



República Federativa do Brasil
Ministério da Indústria, Comércio Exterior
e Serviços
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(11) PI 1007336-1 B1



(22) Data do Depósito: 15/01/2010

(45) Data de Concessão: 11/04/2017

(54) Título: COMPOSTO DE BETA-AMINO ÉSTER, COMPOSIÇÃO COSMÉTICA PARA CABELO, E USO DA REFERIDA COMPOSIÇÃO

(51) Int.Cl.: A61K 8/85; A61K 8/90; A61Q 5/06

(30) Prioridade Unionista: 15/01/2009 US 12/354,697

(73) Titular(es): LIVING PROOF, INC.

(72) Inventor(es): DAVID THOMAS PUERTA; SUSAN ALICE WILLIAMS; RONALD P. MCLAUGHLIN; DANIEL GRIFFITH ANDERSON

Relatório Descritivo da Patente de Invenção para "COMPOSTO DE BETA-AMINO ÉSTER, COMPOSIÇÃO COSMÉTICA PARA CABELO, E USO DA REFERIDA COMPOSIÇÃO".

Antecedentes da Invenção

5 Campo da Invenção

A presente invenção refere-se a composições e métodos para tratar cabelo e, em particular, a métodos e composições para conferir espessura, volume, textura e definição, os quais permitem modelagem aprimorada.

Descrição da Técnica Relacionada

10 Os produtos de tratamento de cabelo no mercado tipicamente usam polímeros comerciais para conferir volume, textura, definição e espessura. Pessoas com cabelos finos ou delicados usam regularmente produtos de volumização sob a forma de xampus, condicionadores, sprays modelador, cremes, géis, ou mousses em um esforço para aumentar o volume e o
15 encorpar de seu cabelo. Muitos destes materiais são combinações de polivinilpirrolidona/acetato de polivinila (PVP/V). Estes materiais criam volume no cabelo ligando múltiplas fibras de cabelo juntas em soldas de pontos, de modo que uma gotícula do produto pouse sobre uma seção do cabelo, deste modo ligando uma fibra de cabelo sobre si mesma e/ou ligando duas ou
20 mais fibras, criando cabelo mais firme, mais resistente a, por exemplo, cair liso sobre a cabeça. Esta tecnologia sofre de várias desvantagens, uma vez que os benefícios visuais obtidos não duram e o cabelo fica grosso ou quebradiço. Portanto, deseja-se identificar e desenvolver composições que obtenham estes resultados com maior facilidade de uso, menos peso e menos
25 sensação de resíduo pegajoso que não confirmam um tato quebradiço ou grosso ao cabelo, e as quais confirmam brilho e suavidade ao cabelo bem como volume e espessura.

A preparação de poli(β-amino ésteres) a partir da adição de conjugado de bis(aminas secondárias) ou aminas primárias a um bis(acrilato 30 éster) é descrita nas Patentes dos Estados Unidos N^os 6.998.115 e 7.427.394, e em requerimentos relacionados, cujas revelações são incorporadas aqui, a este requerimento de patente, por meio de referência em sua

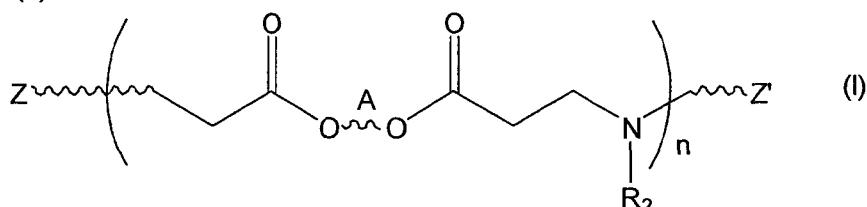
totalidade. Muitos dos compostos dentro do âmbito da descoberta são considerados biodegradáveis e biocompatíveis e são considerados úteis em uma variedade de sistemas de liberação de fármacos. No entanto, a aplicação em cosméticos não é contemplada nestas patentes.

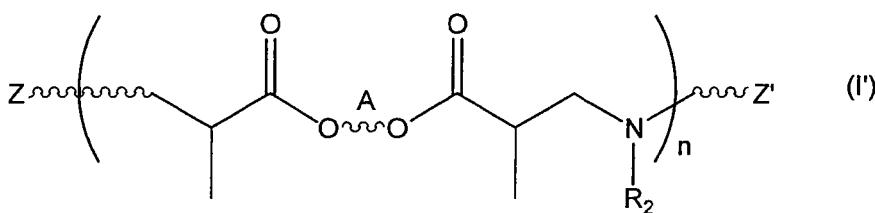
5 Sumário da Invenção

Enquanto que os avanços na técnica tipicamente envolvem novas formulações de compostos conhecidos, os inventores aqui, neste requerimento de patente, trouxeram inovação real ao campo do tratamento de cabelo no nível de composto, desenvolvendo novas entidades moleculares para aplicação na modelagem do cabelo. De particular interesse são composições de modelagem do cabelo que evitam confiar em compostos de PVP/VA de elevado peso molecular convencionais, que proporcionam um tato mais leve, mais natural, ao mesmo tempo que ainda proporcionam espessura, textura, volume e definição.

Em um aspecto, a invenção envolve o uso dos compostos, tais como são revelados nas Patentes dos Estados Unidos Nos. 7.427.394 e 6.998.115; Publicação dos Requerimentos de Patentes dos Estados Unidos Nos. US 2004/0071654 e US 2005/0265961; e nos Requerimentos de Patente Internacional Nos. WO 02/31025; WO 04/106411 e WO 07/143659 com um veículo cosmeticamente aceitável em uma composição para tratamento de cabelo. A revelação de cada uma das patentes e requerimentos publicados supracitados é incorporada por meio de referência aqui, a este requerimento de patente.

Portanto, em um aspecto, a invenção é uma composição para tratamento de cabelo compreendendo um composto de acordo com a fórmula (I) ou (I') em um veículo cosmeticamente aceitável:





Nas fórmulas (I) e (II'), n é um número inteiro entre 1 e 10.000; e Z e Z', juntos com os átomos aos quais estão ligados, representam grupos terminais acrilato, metacrilato ou amino.

O substituinte R₂ é o resíduo de um material de partida de ami-

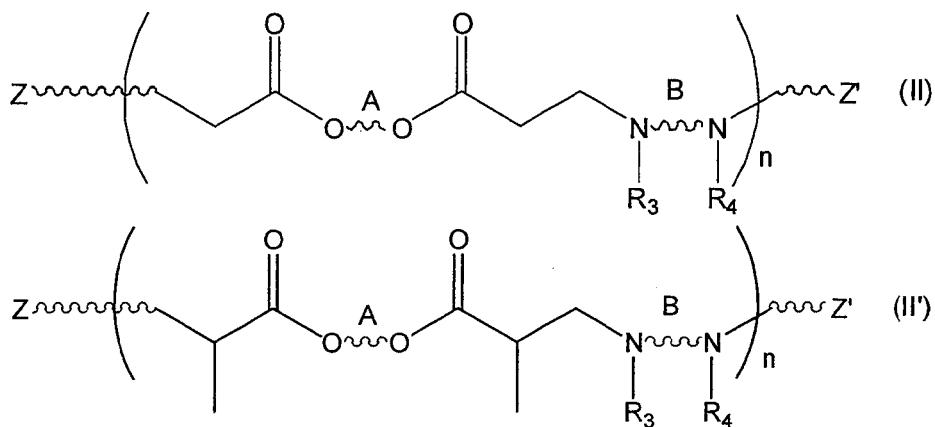
5 na primária, o qual pode ser reagido com um material de partida de diacrilato ou dimetacrilato, para formar o composto de acordo com a fórmula (I) ou (II'), conforme descrito em maiores detalhes abaixo. Por exemplo, R₂ pode ser selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, alcoxialquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido,

10 alquiltioéter, carbamoíla, carbonildioxila, éster carboxílico, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático e ureído, cada um dos quais pode ser substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, alcoxilalquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alifático cícli-

15 co, alifático heterocíclico, halogênio, hidroxila, ciano, carbamoíla, ácido carboxílico, carbonildioxila, alquiltioéter, siloxila, e tio-hidroxila.

A é uma cadeia de carbono ou uma cadeia de carbono contendo heteroátomo, opcionalmente substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, amino, alquilamino, dialquilamino, trialquilamino, aminoalquil arila, ureído, heterocíclico, heterocíclico aromático, cíclico, cíclico aromático, halogênio, hidroxila, alcóxi, ciano, amido, carbamoíla, ácido carboxílico, éster, carbonila, carbonildioxila, alquiltioéter, e tiol; em que os referidos substituintes podem se unir para formar um ou mais anéis.

25 Alternativamente, uma bis(amina) é usada como um material de partida e é reagida com o material de partida de diacrilato ou dimetacrilato, de modo que a composição para tratamento de cabelo compreenda um composto de acordo com a fórmula (II) ou (II').



Nas fórmulas (II) e (II'), A, n, Z e Z' são conforme definido para fórmula (I); R₃ e R₄ são definidos como para R₂ na Fórmula (I); e B e A são, de modo independente, uma cadeia de carbono ou uma cadeia de carbono contendo heteroátomo, opcionalmente substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, amino, alquilamino, dialquilamino, trialquilamino, aminoalquila, arila, ureído, heterocíclico, heterocíclico aromático, cíclico, cílico aromático, halogênio, hidroxila, alcóxi, ciano, amido, carbamoila, ácido carboxílico, éster, carbonila, carbonildioxila, alquiltioéter, e tiol.

5 Em outro aspecto da invenção, são proporcionados oligômeros os quais têm unidades monoméricas de β-amino éster ligadas a blocos de unidades monoméricas de repetição (tais como blocos de polibutadieno). Em particular, foi agora visto que compostos tendo uma porção β-amino éster e uma porção de borracha em composições para tratamento de cabelo novas

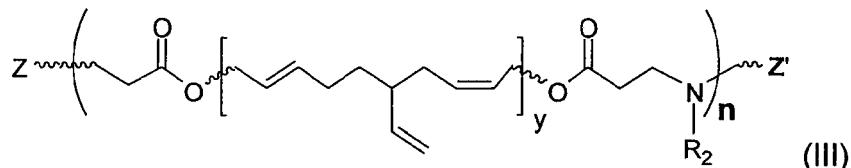
10 e úteis evitam as desvantagens dos produtos de volumização conhecidos na técnica anterior.

Sem desejar ser limitado por qualquer teoria em particular, acredita-se que os compostos de β-amino éster divulgados aqui, neste requerimento de patente, ligam às fibras do cabelo aumentando a fricção entre as 15 fibras e produzem benefícios não fornecidos através da tecnologia convencional. A composição da invenção aumenta fricção em cabelo, enquanto permite que as fibras do cabelo permaneçam livres para se mover, possibilitando uma sensação mais natural. Além disso, as composições da invenção proporcionam estilos de cabelo mais duradouros e remodeláveis. As fibras 20 são livres para separar e refixar em pontos diferentes, possibilitando uma

sensação e movimento mais naturais. Estes efeitos são obtidos de acordo com a invenção usando as composições e métodos descritos aqui, neste requerimento de patente. Em consequência, acredita-se que as composições e métodos da presente invenção evitam fazer o cabelo ter tato grosso ou quebradiço.

Portanto, neste aspecto adicional, a invenção é uma composição para tratamento de cabelo compreendendo um composto de acordo com fórmula (I) ou fórmula (II), em que A é uma porção de borracha, tal como, sem limitação, uma porção composta de uma ou mais unidades de butadieno, isopreno, cloropreno, estireno-butadieno, misturas dos mesmos, ou variações dos mesmos.

