約100℃以上に加熱される、高温およびアルカリ処理されたケラチン、ジチオナイトおよび特定の水素化物を使用することができる。これらの還元剤の詳細は、US6544499に開示されている。

【0120】

K) タンニン

任意にて、1つまたは複数のタンニン、具体的にはガロタンニン、エラギタンニン、複合タンニン、縮合型タンニン、すなわちタンニン酸および他の形態のケルシタンニン酸およびガロタンニン酸を使用することができる。タンニンはポリフェノール誘導体のクラスを表し、その構造の多様性で知られている。分類は、参照により本明細書に含まれる、K. Khanbabaee, T. van Ree, Nat. Prod. Rep., 2001, 18, 641-649に基づいて行われ、そして本発明の文脈においてタンニンという用語を定義するために使用される。最も好ましいタンニンはガロタンニン酸(=タンニン酸)である。好ましいタンニンには、以下が含まれる。

【化23】



【0121】

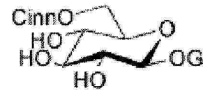
ガロタンニンの例は以下である。

【化 2 4】



R = α, β -OH; **55**

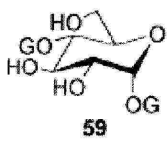
R = β -OG; **56**



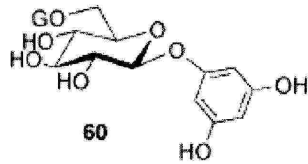
57



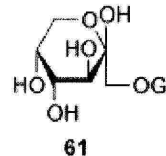
58



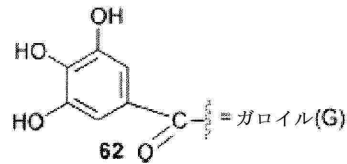
59



60



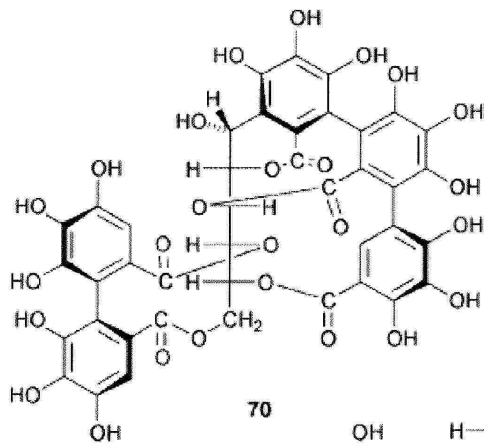
61



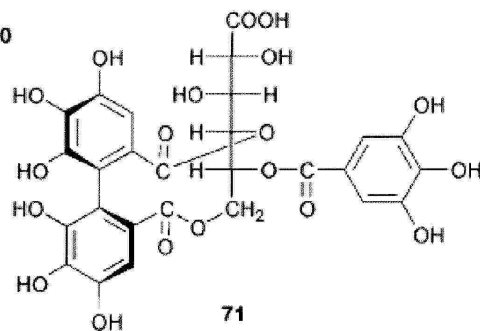
【 0 1 2 2 】

エラギタンニンの例は以下である。

【化 2 5】



70



71

【 0 1 2 3 】

複合タンニンの例はアクチシミン A である。

10

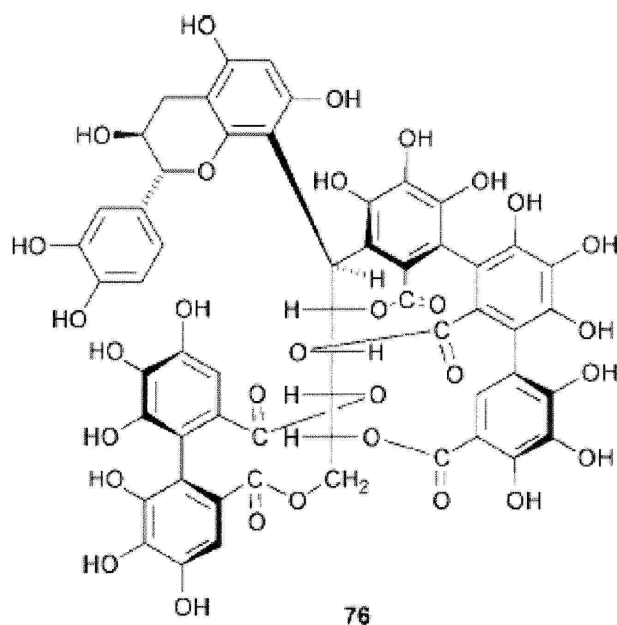
20

30

40

50

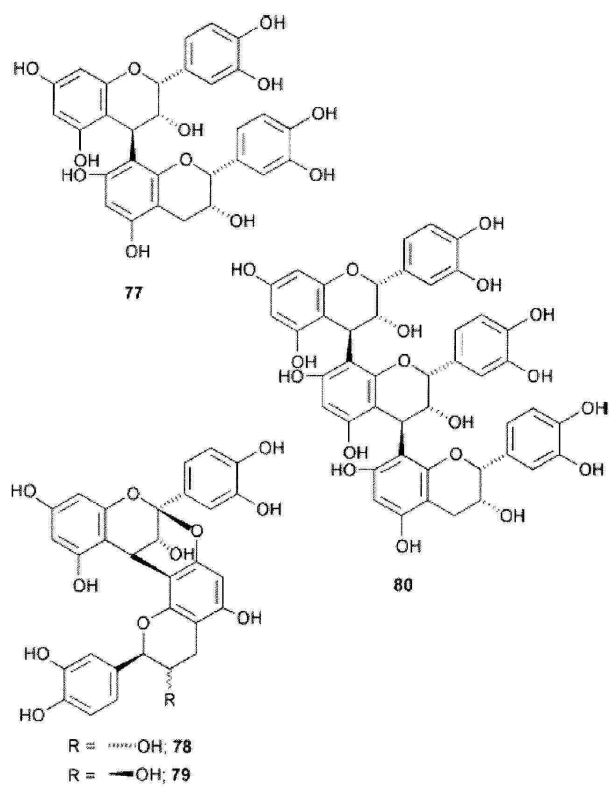
【化 2 6】



【 0 1 2 4】

縮合型タンニンの例は、プロシアニジン B 2 (77)、プロアントシアニジン A 1 (78)、プロアントシアニジン A 2 (79)、およびプロアントシアニジン C 1 (80) である。

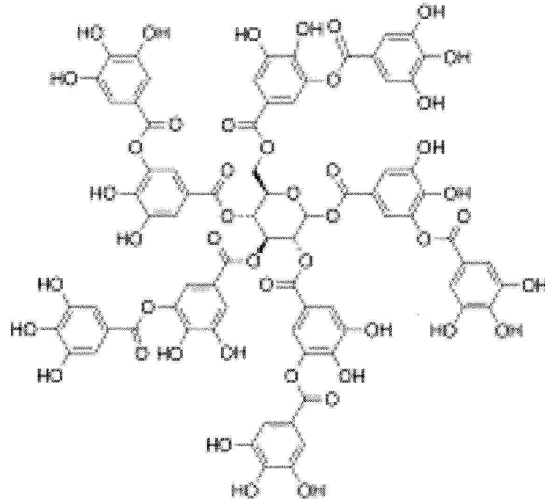
【化 2 7】



【 0 1 2 5】

最も好ましいタンニンはタンニン酸である。

【化 28】

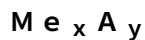


10

【0126】

金属塩

特に下記一般式のものを含み、



20

ここで本式中の Me は金属カチオンであり、カチオン Me の数は x であり、アニオン A の数は y であり、そして数字 x および y は、塩が中性になるようなものである。特に、x は例えば 1 または 2 であり得、y は例えば 1 から 3 であり得る。A は、好ましくは、(i) 式 $-\text{O}-\text{C}(\text{O})-\text{R}$ の酸化された炭水化物のアニオン、または無機酸または有機酸に由来するアニオンである。Me は、好ましくは、鉄または亜鉛カチオンである。

【0127】

特に好ましい塩は、好ましくは水溶性である Fe または Zn 塩、例えば、 Fe^{2+} ラクトビオネート、 Fe^{2+} マルトビオネート、 Fe^{2+} イソマルトビオネート、 Fe^{3+} ラクトビオネート、 Fe^{3+} マルトビオネート、 Fe^{3+} イソマルトビオネート、 Fe^{2+} グルコネート、 Fe^{3+} グルコネート、 Fe^{2+} グルコヘプトネート、 Fe^{3+} グルコヘプトネート、 Fe^{2+} グリセロホスフェート、 Fe^{3+} グリセロホスフェート、 Zn^{2+} ラクトビオネート、 Zn^{2+} マルトビオネート、 Zn^{2+} イソマルトビオネート、 Zn^{2+} グルコネート、および Zn^{2+} グリセロホスフェート、 Fe^{2+} タートレート、 Fe^{2+} グルカレート、 Fe^{3+} タートレート、 Fe^{3+} グルカレート、 Zn^{2+} タートレート、 Zn^{2+} グルカレートである。

30

【0128】

本発明による化合物に対する Fe または Zn 塩の重量比は、少なくとも 0.01、好ましくは 0.01 から 3、より好ましくは 0.02 から 3、さらにより好ましくは 0.05 から 3、具体的には 0.1 から 3、さらに具体的には 0.1 から 1 である。任意選択のタンニンが使用される場合、本発明の化合物 + タンニンに対する水溶性の Fe または Zn 塩の重量比は、少なくとも 0.01、好ましくは 0.01 から 3、より好ましくは 0.02 から 3、さらにより好ましくは、0.05 から 3、具体的には、0.1 から 3、さらにより具体的には、0.1 から 1 である。

40

【0129】

水溶性 Fe または Zn 塩の特定の量は、水溶性 Fe または Zn 塩の分子量および構造、ならびに本発明の化合物中のカルボキシ基のモル比および任意に使用されるタンニンのモル量に依存する。典型的には、水溶性 Fe または Zn 塩の分子量が高いほど、および／または本発明の化合物中のカルボキシ基のモル量および任意選択のタンニンのモル量が高いほど、使用される水溶性 Fe または Zn 塩の特定の量が高くなる。

【0130】

50

さらなる助剤

ヘアトリートメント配合物はまた、1つまたは複数のさらなる助剤、すなわち、pH値を調整するための酸、塩基および緩衝剤などのpH調整剤、増粘剤（多糖類増粘剤、デンプン、変性デンプン、キサンタン、ジェラン、カラギーナン、プルラン、セルロース、セルロース誘導体、ポリアクリル酸、ポリアクリレートコポリマー、ポリアクリルアミド、ペクチン、粘土、ヒュームドシリカなど）、脂質、アミノ酸、糖、香料、日焼け止め剤、ビタミン、真珠光沢剤、ゲル化剤、微量元素、封鎖剤、抗酸化剤、保湿剤、脱毛防止剤、フケ防止剤、噴射剤、セラミド、ポリマー、特にフィルム形成ポリマー；充填剤、真珠層、以下に記載する染毛剤を含む、着色剤および特に顔料および染料、あらゆる種類の生物活性植物化学物質、およびそれらの混合物を含み得る。

