



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0169090  
(43) 공개일자 2024년12월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07C 217/08 (2006.01) A61K 8/41 (2006.01)  
A61Q 5/00 (2006.01) C07C 211/21 (2006.01)  
C07C 57/20 (2006.01) C07C 59/305 (2006.01)  
(52) CPC특허분류  
C07C 217/08 (2013.01)  
A61K 8/41 (2013.01)  
(21) 출원번호 10-2024-7036223  
(22) 출원일자(국제) 2023년04월04일  
심사청구일자 없음  
(85) 번역문제출일자 2024년10월30일  
(86) 국제출원번호 PCT/EP2023/058848  
(87) 국제공개번호 WO 2023/194382  
국제공개일자 2023년10월12일  
(30) 우선권주장  
22382317.0 2022년04월04일  
유럽특허청(EPO)(EP)

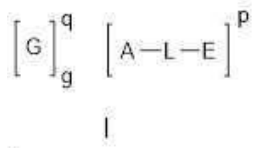
(71) 출원인  
타라 브랜즈 유럽 에스.엘.유.  
스페인 바르셀로나 바르셀로나 08916 바달로나 51  
카레르 데 포가르스 데 토르테라  
(72) 발명자  
아르하마, 나와프  
스페인 바르셀로나 바달로나-바르셀로나 08916 51  
카레르 데 포가르스 데 토르테라  
(74) 대리인  
특허법인에이아이피

전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 화장품 염

(57) 요약

식 I의 염이 본원에 개시되어 있다:



여기서 q는 + 또는 -이고; p는 2+, +, - 또는 2-이고; g는 1 또는 2이고; G는  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-C(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CS}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_3^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)}_2\text{S}^-$  및 디알릴암모늄기로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고; L은 직쇄  $\text{C}_{1-15}$  알킬이며, 여기서 하나 이상의  $\text{CH}_2$  기는  $-(\text{CH}_2\text{-O-CH}_2)-$ ,  $-(\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-O})-$ ,  $-(\text{O-CH}_2\text{-CH}_2)-$ ,  $\text{C=O}$ ,  $-\text{O}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{NH}-$  또는  $-\text{NR}^1-$ 에 의해 독립적으로 대체되며, 여기서  $\text{R}^1$ 은 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬이고; A는  $\text{NR}_3^{2+}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C(=O)S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S(=O)S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$  및  $\text{S(=O)}_2\text{S}^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고; E는  $\text{NR}_2^3$ ,  $\text{NR}_3^{3+}$ ,  $\text{CO}_2\text{H}$ ,  $\text{C(=O)SH}$ ,  $\text{CS}_2\text{H}$ ,  $\text{SO}_2\text{H}$ ,  $\text{S(=O)SH}$ ,  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{S(=O)}_2\text{SH}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C(=O)S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S(=O)S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$ ,  $\text{S(=O)}_2\text{S}^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로  $\text{R}^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고; 단, A 및 E의 전체 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성임. 식 I의 염을 포함하는 화장품 제제뿐만 아니라 이러한 염 또는 제제의 모발 케어 제품으로서의 용도가 추가로 개시되어 있다.

(52) CPC특허분류

*A61Q 5/002* (2013.01)

*C07C 211/21* (2013.01)

*C07C 57/20* (2013.01)

*C07C 59/305* (2013.01)

*A61K 2800/10* (2013.01)

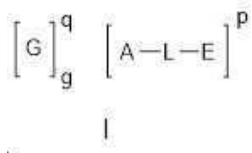
---

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

식 I의 염:



여기서

q는 + 또는 -이고;

p는 2+, +, - 또는 2-이고;

g는 1 또는 2이고;

G는  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-C(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CS}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_3^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)}_2\text{S}^-$  및 디알릴암모늄기로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;

L은 직쇄  $\text{C}_{1-15}$  알킬이며, 여기서 하나 이상의  $\text{CH}_2$  기는  $-(\text{CH}_2\text{-O-CH}_2)-$ ,  $-(\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-O})-$ ,  $-(\text{O-CH}_2\text{-CH}_2)-$ ,  $\text{C=O}$ ,  $-\text{O}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{NH}-$  또는  $-\text{NR}^1-$ 에 의해 독립적으로 대체되며, 여기서  $\text{R}^1$ 은 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬이고;

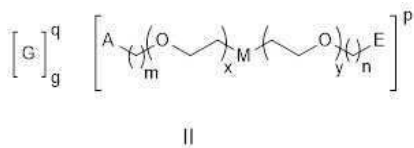
A는  $\text{NR}_3^{2+}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C(=O)S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S(=O)S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$  및  $\text{S(=O)}_2\text{S}^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

E는  $\text{NR}_3^3$ ,  $\text{NR}_3^{3+}$ ,  $\text{CO}_2\text{H}$ ,  $\text{C(=O)SH}$ ,  $\text{CS}_2\text{H}$ ,  $\text{SO}_2\text{H}$ ,  $\text{S(=O)SH}$ ,  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{S(=O)}_2\text{SH}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C(=O)S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S(=O)S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$ ,  $\text{S(=O)}_2\text{S}^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로  $\text{R}^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

단, A 및 E의 전체 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성임.

#### 청구항 2

제1항에 있어서, 식 II를 갖는, 염:



여기서

q는 + 또는 -이고;

p는 2+, +, - 또는 2-이고;

g는 1 또는 2이고;

G는  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-C(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CS}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_3^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)}_2\text{S}^-$  및 디알릴암모늄기로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;

$S(=O)_2S^-$  (여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택됨), 및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^{4+}$ 로부터 선택되며, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;

A는  $NR_3^{2+}$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$ ,  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

E는  $NR_3^3$ ,  $NR_3^{3+}$ ,  $CO_2H$ ,  $C(=O)SH$ ,  $CS_2H$ ,  $SO_2H$ ,  $S(=O)SH$ ,  $SO_3H$ ,  $S(=O)_2SH$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$ ,  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

M은 O, S, NH 및  $NR^1$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^1$ 은 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬이고;

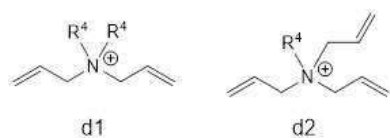
m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;

x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택되고;

단, A 및 E의 전체 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성임.

### 청구항 3

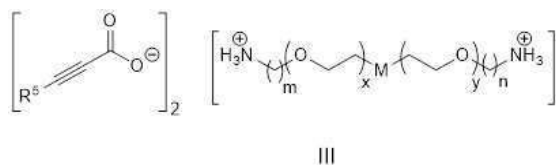
제1항 또는 제2항에 있어서, 디알릴암모늄기는 식 d1 또는 d2의 모이어티인, 염:



여기서, 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택됨.

### 청구항 4

제1항에 있어서, 식 III을 갖는, 염:



여기서

M은 O, S 및  $NR^6$ 으로부터 선택되며, 여기서  $R^6$ 은 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

$R^5$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;

x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택됨.

### 청구항 5

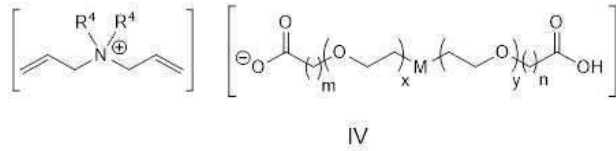
제4항에 있어서,  $R^5$ 는 H이고 M은 O인, 염.

### 청구항 6

제4항 또는 제5항에 있어서, m 및 n은 2 또는 3으로부터 독립적으로 선택되고, 바람직하게는 m 및 n은 둘 모두 2 또는 3으로부터 선택된, 염.

#### 청구항 7

제1항에 있어서, 식 IV를 갖는, 염:



여기서

M은 O, S 및 NR<sup>6</sup>으로부터 선택되며, 여기서 R<sup>6</sup>은 H, 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬로부터 선택되고;

R<sup>4</sup>는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬로부터 선택되고;

m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;

x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택됨.

#### 청구항 8

제7항에 있어서, R<sup>4</sup>는 H이고 M은 O인, 염.

#### 청구항 9

제7항 또는 제8항에 있어서, m 및 n은 독립적으로 1 및 2로부터 선택되는, 염.

#### 청구항 10

제2항 내지 제9항 중 어느 한 항에 있어서, m은 n과 같고, 임의적으로 x는 y와 같은, 염.

#### 청구항 11

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 따른 적어도 하나의 염을 포함하는 화장품 제제.

#### 청구항 12

제11항에 있어서, 계면활성제, 오일 성분, 유화제, 진주광택 왁스, 점도 증진제, 증점제, 과지방화제, 안정제, 중합제, 실리콘 화합물, 지방, 왁스, 레시틴, 인지질, 자외선 차단 인자, 보습제, 생물기원 작용제, 항산화제, 탈취제, 발한억제제, 비듬 방지제, 필름 형성제, 팽창제, 방충제, 자가 태닝제, 티로신 억제제(탈색제), 하이드로트로프, 가용화제, 방부제, 향유 및 염료, 뿐만 아니라 이의 혼합물로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나의 화장품 첨가제를 추가로 포함하는, 화장품 제제.