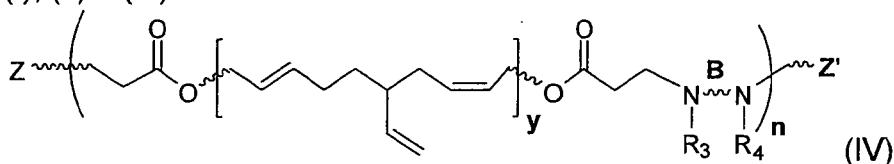
Em modalidades preferenciais, uma composição para tratamento de cabelo de acordo com a invenção compreende um composto de fórmula (III) em um veículo cosmeticamente aceitável:



Na fórmula (III) acima, n é um número inteiro entre 1 e 10.000; y é um número inteiro entre 1 e 10.000; e R₂ é selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, alcoxialquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, arila, amido, alquiltioéter, carbamoíla, carbonildioxila, éster carboxílico, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático e ureído, cada um dos quais pode ser substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, alcoxilalquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halogênio, hidroxila, ciano, carbamoíla, ácido carboxílico, carbonildioxila, alquiltioéter, siloxila, e tio-hidroxila.

Alternativamente, uma composição para tratamento de cabelo de acordo com a invenção pode compreender um composto de acordo com fórmula (IV) em um veículo cosmeticamente adequado, em que y, n, Z, Z', B, R₃ e R₄ são todos definidos conforme estipulado acima com respeito às fórmulas (I) e (II).

mulas (I), (II) e (III):



- Os métodos de acordo com a invenção compreendem a etapa de contactar o cabelo do couro cabeludo com a composição contendo um composto de acordo com quaisquer das fórmulas (I) a (IV) em um veículo cosmeticamente aceitável, conforme descrito em maiores detalhes na descrição detalhada que se segue.
- 5

Descrição Detalhada das Modalidades Preferenciais

As vantagens das composições e formulações de acordo com a invenção são trazidas incorporando porções β -amino éster específicas e 10 porções de ligação específicas de acordo com a invenção. Em alguns casos (que não devem ser considerados como limitantes), as formulações foram adaptadas para modelagem de cabelo. Foi visto que algumas destas composições proporcionam ao usuário a capacidade de não somente modelar o cabelo, mas também a capacidade de remodelar um estilo depois deste ter 15 sido significativamente alterado (depois de dormir de um dia para o outro, por exemplo). Os métodos e exemplos específicos de reagir diacrilatos e aminas, e os compostos e resultados funcionais obtidos, deste modo, são descritos em maiores detalhes na seguinte descrição detalhada da invenção.

Definições

20 Definições de grupos funcionais específicos e termos químicos são descritos em mais detalhes abaixo. Para os fins desta invenção, os elementos químicos são identificados de acordo com a tabela periódica de elementos *Periodic Table of the Elements, CAS version, Handbook of Chemistry and Physics*, 75th Ed., e grupos funcionais específicos são geralmente definidos conforme descrito na mesma. Adicionalmente, princípios gerais de 25 química orgânica, bem como porções funcionais específicas e reatividade são descritas em *Organic Chemistry*, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito (1999), cujos conteúdos integrais são incorporados aqui, a este requerimento de patente, por meio de referência.

Em geral, o termo "substituído", quer precedido pelo termo "opcionalmente" ou não, e substituintes contidos nas fórmulas desta invenção se referem à substituição de átomos de hidrogênio em uma dada estrutura com um substituinte especificado. A menos que declarado de modo diverso,

5 quando mais de uma posição em qualquer dada estrutura pode ser substituída com mais de um substituinte selecionado entre um grupo especificado, o substituinte pode ser quer o mesmo ou diferente em cada posição. Conforme usado aqui, neste requerimento de patente, o termo "substituído" é contemplado para incluir todos os substituintes permissíveis de compostos orgânicos.

10 Em um amplo aspecto, os substituintes permissíveis incluem substituintes acíclicos e cílicos, ramificados e não ramificados, carbocíclicos e heterocíclicos, aromáticos e não aromáticos de compostos orgânicos. Para os fins desta invenção, heteroátomos, tais como nitrogênio, oxigênio ou enxofre, podem ser ligados a átomos de hidrogênio ou ser substituídos com

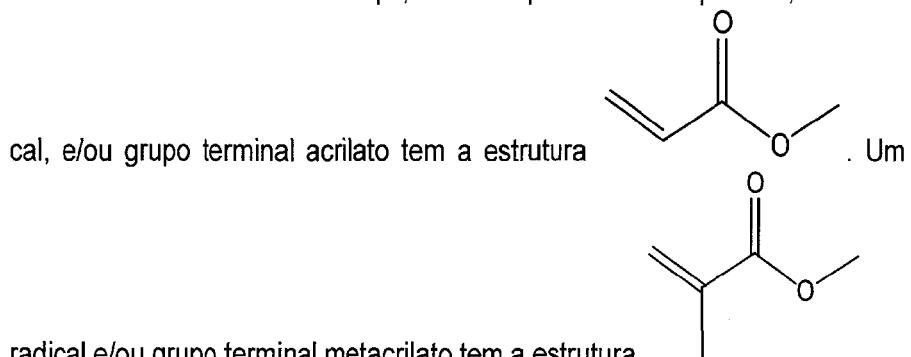
15 quaisquer substituintes permissíveis de compostos orgânicos descritos aqui, neste requerimento de patente, os quais satisfazem as valências dos heteroátomos.

Onde um átomo de carbono em uma cadeia pode ser substituído com um heteroátomo, isto também é algumas vezes referido como uma

20 "substituição".

O termo acila conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um grupo tendo a fórmula geral $-C(O)R$, onde R é alquila, alquenila, alquinila, arila, carbocíclico, heterocíclico, ou heterocíclico aromático. Um exemplo de um grupo acila é acetila.

25 Conforme usado aqui, neste requerimento de patente, um radi-



O termo alifático, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, inclui tanto hidrocarbonetos saturados quanto insaturados, de cadeia reta (isto é, não ramificados), ramificados, acíclicos, cílicos, ou policílicos alifáticos, os quais são opcionalmente substituídos com um ou mais 5 grupos funcionais. Conforme será reconhecido por uma pessoa versada na técnica, "alifático" pretende incluir aqui, neste requerimento de patente, mas não está limitado a, porções alquila, alquenila, alquinila, cicloalquila, cicloalquenila, e cicloalquinila.

O termo alquila conforme usado aqui, neste requerimento de pa- 10 tente, refere-se a alguns radicais hidrocarboneto saturados, de cadeia reta ou ramificada derivados de um hidrocarboneto contendo entre um e vinte átomos de carbono por remoção de um único átomo de hidrogênio. Em al- 15 gumas modalidades, o grupo alquila contém 1 a 10 átomos de carbono. Em outras modalidade, o grupo alquila contém 1 a 8 átomos de carbono. Em 15 ainda outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 6 átomos de carbono. Em ainda outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 4 carbonos. Ex- 20 emplos de radicais alquila incluem, mas não estão limitados a, metila, etila, n-propila, isopropila, n-butila, iso-butila, sec-butila, sec-pentila, iso-pentila, terc-butila, n-pentila, neopentila, n-hexila, sec-hexila, n-heptila, n-octila, n- 25 decila, n-undecila, dodecila, e similares, os quais podem carregar um ou mais substituintes. Conforme usado aqui, neste requerimento de patente, o termo "alquila" inclui grupos alquila retos, ramificados e cílicos. Uma con- 30 venção análoga aplica-se a outros termos genéricos tais como "alquenila", "alquinila", e similares. Além disso, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, os termos "alquila", "alquenila", "alquinila," e similares englobam tanto grupos substituídos, quanto não substituídos. Em algumas modalida- des, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, "alquila inferior" é usada para indicar os grupos alquila (cílicos, acíclicos, substituídos, não substituídos, ramificados ou não ramificados) tendo 1 a 6 átomos de carbo- no.

O termo alcóxi conforme usado aqui, neste requerimento de pa- 10 tente, refere-se a um grupo saturado (isto é, alquil-O-) ou não saturado (isto

é, alquenil-O- e alquinil-O-) ligado à porção molecular de origem através de um átomo de oxigênio. Em algumas modalidades, o grupo alquila, alquenila ou alquinila contém 1 a 20 átomos de carbono alifáticos. Em algumas outras modalidades, os grupos alquila, alquenila, e alquinila empregados nos grupos alcóxi da invenção contêm 1 a 8 átomos de carbono alifáticos. Em ainda outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 6 átomos de carbono alifáticos. Em ainda outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 4 átomos de carbono alifáticos. Exemplos incluem, mas não estão limitados a, metóxi, etóxi, propóxi, isopropóxi, n-butóxi, *terc*-butóxi, *i*-butóxi, sec-butóxi, neopen-
tóxi, n-hexóxi, e similares.

O termo alquenila denota um grupo monovalente derivado de uma porção hidrocarboneto tendo, no mínimo, uma ligação dupla carbono-carbono pela remoção de um único átomo de hidrogênio. Em algumas modalidades, o grupo alquenila empregado na invenção contém 1 a 20 átomos de carbono. Em algumas modalidades, o grupo alquenila empregado na invenção contém 1 a 10 átomos de carbono. Em outras modalidade, o grupo alquenila empregado contém 1 a 8 átomos de carbono. Em ainda outras modalidades, o grupo alquenila contém 1 a 6 átomos de carbono. Em ainda outras modalidades, o grupo alquenila contém 1 a 4 carbonos. Grupos alquenila incluem, por exemplo, etenila, propenila, butenila, 1-metil-2-buten-1-ila, e similares.

O termo alquinila conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um grupo monovalente derivado de um hidrocarboneto tendo no mínimo uma ligação tripla carbono-carbono pela remoção de um único átomo de hidrogênio. Em algumas modalidades, o grupo alquinila empregado na invenção contém 1 a 20 átomos de carbono. Em algumas modalidades, o grupo alquinila empregado na invenção contém 1 a 10 átomos de carbono. Em outras modalidade, o grupo alquinila empregado contém 1 a 8 átomos de carbono. Em ainda outras modalidades, o grupo alquinila contém 1 a 6 átomos de carbono. Exemplos de grupos alquinila incluem, mas não estão limitados a, etinila, 2-propinil (propargila), 1-propinila, e similares.

Os termos alquilamino, dialquilamino, e trialquilamino conforme

usados aqui, neste requerimento de patente, referem-se a um, dois, ou três, respectivamente, grupos alquila, conforme previamente definido, ligados à porção molecular de origem através de um átomo de nitrogênio. O termo alquilamino refere-se a um grupo tendo a estrutura $-NHR'$, em que R' é um grupo alquila, conforme previamente definido; e o termo dialquilamino refere-se a um grupo tendo a estrutura $-NR'R''$, em que R' e R'' são cada um selecionado de modo independente a partir do grupo consistindo em grupos alquila. O termo trialquilamino refere-se a um grupo tendo a estrutura $-NR'R''R'''$, em que R' , R'' , e R''' são cada um selecionado de modo independente a partir o 5 grupo consistindo em grupos alquila. Em algumas modalidades, o grupo alquila contém 1 a 20 átomos de carbono alifáticos. Em algumas outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 10 átomos de carbono alifáticos. Em ainda outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 8 átomos de carbono alifáticos. Em ainda outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 6 átomos de 10 carbono alifáticos. Em ainda outras modalidades, o grupo alquila contém 1 a 4 átomos de carbono alifáticos. Adicionalmente, R' , R'' , e/ou R''' tomados juntos podem opcionalmente ser $-(CH_2)_k-$ onde k é um número inteiro de 2 a 6, para formar um anel. Exemplos incluem, mas não estão limitados a, metilamino, 15 dimetilamino, etilamino, dietilamino, dietilaminocarbonila, metiletilamino, isopropilamino, piperidino, trimetilamino, e propilamino.

20

Um grupo amino, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, engloba grupos alquilamino, dialquilamino e trialquilamino (conforme definidos acima), e aminoalquila igualmente inclui $-RNH_2$, $-RNHR'$, $-RNR'R''$ e $-RNR'R''R'''$. Em modalidades preferenciais de acordo com a invenção, um grupo aminoalquila substituído, tal como um grupo dietanolamino-propila, é substituído no nitrogênio da porção β -amino éster do composto.