10

【0131】

染毛剤

染毛剤には、一般的に使用される酸化性または非酸化性、一時的、半永久的、部分永久的および永久的な染毛剤が含まれる。一時的な非酸化性染料には、例えば、一般的に混合物として使用される、Acid Yellow、Acid Orange 7、Acid Yellow 1、Acid Red 33、Acid Red 92、Acid Violet 43、Acid Blue 9、Acid Black 1が含まれる。半永久的な非酸化性染毛剤には、低モル質量の塩基性染料またはカチオン染料が含まれ、そして特に、HC Yellow No. 2、HC Red No. 3、4-ヒドロキシプロピルアミノ-3-ニトロフェノール、N,N'-ビス-(2-ヒドロキシエチル)-2-ニトロフェニレンジアミン、HC Blue No. 2、Basic Red 51、Basic Red 76、Basic Brown 16、Basic Brown 17、Basic Blue 99、Basic Yellow 57が含まれる。他の半永久的な染料には、金属および野菜の誘導体（ヘナなど）が含まれる。金属染料は、銀塩、鉛、ビスマスに由来する。永久的な酸化染毛剤には、酸化剤の存在下で一般的に使用される前駆体の複合システムが含まれる。

20

【0132】

ポリマー構造のタイプと適用目的に応じて、透明な配合物を得るために、酸、塩基、および／または短鎖アルコールに一定量が必要とされる。適切な酸には、例えば、酢酸などのカルボン酸、塩酸、硫酸、およびリン酸などの無機酸または有機酸が含まれる。適切な塩基には、アンモニア水、アルカリ性水酸化物、アルカリ性炭酸塩などが含まれる。

30

【0133】

例えば、そのような酸または塩基を添加することにより、水性組成物の適切なpH範囲は、9未満、好ましくは8.5未満、好ましくは7.5未満、より好ましくは7.0未満などに調整することができる。

【0134】

本発明のさらに好ましい実施形態は、それぞれ本明細書で定義される、本発明による少なくとも1つの化合物、または本発明による少なくとも1つの水性組成物を含む化粧品組成物またはパーソナルケア配合物に関する。

【0135】

化合物または本発明を利用することができるパーソナルケア組成物または化粧品組成物の例には、例えば、スプレーを含む、デオドラント、制汗剤、デオドラント／制汗剤、スティックおよびロールオン製品、シェービング製品、スキンローション、保湿剤、化粧液、バス製品、クレンジング製品、シャンプー、コンディショナー、シャンプー／コンディショナーの組み合わせ、ムース、スタイリングジェル、ヘアスプレー、染毛剤、ヘアカラー製品、ヘアブリーチ、ウェーブ製品、ヘアストレートナー、マニキュア、ネイルポリッシュリムーバー、ネイルクリームおよびローション、キューティクルソフトナー、日焼け止め、虫除け、アンチエイジング製品、リップスティック、ファンデーション、フェイスパウダー、アイライナー、アイシャドウ、チーク、メイクアップ、マスカラ、保湿製剤、ファンデーション、ボディおよびハンド用製剤、スキンケア用製剤、フェイスおよびネッ

40

50

ク用製剤、トニック、ドレッシング、育毛補助剤、エアロゾル固定剤、芳香剤、アフターシェーブ、メイクアップ製剤、ソフトフォーカスアプリケーション、昼および夜用スキンケア製剤、非着色ヘア製剤、日焼け用製剤、合成および非合成の石鹸バー、ハンドリキッド、ノーズストリップ、パーソナルケア用不織布アプリケーション、ベビーローション、ベビーバスおよびシャンプー、ベビーコンディショナー、シェービング製剤、キュウリスライス、スキンパッド、メイク落とし、フェイシャルクレンジング製品、コールドクリーム、日焼け止め製品、ムース、スプリッツ、ペーストマスクおよびマッド、フェイスマスク、コロソおよび化粧水、ヘアキューティクルコート、シャワージェル、フェイスおよびボディウォッシュ、パーソナルケアリンスオフ製品、ジェル、フォームバス、スクラブクレンザー、収斂剤、ネイルコンディショナー、アイシャドウスティック、フェイスまたはアイ用パウダー、リップクリーム、リップグロス、ヘアケアポンプスプレーおよびその他の非エアゾールスプレー、ヘアフリズコントロールジェル、ヘアリーブインコンディショナー、ヘアポマード、ヘアデタングリング製品、ヘア固定剤、ヘアブリーチ製品、スキンローション、プレシェーブおよびプレエレクトリックシェーブ、無水クリームおよびローション、オイル／水、水／オイル、多重およびマクロおよびマイクロエマルジョン、耐水性クリームおよびローション、にきび防止剤、マウスウォッシュ、マッサージオイル、歯磨き粉、透明ジェルおよびスティック、軟膏ベース、局所創傷治癒製品、エアゾールタルク、バリアスプレー、ビタミンおよび老化防止剤、ハーブエキス製剤、バスソルト、バスおよびボディミルク、ヘアスタイリング補助剤、ヘア、アイ、ネイル、スキン用ソフト固形アプリケーション、徐放性パーソナルケア製品、ヘアコンディショニングミスト、スキンケア保湿ミスト、スキンワイプ、毛穴スキンワイプ、毛穴クリーナー、傷軽減剤、皮膚剥離剤、皮膚落屑促進剤、スキントオルおよび布、除毛剤、パーソナルケア潤滑剤、ネイルカラー剤、日焼け止め、化粧品、ヘアケア製品、スキンケア製品、練り歯磨き、皮膚に適用される薬用組成物の局所適用用のドラッグデリバリーシステム、それらの2つ以上の組み合わせなどが含まれるが、これらに限定されない。本発明のそのような化粧品またはパーソナルケア組成物は、特定の目的または意図された使用のために望まれる他の成分および成分を含み得る。例えば、パーソナルケア組成物は、皮膚軟化剤、モイスチャライザー、保湿剤、顔料、コーティングされた雲母、着色剤、芳香剤、殺生物剤、防腐剤、抗酸化剤、抗菌剤、抗真菌剤、制汗剤、剥離剤、ホルモン、酵素、薬用化合物、ビタミン、塩、電解質、アルコール、ポリオール、紫外線吸収剤、植物抽出物、界面活性剤、シリコンオイル、有機油、ワックス、フィルム形成剤、増粘剤、粒子状充填剤、粘土、界面活性剤、乳化剤、溶剤、皮膚軟化剤、モイスチャライザー、保湿剤、顔料、着色剤、香料、殺生物剤、防腐剤、キレート剤、抗酸化剤、抗菌剤、抗真菌剤、制汗剤、剥離剤、ホルモン、酵素、薬用化合物、ビタミン、アルファヒドロキシ酸、ベータヒドロキシ酸、レチノール、ナイアシンアミド、美白剤、塩、電解質、アルコール、ポリオール、紫外線吸収剤、植物抽出物、有機油、ワックス、フィルム形成剤、増粘剤、粒子状充填剤、シリコン、粘土、可塑剤、保湿剤、閉塞、感覚増強剤、エステル、樹脂、フィルム形成剤、フィルム形成乳化剤、高屈折率材料、それらの2つ以上の組み合わせなどから選択される成分を含み得る。

【0136】

スキンケアクリーム、リップスティック、目および顔のメイク、タオル、カラーコンタクトレンズなど、顔に適用し得る化粧製品。デオドラント、ローション、パウダー、香水、ベビー用品、バスオイル、バブルバス、バスソルト、ボディバターなど、体に適用することができる化粧品；手／爪に適用できる化粧品：指の爪と足指爪のマニキュア、および手の消毒剤；髪に適用できる化粧品：パーマネントケミカル、ヘアカラー、ヘアスプレー、ジェル；カラー顔料を含むメイクアップ組成物、プライマー、ファンデーションまたはアイシャドウ、リップスティック、リップグロス、リップライナー、リップブランパー、リップクリーム、リップステイン、リップコンディショナー、リッププライマー、リップブラスター、リップバターであって日焼け止めを含み得るもの、コンシーラー、フェイスパウダー、マスカラ、アイシャドウ、アイライナー、眉ペンシル、クリーム、ワックス、

10

20

30

40

50

ジェル、および眉を着色、塗りつぶし、および明確にするために使用されるパウダーなど、特に顔や目の領域に適用できる化粧品；ローション、クレンジング配合物；化粧液；フェイシャルマスク；ピールマスク、シートマスク、角質除去製品、エッセンシャルオイル、ハーブ抽出物、または他の化学物質を含み得るクリームやローションなどの保湿剤；ナイトクリーム、デイクリーム、日焼け止め組成物、マニキュアなど。

【0137】

本発明の化合物を含み得るパーソナルケア物品には、例えば、化粧品および医療用品、固形石鹸、液体石鹸（例：ハンドソープ）、ハンド消毒剤（リンスオフおよびリーブオンのアルコールベースおよび水性ベースのハンド消毒剤を含む）、術前皮膚消毒剤、クレンジングワイプ、消毒ワイプ、ボディウォッシュ、にきび治療製品、スキนครリーム、シャンプー、コンディショナー、化粧品（液体または粉末ファンデーション、液体または固体アイライナー、マスカラ、クリームアイシャドウ、着色粉末、乾燥または湿らせて使用する「パンケーキ」タイプの粉末などを含むがこれらに限定されない）デオドラント、抗菌クリーム、ボディローション、ハンドクリーム、局所クリーム、アフターシェーブローション、スキン化粧液、マウスウォッシュ、歯磨き粉、日焼け止めローション、およびベビー用品、例えば、限定されるものではないが、クレンジングワイプ、ベビシャンプー、ベビソープ、およびおむつクリーム、創傷ケ製品、例えば、限定されるものではないが、創傷治癒軟膏、クリーム、およびローション、創傷被覆、火傷創傷クリーム、包帯、テープ、およびステリストリップ、および医療物品、例えば医療用ガウン、キャップ、フェイスマスク、靴カバー、外科用ドレープなどが含まれる。さらなる製品には、マウスリンス、歯磨き粉、デンタルフロスコティングなどの経口製品、獣医およびペットケア製品、防腐剤組成物、および溶液、スプレーまたはワイプなどを含む表面消毒剤が含まれるが、これらに限定されない。

【0138】

本発明による水性または化粧品組成物は、特に、ヘアトリートメント組成物に典型的な形態に（使用または）配合され得る。好ましくは、局所ヘアケアまたは治療組成物、例えば、ヘアトニック、コンディショナー、ヘアケア製剤、例えば前処理剤、スタイリングクリーム、スタイリングジェル、ポマード、ヘアリンス、トリートメントパック、集中的ヘアトリートメント、例えばリーブオンおよびリンスオフディープコンディショナー、毛髪構造化製剤、例えばパーマネントウェーブ（ホットウェーブ、マイルドウェーブ、コールドウェーブ）用の毛髪ウェーピング製剤、毛髪矯正剤、液体ヘアセット剤、ヘアフォーム、ヘアセラム、ヘアスプレー、漂白剤、例えば、過酸化水素水溶液、ライトニングシャンプー、ブリーチクリーム、ブリーチパウダー、ブリーチペーストまたはオイル、一時的、半永久的または永久的な染毛剤、自己酸化染料、または天然の染毛剤を含む製剤、ヘナやカモミールなどである。用途に基づいて、ヘアケア製剤は、特に、（エアゾール）スプレー、（エアゾール）フォーム、ゲル、ゲルスプレー、クリーム、ローション、液体、セラムまたはワックス、ムース、パールシャンプー、アンチフリーズシャンプーなどのシャンプーなどの形態であり得る。本発明による水性組成物は、リーブオンまたはリンスオフヘアトリートメント組成物として使用することができる。