#### 청구항 13

제11항 또는 제12항에 있어서, 담체를 추가로 포함하며, 바람직하게는 물, C(2-6)-알코올, C(1-10)폴리올 뿐만 아니라 오일 성분으로부터 선택된 담체를 추가로 포함하는, 화장품 제제.

#### 청구항 14

화장품 제제, 바람직하게는 모발 케어 제품의 제조를 위한 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 따른 염의 용도.

#### 청구항 15

모발과 같은 케라틴 물질의 트리트먼트를 위한 방법으로서, 상기 방법은 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 따른 염 또는 제11항 내지 제13항 중 어느 한 항에 따른 화장품 제제를 케라틴 물질에 적용하는 것을 포함하는, 방법.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 개시내용은 염 및 이의 화장품 제제와 모발 케어 제품으로서 그 용도에 관한 것이다. 모발과 같은 케라틴 물질의 트리트먼트를 위한 방법이 더 개시된다.

### 배경 기술

[0002] 인간의 모발은 고도로 조직화되어 있지만 복잡한 구조를 가지고 있다. 이는 피부에 묻혀 있는 모낭과 피부 밖으로 신장해 있는 모간으로 구성된다. 모발은 전형적으로 2 또는 3개의 층으로 구성된다. 가장 바깥쪽 층은 큐티클이고, 중간 층은 피질이고, 일부 경우에는 뭉친 세포 및/또는 속이 빈 공간으로 이루어진 중앙 수질 영역이 있다. 인간 모발 질량의 대부분은 거대섬유라고 하는 섬유질 구조로 구성되어 있으며, 각각은 기질 단백질에 의해 함께 고정된 미세섬유로 구성된다. 인간 모발은 65-95wt%의 단백질로 이루어져 있으며, 이는 주로 아미노산 시스테인이 특히 풍부한 섬유질의 나선형 단백질인 케라틴으로, 그의 티올기는 이황화물 가교를 형성하여 전체 모발 구조에 강성과 저항성을 더할 수 있다.

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

[0003] 표백, 염색, 스트레이트닝 및 퍼머넌트 웨이브와 같이 모발에 대한 다양한 트리트먼트가 있으며, 이들 과정 동안 원하는 변화를 유효하게 위해 필요한 화학 물질로 인해 모발이 과도하게 처리되거나 손상될 수 있다. 예를 들어, 일부 알려진 헤어 스트레이트닝 과정은 알칼리성 스트레이트너로의 트리트먼트로 구성된다. 높은 pH(9.0-14.0)는 모발이 부풀어 오르게 하며, 이는 알칼리성 작용제가 모발 섬유 안으로 침투하도록 허용하며, 여기서 이는 케라틴과 반응하고 케라틴에 존재하는 이황화물 브릿지의 절단 및 재배열을 야기하여 모발이 늘어지도록 허용한다. 화학적으로 야기된 손상 외에도 빈번하고/하거나 높은 열 또는 환경 노출과 같은 물리적 트리트먼트는 모발 질감에서 변화를 만들어내고 더욱이 종종 영구적인 손상으로 이어질 수 있다.

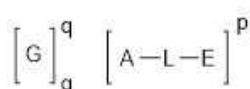
#### 과제의 해결 수단

[0004] 이들 모발 트리트먼트 과정 동안에 발생하는 임의의 그러한 손상을 회피하거나, 최소화하거나, 완화하거나 복구하고, 특히 이황화물 브릿지를 복원하여 모발의 질, 강도 및 질감을 회복하고 개선하는 것이 매우 바람직할 것이다.

[0005] 본 개시내용의 목적은 모발 복구의 최신 기술을 진보시키는 것이다. 본 개시내용의 추가 목적은 모발 케어 제품으로 사용하기 위한 염 및 제제를 제공하는 것이며, 이는 바람직하게는 티올 모이어티를 가교할 수 있다. 가교되는 티올 모이어티는, 예를 들어 물리적 또는 화학적 모발 트리트먼트의 결과로 이황화물 브릿지의 절단에 의해 형성될 수 있다. 본 개시내용의 추가 목적은 모발에서 본 발명의 링커를 사용하여 이황화물 브릿지의 복원을 증강시키는 것이다.

[0006] 출원인은 티올 모이어티를 가교할 수 있고 이에 의해 이황화물 브릿지를 모방하는 티올-반응성 가교제를 개발했다. 가교되는 티올 모이어티는 예를 들어, 물리적 또는 화학적 모발 트리트먼트의 결과와 같이 이황화물 브릿지의 사전 절단으로 인해 발생할 수 있다. 티올 모이어티를 가교함에 의해, 본원에서 개시된 티올-반응성 가교제는 이황화물 브릿지의 복원을 효과적으로 가능하게 한다.

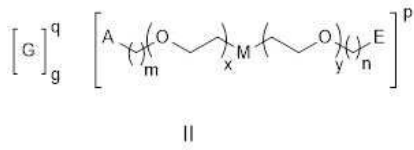
[0007] 본 개시내용은 제1 양태에서 식 I의 염에 대한 것이다:



[0008] ,

[0009] 여기서

- [0010] q는 + 또는 -이고;
- [0011] p는 2+, +, - 또는 2-이고;
- [0012] g는 1 또는 2이고;
- [0013] G는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_3^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)_2S^-$  및 디알릴암모늄기로부터 선택되며, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;
- [0014] L은 직쇄  $C_{1-15}$  알킬이며, 여기서 하나 이상의  $CH_2$  기는  $-(CH_2-O-CH_2)-$ ,  $-(CH_2-CH_2-O)-$ ,  $-(O-CH_2-CH_2)-$ ,  $C=O$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$  또는  $-NR^1-$ 에 의해 독립적으로 대체되며, 여기서  $R^1$ 은 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬이고;
- [0015] A는  $NR_3^{2+}$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$  및  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0016] E는  $NR_3^3$ ,  $NR_3^{3+}$ ,  $CO_2H$ ,  $C(=O)SH$ ,  $CS_2H$ ,  $SO_2H$ ,  $S(=O)SH$ ,  $SO_3H$ ,  $S(=O)_2SH$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$ ,  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로  $R^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0017] 단, A 및 E의 전체 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성이다.
- [0018] 일부 구체예에서, 본 개시내용은 식 II의 염에 대한 것이다:



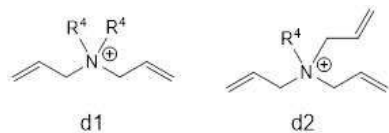
- [0019]
- [0020] 여기서
- [0021] q는 + 또는 -이고;
- [0022] p는 2+, +, - 또는 2-이고;
- [0023] g는 1 또는 2이고;
- [0024] G는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_3^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)_2S^-$  및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^4$ 로부터 선택되며, 여기서 i는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되며, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;
- [0025] A는  $NR_3^{2+}$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$ ,  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0026] E는  $NR_3^3$ ,  $NR_3^{3+}$ ,  $CO_2H$ ,  $C(=O)SH$ ,  $CS_2H$ ,  $SO_2H$ ,  $S(=O)SH$ ,  $SO_3H$ ,  $S(=O)_2SH$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$ ,  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0027] M은 O, S, NH 및  $NR^1$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^1$ 은 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬이고;

[0028] m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;

[0029] x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택되고;

[0030] 단, A 및 E의 전체 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성이다.

[0031] 식 I 또는 II의 염의 일부 구체예에서, 디알릴암모늄 기는 식 d1 또는 d2의 모이어티이다:

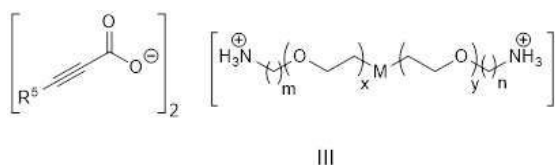


[0032]

[0033] 여기서, 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택됨.

[0034] 식 I 또는 II의 염의 일부 구체예에서, G는  $R^5C \equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5C \equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5C \equiv C-CS_2^-$ ,  $R^5C \equiv C-SO_2^-$ ,  $R^5C \equiv C-S(=O)S^-$ ,  $R^5C \equiv C-SO_3^-$ ,  $R^5C \equiv C-S(=O)_2S^-$  및  $(CH_2=CH_2CH_2)_iNR_r^4+$ 로부터 선택되며, 여기서 i는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고, r은 i와 r의 합이 4가 되도록 선택되고,  $R^5$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고,  $R^4$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 I 또는 II의 염의 일부 구체예에서, G는  $R^5C \equiv C-CO_2^-$  및  $(CH_2=CH_2CH_2)_iNH_{(4-i)}^+$ 로부터 선택되고, 여기서 i는 2 및 3으로부터 선택되고,  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 I 또는 II의 염의 일부 구체예에서, G는  $HC \equiv C-CO_2^-$  및  $(CH_2=CH_2CH_2)_2NH_2^+$ 로부터 선택된다.