O termo aromático, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a uma porção tendo elétrons deslocalizados devido a ligações duplas conjugadas, que podem formar um anel (como em uma porção aril); heteroaromático significa um composto aromático, no qual um carbono é substituído com um ou mais átomos de nitrogênio, oxigênio, fósforo, silício 30 ou enxofre.

Em geral, os termos arila e heteroarila, conforme usados aqui, neste requerimento de patente, referem-se a porções mono- ou policíclicas, heterocíclicas, e poli-heterocíclicas insaturadas tendo preferencialmente 3 a 14 átomos de carbono, cada um dos quais pode ser substituído ou não substituído. Substituintes incluem, mas não estão limitados a, quaisquer dos substituintes previamente mencionados, isto é, os substituintes mencionados para porções alifáticas, ou para outras porções conforme revelado aqui, neste requerimento de patente, resultando na formação de um composto estável. Em algumas modalidades da presente invenção, arila refere-se a um sistema de anéis carbocíclicos mono- ou bicíclicos tendo um ou dois anéis aromáticos incluindo, mas não limitado a, fenila, naftila, tetra-hidronaftila, indanila, indenila, e similares. Em algumas modalidades da presente invenção, o termo heteroarila, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um radical cílico aromático tendo de cinco a dez átomos do anel dos quais um átomo do anel é selecionado entre S, O, e N; zero, um, ou dois átomos do anel são heteroátomos adicionais selecionados de modo independente entre S, O, e N; e os átomos do anel restantes são carbono, o radical sendo unido ao resto da molécula através de quaisquer dos átomos do anel, tais como, por exemplo, piridila, pirazinila, pirimidinila, pirrolila, pirazolila, imidazolila, tiazolila, oxazolila, iso-oxazolila, tiadiazolila, oxadiazolila, tiofenila, furanila, quinolinila, isoquinolinila, e similares.

Será reconhecido que grupos arila e heteroarila podem ser não substituídos ou substituídos, em que substituição inclui substituição de um, dois, três, ou mais dos átomos de hidrogênio nos mesmos, de modo independente, com qualquer uma ou mais das seguintes porções incluindo, mas não limitadas a: alifático; heteroalifático; arila; heteroarila; arilalquila; heteroarilalquila; alcóxi; arilóxi; heteroalcóxi; heteroarilóxi; alquiltio; ariltio; heteroalquiltio; heteroariltio; -F; -Cl; -Br; -I; -OH; -NO₂; -CN; -CF₃; -CH₂CF₃; -CHCl₂; -CH₂OH; -CH₂CH₂OH; -CH₂NH₂; -CH₂SO₂CH₃; -C(O)R_x; -CO₂(R_x); -CON(R_x)₂; -OC(O)R_x; -OCO₂R_x; -OCON(R_x)₂; -N(R_x)₂; -S(O)₂R_x; -NR_x(CO)R_x, em que cada ocorrência de R_x de modo independente inclui, mas não está limitada a, alifático, heteroalifático, arila, heteroarila, arilalquila,

ou heteroarilalquila, em que quaisquer dos substituintes alifáticos, heteroalifáticos, arilalquila, ou heteroarilalquila descritos acima e aqui, neste requerimento de patente, podem ser substituídos ou não substituídos, ramificados ou não ramificados, cíclicos ou acíclicos, e em que quaisquer dos substituintes arila ou heteroarila descritos acima e aqui, neste requerimento de patente, podem ser substituídos ou não substituídos. Exemplos adicionais de substituintes aplicáveis de modo geral são ilustrados pelas modalidades específicas mostradas nos Exemplos que são descritos aqui, neste requerimento de patente.

10 O termo ácido carboxílico conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um grupo de fórmula $\text{--CO}_2\text{H}$.

Os termos halo e halogênio conforme usados aqui, neste requerimento de patente, referem-se a um átomo selecionado a partir de flúor, cloro, bromo, e iodo.

15 O termo heteroalifático, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a porções alifáticas que contêm um ou mais átomos de oxigênio, enxofre, nitrogênio, fósforo, ou silício, por exemplo, em vez de átomos de carbono. Porções heteroalifáticas podem ser ramificadas, não ramificadas, cíclicas ou acíclicas e incluem heterociclos saturados e insaturados, tais como morfolino, pirrolidinila, etc. Em algumas modalidades, porções heteroalifáticas são substituídas por substituição independente de um ou mais dos átomos de hidrogênio nas mesmas com uma ou mais porções incluindo, mas não limitadas a, alifáticas; heteroalifáticas; arila; heteroarila; arilalquila; heteroarilalquila; alcóxi; arilóxi; heteroalcóxi; heteroarilóxi; alquilitio; ariltio; heteroalquilitio; heteroarilitio; -F; -Cl; -Br; -I; -OH; -NO₂; -CN; -CF₃; -CH₂CF₃; -CHCl₂; -CH₂OH; -CH₂CH₂OH; -CH₂NH₂; -CH₂SO₂CH₃; -C(O)R_x; -CO₂(R_x); -CON(R_x)₂; -OC(O)R_x; -OCO₂R_x; -OCON(R_x)₂; -N(R_x)₂; -S(O)₂R_x; -NR_x(CO)R_x, em que cada ocorrência de R_x de modo independente inclui, mas não está limitada a, alifático, heteroalifático, arila, heteroarila, arilalquila, ou heteroarilalquila, em que quaisquer dos substituintes alifáticos, heteroalifáticos, arilalquila, ou heteroarilalquila descritos acima e aqui, neste requerimento de patente, podem ser substituídos ou não substituídos, ramifi-

cados ou não ramificados, cíclicos ou acíclicos, e em que quaisquer dos substituintes arila ou heteroarila descritos acima e aqui, neste requerimento de patente, podem ser substituídos ou não substituídos. Exemplos adicionais de substituintes aplicáveis de modo geral são ilustrados pelas modalidades 5 específicas mostradas nos Exemplos que são descritos aqui, neste requerimento de patente.

O termo heterocíclico, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um sistema de anéis de 3 a 10 membros aromático ou não aromático, parcialmente insaturado ou totalmente saturado, o qual 10 inclui anéis únicos de 3 a 8 átomos de tamanho e sistemas de anéis bi- e tricíclicos, os quais podem incluir grupos arila aromáticos de cinco ou seis membros ou heterocíclicos aromáticos fundidos a um anel não aromático. Estes anéis heterocíclicos incluem aqueles tendo de um a três heteroátomos selecionados de modo independente entre oxigênio, enxofre, e nitrogênio, 15 nos quais os heteroátomos de nitrogênio e enxofre podem ser opcionalmente oxidados e o heteroátomo de nitrogênio pode ser opcionalmente quaternizado. Em algumas modalidades, o termo heterocílico refere-se a um anel não aromático de 5, 6, ou 7 membros ou um grupo policíclico, em que, no mínimo, um átomo do anel é um heteroátomo selecionado entre O, S, e N 20 (em que os heteroátomos de nitrogênio e enxofre podem ser opcionalmente oxidados), incluindo, mas não limitado a, um grupo bi- ou tri-cíclico, compreendendo anéis fundidos de seis membros tendo entre um e três heteroátomos selecionados de modo independente entre o oxigênio, enxofre, e nitrogênio, em que (i) cada anel de 5 membros tem 0 a 2 ligações duplas, 25 (ii) cada anel de 6 membros tem 0 a 2 ligações duplas, e cada anel de 7 membros tem 0 a 3 ligações duplas, (iii) os heteroátomos de nitrogênio e enxofre podem ser opcionalmente oxidados, (iv) o heteroátomo de nitrogênio pode ser opcionalmente quaternizado, e (v) quaisquer dos anéis heterocíclicos acima podem ser fundidos a um anel arila ou heteroarila.

30 O termo heterocíclico aromático, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um radical cíclico aromático tendo de cinco a dez átomos do anel dos quais um átomo do anel é selecionado entre

enxofre, oxigênio, e nitrogênio; zero, um, ou dois átomos do anel são heteroátomos adicionais selecionados de modo independente entre enxofre, oxigênio, e nitrogênio; e os átomos do anel restantes são carbono, o radical sendo unido ao resto da molécula através de quaisquer dos átomos do anel,

5 tais como, por exemplo, piridila, pirazinila, pirimidinila, pirrolila, pirazolila, imidazolila, tiazolila, oxazolila, iso-oxazolila, tiadiazolila, oxadiazolila, tiofenila, furanila, quinolinila, isoquinolinila, e similares. Grupos heterocíclicos aromáticos podem ser não substituídos ou substituídos com substituintes selecionados entre o grupo consistindo em alquila, alquenila, alquinila, haloalquila,

10 10 alcóxi, tioalcóxi, amino, alquilamino, dialquilamino, trialquilamino, acilamino, ciano, hidróxi, halo, mercapto, nitro, carboxialdeído, carbóxi, acoxicarbonila, e carboxamida ramificados e não ramificados.

O termo carbonildioxila, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um grupo carbonato da fórmula –O-CO-OR.

15 O termo carbamoíla, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um grupo amida da fórmula –CONH₂.

O termo hidrocarboneto, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a qualquer grupo químico compreendendo hidrogênio e carbono. O hidrocarboneto pode ser substituído ou não substituído. O hidrocarboneto pode ser não saturado, saturado, ramificado, não ramificado, cíclico, policíclico, ou heterocíclico. Hidrocarbonetos ilustrativos incluem, por exemplo, metila, etila, n-propila, iso-propila, ciclopropila, alila, vinila, n-butila, terc-butila, etinila, ciclo-hexila, metóxi, dietilamino, e similares. Conforme seria de conhecimento de uma pessoa versada na técnica, todas as valências devem ser satisfeitas ao fazer quaisquer substituições.

O termo tio-hidroxila ou tiol, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um grupo da fórmula –SH.

O termo ureído, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um grupo da fórmula –NH–CO–NH₂

30 Os seguintes são mais termos gerais usados do início ao fim do presente requerimento:

Conforme usado aqui, neste requerimento de patente, as formas

singulares "um", "uma", e "o", "a" incluem a referência plural, a menos que o contexto claramente indique o contrário. Portanto, por exemplo, uma referência a "um monômero" inclui uma pluralidade de tais monômeros.

O termo "queratina", conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a qualquer uma de uma classe de proteínas estruturais fibrosas encontradas no cabelo, lã e unhas. As proteínas queratina contêm uma grande quantidade de resíduos cisteína. O cabelo humano é uma queratina que tem aproximadamente 15% de resíduos cisteína reticulados por pontes de dissulfeto.

Conforme usado aqui, neste requerimento de patente, um "monômero" é uma unidade estrutural de repetição aparecendo em um polímero ou um oligômero. Portanto, por exemplo, o polímero polibutadieno consiste em unidades de repetição derivadas de butadieno.

O termo "oligômero", conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um composto químico com menos de 10 unidades estruturais de repetição. Em particular, um composto de acordo com a invenção contendo menos de 10 grupos β -amino éster é considerado um oligômero, não obstante o tamanho do bloco conectando os grupos amino éster.

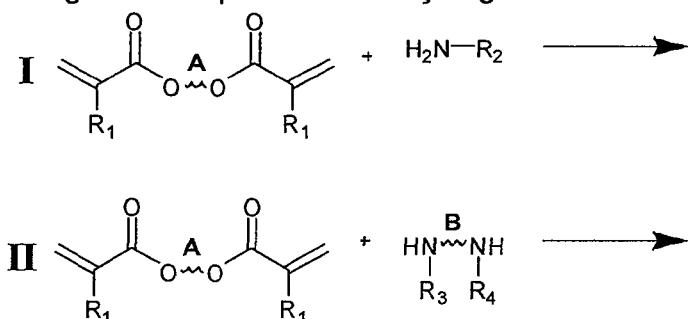
O termo "polímero", conforme usado aqui, neste requerimento de patente, refere-se a um composto químico de unidades estruturais de repetição (monômeros) conectadas por ligações covalentes. Um polímero é tipicamente de peso molecular elevado compreendendo 10s a 100s a 1000s ou ainda mais monômeros. No entanto, conforme usado aqui, neste requerimento de patente, o termo "polímero" também inclui "oligômeros".