【0139】

本発明による特定の好ましい化粧品組成物は、ヘアトリートメントで使用するためのものであり、好ましくはヘアカラートリートメントで使用するためのものである。本発明による上記の水性化粧品組成物は、毛髪の人工着色料の改善された耐久性に関して特に利益を提供することができる。さらに、本発明による水性ヘアトリートメント配合物は、特に、ヘアブリーチ処理などの毛染処理の前、最中、および後に、毛髪の強化および成形効果ならびにコンディショニング効果を提供する。本発明によるヘアトリートメント組成物は、毛髪の強化、毛髪の着色、色の保持および毛髪の成形、すなわち、毛髪のカールおよび矯正に関して利益を提供することができる。

【0140】

本発明による毛髪のトリートメントのための好ましい化粧品組成物は、ヘアシャンプー

組成物、ヘアケア組成物、ヘアコンディショニング組成物、毛髪強化組成物、毛髪着色または染色組成物、毛髪通り性改善組成物、縮れ防止組成物、ヘアリンスオフおよびリーブオン組成物からなる群から選択される。

【0141】

さらなる実施形態において、本発明は、本発明による化粧品組成物を提供するステップ、および前記化粧品組成物を毛髪に適用するステップを含む、毛髪のトリートメントのための方法に関する。そのような毛髪のトリートメントのための方法は、毛髪を染色するステップをさらに含み得る。

【0142】

毛髪のトリートメントのための特定の好ましい方法は、

- 1) 毛髪を本発明の水溶性化粧品組成物と接触させること、
- 2) 任意にて、水性組成物と毛髪を接触させること、該水性組成物は、Feおよび／またはZnの金属塩を含み、水相を含み、pH>2から10の範囲を有し、そして好ましくは、クロリド、サルフェート、アルキルスルホネート、アリアルスルホネート、アルキルアリアルスルホネート、

C2からC12、好ましくはC2からC9の飽和または不飽和ヒドロキシアシルカルボン酸、すなわち、グリコール酸、乳酸、β-ヒドロキシ酪酸、γ-ヒドロキシ酪酸、2-ヒドロキシコハク酸、クエン酸、マンデル酸、

C2からC12、好ましくはC2からC9、また好ましくはC7からC12、より好ましくはC7からC9の飽和または不飽和ポリヒドロキシアシルカルボン酸、すなわち、グリセリン酸、2,2-ジメチロールプロパンカルボン酸、アラビノン酸、グルコン酸、グルコロン酸、グルコヘプトン酸、グルコピラノシルアラビノン酸、ラクトビオン酸、マルトビオン酸、酒石酸、グルカル酸、

C7からC12、好ましくはC7からC9のヒドロキシ芳香族カルボン酸、すなわち、2-ヒドロキシ安息香酸、3-ヒドロキシ安息香酸、4-ヒドロキシ安息香酸、2-ヒドロキシ桂皮酸、3-ヒドロキシ桂皮酸、4-ヒドロキシ桂皮酸、

C7からC12、好ましくはC7からC9のポリヒドロキシ芳香族カルボン酸、すなわち、2,3-ジヒドロキシ安息香酸、2,4-ジヒドロキシ安息香酸、2,5-ジヒドロキシ安息香酸、2,6-ジヒドロキシ安息香酸、3,4-ジヒドロキシ安息香酸、3,5-ジヒドロキシ安息香酸、ジヒドロキシ桂皮酸またはそれらの部分エステル、すなわち3,4-ジヒドロキシ桂皮酸、トリヒドロキシ安息香酸またはそれらの部分エステル、すなわち2,3,4-トリヒドロキシ安息香酸、2,3,5-トリヒドロキシ安息香酸、2,3,6-トリヒドロキシ安息香酸、2,4,5-トリヒドロキシ安息香酸、2,4,6-トリヒドロキシ安息香酸、3,4,5-トリヒドロキシ安息香酸、トリヒドロキシ桂皮酸またはそれらの部分エステル、すなわち3,4,5-ジヒドロキシ桂皮酸、およびそれらの混合物、

から特に選択されるヒドロキシ官能化カルボン酸、

から選択される対イオンを有する水溶性Zn²⁺、Fe²⁺および／またはFe³⁺塩を含み、および

- 3) 好ましくは>150℃の温度で、例えば、ステップ1)および2)で使用される本発明のヘアトリートメント組成物またはヘアトリートメント組成物の一部を永久的に毛髪に結合する、または毛髪に組み込むホットアイロンステップ中に、毛髪を乾燥すること、のステップを含む。

【0143】

毛髪のトリートメントのための別の特定の好ましい方法は、

- 1) 毛髪を本発明の水溶性化粧品組成物と接触させること、該水溶性化粧品組成物は、本発明の化合物、任意選択で上記に説明した1つまたは複数の界面活性剤、および

クロリド、サルフェート、アルキルスルホネート、アリアルスルホネート、アルキルアリアルスルホネート、

C2からC12、好ましくはC2からC9の飽和または不飽和ヒドロキシアシルカル

10

20

30

40

50

ボン酸、すなわち、グリコール酸、乳酸、 β -ヒドロキシ酪酸（3-ヒドロキシブタン酸としても知られている）、 γ -ヒドロキシ酪酸（4-ヒドロキシブタン酸としても知られている）、2-ヒドロキシコハク酸、クエン酸、マンデル酸、

C2からC12、好ましくはC2からC9、また好ましくはC7からC12、より好ましくはC7からC9の飽和または不飽和ポリヒドロキシアルキルカルボン酸、すなわちグリセリン酸、2,2-ジメチロールプロパンカルボン酸、アラビノン酸、グルコン酸、グルコロン酸、グルコヘプトン酸、グルコピラノシルアラビノン酸、ラクトビオン酸、マルトビオン酸、酒石酸、グルタル酸、

C7からC12、好ましくはC7からC9ヒドロキシ芳香族カルボン酸、すなわち、2-ヒドロキシ安息香酸、3-ヒドロキシ安息香酸、4-ヒドロキシ安息香酸、2-ヒドロキシ桂皮酸、3-ヒドロキシ桂皮酸、4-ヒドロキシ桂皮酸、

C7からC12、好ましくはC7からC9のポリヒドロキシ芳香族カルボン酸、すなわち、2,3-ジヒドロキシ安息香酸、2,4-ジヒドロキシ安息香酸、2,5-ジヒドロキシ安息香酸、2,6-ジヒドロキシ安息香酸、3,4-ジヒドロキシ安息香酸、3,5-ジヒドロキシ安息香酸、ジヒドロキシ桂皮酸またはそれらの部分エステル、すなわち3,4-ジヒドロキシ桂皮酸、トリヒドロキシ安息香酸またはそれらの部分エステル、すなわち2,3,4-トリヒドロキシ安息香酸、2,3,5-トリヒドロキシ安息香酸、2,3,6-トリヒドロキシ安息香酸、2,4,5-トリヒドロキシ安息香酸、2,4,6-トリヒドロキシ安息香酸、3,4,5-トリヒドロキシ安息香酸、トリヒドロキシ桂皮酸またはそれらの部分エステル、すなわち3,4,5-ジヒドロキシ桂皮酸、およびそれらの混合物、

から特に選択されるヒドロキシ官能化カルボン酸、

から好ましくは選択される対イオンを有するFeおよび／またはZnの金属塩、好ましくは水溶性 Zn^{2+} 、 Fe^{2+} および／または Fe^{3+} 塩を含み、そして

2) 例えば、ステップ1)で使用される本発明のヘアトリートメント組成物またはヘアトリートメント組成物の一部を永久的に毛髪に結合する、または毛髪に組み込むホットアイロンステップの間、150℃を超えて毛髪を乾燥させること、のステップを含む。

【0144】

上記の方法において、本発明による化合物に対する任意選択の水溶性Feおよび／またはZn塩の重量比は、少なくとも0.01、好ましくは0.01から3、より好ましくは0.02から3、さらにより好ましくは0.05から3、具体的には0.1から3、さらにより具体的には0.1から1である。任意選択のタンニンを使用する場合、本発明の化合物（式(A)のポリオルガノシロキサンおよび／または式(B)の化合物）+タンニンに対する水溶性Feおよび／またはZn塩の重量比は、少なくとも0.01、好ましくは0.01から3、より好ましくは0.02から3、さらにより好ましくは0.05から3、具体的には0.1から3、さらにより具体的には0.1から1である。水溶性Feおよび／またはZn塩の特定の量は、水溶性FeまたはZn塩の分子量および構造、ならびに本発明の化合物中のカルボキシ基のモル比および任意にて使用されるタンニンのモル量に依存する。典型的には、水溶性のFeまたはZn塩の分子量が高いほど、および／または本発明の有機化合物中のカルボキシ基のモル量および任意選択のタンニンのモル量が高いほど、使用される水溶性FeまたはZn塩の特定の量が高くなる。

【0145】

好ましくは、トリートメントされた毛髪を形成するために、本発明の水溶性化粧品組成物と毛髪を接触させるプロセスステップ1)は、繊維に浸透するのに十分な温度と時間で行われる。典型的には、方法ステップ1)は、10から50℃、好ましくは20から50℃、さらにより好ましくは室温で、5から120分、好ましくは5から60分、さらにより好ましくは10から40分で実施される。

【0146】

好ましくは、方法ステップ2)の、さらにトリートメントされた毛髪を形成するために

、水溶性 Zn^{2+} 、 Fe^{2+} および／または Fe^{3+} 塩に基づく本発明の毛髪処理組成物と毛髪を接触させることは、繊維を浸透するのに十分な温度および時間の長さで行われる。典型的には、方法ステップ 2) は、10 から 50℃、好ましくは 20 から 50℃、さらにより好ましくは室温で、5 から 120 分、好ましくは 5 から 60 分、さらにより好ましくは 10 から 40 分で実施される。

【0147】

好ましくは、方法ステップ 3) の好ましくは 150℃を超える温度で熱を加えることによってトリートメントされた毛髪を乾燥することは、ステップ 1) および 2) で使用される本発明のヘアトリートメント組成物またはヘアトリートメント組成物の一部を永久的に毛髪に結合する、または毛髪に組み込むホットアイロンステップである。高温は、ステップ 1) および 2) で使用される組成物の成分とケラチン繊維の反応性部分との化学反応、またはステップ 1) および 2) で使用される組成物の成分の複合体の形成をもたらし得る。好ましくは、温度は、150℃から約 235℃、より好ましくは 180℃から約 225℃、さらにより好ましくは 190℃から約 215℃の範囲である。通常、毛髪を乾燥させる場合は、2 から 10 回のホットアイロンが適用される。

【0148】

本発明の文脈において、ステップ 2) で使用される水溶性 Zn および／または Fe 塩は、好ましくは、25℃で少なくとも 0.5 g/l の水溶性を有する。

【0149】

本発明による上記の毛髪トリートメント方法は、毛髪の強化、毛髪の成形、すなわち、毛髪のカールおよび矯正、毛髪の着色、毛髪の色を深化、毛髪のブリーチ、毛髪の色を保持、ヘアコンディショニングに関して利益を提供することができる。