[0035] 일부 구체예에서, 본 개시내용은 식 III의 염에 대한 것이다:



[0036]

[0037] 여기서

[0038] M은 O, S 및  $NR^6$ 으로부터 선택되며, 여기서  $R^6$ 은 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

[0039]  $R^5$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

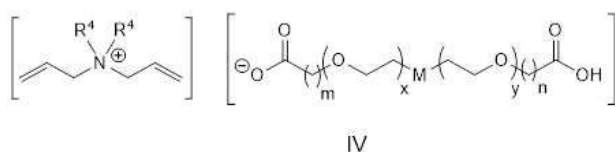
[0040] m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;

[0041] x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택된다.

[0042] 식 III의 염의 일부 구체예에서,  $R^5$ 는 H이고 M은 O이다.

[0043] 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 독립적으로 2 또는 3으로부터 선택된다. 식 III의 염의 바람직한 구체예에서, m 및 n은 모두 2 또는 3으로부터 선택된다.

[0044] 일부 구체예에서, 본 개시내용은 식 IV의 염에 대한 것이다:



[0045]

[0046] 여기서

- [0047] M은 O, S 및  $\text{NR}^6$ 으로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^6$ 은 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0048]  $\text{R}^4$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0049] m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;
- [0050] x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택됨.
- [0051] 식 IV의 염의 일부 구체예에서,  $\text{R}^4$ 는 H이고 M은 O이다.
- [0052] 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 독립적으로 1 및 2로부터 선택된다.
- [0053] 식 II, III 또는 IV의 염의 일부 구체예에서, m은 n과 같다. 식 II, III 또는 IV의 염의 일부 구체예에서, m은 n과 같고 x는 y와 같다. 식 II, III 또는 IV의 염의 일부 구체예에서, m은 n과 같고 x는 y와 다르다.
- [0054] 두 번째 양태에서, 본 개시내용은 본원에 기술된 임의의 구체예에 따른 적어도 하나의 염을 포함하는 화장품 제제에 대한 것이다.
- [0055] 화장품 제제의 일부 구체예에서, 화장품 제제는 계면활성제, 오일 성분, 유화제, 진주광택 왁스, 점도-증진제, 증점제, 과지방화제, 안정제, 중합체, 실리콘 화합물, 지방, 왁스, 레시틴, 인지질, 자외선 차단 인자, 보습제, 생물기원 작용제, 향산화제, 탈취제, 발한억제제, 비듬 방지제, 필름-형성제, 팽창제, 방충제, 자가-태닝제, 티로신 억제제(탈색제), 하이드로트로프, 가용화제, 방부제, 향유 및 염료, 뿐만 아니라 이의 혼합물로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나의 화장품 첨가제를 추가로 포함한다.
- [0056] 화장품 제제의 일부 구체예에서 담체, 바람직하게는 물, C(2-6)-알코올, C(1-10)폴리올, 뿐만 아니라 오일 성분으로부터 선택된 담체를 추가로 포함한다.
- [0057] 세 번째 양태에서, 본 개시내용은 모발 케어 제품으로 사용하기 위한, 본원에 개시된 임의의 구체예에 따른 염, 조성물 또는 화장품 제제에 대한 것이다.
- [0058] 네 번째 양태에서, 본 개시내용은 바람직하게는 모발 케어 제품인 화장품 제제의 생산을 위한, 본원에 개시된 임의의 구체예에 따른 염의 사용에 대한 것이다.
- [0059] 다섯 번째 양태에서, 본 개시내용은 모발과 같은 케라틴 물질의 트리트먼트에 대한 방법에 대한 것으로서, 상기 방법은 케라틴 물질에 본원에 개시된 임의의 구체예에 따른 염 또는 화장품 제제를 적용하는 것을 포함한다.
- [0060] 본원에 개시된 염 및 화장품 제제는 특히 건강한 모발의 보호 또는 손상된 모발의 개선을 위한 화장품 용도에 적합하다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0061] 본 개시내용의 맥락에서, 이황화물 브릿지의 복원은 2개의 티올 모이어티가 서로 연결되는 과정을 지칭한다(용어 "이황화물 브릿지"는 직접적으로 연결된 -S-S-결합이 아니고 발명의 염을 사용하여 연결된 2개의 티올 모이어티를 지칭한다는 것이 이해되어 진다). 티올 모이어티는, 예를 들어 케라틴 단백질의 일부일 수 있다. 티올 모이어티를 서로 연결하는 과정은 가교제에서 각 티올의 친전자성 모이어티와의 반응을 포함할 수 있다. 본원에 개시된 티올-반응성 가교제는 전형적으로 2개의 티올 모이어티와 반응하여 2개의 티올 모이어티를 함께 연결하는 가교 단위를 형성한다.
- [0062] 달리 명시되지 않는 한, 다음 일반적인 정의는 설명에 따라 본 개시내용의 모든 염에 적용된다.
- [0063] 본원에 사용된 용어 "본 개시내용의 염"은 식 I-IV로 표현된 염과 본원에 개시된 임의의 특정 예를 지칭한다.
- [0064] "서로 독립적으로"는 기가 임의의 염에서 1번 초과로 고리에 나타날 때, 각 경우에 대한 그 정의가 임의의 다른 경우와 독립적이라는 것을 의미한다는 것이 이해된다.
- [0065]  $-\text{C}_{1-4}$  알킬과 같이 부착이 없는 점선 또는 실선은 잔기(즉, 부분적인 식)의 부착 부위를 묘사한다는 것이 추가로 이해된다.
- [0066] 약어 "C" 및 "N"은 전형적으로 라디칼, 니트렌 또는 카벤을 생성하지 않는 모든 가능한 포화도를 나타낸다는

것, 즉 N에는 -NH-, -N= 및  이 포함되고, C에는 -CH<sub>2</sub>-, =CH- 및  이 포함된다는 것이 추가로 이해된다. 부가하여, 임의의 적합한 위치에서 치환기 R<sup>x</sup>를 갖는 방향족 또는 헤테로방향족 고리에서의 원자로서 "C"에는 =CH-뿐만 아니라 =CR<sup>x</sup>-가 포함된다. 부가하여, 임의의 적합한 위치에서 치환기 R<sup>x</sup>를 갖지 않는 방향족 또는 헤테로방향족 고리에서의 원자로서 "C"에는 경우에 따라 =CH- 및  이 포함된다. 숙련된 기술자는 일반적인 원자가 규칙이 준수되어야 함을 이해하고 알고 있다.

[0067] 임의의 식에서 직쇄 또는 분지형 알킬 사슬 중 하나 초과 CH<sub>2</sub> 기, 예를 들어 직쇄 또는 분지형 C<sub>1-15</sub> 알킬이 헤테로원자 또는 헤테로원자-함유 기로 대체될 때마다 2개 이상의 CH<sub>2</sub> 기가 직접적으로 인접한 헤테로원자, 예를 들어 -O-O- 또는 -NH-NH-가 회피되도록 다시 대체된다는 것이 이해된다. 특히, 2개 이상의 CH<sub>2</sub> 기는 알킬 사슬에 과산화물기가 함유되지 않도록 대체되어야 한다. L과 같이 본원에 정의된 일반기의 선택에 대해서도 이는 유효하여, 직접적으로 인접한 헤테로원자, 예를 들어 -O-O- 또는 -NH-NH-가 회피되도록 선택된다.

[0068] 용어 "디아릴암모늄기"는 4개의 치환기에 공유 결합된, 양으로 하전된 질소 원자를 지칭하며, 여기서 4개의 치환기 중 적어도 2개는 알릴 치환기이다. "디아릴암모늄기"의 예로는 (CH<sub>2</sub>=CHCH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NR<sub>2</sub><sup>+</sup>, (CH<sub>2</sub>=CHCH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>NR<sup>+</sup>, (CH<sub>2</sub>=CHCH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>N<sup>+</sup>, (CH<sub>2</sub>=C(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NR<sub>2</sub><sup>+</sup>, (CH<sub>2</sub>=C(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>NR<sup>+</sup>, (CH<sub>2</sub>=C(CH<sub>3</sub>)CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>N<sup>+</sup>, ((CH<sub>3</sub>)HC=CCH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NR<sub>2</sub><sup>+</sup>, ((CH<sub>3</sub>)HC=CCH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>NR<sup>+</sup>, ((CH<sub>3</sub>)HC=CCH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>N<sup>+</sup>, ((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C=CCH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NR<sub>2</sub><sup>+</sup>, ((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C=CCH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>NR<sup>+</sup>, ((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C=CCH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>N<sup>+</sup>가 포함되며, 여기서 R은 독립적으로 H 및 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬로부터 선택될 수 있다. 일부 구체예에서, "디아릴암모늄기"는 4개의 치환기에 공유 결합된 양으로 하전된 질소 원자를 지칭하며, 여기서 4개의 치환기 중 2개는 알릴 치환기이고 다른 2개의 치환기는 알릴 치환기가 아니다. 일부 구체예에서, "디아릴암모늄기"는 (CH<sub>2</sub>=CHCH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NR<sub>2</sub><sup>+</sup>이며, 여기서 R은 H 및 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬로부터 독립적으로 선택될 수 있다. 일부 구체예에서, "디아릴암모늄기"는 (CH<sub>2</sub>=CHCH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NH<sub>2</sub><sup>+</sup>이다.