O termo "borracha", conforme usado aqui, neste requerimento de patente, significa um composto contendo unidades de repetição de butadieno, isopreno, cloropreno, estireno-butadieno, ou variações dos mesmos, e também inclui acetato de vinila de etileno (EVA) (tal como vendido sob o nome comercial Elvax[®]), borracha de uretano, borracha de silicone ou elástómero de silicone. Estas unidades incorporadas em uma molécula constituem a "porção de borracha" da molécula, conforme este termo é usado aqui, neste requerimento de patente.

O símbolo $\sim\sim$ em uma estrutura química significa que diferentes átomos e/ou ligações podem ser encontradas naquela posição. Portanto, na fórmula (I), A é designado com símbolo $\sim\sim$ porque existem uma série de opções para a configuração de A. Em conexão com os grupos terminais, para formar um grupo terminal de acrilato ou metacrilato, por exemplo, Z $\sim\sim$ significa que Z e o carbono ao qual é ligado formam um $\text{CH}_2=\text{}$ terminal do grupo terminal de acrilato ou metacrilato. Alternativamente, na mesma fórmula, o símbolo $\sim\sim$ pode representar uma ligação com o próximo grupo de repetição de monômero.

10 Modalidades Preferenciais

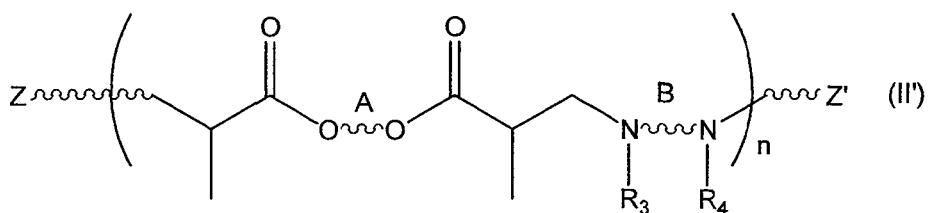
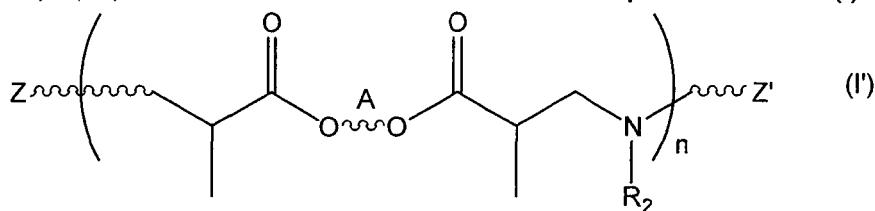
Composições para tratamento de cabelo, de acordo com a invenção, compreendem um composto de β -amino éster, o qual pode ser formado por reação de um diacrilato ou dimetacrilato com uma amina, de acordo com um dos seguintes esquemas de reação geral:



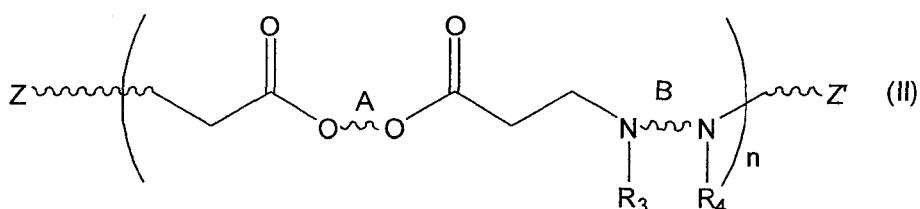
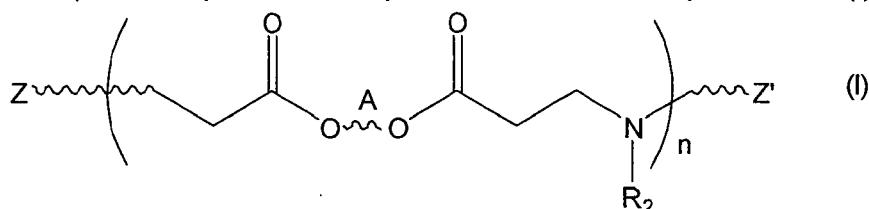
Nestas fórmulas, R₁ é um hidrogênio ou metila, o qual define o material de partida como um diacrilato ou um dimetacrilato. R₂, R₃, e R₄ são selecionados a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, alcoxialquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alquistioéter, carbamoíla, carbonildioxila, éster carboxílico, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático e ureído, cada um dos quais pode ser substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, acoxialquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halogênio, hidroxila, ciano, carbamoíla, ácido carboxílico, carbonildioxila, alquistioéter, siloxila, e tio-hidroxila.

Se o material de partida for um dimetacrilato, as reações acima

formam compostos representados pelas fórmulas correspondentes (I') e (II'), em que A, B, Z, Z' e n são conforme definido acima para fórmulas (I) e (II):



Onde o material de partida é um diacrilato, as reações acima formam compostos representados pelas fórmulas correspondentes (I) e (II):



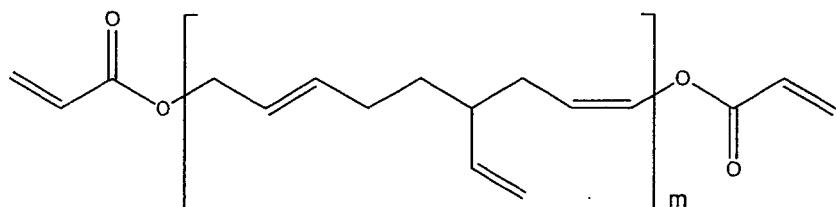
5 Os compostos referidos incluem, sem limitação a, os compostos revelados nas patentes supracitadas e nos requerimentos publicados incorporados por meio de referência.

Em uma modalidade da presente invenção, n está na faixa de 1 a 10.000. Em algumas outras modalidades da presente invenção, n está na 10 faixa de 1 a 1.000, 1 a 100 ou 3 a 10.

Em modalidades preferenciais, as porções de acrilato ou metacrilato nos compostos são encadeadas por uma porção A de peso molecular relativamente elevado. Nas modalidades presentemente preferenciais, A é uma porção de borracha, incluindo sem limitação, um material compreendendo monômeros selecionados entre monômeros de butadieno, estireno-

butadieno, cloropreno, e isopreno.

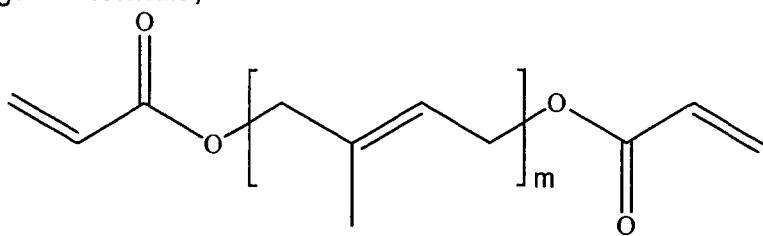
Materiais contendo borracha que podem ser reagidos para formar um polímero de acordo com a invenção incluem, sem limitação, diacrilato de polibutadieno, o qual é representado pela fórmula



5

ou seu dimetacrilato correspondente.

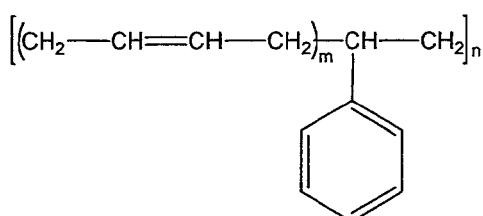
Também pode ser usado diacrilato de poli-isopreno, representa-
do pela seguinte fórmula,



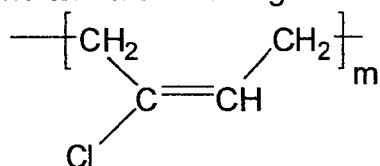
Também pode ser usado o dimetacrilato correspondente.

Nestes materiais de partida, m pode ser 1 a 60, e em algumas
10 modalidades 1 a 40, 1 a 30 ou 20 a 30.

Alternativamente, borrachas de policloropreno ou estireno-
butadieno podem ser modificadas em diacrilatos ou dimetacrilatos, os quais
podem ser em seguida reagidos de acordo com os esquemas de reação ge-
ral I e II acima. As borrachas de estireno/butadieno têm a seguinte estrutura
15 geral:



Poli-cloropreno tem a estrutura geral

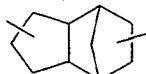


Em modalidades presentemente preferenciais diacrilatos de polibutadieno (PBDs) são empregados como um material de partida. Embora não limitem a invenção, podem ser usados diacrilatos e dimetacrilatos tendo um número médio de peso molecular na faixa de 1000 g/mol a 5.000 g/mol.

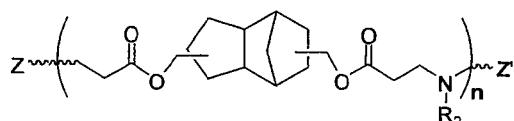
- 5 Nos exemplos elaborados abaixo, foram usados dois materiais de partida diferentes, tendo um número médio de peso molecular de 1400 g/mol e 3000 g/mol, respectivamente.

Em outras modalidades, A é uma cadeia de carbono opcionalmente substituída ou cadeia de carbono contendo heteroátomo contendo 1 a 10 30 átomos na cadeia. Portanto, em alguns casos, diacrilato de 1,4-butanodiol, dimetacrilato de 1,4-butanodiol, diacrilato de 1,2-etanodiol, diacrilato de 1,6-hexanodiol, diacrilato de 2,5-hexanodiol, e diacrilato de 1,3-propanodiol podem ser usados como um material de partida de diacrilato, de tal modo que A compreenda uma cadeia de carbono tendo menos de 30 átomos.

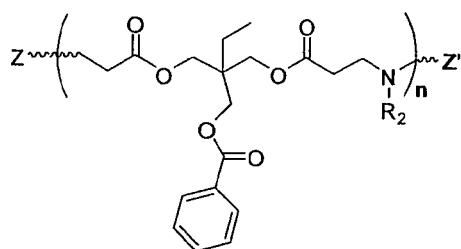
15 O ligante A entre as porções de acrilato ou metacrilato do composto pode compreender uma cadeia de carbono substituída, em que os substituintes se unem para formar um ou mais anéis. Por exemplo, a porção multicíclica A pode ser representada pela fórmula



20 O composto correspondente útil em uma composição para tratamento de cabelo, de acordo com a invenção, tem a seguinte fórmula, em que Z, Z' e R₂ são conforme descrito acima.:.



25 Alternativamente, o ligante A pode compreender uma cadeia de carbono ou cadeia de carbono contendo heteroátomo tendo um ou mais substituintes aromáticos sobre a cadeia, resultando em compostos de acordo com a seguinte fórmula,



O material de partida de diacrilato ou dimetacrilato pode ser reagido com aminas tendo grupos funcionais variáveis em proporções variáveis. Por exemplo, proporções aceitáveis de PBD:amina podem variar a partir de cerca de 1: 2 até cerca de 2: 1. Nos exemplos elaborados abaixo, as proporções de PBD:amina foram variadas entre 1:1,8 e 1:1,2.

Os compostos, de acordo com a invenção, resultantes da reação acima descrita, algumas vezes têm pequenas quantidades de amina não reagida. Em modalidades preferenciais, o composto usado na composição, de acordo com a invenção, contém menos de 1% em peso, preferencialmente menos de 0,1% em peso, e mais preferencialmente menos de 0,01% em peso de amina não reagida.

Um diacrilato ou dimetacrilato adequado pode ser reagido com uma amina primária tendo uma fórmula NH_2R (onde R_2 é conforme definido acima) por Adição de Michael. O grupo R_2 sobre a amina primária pode ser selecionado para conferir propriedades desejadas à composição. Portanto, a amina pode ser selecionada para modificar as propriedades conferidas à composição pela porção de borracha, para reduzir uma sensação oleosa, pesada enquanto mantém os atributos friccionais obtidos com a borracha, por exemplo. Alternativamente, grupos hidrofílicos podem ser incorporados no composto através da amina para melhorar a solubilidade em água. Do mesmo modo, grupos hidrofóbicos podem ser usados para melhorar a formulação da fase de óleo e/ou a interação com lipídeos do cabelo. Porções aromáticas e porções contendo estireno podem ser usadas para aumentar a rigidez dos compostos acabados.