【0150】

本発明はさらに、毛髪のトリートメント、特に毛髪の強化、毛髪の色を保持、毛髪の色を増大、毛髪の色を深化、毛髪の色を保護、毛髪の成形、すなわち、毛髪のカールと矯正、ヘアコンディショニング、毛髪の滑らかさまたは柔らかさ、毛髪の矯正、毛髪の扱いやすさの改善、特に毛髪の通りの改善のための本発明による水性組成物の使用に関する。

【0151】

本発明による最も好ましい化粧品組成物は、ヘアトリートメントで使用するためのものであり、好ましくはヘアカラーリングで使用するためのものである。

【0152】

本発明による最も好ましい化粧品組成物は、ヘアシャンプー組成物、ヘアケア組成物、ヘアコンディショニング組成物、毛髪強化組成物、毛髪着色または染色組成物、毛髪色深化組成物、毛髪通り性改善組成物、縮れ防止組成物、ヘアリンスオフおよびリーブオン組成物から選択される。

【0153】

本発明はさらに、毛髪のトリートメント、好ましくは毛髪の強化、毛髪の色を保持、毛髪の色を増大、毛髪の色を深化、毛髪の色を保護、毛髪の成形、すなわち毛髪のカールおよび矯正、ヘアコンディショニング、毛髪の滑らかさまたは柔らかさ、毛髪矯正、毛髪の扱いやすさの改善、特に毛髪を通り性の改善のための本発明による化合物または本発明による水性組成物の使用に関する。

【0154】

本発明の態様は、以下の非限定的な例を参照してさらに理解することができる。

【実施例】

【0155】

例

(パーセンテージは、特に明記されていない限り、重量%を指す)。

【0156】

例 1

グリセロールジグリシジルエーテルベースのコハク酸エステル誘導体

10

20

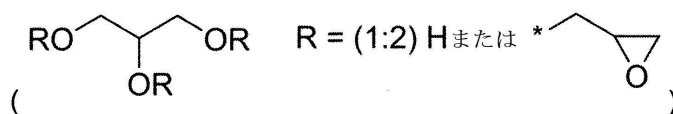
30

40

50

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた250mlの三口フラスコで、23.1g (195.8mmol) のコハク酸、122gのジプロピレングリコール、0.8gのトリエチルアミンを混合し、90℃に加熱する。20g (195.8mmolエポキシ基) グリセロールジグリシジルエーテルを

【化 2 9】



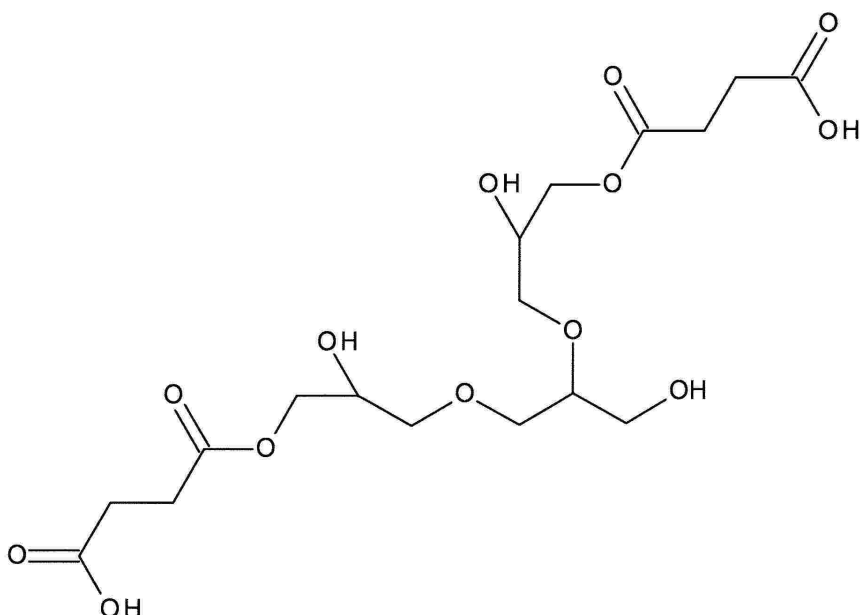
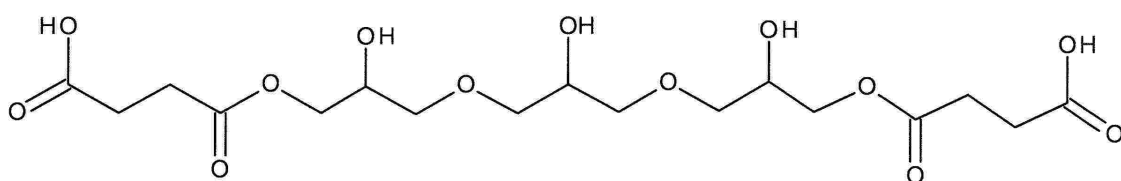
10

20分内で滴下する。混合物を90℃で12時間保持する。その後、透明なわずかに黄色の混合物を室温まで冷却し、エポキシド基の変換を¹H NMR分光法によって決定するエポキシ基の変換率は100%である。

【 0 1 5 7 】

本質的に以下の異性体からなる生成物が得られる。

【化 3 0】



30

【 0 1 5 8 】

例 2

3つのコハク酸エステル官能基を有するグリセロールジグリシジルエーテル

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた100mLの三口フラスコで、10g (97.9mmol エポキシ基) のグリセロールジグリシジルエーテル、11.56g のコハク酸 (97.9mmol)、61.7g の酢酸メトキシプロピルおよび0.53g のトリメチルアミンを混合し、90℃で15時間加熱する。エステル化反応が進行すると、混合物は濁る。¹H NMR分光法によって決定されるように、エポキシド基の変換は100%である。

【 0 1 5 9 】

50

4. 9 g (48.9 mmol) の無水コハク酸を加え、反応を90℃で6時間続けた。この2回目のエステル化反応が進行すると、混合物は（わずかに茶色がかった）透明になる。¹H NMR分光法によって決定されるように、無水物基の変換は100%である。

【0160】

61.7 g の1,3-ブタンジオールを加える。酢酸メトキシプロピルは、75℃/3 mmHg の減圧下で除去される。

【0161】

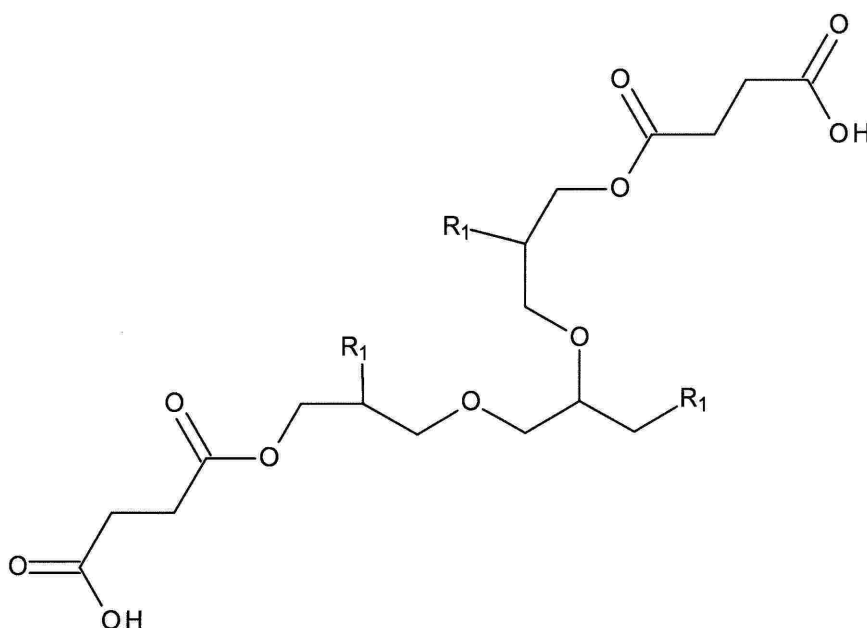
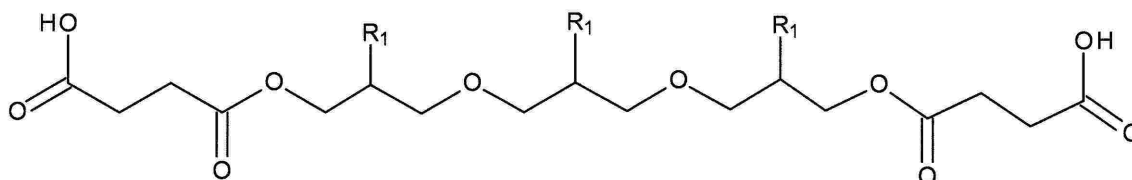
やや褐色がかった透明な液体が得られる。

【0162】

本質的に以下の異性体からなる生成物が得られ、

10

【化31】



20

30

ここでR₁は、2:1の比の-OHおよび-OC(O)CH₂CH₂COOHである。

【0163】

例3

グリセロールジグリシジルエーテルベースのアジピン酸エステル誘導体

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた100mlの三口フラスコに、10 g (97.9 mmol エポキシ基) のグリセロールジグリシジルエーテル、14.31 g のアジピン酸 (97.9 mmol)、56.71 g の1,3-ブタンジオールおよび0.48 g のトリメチルアミンを混合し、90℃で9.5時間加熱する。¹H NMR分光法によって決定されるように、エポキシド基の変換は99.5%である。無色透明の液体が得られる。

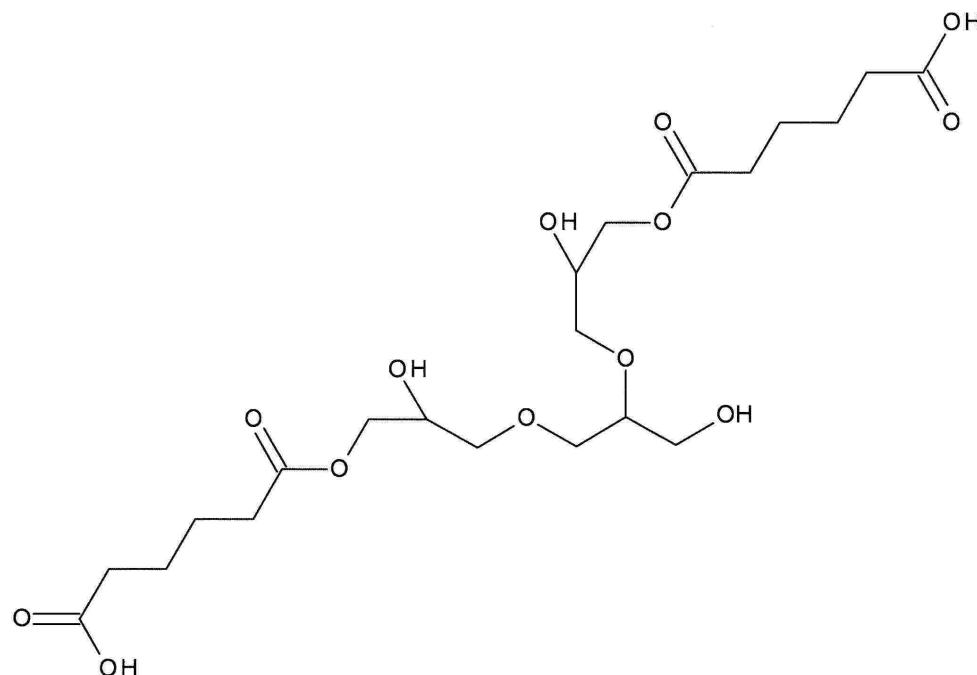
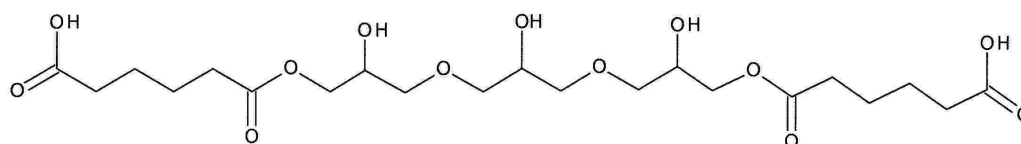
40