[0069] 크로틸 단편((CH<sub>3</sub>)HC=CCH<sub>2</sub>-)에서와 같이 E 및 Z 이성질체가 존재하는 경우, E-이성질체, Z-이성질체 및 이의 임의의 혼합물이 포함된다.

[0070] "알릴 치환기" 또는 "알릴"은 하나 이상의 C<sub>1-6</sub> 알킬기로 임의적으로 치환될 수 있는 -CH<sub>2</sub>CH=CH<sub>2</sub> 단위를 지칭한다. "알릴"의 예로는 -CH<sub>2</sub>CH=CH<sub>2</sub>, -CH(CH<sub>3</sub>)CH=CH<sub>2</sub>, -C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CH=CH<sub>2</sub> 단위 -CH<sub>2</sub>C(Me)=CH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH=CH(CH<sub>3</sub>) (E 및 Z), -CH<sub>2</sub>CH=C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>가 포함된다. 일부 구체예에서, "알릴"은 -CH<sub>2</sub>CH=CH<sub>2</sub>이다.

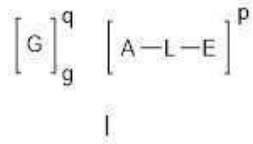
[0071] 용어 "C<sub>1-14</sub> 알킬", "C<sub>1-12</sub> 알킬", "C<sub>1-11</sub> 알킬" 및 "C<sub>1-6</sub> 알킬"은 지정된 수의 탄소 원자를 갖는 완전히 포화된 분지형 또는 비분지형 탄화수소 모이어티를 지칭한다. C<sub>1-14</sub> 알킬의 대표적인 예로는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, sec-부틸, 이소-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소-펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 이소-헥실, 네오헥실, 헵틸, 옥틸, 노닐, 데실, 도데실 등이 포함되지만 이에 제한되지 않는다. C<sub>1-6</sub> 알킬의 대표적인 예로는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소-프로필, n-부틸, sec-부틸, 이소-부틸, tert-부틸, n-펜틸, 이소-펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 이소-헥실 또는 네오헥실이 포함되지만 이에 제한되지 않는다. C<sub>1-14</sub> 알킬, C<sub>1-12</sub> 알킬, C<sub>1-11</sub> 알킬 및 C<sub>1-6</sub> 알킬의 하나 이상의 인접 또는 비인접 CH<sub>2</sub> 기는 -(CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>)-, -(CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-O)-, 및 -(O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>)-, C=O, -O-, -S-, -NH-, -NR-로부터 선택된 하나 이상의 기로 독립적으로 대체되며, 여기서 R은 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬이다.

[0072] p 및 q와 같은 본원에서 사용되는 특정 매개변수는 전하를 지칭한다. 예를 들어, 전하는 2+, +, - 또는 2-일 수 있다. 2+는 2개의 양전하를 지칭하며, 즉 각각의 이온은 이중으로 양으로 하전된다. 반대로 2-는 2개의 음전하를 지칭하며, 즉 각각의 이온은 이중으로 음으로 하전된다. 전하는 전형적으로 이온을 지칭하며, 이는 전체 화학적 모이어티 또는 단편 또는 독립체일 수 있다. 이온의 전하는 이온에 포함된 모든 양전하와 음전하를 더하여 계산될 수 있는 그 이온의 전반적인 전하를 지칭한다. 예로서, 암모늄기와 2개의 카르복실레이트기를 포함하는 이온은 -의 전반적인 전하를 갖는다. 이온의 전하는 하나 초과 원자에 걸쳐 비국재화될 수 있다. 전하는 또한

하나의 원자와 같은 소수의 원자 상에 국소화될 수 있다.

[0073] 출원 전반에 걸쳐 제공된 정의에 근거하여, 당업자는 어떤 조합이 합성적으로 실행가능하고 현실적인지, 예를 들어, 전형적으로 서로에 직접적으로 연결된 일부 헤테로원자로 이어지는 기의 조합, 예를 들어 -O-O-는 고려되지 않지만, 이소티아졸에서의 -S-N=과 같은 합성적으로 실행가능한 조합은 고려된다는 것을 알고 있다.

[0074] 첫 번째 양태에서, 본 개시내용은 식 I의 염에 대한 것이다.



[0075]

[0076] 여기서

[0077] q는 + 또는 -이고;

[0078] p는 2+, +, - 또는 2-이고;

[0079] g는 1 또는 2이고;

[0080] G는  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-C(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CS}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-SO}_3^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-S(=O)}_2\text{S}^-$  및 디알릴암모늄기로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;

[0081] L은 직쇄  $\text{C}_{1-15}$  알킬이며, 여기서 하나 이상의  $\text{CH}_2$  기는  $-(\text{CH}_2\text{-O-CH}_2)-$ ,  $-(\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{-O})-$ ,  $-(\text{O-CH}_2\text{-CH}_2)-$ ,  $\text{C=O}$ ,  $-\text{O}-$ ,  $-\text{S}-$ ,  $-\text{NH}-$  또는  $-\text{NR}^1-$ 에 의해 독립적으로 대체되며, 여기서  $\text{R}^1$ 은 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬이고;

[0082] A는  $\text{NR}_3^{2+}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C(=O)S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S(=O)S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$  및  $\text{S(=O)}_2\text{S}^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $\text{R}^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

[0083] E는  $\text{NR}_3^3$ ,  $\text{NR}_3^{3+}$ ,  $\text{CO}_2\text{H}$ ,  $\text{C(=O)SH}$ ,  $\text{CS}_2\text{H}$ ,  $\text{SO}_2\text{H}$ ,  $\text{S(=O)SH}$ ,  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{S(=O)}_2\text{SH}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C(=O)S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S(=O)S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$ ,  $\text{S(=O)}_2\text{S}^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로  $\text{R}^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

[0084] 단, A 및 E의 전체 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성이다.

[0085] 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 +이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 -이다.

[0086] 식 I의 염의 일부 구체예에서, p는 2+이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, p는 +이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, p는 2-이다. 일부 실시양태의 식 I의 염에서, p는 -이다.

[0087] 식 I의 염의 일부 구체예에서, g는 1이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, g는 2이다.

[0088] 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 +이고, p는 -이고, g는 1이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 +이고, p는 2-이고, g는 2이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 -이고, p는 +이고, g는 1이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 -이고, p는 2+이고, g는 2이다.

[0089] 식 I의 염의 일부 구체예에서, G는  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-C(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CS}_2^-$ , 및 디알릴암모늄기로부터 선택되고, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, G는  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CO}_2^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-C(=O)S}^-$ ,  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CS}_2^-$  및  $(\text{CH}_2=\text{CH-CH}_2)_i\text{NR}_{(4-i)}^4$ 로부터 선택되고, 여기서 i는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $\text{R}^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, G는  $\text{R}^5\text{-C}\equiv\text{C-CO}_2^-$  및

디알릴암모늄기로부터 선택되고, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, G는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$  및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^4$ 로부터 선택되고, 여기서 독립적으로 i는 2 및 3으로부터 선택되고, 여기서  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, G는  $H-C\equiv C-CO_2^-$  및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNH_{(4-i)}^+$ 로부터 선택되고, 여기서 i는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택된다.

[0090]

식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 +이고 G는 디알릴암모늄기이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 +이고 G는  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^4$ 이고, 여기서 i는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고,  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 +이고 G는  $(CH_2=CH-CH_2)_iNH_{(4-i)}^+$ 이며, 여기서 i는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택된다. 이 문단에 기술된 구체예에서, 바람직하게는 p는 -이고 g는 1이다.

[0091]

식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 -이고 G는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_3^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 -이고, G는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ 로부터 선택되고, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, q는 -이고, G는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ 이고, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 이 문단에 기술된 구체예에서, 바람직하게는 p는 2+이고 g는 2이다.

[0092]

식 I의 염의 일부 구체예에서, L은 직쇄  $C_{1-10}$  알킬이고, 여기서 하나 이상의  $CH_2$  기는 독립적으로  $-(CH_2-O-CH_2)-$ ,  $-(CH_2-CH_2-O)-$ ,  $-(O-CH_2-CH_2)-$ ,  $C=O$ ,  $-O-$ ,  $-S-$ ,  $-NH-$  또는  $-NR^1-$ 로 대체되고, 여기서  $R^1$ 은 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬이다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, L은 직쇄  $C_{1-10}$  알킬이고, 여기서 하나 이상의  $CH_2$  기는 독립적으로  $-(CH_2-O-CH_2)-$ ,  $-(CH_2-CH_2-O)-$ ,  $-(O-CH_2-CH_2)-$ ,  $C=O$ ,  $-O-$  또는  $-S-$ 로 대체된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, L은 직쇄  $C_{1-10}$  알킬이고, 여기서 하나 이상의  $CH_2$  기는 독립적으로  $-(CH_2-O-CH_2)-$ ,  $-(CH_2-CH_2-O)-$ ,  $-(O-CH_2-CH_2)-$  또는  $-O-$ 로 대체된다.