As seguintes aminas primárias foram usadas para formular compostos de acordo com a invenção: propilamina; butilamina; pentilamina; hexilamina; octilamina; 1-aminodecano; isopropilamina; sec-butilamina; isobutilamina; terc-butilamina; 2-aminopentano; isopentilamina; 2-amino-6-metil-

- heptano; 3-(dimetilamino)-1-propilamina; 2-dietilaminoetilamina; 2-(di-isopropilamino)etilamina; 3-(dietilamino)propilamina; N,N-dimetiletilenodiamina; etanolamina; 3-amino-1-propanol; amino-2-propanol; 4-amino-1-butanol; 5-amino-1-pentanol; 6-amino-1-hexanol; n-(3-aminopropil)dietanolamina;
- 5 2-(2-aminoetóxi)etanol; 2-metoxietilamina; 3-metoxipropilamina; 3-etoxipropilamina; 3-butoxipropilamina; aminoacetaldeído dimetil acetal; 3-Isopropoxipropilamina; aminoacetaldeído dietil acetal; 4-aminobutiraldeído dietil acetal; 3-aminopropiltetoxissilano; 2-metoxibenzilamina; 4-metoxibenzilamina; 2-fenoxietilamina; 3,4-dimetoxifenetilamina; 4-metoxifenetilamina; 2-metoxifenetilamina; tiramina; benzilamina; 4-metilbenzilamina; fenetilamina; 4-aminobenzilamina; 4-terc-butilbenzilamina; 4-fenilbenzilamina; 4-iodobenzilamina; 4-(aminometil)piridina; 3-picolinilamina; 2-fluorobenzilamina; 4-fluorobenzilamina; 4-fluorofenetilamina; 3-(trifluorometil)benzilamina; 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9-heptadecafluorononilamina; ciclopripilamina;
- 10 ciclopentilamina; N-(3-aminopropil)-2-pirrolidinona; ciclo-hexilamina; ciclo-hexanometilamina; 2-(1-ciclo-hexenil)etilamina; 1-(2-aminoetil)piperidina; 3-morfolinopropilamina; (\pm)-3-amino-1,2-propanodiol; 2-amino-1,3-propanodiol; 2-Amino-2-metil-1,3-propanodiol; 2-amino-2-etyl-1,3-propanodiol; N,N-bis(2-hidroxietil)etilenodiamina; ácido oxâmico; e 2-amino-2-(hidroximetil)propano-
- 15 20 1,3-diol.

Aminas adequadas contendo substituintes siloxila podem ser usadas como materiais de partida, incluindo, sem limitação, 3-amino-propil(dietóxi)metsilsilano; 3-(2-aminoetilamino) propildimetoximetsilsilano; N-[3-(trimetoxissilil)propil]etilenodiamina; 3-[2-(2-aminoetilamino)etilamino]-propil-trimetoxissilano; e 1-[3-(trimetoxissilil)propil]ureia.

Os aminoácidos, incluindo Alanina, Leucina, Serina, Cisteína, Tirosina, Ácido Glutâmico, Glutamina, Lisina, e Arginina também são adequados para formar compostos, de acordo com a invenção.

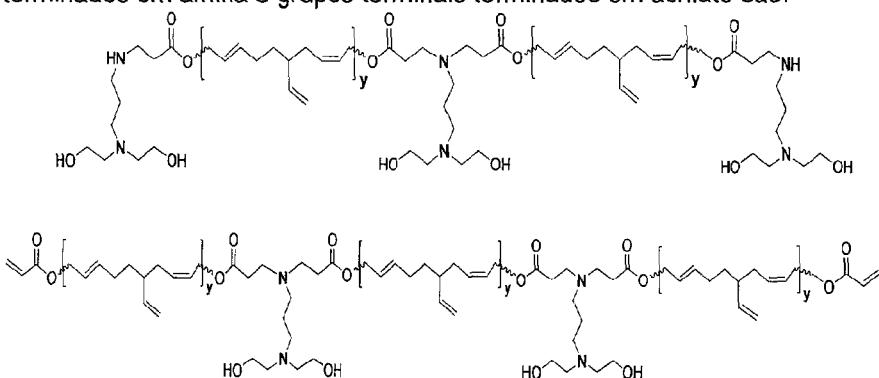
Alternativamente, pode ser usado um material de partida de bis (amina). Os grupos amina em tais materiais de partida de bis (amina) são encadeados por uma porção B, conforme mostrado no esquema de reação II acima. Em geral, B é uma cadeia de carbono ou uma cadeia de carbono

contendo heteroátomo, opcionalmente substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, amino, alquilamino, dialquilamino, trialquilamino, aminoalquil arila, ureído, heterocíclico, heterocíclico aromático, cíclico, cíclico aromático, 5 halogênio, hidroxila, alcóxi, ciano, amido, carbamoila, ácido carboxílico, éster, carbonila, carbonildioxila, alquiltioéter, e tiol.

Monômeros de bis(amina secundária) que são úteis na presente invenção incluem, mas não estão limitados a, N,N'-dimetiletilenodiamina, piperazina, 2-metilpiperazina, 1,2-bis(N-etilamino)etileno, e 4,4'-trimetilenidipiperidina.

Grupos terminais Z e Z', juntos com os átomos aos quais são ligados, representam grupo terminal acrilato, metacrilato ou amino. Em modalidades, Z e Z' formam um grupo amino ou grupo acrilato ou metacrilato insaturado sobre ambos os términos do polímero. Portanto, por exemplo, no 15 caso onde Z e Z' formam uma porção amino, Z' é hidrogênio e Z é -NR₂-H. Onde o grupo terminal é acrilato, Z~~~~ significa que Z e o carbono ao qual está ligado formam um término CH₂= do grupo terminal acrilato ou metacrilato, ao passo que Z' forma um grupo acrilato ou metacrilato.

Exemplos não limitantes de polímeros com grupos terminais 20 terminados em amina e grupos terminais terminados em acrilato são:



em que y é 1 a 100.

Em modalidades, n nas fórmulas (I) a (IV) podem variar de 1 a 10.000. No entanto, compostos presentemente preferenciais da invenção 25 são oligômeros, tendo 3 a 10 unidades amino éster. Uma composição, de acordo com a invenção, pode conter uma pluralidade de oligômeros de ex-

tensão diferente.

As composições preferenciais usadas na invenção incluem um veículo cosmeticamente aceitável, tal que a composição possa ser aplicada ao cabelo sem irritação dos olhos ou do couro cabeludo. As composições 5 podem estar sob a forma de uma emulsão de óleo em água, uma emulsão de água em óleo, uma dispersão, uma suspensão, um creme, uma espuma, um gel, um spray, um pó, um líquido ou uma pomada.

O composto de β-amino éster geralmente está presente na composição em uma faixa de cerca de 0,01 por cento em peso até cerca de 20 por cento em peso da composição. Em modalidades, o β-amino éster está 10 presente em uma faixa de cerca de 0,1 por cento em peso até cerca de 10,0 por cento em peso da composição; e, em ainda outras modalidades, em uma faixa de cerca de 1,0 por cento em peso até cerca de 5,0 por cento em peso.

As composições, de acordo com a invenção, são preferencialmente 15 à base de água ou à base de água-álcool, significando que elas contêm mais de 50 por cento em peso de água. Preferencialmente, água está presente nas composições, de acordo com a invenção, em uma faixa de 60 a 99 por cento em peso da composição. Nas modalidades presentemente preferenciais, água está presente em uma faixa de cerca de 80 até cerca de 20 95 por cento em peso da composição.

O veículo cosmeticamente aceitável para o composto contém ingredientes usados convencionalmente em composições para tratamento de cabelo. Um ou mais emulsificantes podem ser incluídos em uma faixa de cerca de 0,1 até cerca de 10,0 por cento em peso, em modalidades preferenciais, em uma faixa de cerca de 0,5 por cento em peso até cerca de 3,0 por cento em peso. Quantidades de formulação adequadas podem ser determinadas por aqueles versados na técnica sem indevida experimentação, dependendo de como se pretende que a composição seja liberada. Emulsificantes adequados podem ser selecionados entre os versados na técnica, 25 incluindo sem limitação, Polissorbato 20, Poliacrilato-13, Poli-isobuteno, Ole-th-10, e similares.

Um álcool graxo, ou uma mistura pode ser proporcionada em

uma quantidade de 0,1 até cerca de 5,0 por cento em peso da composição para prover propriedades de espessamento e/ou emolientes. Em modalidades, um componente de álcool graxo, tal como álcool cetearílico (uma mistura de alcoóis graxos), pode ser proporcionado em uma faixa de cerca de 0,1
5 a 1,0 por cento em peso da composição.

Um ou mais ácidos graxos podem ser proporcionados em uma faixa de cerca de 0,1 por cento em peso a 5,0 por cento em peso da composição. Ácidos graxos, incluem, sem limitação, ácido palmítico, ácido esteárico, ácido linoleico, ácido mirístico, e outros ácidos conhecidos na técnica
10 para prover propriedades de espessamento e/ou emolientes em uma composição para tratamento de cabelo.

Composições, de acordo com a invenção, também podem incluir, no mínimo, um aditivo usado convencionalmente em composições para tratamento de cabelo. Exemplos não limitantes de aditivos adequados incluem emolientes, auxiliares de processamento, pigmentos, tensoativos aniónicos, tensoativos catiônicos, tensoativos não iônicos, tensoativos anfotéricos, fragrâncias, agentes de proteção, agentes preservantes, proteínas, vitaminas, silicones, polímeros tais como polímeros espessantes, óleos vegetais, óleos minerais, óleos sintéticos e qualquer outro aditivo usado convencionalmente em composições para a proteção e/ou tratamento de fibras queratinosas.
20

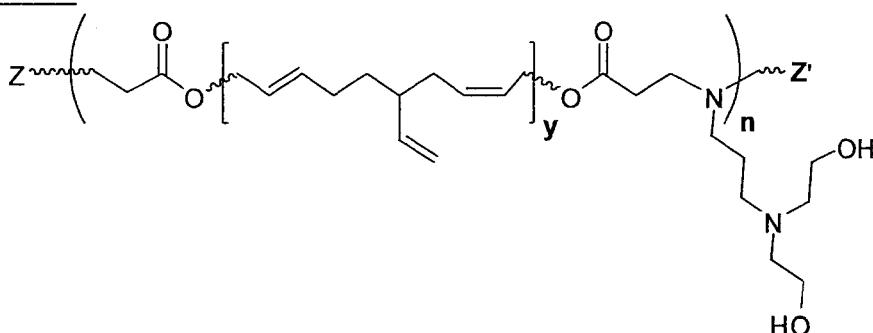
Procedimento Sintético Geral

A síntese dos compostos descritos abaixo foi realizada em jarras de vidro transparente de 30 ml com tampas fenólicas revestidas com revestimentos de núcleo de polietileno, e agitadas com barra de movimento giratório revestidas com Teflon® de 15,9 x 9,5 mm. Para cada reação, 5 g de PBD foram adicionados a cada frasco. Amina foi adicionada por pipeta para líquidos ou por massa para sólidos em proporções desejadas. Os frascos foram agitados a 90°C por 48 horas. A barra de movimento giratório foi removida
25 enquanto o material da reação ainda estava quente. Os polímeros foram deixados para esfriar até a temperatura ambiente antes de observar para cor e viscosidade como um monitor grosseiro da plenitude da reação. À medida
30

que as reações chegavam ao completamento, a viscosidade aumentou dramaticamente e as misturas ficaram de cor mais amarela/âmbar. Os produtos foram armazenados a 4°C.