【0164】

本質的に以下の異性体からなる生成物が得られる。

50

【化 3 2】



10

20

【 0 1 6 5 】

例 4

2つのコハク酸エステル官能基および2つのアジピン酸エステル官能基を持つグリセロールジグリシジルエーテル

30

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた100mlの三口フラスコで、14.31gのアジピン酸(97.9mmol)、56.71gの酢酸メトキシプロピルおよび0.51gのトリメチルアミンを混合し、70℃に加熱する。10g(97.9mmolのエポキシ基)のグリセロールジグリシジルエーテルを15分間にて加える。最初は濁った混合物が透明になる。その後、温度を90℃に上げ、11時間維持する。

【 0 1 6 6 】

^1H NMR分光法によって決定されるように、エポキシド基の変換は99%である。

【 0 1 6 7 】

9.79g(97.9mmol)の無水コハク酸を加え、反応を90℃で6.5時間続けた。 ^1H NMR分光法によって決定されるように、無水物基の変換は、98%である。室温まで冷却すると、目的生成物が溶液から沈殿する。

40

【 0 1 6 8 】

79.6gの1,3-ブタンジオールを加える。酢酸メトキシプロピルは、75℃/3mmHgの減圧下で除去される。

【 0 1 6 9 】

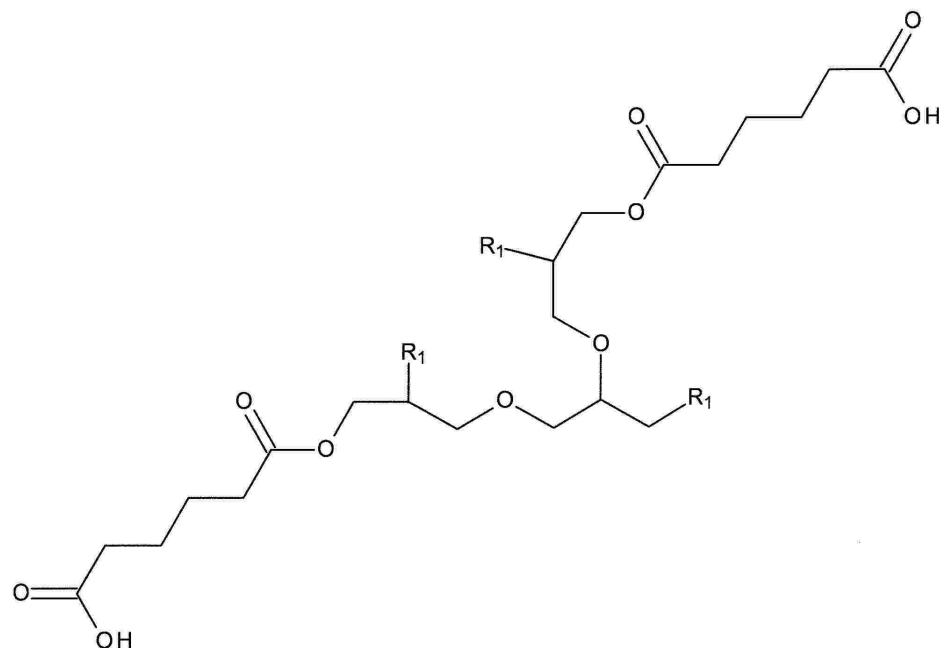
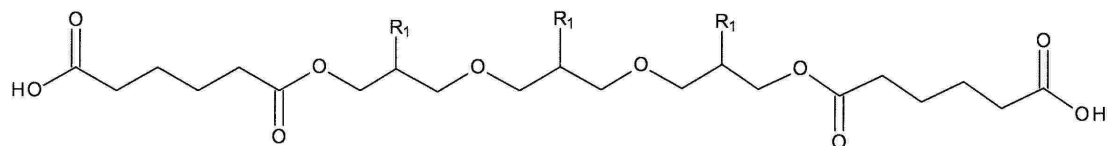
やや黄色がかった透明な液体が得られる。

【 0 1 7 0 】

本質的に以下の異性体からなる生成物が得られ、

50

【化 3 3】



ここで R_1 は、1 : 2 の比の $-OH$ および $-OC(O)CH_2CH_2COOH$ である。

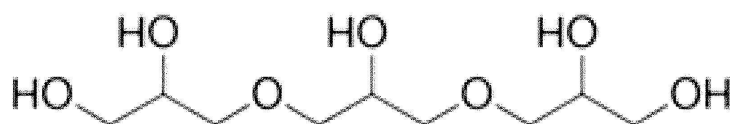
【0171】

例 5

トリグリセロールベースのイタコン酸エステル誘導体

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた 100 ml の三口フラスコに、60 g の酢酸メトキシプロピル、10 g (41.6 mmol) のトリグリセロール

【化 3 4】

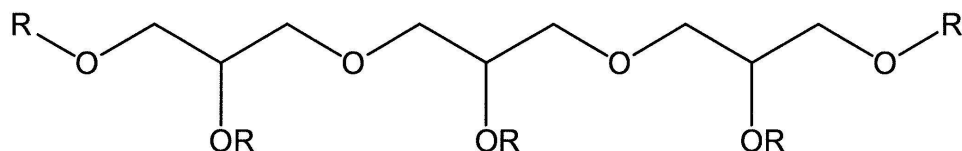


および 0.29 g のトリエチルアミンを混合し、70℃に加熱する。9.33 g (83.2 mmol) の無水イタコン酸を 15 分内で滴下する。混合物を 90℃に 18 時間加熱する。最初は黄色の分散液は、反応の過程でわずかに赤みがかった色に変わる。無水物の変換は、 ^1H NMR 分光法によって決定される。無水物の転化率は 100% である。その後、60 g の 1,3-ブタンジオールを添加し、酢酸メトキシプロピルを 70℃/20 mmHg で 2 時間除去する。わずかに黄色の透明な溶液が得られる。

【0172】

本質的に以下の構造からなる生成物が得られ、

【化 3 5】



10

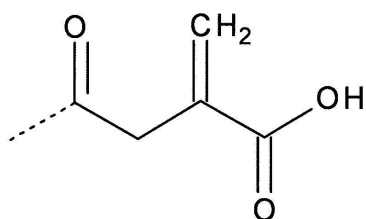
20

30

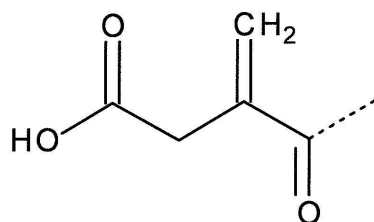
40

50

ここでRの2つは、
【化36】



または
【化37】



(ここで点線は、酸素原子への結合である)
であり、そして3つは水素である。

【0173】

例6

グリセロールジグリシジルエーテルベースのイタコン酸エステル誘導体

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた100mlの三口フラスコで、10.76g(82.7mmol)のイタコン酸、60gの1,3ブタンジオール、0.29gのトリエチルアミンを混合して80℃に加熱する。8.45g(82.7mmolエポキシ基)のグリセロールジグリシジルエーテルを20分内で滴下する。温度は86℃に上昇した。さらに90℃に上げて14時間保持させる。その後、透明な無色の混合物を室温まで冷却し、エポキシド基の変換を¹H NMR分光法によって決定する。エポキシ基の変換率は100%である。

【0174】

本質的に以下の異性体からなる生成物が得られ、

10

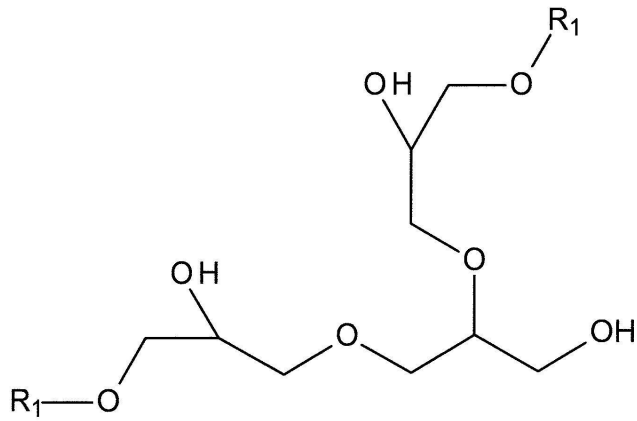
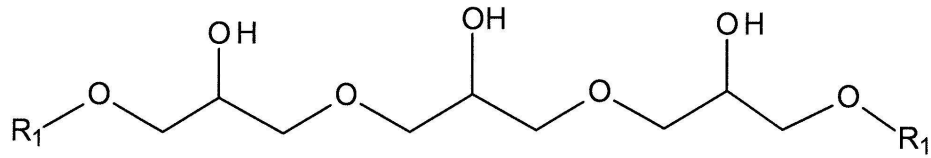
20

30

40

50

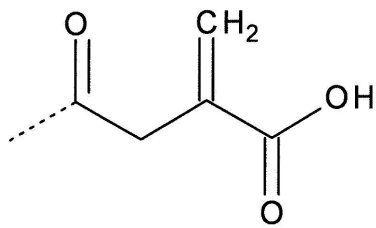
【化 3 8】



10

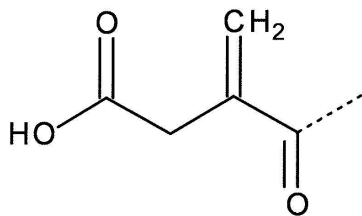
20

ここで R₁ は、
【化 3 9】



30

または
【化 4 0】



40

(ここで点線は、酸素原子への結合である)
である。

【0175】

適用試験

試験方法

色保持を評価するための試験方法は、US 2011/0219552 A1 に詳細に記載されている。この方法は、洗浄前後のデルタ E による毛髪の色の変化を決定する。色の変化は、Hunter Lab 比色計で CIE L*, a*, および b* の値 (または CIE LAB 色スペース) を測定することによって決定された。

50

【0176】

L*、a*、b*の意味は、“Practical Modern Hair Science” Trefor Evans and R. Randall Wichett, Alluredbooks, Carol Stream, Illinois, 2012で詳しく説明されている。L*値は、L*=0（黒）からL*=100（白）までの明度を測定する。色は、a*が負の値（緑）から正の値（赤）に、b*が負の値（青）から正の値（黄色）に測定される。例えば、ミディアムブロンドのL*、a*、b*値はL*=49、a*=12、b*=26で、ミディアムオーバーンのL*、a*、b*値はL*=26、a*=13、b*=12である。