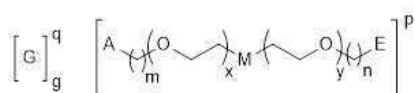
[0093]

식 I의 염의 일부 구체예에서, A는  $NR_3^{2+}$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ 로부터 선택되고, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, p는 + 또는 2+이고 A는  $NR_3^{2+}$ 이고, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, p는 - 또는 2-이고 A는  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$  및  $S(=O)_2S^-$ 이고, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, p는 - 또는 2-이고 A는  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ 로부터 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, p는 - 또는 2-이고 A는  $CO_2^-$ 이다.

[0094]

식 I의 염의 일부 구체예에서, E는  $NR_3^3$ ,  $NR_3^{3+}$ ,  $CO_2H$ ,  $C(=O)SH$ ,  $CS_2H$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ 로부터 선택되고, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 I의 염의 일부 구체예에서, E는  $NR_3^3$ ,  $NR_3^{3+}$ ,  $CO_2H$ ,  $CO_2^-$ 로부터 선택되고, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다.

- [0095] 식 I의 염의 일부 구체예에서,
- [0096] q는 +이고;
- [0097] p는 - 또는 2-이고;
- [0098] g는 1 또는 2이고;
- [0099] G는 디알릴암모늄기이고;
- [0100] L은 직쇄 C<sub>1-15</sub> 알킬이며, 여기서 하나 이상의 CH<sub>2</sub> 기는 독립적으로 -(CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>)-, -(CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-O)-, -(O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>)-, C=O, -O-, -S-, -NH- 또는 -NR<sup>1</sup>-로 대체되고, 여기서 R<sup>1</sup>은 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬이고;
- [0101] A는 CO<sub>2</sub><sup>-</sup>, C(=O)S<sup>-</sup>, CS<sub>2</sub><sup>-</sup>, SO<sub>2</sub><sup>-</sup>, S(=O)S<sup>-</sup>, SO<sub>3</sub><sup>-</sup> 및 S(=O)<sub>2</sub>S<sup>-</sup>로부터 선택되고;
- [0102] E는 NR<sub>2</sub><sup>3</sup>, CO<sub>2</sub>H, C(=O)SH, CS<sub>2</sub>H, SO<sub>2</sub>H, S(=O)SH, SO<sub>3</sub>H, S(=O)<sub>2</sub>SH, CO<sub>2</sub><sup>-</sup>, C(=O)S<sup>-</sup>, CS<sub>2</sub><sup>-</sup>, SO<sub>2</sub><sup>-</sup>, S(=O)S<sup>-</sup>, SO<sub>3</sub><sup>-</sup>, S(=O)<sub>2</sub>S<sup>-</sup>로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로 R<sup>3</sup>는 H, 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬로부터 선택되고;
- [0103] 단, A 및 E의 전반적인 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성인 조건을 갖는다.
- [0104] 식 I의 염의 일부 구체예에서,
- [0105] q는 -이고;
- [0106] p는 2+ 또는 +이고;
- [0107] g는 1 또는 2이고;
- [0108] G는 R<sup>5</sup>-C≡C-CO<sub>2</sub><sup>-</sup>, R<sup>5</sup>-C≡C-C(=O)S<sup>-</sup>, R<sup>5</sup>-C≡C-CS<sub>2</sub><sup>-</sup>, R<sup>5</sup>-C≡C-SO<sub>2</sub><sup>-</sup>, R<sup>5</sup>-C≡C-S(=O)S<sup>-</sup>, R<sup>5</sup>-C≡C-SO<sub>3</sub><sup>-</sup>, R<sup>5</sup>-C≡C-S(=O)<sub>2</sub>S<sup>-</sup>로부터 선택되고, 여기서 R<sup>5</sup>는 H, 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬에서 독립적으로 선택되고;
- [0109] L은 직쇄 C<sub>1-15</sub> 알킬이고, 여기서 하나 이상의 CH<sub>2</sub> 기는 -(CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>)-, -(CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-O)-, -(O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>)-, C=O, -O-, -S-, -NH- 또는 -NR<sup>1</sup>-로 독립적으로 대체되고, 여기서 R<sup>1</sup>은 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬이고;
- [0110] A는 NR<sub>3</sub><sup>2+</sup>이고, 여기서 R<sup>2</sup>는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬로부터 선택되고;
- [0111] E는 NR<sub>2</sub><sup>3</sup>, NR<sub>3</sub><sup>3+</sup>, CO<sub>2</sub>H, C(=O)SH, CS<sub>2</sub>H, SO<sub>2</sub>H, S(=O)SH, SO<sub>3</sub>H, S(=O)<sub>2</sub>SH로부터 선택되고, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로 R<sup>3</sup>는 H, 선형 또는 분지형 C<sub>1-6</sub> 알킬로부터 선택되고;
- [0112] 단, A 및 E의 전반적인 전하는 0이 아니고, 식 I의 염은 전하가 전체적으로 중성인 조건을 갖는다.
- [0113] 일부 구체예에서, 본 발명의 염은 식 II의 것이다:



II

- [0114]
- [0115] 여기서
- [0116] q는 + 또는 -이고;
- [0117] p는 2+, +, - 또는 2-이고;
- [0118] g는 1 또는 2이고;

- [0119]  $G$ 는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_3^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)_2S^-$  및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^{4+}$ 로부터 선택되며, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되며, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;
- [0120]  $A$ 는  $NR_3^{2+}$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$ ,  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0121]  $E$ 는  $NR_2^3$ ,  $NR_3^{3+}$ ,  $CO_2H$ ,  $C(=O)SH$ ,  $CS_2H$ ,  $SO_2H$ ,  $S(=O)SH$ ,  $SO_3H$ ,  $S(=O)_2SH$ ,  $CO_2^-$ ,  $C(=O)S^-$ ,  $CS_2^-$ ,  $SO_2^-$ ,  $S(=O)S^-$ ,  $SO_3^-$ ,  $S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0122]  $M$ 은 O, S, NH 및  $NR^1$ 로부터 선택되며, 여기서  $R^1$ 은 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬이고;
- [0123]  $m$  및  $n$ 은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;
- [0124]  $x$  및  $y$ 는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택되고;
- [0125] 단,  $A$  및  $E$ 의 전체 전하는 0이 아니고, 식 II의 염의 전체 전하가 전체적으로 중성이다.
- [0126] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 +이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 -이다.
- [0127] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 2+이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 +이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 2-이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 -이다.
- [0128] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $g$ 는 1이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $g$ 는 2이다.
- [0129] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 +이고,  $p$ 는 -이고,  $g$ 는 1이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 +이고,  $p$ 는 2-이고,  $g$ 는 2이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 -이고,  $p$ 는 +이고,  $g$ 는 1이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 -이고,  $p$ 는 2+이고,  $g$ 는 2이다.
- [0130] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $G$ 는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ , 및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^{4+}$ 로부터 선택되고, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $G$ 는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$  및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^{4+}$ 로부터 선택되고, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고,  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고,  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $G$ 는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$  및  $(CH_2=CH-CH_2)_iNH_{(4-i)}^{4+}$ 로부터 선택되고, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고,  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다.
- [0131] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 +이고  $G$ 는  $(CH_2=CH-CH_2)_iNR_{(4-i)}^{4+}$ 이고, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고,  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 +이고  $G$ 는  $(CH_2=CH-CH_2)_iNH_{(4-i)}^{4+}$ 이고, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택된다. 이 문단에 기술된 구체예에서, 바람직하게는  $p$ 는 -이고  $g$ 는 1이다.
- [0132] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 -이고  $G$ 는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_2^-$ ,  $R^5-C$

$\equiv\text{C}-\text{S}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{R}^5-\text{C}\equiv\text{C}-\text{SO}_3^-$ ,  $\text{R}^5-\text{C}\equiv\text{C}-\text{S}(=\text{O})_2\text{S}^-$ 로부터 선택되고, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 -이고,  $G$ 는  $\text{R}^5-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CO}_2^-$ ,  $\text{R}^5-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{R}^5-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CS}_2^-$ 로부터 선택되고, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $q$ 는 -이고,  $G$ 는  $\text{R}^5-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CO}_2^-$ 이고, 여기서  $\text{R}^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다. 이 문단에 기술된 구체예에서, 바람직하게는  $p$ 는 2+이고  $g$ 는 2이다.

[0133] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $m$ 과  $n$ 은 둘 모두 1, 2 및 3으로부터 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $m$ 과  $n$ 은 1이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $m$ 과  $n$ 은 2이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $m$ 과  $n$ 은 3이다.

[0134] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $x$ 와  $y$ 는 둘 모두 0, 1 및 2로부터 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $x$ 와  $y$ 는 둘 모두 0이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $x$ 와  $y$ 는 둘 모두 1이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $x$ 와  $y$ 는 둘 모두 2이다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $x$ 는 0이고  $y$ 는 1이다.