- Aminas primárias foram obtidas da Sigma-Aldrich, Inc. (St. Louis, Mo.) e VWR International, LCC (West Chester, Pa.). PBDs foram obtidos da Sartomer Company, Inc. (Exton, Pa.) (produto Sartomer no. CN307) e San Esters (New York, NY) (produto no. BAC-15 e BAC-45).

Exemplo 1-1

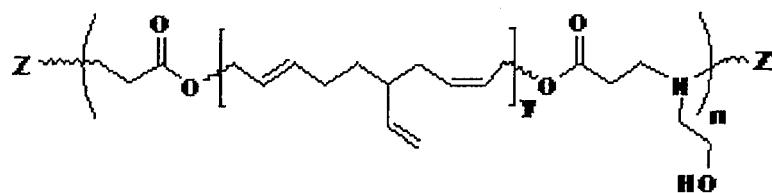
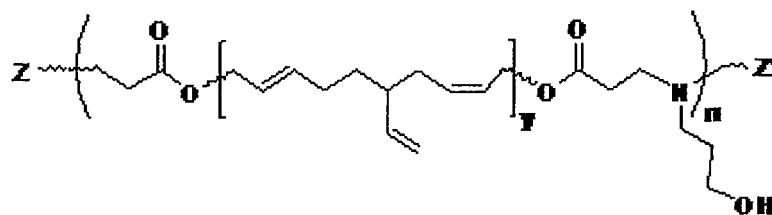
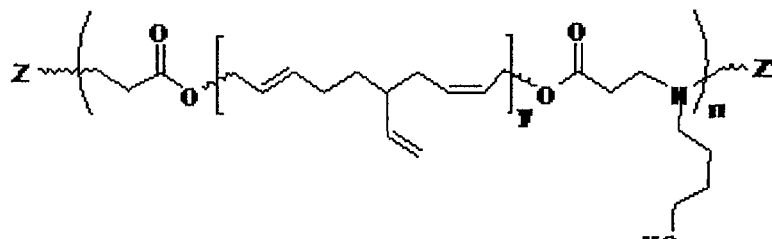
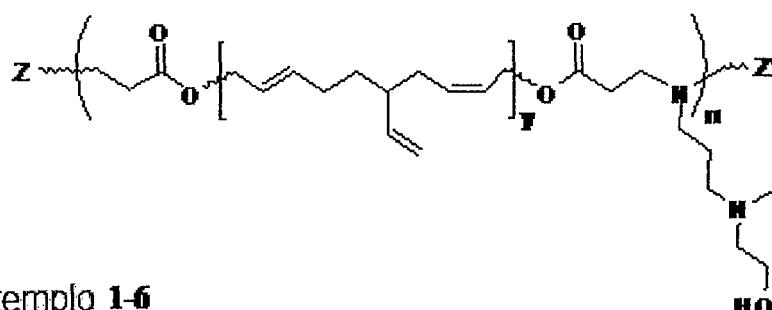
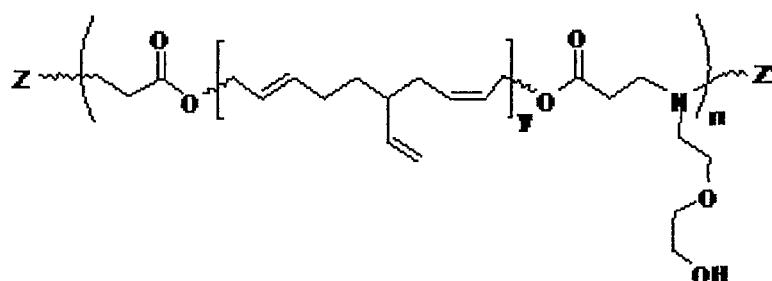


- O polímero acima foi sintetizado seguindo o procedimento esboçado acima usando 5,0 gramas de diacrilato de polibutadieno (99%) tendo um peso molecular de 3000 Da (1 equivalente) e 325,11 mg de N-(3-aminopropil) dietanolamina (1,2 equivalentes). O material resultante foi caracterizado através de ^1H RMN.

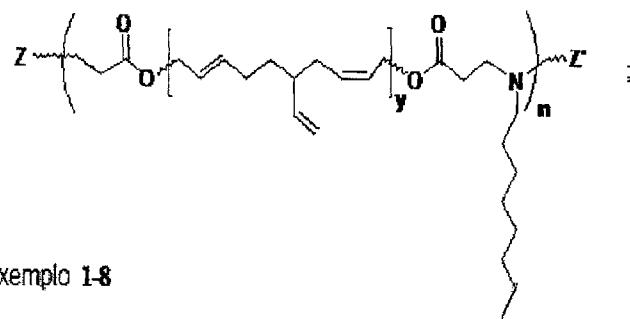
HRMN (CDCl_3): δ (ppm) 1,0-1,3 (m), 1,3-1,5 (m), 1,6-1,7 (m), 1,8-2,2 (m), 2,4-2,5 (m), 2,5-2,7 (m), 2,7-2,8 (m), 3,6-3,7 (m), 4,8-5,1 (m), 5,2-5,4 (m), 5,4-5,7 (m).

Todos os espectros de RMN foram registrados em um espectrômetro Varian Mercury de 300 MHz e tomados em CDCl_3 .

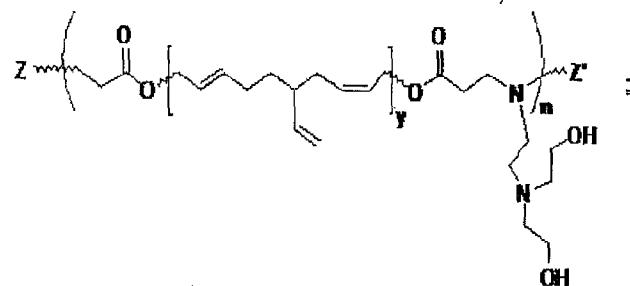
- Em maneira semelhante, os Exemplos 1-2 a 1-11 abaixo foram formados a partir de polímero de diacrilato de polibutadieno (peso molecular de 1400 Da ou 3000 Da) e aminas adequadas para formar os compostos de β -amino éster listados abaixo. As composições foram formuladas e testadas conforme estipulado abaixo.

Exemplo 1-2Exemplo 1-3Exemplo 1-4Exemplo 1-5Exemplo 1-6

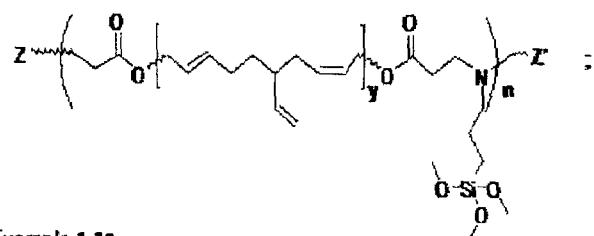
Exemplo 1-7



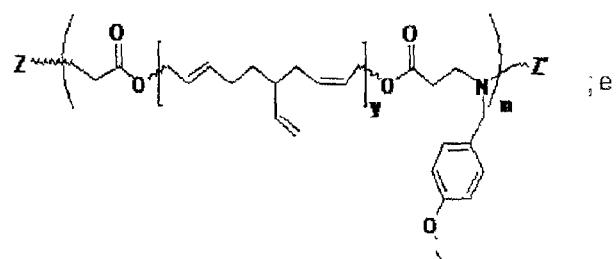
Exemplo 1-8



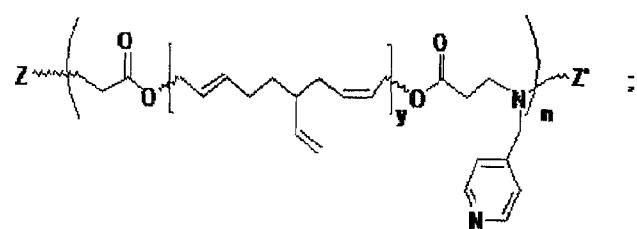
Exemplo 1-9



Exemplo 1-10



Exemplo 1-11



Exemplo 2-1 Teste de Tato

Foram avaliadas as propriedades de tato de polímeros preferenciais sobre o cabelo. Foram preparados 10 g de uma solução a 1% (em peso/peso) em THF. Soluções foram aplicadas em mechas de cabelo seco de 5 1 g x 2,5 cm de largura x 22 cm de comprimento de cabelo castanho médio liso virgem (*virgin straight*, International Hair Importers). As mechas foram enroladas com um modelador de $\frac{1}{2}$ polegada de diâmetro (Hot Tools Model 1101) no maior ajuste de calor (aproximadamente 200°C) por 30 segundos. Cada mecha foi avaliada com mãos limpas para os seguintes atributos: pegajosidade, gordura, fricção, e a presença de uma cobertura. Cada atributo foi classificado de acordo com a seguinte escala: 0=nenhum, 1=ligeiro, 10 2=moderado, 3=excessivo.

As propriedades de tato desejadas são nenhuma gordura, nenhuma pegajosidade, muito pouco ou nenhuma cobertura, e leve fricção. 15 Os resultados obtidos na Tabela 1 foram típicos de composições preferenciais, com base nas propriedades de tato obtidas.

TABELA 1

Composto	Pegajosidade	Gordura	Cobertura	Fricção
PBD:amina a 1:1.2				
14PBD:octilamina	0	0	1	0
14PBD:amino 2-propanol	0	0	1	0
14PBD:n-(3-aminopropil) dietanolamina	0	0	0	2
14PBD:4-metoxibenzilamina	0	0	1	0
14PBD:4-(Aminometil)piridina	0	0	1	0
30PBD:3-amino-1-propanol	0	0	1	0
30PBD:4-amino-1-butanol	1	0	0	0
30PBD:2-(2-Aminoetóxi)etanol	1	0	0	0
PBD:amina a 1:1.8				
14PBD:3-aminopropiltrietoxissilano	0	0	2	0
14PBD:4-Metoxibenzilamina	1	0	1	0
14PBD:4-(Aminometil)piridina	0	0	1	0
30PBD:etanolamina	1	0	0	0
30PBD:n-(3-aminopropil) dietanolamina	0	0	0	1

14PBD significa diacrilato de polibutadieno tendo um peso molecular de 1400 Da. 30PBD significa diacrilato de polibutadieno tendo um peso molecular de 3000 Da.

Exemplo 3-1 Teste de Quebra e Movimento

5 O movimento do cabelo tratado com cada polímero na Tabela 1 foi avaliado. Foi preparada uma solução a 1% (em peso/peso) de 10 g de cada polímero em THF. As soluções foram aplicadas em mechas de cabelo seco de 1 g x 2,5 cm de largura x 22 cm de comprimento de cabelo castanho médio liso virgem (International Hair Importers). As mechas foram enroladas
10 com um modelador de $\frac{1}{2}$ polegada de diâmetro (Hot Tools Model 1101) no maior ajuste de calor (aproximadamente 200°C) por 30 segundos. Uma vez frias, as extremidades da mecha foram estendidas até o comprimento total e liberadas. Quebra é definida como o recuo inicial da mecha, ao passo que movimento é definido como a extensão de tempo depois do recuo inicial que
15 a mecha estava em movimento, bem como a intensidade do movimento. Ambos os atributos foram classificados, de acordo com a seguinte escala: 0=pobre, 1=ok, 2=bom, 3=muito bom, 4= excelente. Foram desejáveis escores de 4 tanto para quebra quanto para movimento.

20 Os resultados para quebra e movimento para treze compostos testados são dados na Tabela 2.

TABELA 2

Composto	Quebra	Movimento
PBD:amina a (1:1.2)		
14PBD:octilamina	3	3
14PBD:amino 2-propanol	2	2
14PBD:n-(3-aminopropil) dietanolamina	3	3
14PBD:4-metoxibenzilamina	3	3
14PBD:4-metoxibenzilamina	3	3
30PBD:4-(Aminometil)piridina	2	2
30PBD:3-amino-1-propanol	0	0
30PBD:4-amino-1-butanol	2	2
PBD:amina a 1:1.8		
14PBD:3-aminopropiltretoxissilano	3	3
14PBD:4-Metoxibenzilamina	3	3
14PBD:4-(Aminometil)piridina	3	3
30PBD:Etanolamina	3	3
30PBD:n-(3-aminopropil) dietanolamina	2	2

Os polímeros na Tabela 3 foram escolhidos como apresentando melhores propriedades, com base nos resultados globais obtidos nos testes de tato e de quebra e movimento. Foi atribuído um peso maior aos escores de tato do que aos escores de quebra e movimento, uma vez que tato é uma propriedade mais desejável.