【0177】

デルタEは、洗浄前後の色の变化を評価するために、次の式を使用して計算された。

デルタE = $\left((L^*_t - L^*_0)^2 + (a^*_t - a^*_0)^2 + (b^*_t - b^*_0)^2 \right)^{1/2}$
 ここでL*₀、a*₀、b*₀、およびL*_t、a*_t、b*_tは、それぞれ洗浄前後のCIE L*、a*、b*色パラメーター（CIE LAB色スペース）で測定される。

【0178】

デルタEの値が大きいほど色の变化が大きくなり、そのため洗浄後の色の損失が少ないことを示すことから、小さなデルタEが望まれる。

【0179】

同様に、以下式を使用して色増大を計算し、処理による初期の色深度の増加を評価した。

デルタE = $\left((L^*_2 - L^*_1)^2 + (a^*_2 - a^*_1)^2 + (b^*_2 - b^*_1)^2 \right)^{1/2}$
 ここでL*₂、a*₂、b*₂、およびL*₁、a*₁、b*₁は、それぞれ処理あり、処理なしで、洗浄前にCIE L*、a*、b*色パラメーター（CIE LAB色スペース）で測定される。ここでは、より大きな初期色増大を意味するため、より大きなデルタEが望まれる。

【0180】

例7

例7.1 単一のブリーチされた欧州毛髪の色を増大と色の保持への適用

以下の処理液を調製した。

TS1溶液（例1のポリグリセロールコハク酸エステル）約50mlは、例1の3gのポリグリセロールコハク酸エステル、7gのジプロピレングリコール（すなわち、例1で得られたジプロピレングリコール中のポリグリセロールコハク酸エステルの10g溶液）、および40gの水から構成された。

【0181】

染毛剤は、L'Oreal製の市販の染毛剤Garnier Nutrisse Ultra Color R3、Light Intense Auburnであった。

【0182】

染毛前の本発明による水溶液による前処理

4gの単一のブリーチされた欧州毛髪（Kerling International Haarfarbrik GmbH）の束を50gのTS1溶液に30分間浸した。次に、毛髪を室温で一晩乾燥させた。次に、毛束を10wt-%SLES（ラウリルエーテル硫酸ナトリウム）で3回洗浄した。毛髪を乾燥させた後、Garnier R3の標準的な染色手順に従って、Garnier R3染料で30分間染色した。

【0183】

対照の房は、50mlの水で処理された房であった。次に、10wt-%SLESで洗浄し、架橋技術によって処理された毛髪房と同じようにGarnier R3染料で染色した。初期色を測定した。

【0184】

染毛後の本発明による水溶液による後処理

Garnier R3の標準的な染色手順に従って、4gの単一のブリーチされた欧州毛髪（Kerling International Haarfarbrik GmbH）の束をGarnier R3染料で30分間染色した。その後、ボンネットで毛髪を

10

20

30

40

50

乾燥させた。初期色を測定した。乾燥した毛髪を50gのTS1溶液に30分間浸した。次に、毛髪を室温で一晩乾燥させた。次に、毛髪束を10wt-%SLES（ラウリルエーテル硫酸ナトリウム）で3回洗浄した。その後、毛髪を乾燥させた。

【0185】

対照の房は、Garnier R3染色され50mlの水で処理された房であった。次に、毛髪を10重量%のSLESで洗浄し、架橋技術によって処理された毛髪房と同じように乾燥させた。

【0186】

洗浄プロトコル

4gの毛髪房を200mlの2.5%SLES溶液を入れた250mlの三角フラスコに入れた。フラスコをShellab振とう水浴中で120rpm、42℃で5分間振とうした（5分間の洗浄は10回の手洗いに相当）。5分後、毛髪を乾燥させ、毛髪の色を測定した。

【0187】

前処理の利益

【表2】

前処理の色増大デルタE

	初期色パラメータ L^* , a^* , b^*			色増大デルタE
	L^*	a^*	b^*	
対照	24.15	27.03	15.14	
TS1 (例1のポリグリセリンコハク酸エステル)	22.75	19.31	9.27	9.88

【0188】

染色前に本発明による技術によって処理された毛髪は、対照と比較してより暗い初期色で色増大効果を示す。

【表3】

前処理の色保持利益

	色損失デルタE
対照	12.50
TS1 (例1のポリグリセリンコハク酸エステル)	7.20

【0189】

本発明による技術（例1を含むTS1）は、対照よりも低い色損失デルタEで色保持効果を示す。

【0190】

後処理の利益

例1のポリグリセロールコハク酸エステルによる後処理は、 L^* の変化がほとんどなく、元の色の暗さを維持した。

10

20

30

40

50

【表 4】

	初期色 L*, a*, b*		
	L*	a*	b*
処理なしの毛髪	24.15	27.03	15.14
TS1 (例 1 のポリグリセリンコ ハク酸エステル)	24.46	21.7	11.12

10

【表 5】

後処理の色保持利益

	色損失デルタ E
対照	17.91
TS1 (例 1 のポリグリセリンコハ ク酸エステル)	5.28

20

【0191】

本発明による技術 (TS1) による後処理は、対照と比較して、色損失デルタ E を 12 単位以上減少させた。

【0192】

例 7. 2 ブリーチ後の処理

4 グラムの損傷のない暗褐色の毛髪の房は Hair International Importers から入手した。市販の漂白ライトナーパウダー (9 グラム) と市販の 40 容量デヴェロッパー (11 グラム) を一緒に混合した。ブリーチ組成物をバージン暗褐色毛髪房に適用し、毛髪房全体に広げて 50 分間放置した。房から染料を水道水ですすいだ後、房を 10 wt % ラウレス硫酸ナトリウム (2 EO) 溶液で洗浄し、すすいだ。乾燥した毛髪を 50 g の TS1 溶液に 30 分間浸した。次に、毛髪を室温で一晩乾燥させた。次に、毛髪束を 10 wt % SLES (ラウリルエーテル硫酸ナトリウム) で 3 回洗浄した。その後、毛髪を乾燥させた。

30

【0193】

この処理は、ブリーチ後の毛髪を強化するためのものである。

【0194】

例 7. 3 : 白色リンスオフコンディショナー配合物

40

50

【表 6】

	化学名	wt%
A	水	100 までの適量
	乳酸	0.6
B	Amidet APA-22 (ベヘナミドプロピルジメチルアミン)、Kao Corporation 製	2.2
C	Kalcol 6850 (セトステアリルアルコール)、Kao Corporation 製	4.4
D	例 1 のポリグリセリンコハク酸エステル の 30% ジプロピレングリコール 溶液	7

10

1. 部 A . 乳酸と水を混合し、80℃に加熱した。
2. 部 B を部 A に加え、混合物を 80℃で 1 – 3 時間攪拌して、均一な配合物を得た。
3. 部 C を A および B の混合物に加え、部 C が完全に溶解して均一な混合物が得られるまで、80℃で 0.5 から 1 時間攪拌した。
4. 室温に達するまで攪拌を続けながら、加熱源を取り外した。
5. 部 D を A + B + C からなる混合物に加え、均一な混合物に達するまで攪拌を続けた。

20

【0195】

例 7 . 4 : 真珠光沢シャンプー配合物

【表 7】

部	成分	wt %
A	ラウレス硫酸ナトリウム	12
	ココミドプロピルベタイン	3
B	エチレングリコールジステアレート	1
	水	10
C	ココミドモノエタノールアミド	1
	水	10
D	ポリクオタニウム-6	0.06
	Dow Chemical Company 製の ACULYN™ 38 (10 wt-% 活性)	3
E	例 1 のポリグリセリンコハク酸エステル の 30% ジプロピレングリコール 溶液	7
F	水	100 までの適量

30

部 A : 部 A の成分を、600rpm で 10 分間オーバーヘッドメカニカルスターラーにて混合した。

部 B : 1g のエチレングリコールジステアレートと 10g の水をマグネチックスターラーにて 200rpm で 15 分間混合した。

部 C : 1g のココミドモノエタノールアミドと 10g の水をマグネチックスターラーにて 200rpm で 15 分間混合した。

部 D の成分を部 A に加え、オーバーヘッドメカニカルスターラーにて 600rpm で 10 分間攪拌した。混合物 A + D が得られた。

部 B を混合物 A + D に加え、メカニカルスターラーを用いて 600rpm で 10 分間攪拌した。混合物 A + D + B が得られた。

40

50

部 C を混合物 A + D + B に加え、メカニカルスターラーを用いて 600 rpm で 10 分間攪拌した。混合物 A + D + B + C が得られた。

部 E を混合物 A + D + B + C に加え、メカニカルスターラーを用いて 600 rpm で 15 分間攪拌した。混合物 A + D + B + C + E が得られた。

最後に部 F を混合物 A + D + B + C + E に加え、混合物をメカニカルスターラーを用いて 600 rpm で 15 分間攪拌した。

【0196】

例 7. 5 : 真珠光沢シャンプーの非硫酸塩バージョン

【表 8】

部	成分	Wt %
A	ラウリルスルホ酢酸ナトリウム+ラウレススルホコハク酸二ナトリウム	10.6
	セチルベタイン	3.3
B	ココミドモノエタノールアミド	1.5
	水	10
C	ヒドロキシプロピルメチルセルロース	1.5
	水	10
D	エチレングリコールジステアレート	1.5
	水	10
E	ポリクオタニウム-10	0.15
F	例 1 のポリグリセリンコハク酸エステルの 30% ジプロピレングリコール溶液	7
G	水	100 までの適量

部 A : 部 A の成分を、600 rpm で 10 分間オーバーヘッドメカニカルスターラーで混合した。

部 B : 1.5 g のココミドモノエタノールアミドを 10 g の水 (45℃) とマグネチックスターラーで 200 rpm で 30 分間混合した。

部 C : 1.5 g のヒドロキシプロピルメチルセルロース粉末を 10 g の水 (45℃) にゆっくりと加え、マグネチックスターラーで 200 rpm で 30 分間攪拌した。

部 D : 1.5 g のエチレングリコールジステアレート粉末を 10 g の水 (45℃) にゆっくりと加え、マグネチックスターラーで 200 rpm で 30 分間攪拌した。

部 B を、600 rpm で 5 分間機械的に攪拌しながら部 A にゆっくりと加えた。混合物 A + B が得られた。

部 C を、600 rpm で 5 分間機械的に攪拌しながら部 A + B にゆっくりと加えた。混合物 A + B + C が得られた。

部 D を、600 rpm で 5 分間機械的に攪拌しながら部 A + B + C にゆっくりと加えた。混合物 A + B + C + D が得られた。

部 E を、600 rpm で 10 分間機械的に攪拌しながら部 A + B + C + D に加えた。混合物 A + B + C + D + E が得られた。

部 F を混合物 A + B + C + D + E に加え、600 rpm で 15 分間機械的に攪拌した。

最後に、部 G を加え、混合物を 600 rpm で 30 分間攪拌した。

【0197】

例 7. 6 : 縮れ防止シャンプー

10

20

30

40

50

【表 9】

部	成分	wt %
A	水	55
	PEG-120 メチルグルコースジオリート	2
B	水	15.25
	ラウレス硫酸ナトリウム	9
C	EDTA 二ナトリウム	0.1
	コカミドプロピルベタイン	10
	ポリクオタニウム-7	0.5
	デシルグルコシド	1
	デクспанテノール	1
	フェノキシエタノール	0.5
D	例 1 のポリグリセリンコハク酸エステル の 30%ジプロピレングリコール溶液	7
	Givaudan S.A. 製の Tropicalism 18	0.65