[0135] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $A$ 는  $\text{NR}_3^{2+}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ 로부터 선택되고, 여기서  $\text{R}^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 + 또는 2+이고  $A$ 는  $\text{NR}_3^{2+}$ 이고, 여기서  $\text{R}^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 - 또는 2-이고  $A$ 는  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$  및  $\text{S}(=\text{O})_2\text{S}^-$ 이고, 여기서  $\text{R}^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 - 또는 2-이고  $A$ 는  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ 로부터 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $p$ 는 - 또는 2-이고  $A$ 는  $\text{CO}_2^-$ 이다.

[0136] 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $E$ 는  $\text{NR}_2^3$ ,  $\text{NR}_3^{3+}$ ,  $\text{CO}_2\text{H}$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{SH}$ ,  $\text{CS}_2\text{H}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로,  $\text{R}^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택된다. 식 II의 염의 일부 구체예에서,  $E$ 는  $\text{NR}_2^3$ ,  $\text{NR}_3^{3+}$ ,  $\text{CO}_2\text{H}$ ,  $\text{CO}_2^-$ 로부터 선택되며, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로,  $\text{R}^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택된다.

[0137] 식 II의 염의 일부 구체예에서,

[0138]  $q$ 는 +이고;

[0139]  $p$ 는 - 또는 2-이고;

[0140]  $g$ 는 1 또는 2이고;

[0141]  $G$ 는  $(\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2)_i\text{NR}_{(4-i)}^4$ 이고, 여기서  $i$ 는 2 및 3으로부터 독립적으로 선택되고,  $\text{R}^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;

[0142]  $A$ 는  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$ ,  $\text{S}(=\text{O})_2\text{S}^-$ 로부터 선택되고, 여기서  $\text{R}^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

[0143]  $E$ 는  $\text{NR}_2^3$ ,  $\text{CO}_2\text{H}$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{SH}$ ,  $\text{CS}_2\text{H}$ ,  $\text{SO}_2\text{H}$ ,  $\text{S}(=\text{O})\text{SH}$ ,  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{S}(=\text{O})_2\text{SH}$ ,  $\text{CO}_2^-$ ,  $\text{C}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{CS}_2^-$ ,  $\text{SO}_2^-$ ,  $\text{S}(=\text{O})\text{S}^-$ ,  $\text{SO}_3^-$ ,  $\text{S}(=\text{O})_2\text{S}^-$ 로부터 선택되고, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로  $\text{R}^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

[0144]  $M$ 은 O, S, NH 및  $\text{NR}^1$ 로부터 선택되고, 여기서  $\text{R}^1$ 은 선형 또는 분지형  $\text{C}_{1-6}$  알킬이고;

[0145] m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;

[0146] x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택되고;

[0147] 단, A 및 E의 전반적인 전하는 0이 아니고, 식 II의 염은 전하가 전체적으로 중성인 조건을 갖는다.

[0148] 식 II의 염의 일부 구체예에서,

[0149] q는 -이고;

[0150] p는 2+ 또는 +이고;

[0151] g는 1 또는 2이고;

[0152] G는  $R^5-C\equiv C-CO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-C(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-CS_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_2^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)S^-$ ,  $R^5-C\equiv C-SO_3^-$ ,  $R^5-C\equiv C-S(=O)_2S^-$ 로부터 선택되고, 여기서  $R^5$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 독립적으로 선택되고;

[0153] A는  $NR_3^{2+}$ 이고, 여기서  $R^2$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

[0154] E는  $NR_3^3$ ,  $NR_3^{3+}$ ,  $CO_2H$ ,  $C(=O)SH$ ,  $CS_2H$ ,  $SO_2H$ ,  $S(=O)SH$ ,  $SO_3H$ ,  $S(=O)_2SH$ 로부터 선택되고, 여기서 각 경우에 대해 독립적으로  $R^3$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

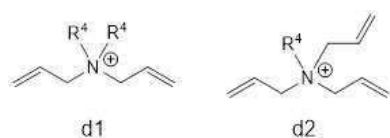
[0155] M은 O, S, NH 및  $NR^1$ 로부터 선택되고, 여기서  $R^1$ 은 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬이고;

[0156] m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;

[0157] x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택되고;

[0158] 단, A 및 E의 전반적인 전하는 0이 아니고, 식 II의 염은 전하가 전체적으로 중성인 조건을 갖는다.

[0159] 본원에 개시된 임의의 염의 일부 구체예에서, 디알릴암모늄기는 식 d1 또는 d2의 모이어티이다:



[0160]

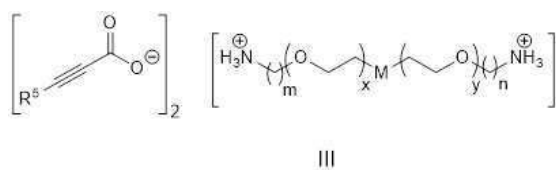
[0161] 여기서, 각 경우에 대해 독립적으로,  $R^4$ 는 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다.

[0162] 본원에 개시된 임의의 염의 일부 구체예에서, 디알릴암모늄기는 식 d1 또는 d2의 것이며, 여기서  $R^4$ 는 H이다.

[0163] 본원에 개시된 임의의 염의 일부 구체예에서, 디알릴암모늄기는 식 d1의 모이어티이다. 본원에 개시된 임의의 염의 일부 구체예에서, 디알릴암모늄기는 식 d2의 모이어티이다.

[0164] 본원에 개시된 염의 일부 구체예에서, 디알릴암모늄기를 함유하는 이온은  $(CH_2=CHCH_2)_2NH_2^+$ 이다.

[0165] 일부 구체예에서, 본 발명의 염은 식 III의 것이다:

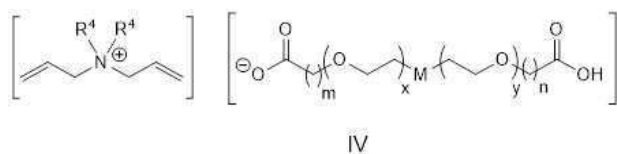


[0166]

[0167] 여기서

[0168] M은 O, S 및  $NR^6$ 으로부터 선택되며, 여기서  $R^6$ 은 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;

- [0169]  $R^5$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0170] m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;
- [0171] x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택됨.
- [0172] 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 O이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 S이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은  $NR^6$ 이고, 여기서  $R^6$ 은 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다.
- [0173] 식 III의 염의 일부 구체예에서,  $R^5$ 는 H이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서,  $R^5$ 는 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬이다.
- [0174] 식 III의 염의 일부 구체예에서, x 및 y는 0 및 1로부터 독립적으로 선택된다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, x 및 y는 0, 1 및 2로부터 선택된다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, x 및 y는 0 및 1로부터 선택된다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, x 및 y는 0이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, x 및 y는 1이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, x는 0이고 y는 1이다.
- [0175] 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 독립적으로 2 및 3으로부터 선택된다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 1, 2 및 3으로부터 선택된다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 2 및 3으로부터 선택된다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 2이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 3이다.
- [0176] 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 2이고 x 및 y는 0이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 3이고 x 및 y는 1이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 2이고, x는 0이고 y는 1이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, m 및 n은 3이고, x는 0이고 y는 1이다.
- [0177] 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 O이고, m 및 n은 2이고, x 및 y는 0이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 O이고, m 및 n은 3이고, x 및 y는 1이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 O이고, m 및 n은 2이고, x는 0이고 y는 1이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 O이고, m 및 n은 3이고, x는 0이고 y는 1이다.
- [0178] 일부 구체예에서, 본 발명의 염은 식 IV의 것이다:



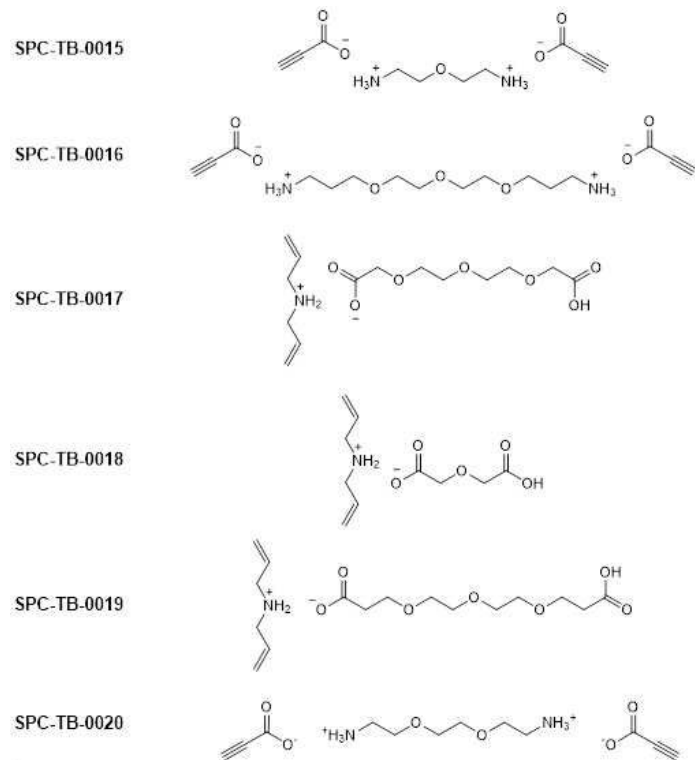
- [0179] 여기서
- [0180] 여기서
- [0181] M은 O, S 및  $NR^6$ 으로부터 선택되며, 여기서  $R^6$ 은 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0182]  $R^4$ 는 각 경우에 대해 독립적으로, H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택되고;
- [0183] m 및 n은 독립적으로 1, 2 및 3으로부터 선택되고;
- [0184] x 및 y는 독립적으로 0, 1 및 2로부터 선택된다.
- [0185] 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 O이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은 S이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서, M은  $NR^6$ 이며, 여기서  $R^6$ 은 H, 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬로부터 선택된다.
- [0186] 식 III의 염의 일부 구체예에서,  $R^4$ 는 각 경우에 대해 H이다. 식 III의 염의 일부 구체예에서,  $R^4$ 는 각 경우에 대해 선형 또는 분지형  $C_{1-6}$  알킬, 예컨대 메틸, 에틸 또는 n-프로필, 특히 메틸이다.
- [0187] 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 1과 2로부터 독립적으로 선택된다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 1, 2 및 3으로부터 선택된다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 1과 2로부터 선택된다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 1이다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 2이다.
- [0188] 식 IV의 염의 일부 구체예에서, x와 y는 0과 1로부터 독립적으로 선택된다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, x와