TABELA 3

Composto	Pegajo-sidade	Gordu-ra	Cober-tura	Fricção	Que-bra	Movi-mento
PBD:amina a 1:1.2						
14PBD:octilamina	0	0	1	0	3	3
14PBD:amino 2-propanol	0	0	1	0	2	2
14PBD:n-(3-aminopropil) dietanolamina	0	0	0	2	3	3
14PBD:4-metoxibenzilamina	0	0	1	0	3	3
14PBD:4-metoxibenzilamina	0	0	1	0	3	3

Exemplo 4-1 Teste de Uso pelo Consumidor

O composto de β -amino éster, de acordo com Exemplo 1-1, foi formulado em um creme, de acordo com o Exemplo de Formulação 5-1 abaixo e um creme, de acordo com o Exemplo de Formulação 5-2. Estas duas formulações foram fornecidas a 20 mulheres. As mulheres no estudo não estavam cientes dos ingredientes e dos potenciais benefícios de performance das formulações. As mulheres foram solicitadas a usar cada produto por uma semana. Tipicamente, as formulações foram aplicadas em cabelo molhado e secadas com secador para um estilo desejado. Depois de usar as duas formulações, as mulheres foram entrevistadas e lhes foi solicitado que preenchessem uma pesquisa de performance do produto. As necessidades das 20 mulheres comparadas com o modo como as duas formulações atenderam estas necessidades são mostradas na Tabela 4.

TABELA 4

Benefício Desejado	Prioridade	Benefício Fornecido pelo Creme	Benefício Fornecido pelo Spray
Volume e encorpamento	Elevado	Elevado	Médio
Espessamento	Elevado	Elevado	Médio
Leveza	Elevado	Elevado	Médio
Efeito Duradouro	Elevado	Elevado	Baixo
Facilidade para Alcançar o Efeito	Elevado	Médio	Baixo
Falta de Resíduo	Médio	Médio	Baixo
Maciez	Baixo	Médio	Baixo
Brilho/ Condicionamento	Médio	Médio	Baixo
Suavidade	Médio	Médio	Baixo
Força/ Controle/ Textura	Médio	Médio	Baixo
Facilidade de Uso	Médio	Médio	Elevado
Aroma Agradável	Médio	Baixo	Baixo

Exemplo de Formulação 5-1

Um creme para modelar, contendo composto de β -amino éster de acordo com a invenção pode incluir o seguinte:

<u>Ingredientes</u>	<u>% em peso/ peso</u>
Água	q.s.
composto de β -amino éster	0,50 a 6,00
Polissorbato 20 (e) Poliacrilato-13 (e) Poli-isobuteno (Emulsificante)	0,50 a 4,00
Fragrância	0,20 a 3,00
Fenoxietanol (e) Metilisotiazolinona (Preservante)	0,50 a 1,50
PPG-2 Miristil Éter Propionato (Emoliente)	0,10 a 5,00
Oleth-10 (Emulsificante)	0,10 a 2,00

Exemplo de Formulação 5-2

Um creme para modelar contendo composto de β-amino éster foi preparado com os seguintes ingredientes:

<u>Ingredientes</u>	<u>% em peso/ peso</u>
Água	93,00
composto de β-amino éster	3,00
Polissorbato 20 (e) Poliacrilato-13 (e) Poli-isobuteno	1,45
Fragrância	1,00
Fenoxietanol (e) Metilisotiazolinona	0,50
PPG-2 Miristil Éter Propionato	0,50
Oleth-10	0,50

A composição acima foi fabricada usando o processo descrito
5 abaixo.

Um vaso foi enchido com água (Fase A) e aquecido até 75°C. A Fase B consistindo em polissorbato 20, poliacrilato-13, e poli-isobuteno foi adicionada à Fase A usando agitação elevada e deixada para misturar por 30 minutos ou até ficar homogênea. O composto de β-amino éster, oleth-10,
10 e propionato de éter de PPG-2 miristila foi misturado em um vaso separado a 75°C até ficar homogêneo para formar a Fase C. A Fase C foi adicionada à mistura acima de Fase A e Fase B e os conteúdos foram misturados até ficarem homogêneos. A mistura foi resfriada até 40°C. Depois disso, a Fase D, consistindo em fenoxietanol, e metilisotiazolinona, foi adicionada à mistura
15 acima e os conteúdos foram misturados até ficarem homogêneos. A mistura foi resfriada até 30°C. A Fase E, consistindo em fragrância, foi adicionada à mistura acima e os conteúdos foram misturados até ficarem homogêneos. Água (q.s.) foi adicionada à mistura e homogenizada para obter a composição acima.

20 Exemplo de Formulação 5-3

Um spray para modelar contendo composto de β-amino éster de acordo com a invenção pode incluir o seguinte:

<u>Ingredientes</u>	<u>% em peso/ peso</u>
Água	q.s.
composto de β-amino éster	0,50-6,00
Oleth-10 (Emulsificante)	0,10-10,00
Oleato de Etoxiciglicol (Emoliente)	0,10-5,00
Fragrância	0,20-3,00
Fenoxietanol (e) Metilisotiazolinona (Preservante)	0,50-1,50
Cloreto de sódio	0,10-1,50
Goma Xantano (Modificador da reologia)	0,10-1,50

Exemplo de Formulação 5-4

Um spray para modelar contendo composto de β-amino éster foi preparado com os seguintes ingredientes:

<u>Ingredientes</u>	<u>% em peso/ peso</u>
Água	92,70
composto de β-amino éster	3,00
Oleth-10	1,10
Oleato de Etoxiciglicol	1,00
Fragrância	1,00
Fenoxietanol (e) Metilisotiazolinona	0,50
Cloreto de sódio	0,40
Goma Xantano	0,30

A composição acima pode ser fabricada usando o processo des-
5 crito abaixo.

Um vaso foi carregado com água e goma xantano foi adicionada para formar a Fase A. Goma xantano foi deixada para hidratar por 20 minutos. Em seguida, a Fase A foi aquecida até 75°C. Em um vaso separado, o composto de β-amino éster, oleth-10 e oleato de etoxiciglicol foi aquecido 10 até 75°C e misturado para formar uma homogênea Fase B. A Fase B foi adicionada à Fase A e misturada até ficar homogênea. A mistura foi resfriada até 40 °C. Depois disso, a Fase C, consistindo em fenoxietanol e metilisotia-

zolinona, foi adicionada à mistura acima e os conteúdos foram misturados até ficarem homogêneos. A mistura foi resfriada até 30°C. Em seguida, a Fase D consistindo em cloreto de sódio e fragrância foi adicionada à mistura acima e os conteúdos foram misturados até ficarem homogêneos. Água (q.s.) foi adicionada à mistura e homogenizada para obter a composição acima.

Exemplo de Formulação 5-5

Uma mousse não aerosol para modelar contendo composto de β-amino éster de acordo com a invenção pode incluir o seguinte:

Ingredientes	% em peso/ peso
Água	q.s.
composto de β-amino éster	0,50-6,00
Óxido de Cocamidopropilamina (Tensoativo)	0,10-10,00
Oleth-10 (Emulsificante)	0,10-10,00
Oleato de Etoxicidiglicol (Emoliente)	0,10-5,00
Fragrância	0,20-3,00
Fenoxietanol (e) Metilisotiazolinona (Preservante)	0,50-1,50
Cloreto de sódio	0,10-1,50
Goma Xantano (Modificador da reologia)	0,10-1,50

Exemplo de Formulação 5-6

10 Uma mousse não aerosol para modelar contendo composto de β-amino éster foi preparada com os seguintes ingredientes:

Ingredientes	% em peso/ peso
Água	89,70
composto de β-amino éster	3,00
Óxido de Cocamidopropilamina	3,00
Oleth-10	1,10
Oleato de Etoxicidiglicol	1,00
Fragrância	1,00
Fenoxietanol (e) Metilisotiazolinona	0,50
Cloreto de sódio	0,40
Goma Xantano	0,30

A composição acima foi fabricada usando o processo descrito abaixo.

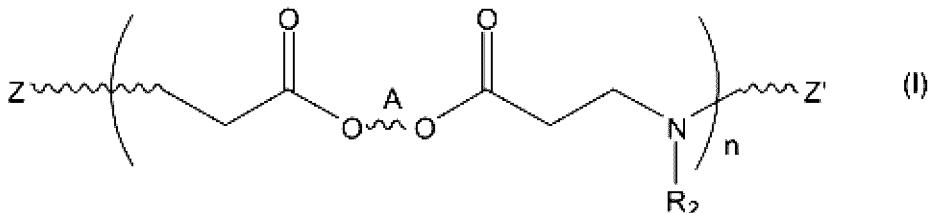
Para formar a Fase A, um vaso foi carregado com água e goma xantano. Goma xantano foi deixada para hidratar por 20 minutos. Em seguida, a Fase A foi aquecida até 75°C. Para obter a Fase B, composto de β-amino éster, oleth-10 e oleato de etoxidiglicol foi aquecido até 75°C em um vaso separado. Os conteúdos foram misturados até ficarem homogêneos. A Fase B foi adicionada à Fase A e misturada até ficar homogênea. A mistura foi resfriada até 40°C. Depois disso, a Fase C, consistindo em fenoxietanol e metilisotiazolinona, foi adicionada à mistura acima e os conteúdos foram misturados até ficarem homogêneos. A mistura foi resfriada até 30°C. Depois disso, a Fase D, consistindo em Óxido de cocamidopropilamina, cloreto de sódio e fragrância foi adicionada à mistura acima das Fases A, B, e C até ser obtida uma composição homogênea acima. Água (q.s.) foi adicionada à mistura e misturada até ficar homogênea.

Não obstante, qualquer coisa ao contrário aqui, neste requerimento de patente, as modalidades precedentes são somente exemplares e não devem ser consideradas como limitantes para a invenção, a qual é definida pelas reivindicações anexadas.

REIVINDICAÇÕES

1. Composto, caracterizado pelo fato de que apresenta a fórmula

(I):



na qual n é um número inteiro entre 1 e 10.000; e Z e Z' , juntos

- 5 com os átomos aos quais estão ligados, representam grupos terminais acrilato, metacrilato ou amino;

R_2 é selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, alcoxialquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alquiltioéter, carbamoila, carbonildioxila, éster carboxílico, 10 alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático e ureído, cada um dos quais pode ser substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, acoxilalquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halogênio, hidroxila, ciano, 15 carbamoila, ácido carboxílico, carbonildioxila, alquiltioéter, siloxila, e tio-hidroxila; e

A compreende uma porção de borracha tendo um peso molecular na faixa de 1.000 g/mol a 10.000 g/mol, selecionado do grupo consistindo em unidades de butadieno, cloropreno, isopreno, e estireno-butadieno.

20 2. Composto, de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que A consiste em unidades de butadieno.

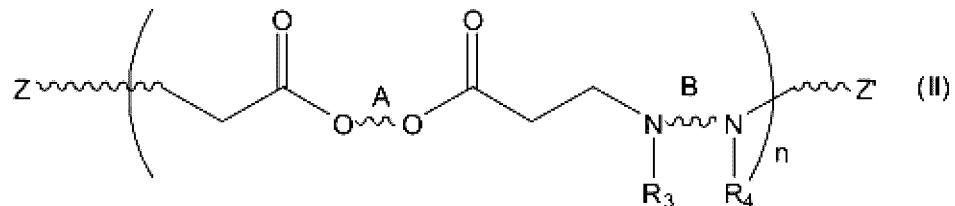
3. Composto, de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que R_2 é selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, acila, alcóxi, alcoxialquila, amino, aminoalquila, amido, cada um dos quais pode 25 ser substituído com pelo menos um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alcóxi, acoxilalquila, amino, aminoalquila, heteroarila, amido, halogênio, hidroxila, ciano, carbamoila, ácido carboxílico, carbonildioxila, alquiltioéter, siloxila, e tio-hidroxila.