部 A：部 A の成分をマグネチックスターラーで 200 rpm で 15 分間混合した。

部 B：部 B の成分をマグネチックスターラーで 200 rpm で 15 分間混合した。

部 B を部 A に加え、混合物をオーバーヘッドメカニカルスターラーで 500 rpm で 15 分間攪拌した。

部 C の成分を混合物 A + B に加え、オーバーヘッドメカニカルスターラーで 500 rpm で 1 時間攪拌した。

部 D の成分をマグネチックスターラーで 200 rpm で 15 分間混合し、その後、混合物 A + B + C に加えた。

最後に、完全な混合物 A + B + C + D をメカニカルスターラーで 500 rpm で 30 分間混合した。

【0198】

例 7. 7：水ベースのスプレー配合物

1. 5 wt % の例 1 のポリグリセロールコハク酸エステル

3. 5 wt % ジプロピレングリコール、

1. 25 wt % SLES、

0.09 wt % NaOH (pH 8 の水中の 10 wt % 活性 NaOH 溶液として添加)

100 wt % までの適量の水

【0199】

例 7. 8：イソプロパノール (IPA) ベースのスプレー配合物

1. 5 wt % の例 1 のポリグリセロールコハク酸エステル

3. 5 wt % ジプロピレングリコール

100 % までの適量の IPA

【0200】

例 8：トリートメントジェルおよびクリーム配合物

例 8. 1：

10

20

30

40

50

【表 10】

配合成分	1	2	3	4	5
	Wt%	wt	Wt%	Wt%	Wt%
Carbopol 1382	1	1			
キサンタンガム	0.1	0.1	0.5		
ヒドロキシプロピルスターチホスフェート				4	
ヒドロキシエチルセルロース					1
例 1 のポリグリセリンコハク酸エステル	10	10	10	10	5
ジプロピレングリコール	30				
ブチレングリコール			30		30
イソプロパノール	25		25		25
水	100 までの適量	100 までの適量	100 までの適量	100 までの適量	100 までの適量
NaOH 10%	pH 4 までの適量	pH 7 までの適量	pH 6.5 までの適量	pH 6.5 までの適量	pH 6.5 までの適量

10

20

【0201】

例 8. 2 :

【表 11】

成分	Wt%
リン脂質（および）大豆油	2
プロパンジオール	3
例 1 のポリグリセリンコハク酸エステル	10
アクリル酸ナトリウム共重合体およびレシチン	1.7
ステアリン酸	0.5
ベヘニルアルコール	0.5
イソノナン酸イソノニル	2
グリセリンおよびオウシュウトウヒ抽出物およびアルコール	1
フェノキシエタノール	0.5
ブチレングリコールジカプリレート/ジカプレート	2
水	100 までの適量

30

【0202】

例 9

グリセロールジグリシジルエーテルベースの酒石酸エステル誘導体

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた 100 ml の三口フラスコに、15 g (146.9 mmol エポキシ基) のグリセロールジグリシジルエーテル、22.05 g (146.9 mmol) の酒石酸、0.56 g のトリメチルアミンおよび 86.45 g のジプロピレングリコールを混合し、12 時間 90℃ に加熱した。その後、混合物を室温に冷却し、エポキシド基の変換を ^1H NMR 分光法によって決定する。変換エポキシ基は 100% である。

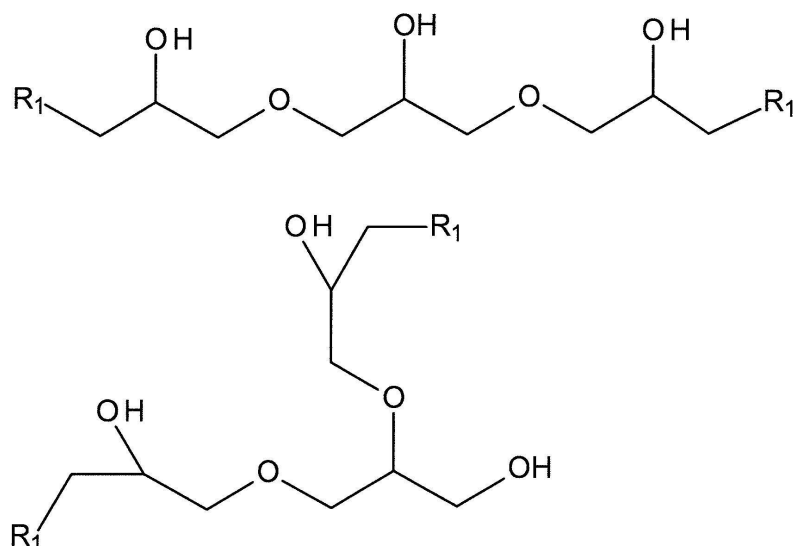
40

【0203】

本質的に以下の異性体からなる無色の生成物が得られ、

50

【化 4 1】



10

ここで R₁ は、 $-\text{OC}(\text{O})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{C}(\text{O})\text{OH}$ である。

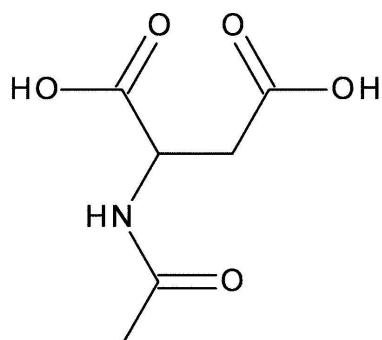
【 0 2 0 4】

例 1 0

グリセロールジグリシジルエーテルベースの N-アセチルアスパラギン酸エステル誘導体
還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた 100 ml の三口フラスコに、
5 g (48.9 mmol エポキシ基) のグリセロールジグリシジルエーテル、8.58 g
(48.9 mmol) の N-アセチルアスパラギン酸：

20

【化 4 2】



30

0.2 g のトリメチルアミンおよび 54.3 g の 1,3-ブタンジオールを混合し、90
℃で 10 時間加熱する。その後、混合物を室温に冷却し、エポキシド基の変換を ¹H NMR
分光法によって決定する。変換エポキシ基は 100% である。

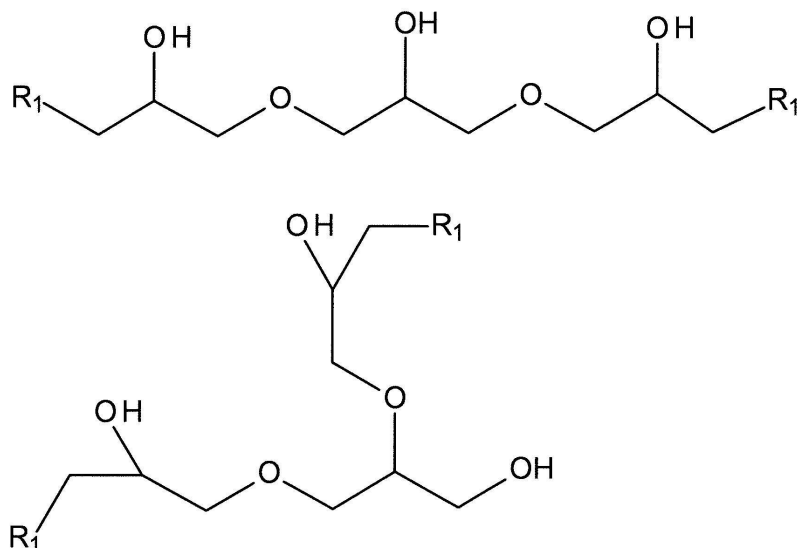
40

【 0 2 0 5】

本質的に以下の異性体からなるわずかに黄色がかった生成物が得られ、

50

【化 4 3】



10

ここで

R₁は、 $-\text{OC}(\text{O})\text{CH}_2\text{CH}(\text{R}^*)\text{C}(\text{O})\text{OH}$ または $-\text{OC}(\text{O})\text{CH}(\text{R}^*)\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{OH}$ であり、ここで $\text{R}^* = -\text{NH}(\text{CO})\text{CH}_3$ 。

20

【0206】

例 1 1

N-マレオイル-β-アラニン ((E)-4-(2-カルボキシエチルアミノ)-4-オキソブト-2-エン酸)

還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた100mlの三口フラスコに、17.8g(200mmol)のβ-アラニンを室温で40gのDI水に溶解する。19.6g(200mmol)の無水マレイン酸を加える。温度は20分以内に22から36℃に上昇する。混合物は濁った白色の分散液に変わる。温度は3時間で22℃に調節される。その後、沈殿物を濾過し、20mlのDI水で10回および20mlのシクロヘキサンで3回洗浄する。最後に、揮発性物質は40℃/20mmHgで除去される。材料の構造は、¹H NMR分光法によって確認された。

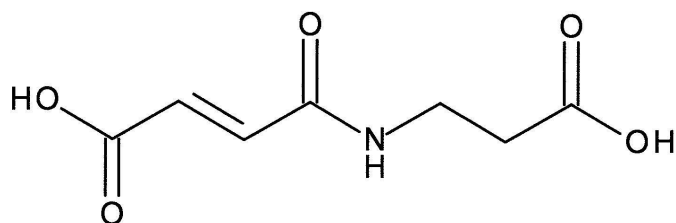
30

【0207】

本質的に以下の構造からなる白色粉末22gが得られる。

N-マレオイル-β-アラニン ((E)-4-(2-カルボキシエチルアミノ)-4-オキソブト-2-エン酸) :

【化 4 4】



40

【0208】

例 1 2

グリセロールジグリシジルエーテルベースのN-マレオイルβ-アラニンの誘導体

還流冷却器、温度計およびマグネチックスターラーを備えた100mlの3つ口フラスコで、10g(53.4mmol)の例11のN-マレオイルβ-アラニン、60gの1,3-ブタンジオールおよび0.23gのトリメチルアミンを室温で混合し、70℃に加

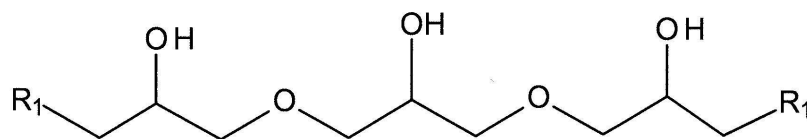
50

熱する。5.45 g (53.4 mmol エポキシ基) のグリセロールジグリシジルエーテルを加える。混合物を90℃に12時間加熱する。混合物は、加熱プロセス中に透明になる。その後、混合物を室温に冷却し、エポキシド基の変換を¹H NMR分光法によって決定する。変換エポキシ基は100%である。

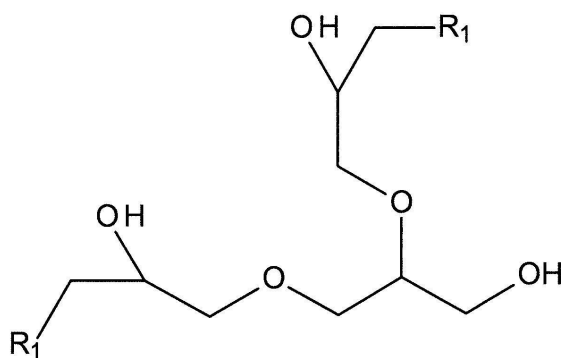
【0209】

本質的に以下の異性体からなる赤みがかった生成物が得られ、

【化45】



10



20

ここで

R₁は、-OC(O)CH=CHC(O)NHCH₂CH₂C(O)OH、または-OC(O)CH₂CH₂NHC(O)CH=CHC(O)OHである。

【0210】

例13

N-マレオイル-アスパラギン(4-アミノ-2-[[(E)-4-ヒドロキシ-4-オキソブト-2-エノイル] アミノ]-4-オキソブタン酸)