y는 0, 1 및 2로부터 선택된다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, x와 y는 0과 1로부터 선택된다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, x와 y는 0이다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, x와 y는 1이다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, x는 0이고 y는 1이다.

[0189] 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 1이고 x와 y는 1이다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 1이고 x와 y는 0이다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, m과 n은 2이고 x와 y는 1이다.

[0190] 식 IV의 염의 일부 구체예에서, M은 0이고, m과 n은 1이고 x와 y는 1이다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, M은 0이고, m과 n은 1이고 x와 y는 0이다. 식 IV의 염의 일부 구체예에서, M은 0이고, m과 n은 2이고 x와 y는 1이다.

[0191] 추가의 특정한 구체예에서, 본 개시내용은 표 1에 개시된 특정한 예에 대한 것이다.



[0192]

[0193] 표 1

[0194] 본 개시내용의 염은 분자 안에 하나 이상의 비대칭 중심을 함유할 수 있다. 입체화학의 지정이 없는 염은 순수하거나 실질적으로 순수한 형태의 모든 광학 이성질체(예를 들어, 부분입체이성질체, 거울상이성질체 등) 뿐만 아니라 이의 혼합물(예를 들어 라세미 혼합물 또는 거울상이성질체로 농후화된 혼합물)을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 이러한 광학적으로 활성인 형태를 제조하는 방법(예를 들어 재결정화 기술에 의한 라세미 형태의 재분해, 광학적으로-활성인 출발 물질로부터의 합성, 키랄 합성, 키랄 고정상을 사용한 크로마토그래피 분리 및 기타 방법에 의한)은 당해 기술 분야에서 잘 알려져 있다.

[0195] 염은 동위원소로-표지된 화합물, 예를 들어 수소, 탄소, 질소, 산소의 다양한 동위원소를 포함하는 화합물일 수 있다. 개시된 염은 호변이성체 형태 및 혼합물로 존재할 수 있고 별도의 개별 호변이성체가 고려된다. 부가하여, 일부 염은 다형성을 나타낼 수 있다.

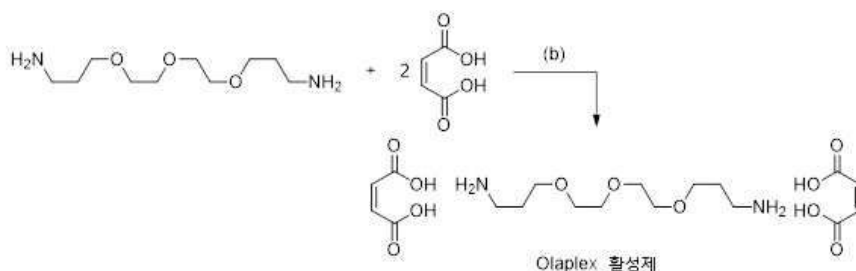
[0196] 본 개시내용의 염은 고체, 즉 결정질(예를 들어, 다형체, 즉 동일한 화학 조성을 갖지만 패킹, 기하학적 배열에서 상이한 다른 결정질 구조) 또는 비결정질 형태(임의적으로 용매화물 같은 것) 또는 액체 형태로 존재할 수 있다. 고체 상태에서는 그 자체 또는 그의 혼합물로 존재할 수 있다. 결정질 용매화물에서 용매 분자는 결정화 동안 결정질 격자 안으로 통합된다. 용매화물의 형성에는, 이에 제한되지 않지만, 에탄올, 이소프로판올, DMSO, 아세트산, 에탄올아민 또는 에틸 아세테이트와 같은 비-수성 용매 또는 물과 같은 수성 용매(또한 "수화물"로 지칭됨)가 포함될 수 있다. 예를 들어, 반응 조건 또는 시약을 변화시키거나 조정함에 의해 다른 다형체가 생성될 수 있다.

- [0197] 추가 양태에서, 본 개시내용은 또한 본 개시내용의 식 I-IV의 염의 제조 방법을 제공한다.
- [0198] 또 다른 양태에서, 본 개시내용은 본 개시내용의 하나 이상의 염의 유효량과 하나 이상의 약학적으로 허용가능한 담체 및/또는 부형제(희석제로도 지칭됨)를 포함하는 화장품 제제를 추가로 제공한다. 부형제는 제형의 다른 성분과 호환가능하고 그 수령체에게 해롭지 않다는 의미에서 허용가능하다. 본원에서 사용되는 용어 "유효량"은 모발 복구의 원하는 효과를 생성하는 데 효과적인 본 개시내용의 염(그 자체로 또는 화장품 제제의 형태로)의 양을 지칭한다.
- [0199] 전형적으로, 화장품 제제의 pH는 20℃에서 3.5-6, 특히 4-5이다. 예를 들어, pH는 락트산, 시트르산 등을 사용하여 조절할 수 있다.
- [0200] 전형적으로, 본원에 개시된 염의 농도는 화장품 제제의 중량 기준으로 0.01% 내지 5%, 예컨대 중량 기준으로 2%-4% 사이일 것이다. 일부 구체예에서, 본원에 개시된 염의 농도는 화장품 제제의 리터당 50-130mmol, 특히 리터당 80-100mmol이다.
- [0201] 일부 구체예에서, 화장품 제제는 가용화제를 포함한다. 가용화제의 농도는, 예를 들어, 화장품 제제의 중량 기준으로 5%-20%, 특히 10%-20%, 예를 들어 15%-20%일 수 있다.
- [0202] 일부 구체예에서, 화장품 제제는 화장품 제제의 중량 기준으로 0.1%-1.7%, 특히 0.7%-1.1%, 예를 들어 0.9%의 농도에서 페녹시에탄올을 포함한다.
- [0203] 일부 구체예에서, 화장품 제제는 화장품 제제의 중량 기준으로 0.01%-0.2%, 특히 0.08%-0.12%, 예를 들어 0.1%의 농도에서 에틸헥실글리세린을 포함한다.
- [0204] 본원에서 사용되는 문구 "약학적으로-허용가능한 담체"는 액체 또는 고체 충전제, 희석제, 부형제, 제조 보조제(예를 들어, 윤활제, 활석 마그네슘, 칼슘 또는 아연 스테아레이트, 또는 스테아르산) 또는 용매 캡슐화 물질과 같은 약학적으로-허용가능한 물질, 조성물 또는 비히클을 의미하며, 대상체 염 또는 화합물을 한 장기 또는 신체의 일부에서 다른 장기 또는 신체의 일부로 운반 또는 수송하는 데 관여된다. 각 담체는 제형의 다른 성분과 호환가능하고 치료를 받는 사람에게 해롭지 않다는 의미에서 "허용가능하여야" 한다. 약학적으로-허용가능한 담체로 이용할 수 있는 물질의 일부 예는: (1) 락토스, 글루코스 및 수크로스와 같은 당; (2) 옥수수 전분 및 감자 전분과 같은 전분; (3) 셀룰로스 및 그 유도체, 예컨대 카르복시메틸 셀룰로스 나트륨, 에틸 셀룰로스 및 셀룰로스 아세테이트; (4) 분말 트라가칸트; (5) 맥아; (6) 젤라틴; (7) 활석; (8) 코코아 버터 및 좌약 왁스와 같은 부형제; (9) 땅콩 기름, 면실 기름, 홍화 기름, 참기름, 올리브 기름, 옥수수 기름 및 대두 기름과 같은 오일; (10) 프로필렌 글리콜과 같은 글리콜; (11) 글리세린, 소르비톨, 만니톨 및 폴리에틸렌 글리콜과 같은 폴리올; (12) 에틸 올레이트 및 에틸 라우레이트와 같은 에스테르; (13) 한천; (14) 수산화 마그네슘 및 수산화 알루미늄과 같은 완충제; (15) 알긴산; (16) 발열원이 없는 물; (17) 등장성 식염수; (18) 링거액; (19) 에틸 알코올; (20) pH 완충 용액; (21) 폴리에스터, 폴리카보네이트 및/또는 폴리안하이드라이드; 및 (22) 화장품 제제에 이용되는 기타 비-독성 호환가능한 물질을 포함한다.
- [0205] 이러한 조성물은 화장품 제제에서 통상적인 추가 성분, 예를 들어 습윤제, 유화제 및 윤활제, 예컨대 라우릴황산나트륨 및 스테아르산마그네슘뿐만 아니라 착색제, 이형제, 코팅제, 감미료, 향미 및 향수제, 방부제 및 항산화제, pH 조절제, 증량제 및 추가 활성제를 함유할 수 있다. 약학적으로-허용가능한 항산화제의 예로는: (1) 아스코르브산, 시스테인 염화물, 중황산나트륨, 메타중아황산나트륨, 아황산나트륨 등과 같은 수용성 항산화제; (2) 아스코르빌 팔미테이트, 부틸화 하이드록시아니솔(BHA), 부틸화 하이드록시톨루엔(BHT), 레시틴, 프로필 갈레이트, 알파-토코페롤 등과 같은 오일-가용성 항산화제; 및 (3) 시트르산, 에틸렌디아민 테트라아세트산(EDTA), 소르비톨, 타르타르산, 인산 등과 같은 금속 킬레이트제가 포함된다.
- [0206] 이러한 조성물은, 예를 들어, 활성 성분을 하나 이상의 담체 및/또는 부형제와 회합시키는 것과 같이 해당 기술 분야에 알려진 임의의 방법에 의해 제조될 수 있다. 담체 및/또는 부형제의 다양한 조성물 및 예는 통상의 기술자에게 잘 알려져 있고, 예를 들어 문헌(Remington: The Science and Practice of Pharmacy, Pharmaceutical Press, 2013; Rowe, Sheskey, Quinn: Handbook of Pharmaceutical Excipients, Pharmaceutical Press, 2009)에 자세히 기술되어 있다. 화장품 제제의 제조에 사용될 수 있는 부형제에는 선택한 투여에 적합한 조성물 또는 제제를 제공하기 위한 완충액, 안정화제, 계면활성제, 습윤제, 윤활제, 유화제, 현탁제, 방부제, 항산화제, 불투명화제, 활택제, 가공 보조제, 착색제, 감미료, 향수제, 향미제, 희석제 및 기타 공지된 첨가제 중 하나 이상이 포함될 수 있다.