4. Composto, de acordo com a reivindicação 3, caracterizado pelo fato de que R₂ é um grupo alquila ou aminoalquila substituído com pelo menos um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alcóxi, acoxilalquila, amino, aminoalquila, heteroarila, amido, halogênio, hidroxila, 5 ciano, carbamoila, ácido carboxílico, carbonildioxila, alquiltioéter, siloxila, e tiohidroxila.

5. Composto, de acordo com a reivindicação 3, caracterizado pelo fato de que R₂ é aminoalquila substituída por hidroxila.

6. Composto, de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo 10 fato de que n é de 1 a 100.

7. Composto, caracterizado pelo fato de que apresenta a fórmula (II):



na qual n é um número inteiro entre 1 e 10.000;

15 Z e Z', juntos com os átomos aos quais estão ligados, representam grupos terminais acrilato, metacrilato ou amino;

R₃ e R₄ são independentemente selecionados a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, alcoxialquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alquiltioéter, carbamoila, carbonildioxila, éster carboxílico, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, 20 aromático, heteroaromático e ureído, cada um dos quais pode ser substituído com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, acila, alcóxi, acoxilalquila, amino, aminoalquila, arila, heteroarila, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halogênio, hidroxila, ciano, carbamoila, ácido carboxílico, carbonildioxila, 25 alquiltioéter, siloxila, e tio-hidroxila;

B é uma cadeia de 1 a 30 átomos de carbono ou heteroátomos, cujos átomos ou heteroátomos são insaturados, saturados com hidrogênio, ou são substituídos com, no mínimo, um substituinte selecionado a partir do grupo

consistindo em grupos alquila, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, alcóxi, alcoxialquila carbamoíla, éster carboxílico, carbonildioxila, amido, tio-hidroxila, alquiltioéter, ciano, ureído, alifático cíclico, aromático, e heteroaromático, cujos substituintes podem ser substituídos ou não substituídos, ou alternativamente 5 podem se ligar uns com os outros ou com um átomo sobre a cadeia para formar um anel; e

A compreende uma porção de borracha com um peso molecular na faixa de 1.000 g/mol a 10.000 g/mol, selecionado do grupo consistindo em unidades de butadieno, cloropreno, isopreno, e estireno-butadieno.

10 8. Composto, de acordo com a reivindicação 7, caracterizado pelo fato de que A consiste em unidades de butadieno.

9. Composto, de acordo com a reivindicação 8, caracterizado pelo fato de que R₃ e R₄ são independentemente selecionados a partir do grupo consistindo em grupos alquila, acila, alcóxi, alcoxialquila, amino, aminoalquila, 15 arila, heteroarila, amido, cada um dos quais podendo ser substituído com pelo menos um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alcóxi, acoxilalquila, amino, aminoalquila, heteroarila, amido, halogênio, hidroxila, ciano, carbamoíla, ácido carboxílico, carbonildioxila, alquiltioéter, siloxila, e tio-hidroxila.

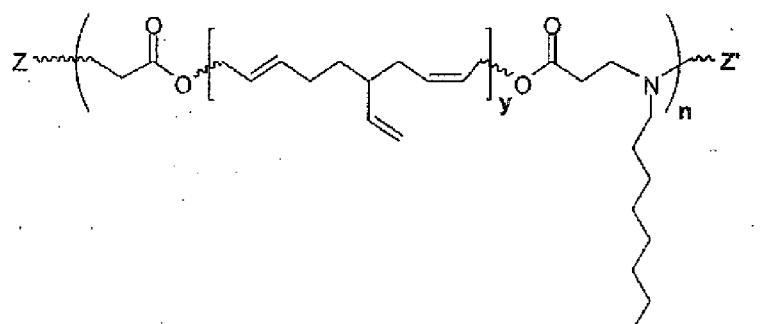
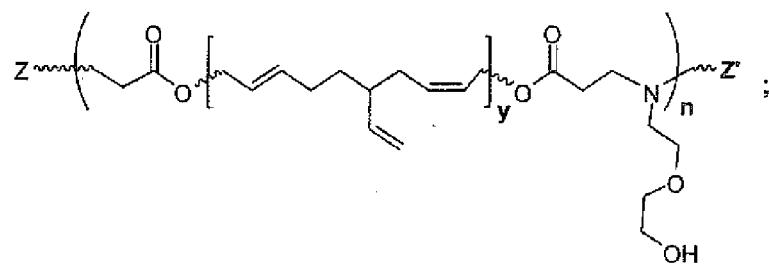
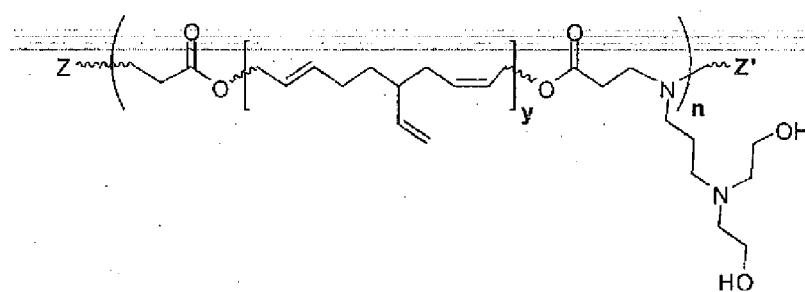
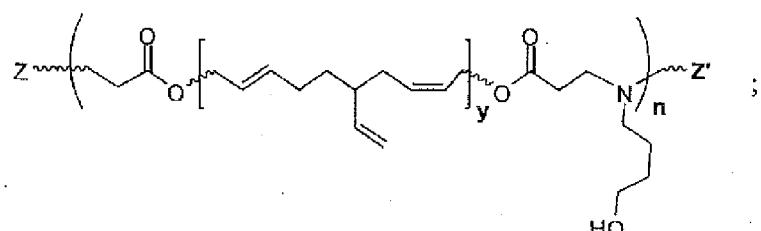
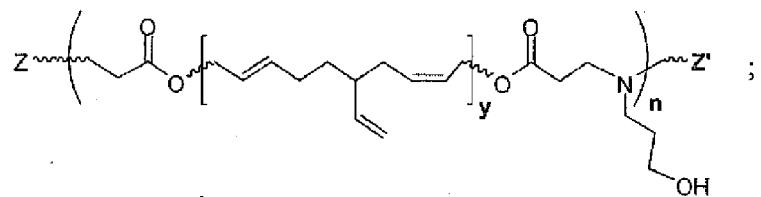
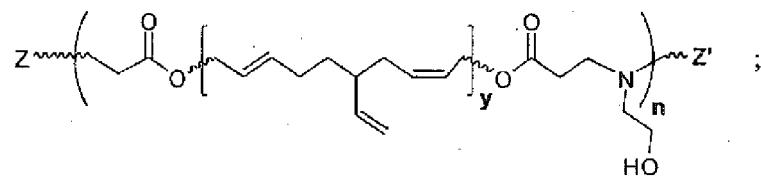
20 10. Composto, de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que R₃ e R₄ são independentemente um grupo alquila ou aminoalquila, substituído com pelo menos um substituinte selecionado a partir do grupo consistindo em grupos alcóxi, acoxilalquila, amino, aminoalquila, heteroarila, amido, halogênio, hidroxila, ciano, carbamoíla, ácido carboxílico, 25 carbonildioxila, alquiltioéter, siloxila, e tio-hidroxila.

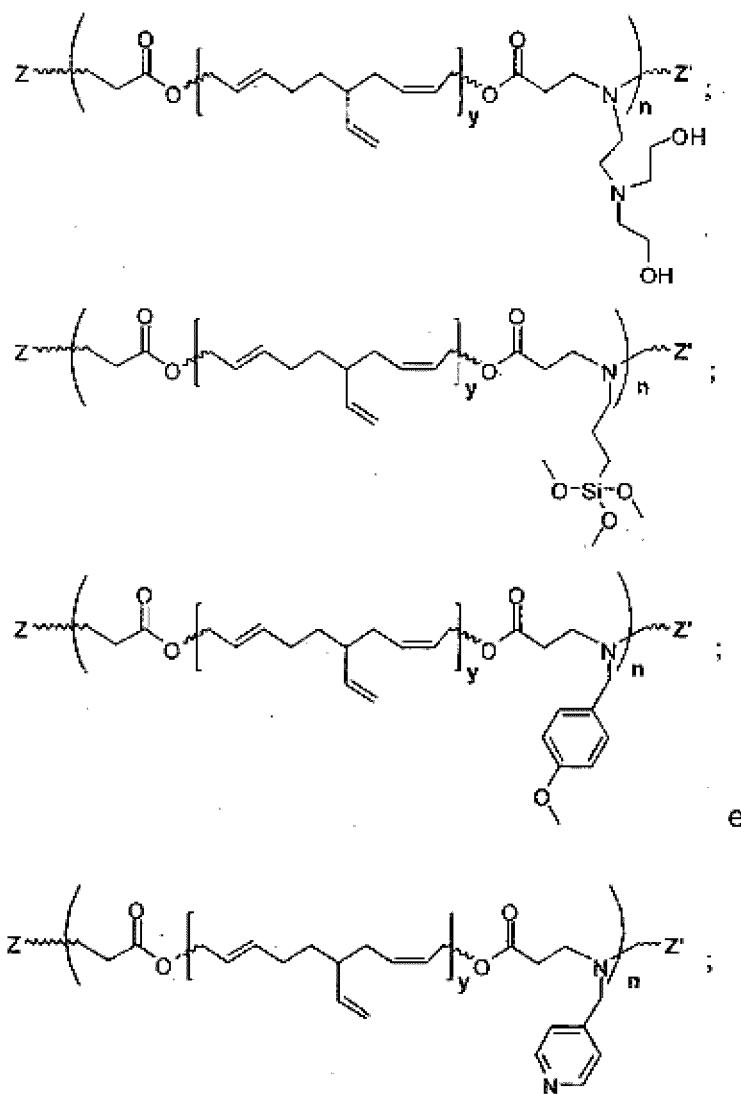
11. Composto, de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que R₃ e R₄ são independentemente aminoalquila substituída por hidroxila.

12. Composto, de acordo com a reivindicação 8, caracterizado pelo 30 fato de que n é de 1 a 100.

13. Composto, de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o composto tem uma estrutura selecionada a partir do grupo

consistindo em:



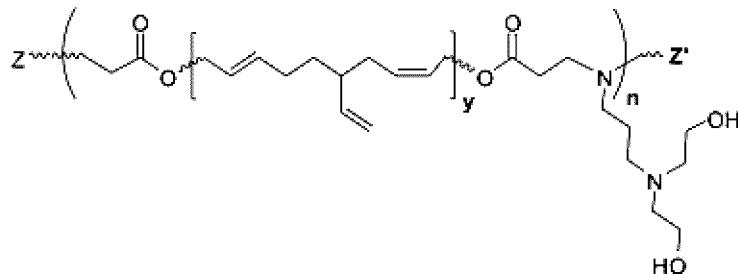


em que y é um número inteiro de 1 a 100;

n é de 1 a 100; e

Z e Z' , juntos com os átomos aos quais estão ligados, formam um grupo terminal de acrilato, metacrilato, ou amino.

- 5 14. Composto, caracterizado pelo fato de que apresenta a estrutura:



na qual y é um número inteiro de 1 a 100;

n é de 1 a 100; e

Z e Z', juntos com os átomos aos quais estão ligados, formam um grupo terminal de acrilato, metacrilato, ou amino.

15. Composição cosmética para cabelo, caracterizada pelo fato de 5 que compreende um composto, como definido em qualquer uma das reivindicações 1 a 14, e um veículo cosmeticamente aceitável.

16. Uso de uma composição cosmética, como definida na reivindicação 15, caracterizado pelo fato de que é para o tratamento do couro cabeludo.