30

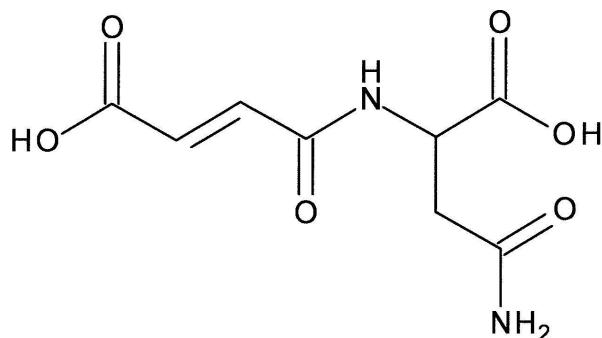
還流冷却器、温度計、マグネチックスターラーを備えた100mlの三口フラスコに、26.42 g (200 mmol) のアスパラギンを46 gのDI水に室温で分散させる。無水マレイン酸19.6 g (200 mmol) を加える。混合物は白色の分散液を形成し、これを23℃で5時間攪拌する。その後、混合物を50℃に5.5時間加熱する。それは透明な溶液を形成する。揮発性物質は45℃/20 mmHgで除去される。粘着性の残留物を2-プロパノールで2回洗浄し、揮発性成分を45℃/20 mmHgで除去する。材料の構造は、¹H NMR分光法によって確認された。

【0211】

本質的に以下の構造からなる無色のキャンディー様材料が得られる。

40

【化 4 6】



10

【 0 2 1 2】

例 1 4

グリセロールジグリシジルエーテルベースのN-マレオイルアスパラギンの誘導体

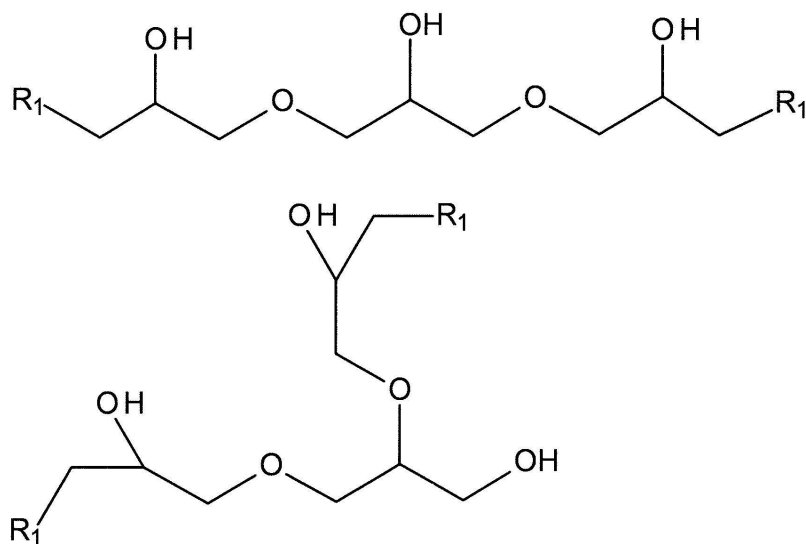
還流冷却器、温度計およびマグネチックスターラーを備えた100mlの3つ口フラスコで、12.29g (53.4mmol)の例13のN-マレオイルアスパラギン、60gの1,3-ブタンジオールおよび0.27gのトリメチルアミンを室温で混合し、70℃に加熱する。5.45g (53.4mmolエポキシ基)のグリセロールジグリシジルエーテルを加える。混合物を90℃に12時間加熱する。加熱プロセス中に白色の分散液が形成される。その後、混合物を室温に冷却し、エポキシド基の変換を¹H NMR分光法によって決定する。変換エポキシ基は>99%である。

20

【 0 2 1 3】

本質的に以下の異性体からなる白色分散液が得られ、

【化 4 7】



30

ここで

R₁は、 $-\text{OC}(\text{O})\text{CH}=\text{CHC}(\text{O})\text{NHCH}(\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2)\text{C}(\text{O})\text{OH}$
または

$-\text{OC}(\text{O})\text{CH}(\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{NH}_2)\text{NHC}(\text{O})\text{CH}=\text{CHC}(\text{O})\text{OH}$ である。

【 0 2 1 4】

材料はDI水に瞬時に溶解する。

【 0 2 1 5】

適用例

例 1 5

40

50

単一のブリーチされた欧州毛髪の色を増大と色の保持への適用

以下の処理液を調製した。

T S 2 溶液（例 9 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの酒石酸エステル誘導体）約 5 0 m l は、3 g の例 9 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの酒石酸エステル、7 g の 1, 3 ブタンジオール（すなわち、例 9 で得られた 1, 3 ブタンジオール中のグリセロールジグリシジルエーテルベースの酒石酸エステルの 1 0 g 溶液）、および 4 0 g の水から構成されていた。

【0 2 1 6】

T S 3 溶液（例 1 0 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N - アセチルアスパラギン酸エステル誘導体）約 5 0 m l は、3 g の例 1 0 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N - アセチルアスパラギン酸エステル、1 2 g の 1, 3 ブタンジオール（すなわち、例 1 0 で得られた 1, 3 ブタンジオール中のグリセロールジグリシジルエーテルベースの酒石酸エステルの 1 5 g の溶液）、および 3 5 g の水から構成されていた。

【0 2 1 7】

T S 4 溶液（例 1 2 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N - マレオイル β - アラニンの誘導体）約 5 0 m l は、3 g の例 1 2 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N - マレオイル β - アラニンの誘導体、1 2 g の 1, 3 ブタンジオール（すなわち、例 1 2 で得られた 1, 3 ブタンジオール中のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N - マレオイル β - アラニンの誘導体の 1 5 g の溶液）、および 3 5 g の水から構成されていた。

【0 2 1 8】

染毛剤は、L ' Oreal の市販の染毛剤 Garnier Nutrisse Ultra Color R3、Light Intense Auburn であった。

【0 2 1 9】

染色ステップ後の本発明による水溶液による後処理

Garnier R3 の標準的な染色手順に従って、4 g の単一のブリーチした欧州毛髪房（Kerling International Haarfarbrik GmbH）の束を Garnier R3 染料で 3 0 分間染色した。その後、ボンネットで毛髪を乾燥させた。初期色を測定した。乾燥した毛髪を 5 0 g の T S 2 溶液または T S 3 溶液または T S 4 溶液に 3 0 分間浸した。次に、毛髪を室温で一晩乾燥させた。次に、毛髪束を 1 0 w t - % S L E S （ラウリルエーテル硫酸ナトリウム）で 3 回洗浄した。その後、毛髪を乾燥させた。

【0 2 2 0】

対照の房は、5 0 m l の水で処理され Garnier R3 染色された房であった。次に、毛髪を 1 0 重量 % の S L E S で洗浄し、架橋技術によって処理された毛髪房と同じように乾燥させた。

【0 2 2 1】

洗浄プロトコル

4 g の毛髪房を 2 0 0 m l の 2 . 5 % S L E S 溶液を有する 2 5 0 m l の三角フラスコに入れた。フラスコを S h e l l a b 振とう水浴中で 1 2 0 r p m の 4 2 ° C で 5 分間振とうした（5 分間の洗浄は 1 0 回の手洗いに相当）。5 分後、毛髪を乾燥させ、毛髪の色を測定した。

【0 2 2 2】

後処理の利益

T S 2 後処理の色増大（深化）

10

20

30

40

50

【表 1 2】

	洗浄前色 L*, a*, b*			色増大デルタ E
	L*	a*	b*	
TS2 の処理前	26.74	29.75	17.74	
TS2 の処理後（例 9 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの酒石酸エステル誘導体）	23.62	15.20	6.70	18.53

10

【0 2 2 3】

TS2 は、後処理のプロトコルで毛髪の色調を著しく深める。

【0 2 2 4】

TS3 および TS4 処理は、色調を深めなかった。

【表 1 3】

	洗浄前色 L*, a*, b*		
	L*	a*	b*
TS3 の処理前	26.83	30.23	18.18
TS3 の処理後（例 10 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N-アセチルアスパラギン酸エステル誘導体）	27.33	24.78	14.27
TS4 の処理前	26.89	30.08	18.16
TS4 の処理後（例 12 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N-マレオイル β-アラニンの誘導体）	28.29	26.45	15.42

20

30

40

50

【表 1 4】

後処理の色保持利益

	色損失デルタ E
対照	17.91
TS2（例 9 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの酒石酸エステル誘導体）	10.35
TS3（例 1 0 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N-アセチルアスパラギン酸エステル誘導体）	7.73
TS4（例 12 のグリセロールジグリシジルエーテルベースの N-マレオイル β -アラニンの誘導体）	7.93

10

20

【 0 2 2 5 】

後処理の結果に関する上記の表は、TS2、TS3、およびTS4が、対照よりも大幅に明らかな色の損失の利点を提供することを示している。TS3とTS4は、対照に対して約10の色損失デルタEの改善を提供したが、TS2は約7.5の色損失デルタEの改善を提供した。

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 C	69/593 (2006.01)	C 0 7 C	69/593
C 0 7 C	67/26 (2006.01)	C 0 7 C	67/26
C 0 7 C	235/12 (2006.01)	C 0 7 C	235/12
C 0 7 C	235/28 (2006.01)	C 0 7 C	235/28
C 0 7 C	231/02 (2006.01)	C 0 7 C	231/02

アメリカ合衆国ニューヨーク州10546, ミルウッド, フェザント・ラン・82

(72)発明者 デュソー, アン

アメリカ合衆国ニューヨーク州10591, タリータウン, コブ・レーン・71

(72)発明者 スターシャック, ニコラス

アメリカ合衆国ニューヨーク州10579, パットナム・バレイ, パートリッジ・レーン・44

(72)発明者 ストライチャー, カタリーナ

ドイツ連邦共和国・51373・レバークーゼン, アドルフシュトラッセ・36

(72)発明者 ワグナー, ロランド

ドイツ連邦共和国・53227・ボン, ヒメリッヒヴェーク・60

審査官 小路 杏

(56)参考文献

特開2009-286753 (JP, A)

国際公開第2018/142484 (WO, A1)

特開2018-076278 (JP, A)

特開平02-212455 (JP, A)

特表2009-530484 (JP, A)

米国特許第04338225 (US, A)

国際公開第2006/010083 (WO, A2)

国際公開第2017/155875 (WO, A1)

特開平09-227479 (JP, A)

特表平09-509402 (JP, A)

R. E. ASAY et al., The synthesis of novel macrocyclic multidentate compounds from dioxodi
oic acids, Journal of Heterocyclic Chemistry, 1977年02月, Vol. 14, No. 1, pp. 85-90, D

OI: 10.1002/jhet.5570140116

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C 0 7 C

CAplus/REGISTRY (STN)