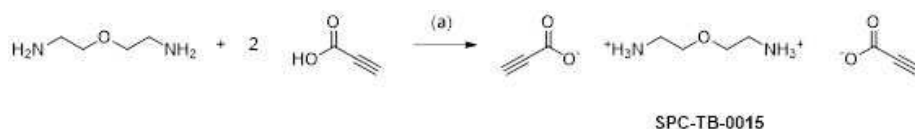
- [0207] 본 개시내용의 화장품 제제는 임의의 적합한 형태로 될 수 있다. 일부 구체예에서, 이러한 적합한 형태는 액체, 예를 들어 로션, 밀크, 무스, 스프레이, 젤, 크림, 연고, 페이스트 등과 같은 저점도에서 적당한 점도 액체를 포함하지만 이에 제한되지 않는다. 상기에 나열된 것과 같은 적합한 부형제는 제형의 사용 형태(예를 들어 로션, 젤, 연고 또는 크림)에 의존하여 피부 제형에 포함되거나 제외된다.
- [0208] 본 개시내용의 염의 액체 형태에는 약학적으로 허용가능한 에멀전, 마이크로에멀전, 용액, 현탁액, 시럽 및 엘릭서가 포함된다. 활성 성분 외에도, 액체 형태에는, 예를 들어, 물 또는 기타 용매, 용해제 및 유화제, 에컨대 에틸 알코올, 이소프로필 알코올, 에틸 카보네이트, 에틸 아세테이트, 벤질 알코올, 벤질 벤조에이트, 프로필렌 글리콜, 1,3-부틸렌 글리콜, 오일(특히, 면실유, 땅콩유, 옥수수유, 배아유, 올리브유, 피마자유 및 참깨유), 글리세롤, 테트라하이드로푸릴 알코올, 폴리에틸렌 글리콜 및 소르비탄의 지방산 에스테르 및 이의 혼합물과 같은 당해 기술 분야에서 일반적으로 사용되는 불활성 희석제가 함유될 수 있다. 현탁액의 형태에서, 염에는, 예를 들어, 에톡실화된 이소스테아릴 알코올, 폴리옥시에틸렌 소르비톨 및 소르비탄 에스테르, 미정질 셀룰로스, 알루미늄 메타하이드록사이드, 벤토나이트, 한천-한천 및 트라가칸트 및 이의 혼합물 같은 현탁제가 함유될 수 있다.
- [0209] 스프레이, 연고, 페이스트, 크림, 로션, 젤, 용액의 형태에서, 염 또는 화합물은 멸균 상태 하에서 약학적으로-허용가능한 담체 및 필요할 수 있는 임의의 방부제, 완충액 또는 추진제와 혼합될 수 있다. 이러한 연고, 페이스트, 크림 및 젤은 본 개시내용의 염 외에도 동물성 및 식물성 지방, 오일, 왁스, 파라핀, 전분, 트라가칸트, 셀룰로스 유도체, 폴리에틸렌 글리콜, 실리콘, 벤토나이트, 규산, 활석 및 산화 아연 또는 이의 혼합물과 같은 부형제를 함유할 수 있다.
- [0210] 분말 및 스프레이의 형태에서, 본 개시내용의 염은 락토스, 활석, 규산, 수산화 알루미늄, 규산 칼슘 및 폴리미드 분말 또는 이들 물질의 혼합물과 같은 부형제를 함유할 수 있다. 스프레이는 부가적으로 클로로플루오로탄 화수소 및 휘발성 비치환된 탄화수소 에컨대 부탄 및 프로판과 같은 통상적인 추진제를 함유할 수 있다.
- [0211] 일부 구체예에서, 화장품 제제는 샴푸, 컨디셔너, 헤어 마스크, 헤어 린스, 헤어 스프레이, 헤어 폼, 헤어 무스, 헤어 젤, 헤어 토닉 등의 형태에서의 제품을 포함하는 모발 케어 제품이다.
- [0212] 모든 고려된 조성물 및 제제는 제조 및 보관의 조건 하에서 안정적이어야 하고 박테리아 및 진균과 같은 미생물의 오염 작용에 대해 보존되어야 한다는 것이 이해된다.
- [0213] 본 개시내용의 화장품 제제에서 본 개시내용의 염의 양은 사람에게 해롭지 않으면서, 특정 사람, 조성물 및 투여의 방식에 대해 원하는 화장품 반응을 달성하는 데 효과적인 본 개시내용의 염의 양을 얻기 위해 조정될 수 있다. 선택된 양은 사용된 본 개시내용의 특정 염의 특성, 투여의 경로, 투여의 시간, 처리의 기간, 특정 염과 조합하여 사용된 다른 화합물, 염 및/또는 물질, 처리되어 지는 사람의 나이, 성별, 체중, 상태, 일반적인 건강 및 이전 병력, 및 의학 분야에서 잘 알려진 유사한 요인을 포함한 다양한 요인에 의존할 것이다.
- [0214] 전형적으로, 본 개시내용의 염의 적절한 양은 원하는 효과를 생성하는 데 효과적인 최소 양인 염의 그 양일 것이다. 이러한 효과적인 용량은 일반적으로 상기에 기술된 요인에 의존할 것이다. 샴푸의 형태에서, 처리당 적용되는 화장품 제제의 양은 예를 들어 1g-10g일 수 있다. 컨디셔너 및/또는 헤어 마스크의 형태에서, 처리당 적용되는 화장품 제제의 양은 예를 들어 1g-10g일 수 있다. 리브온 컨디셔너 또는 리브온 마스크의 형태에서, 처리당 적용되는 화장품 제제의 양은 예를 들어 0.1g-7g일 수 있다.
- [0215] 본원에 개시되고 청구된 모든 염, 조성물, 제제 및/또는 방법은 본 개시내용에 비추어 과도한 실험 없이 만들어지고 실행될 수 있다. 개시내용의 범주를 벗어나지 않고도 본 개시내용에 변경이 적용될 수 있다는 것이 당업자에게 명백할 것이다. 본원에 제공된 실시예는 예시적인 것으로 의도되고 포괄적이지 않다; 따라서, 예시된 실시예는 어떤 식으로든 개시내용을 제한하는 것으로 간주되어서는 안 된다.
- [0216] **실시예**
- [0217] 재료:
- [0218] N-Cbz-시스테인은 문헌 공지 방법을 통해 그 시스테인 대응물의 환원에 의해 얻어졌다. *Adv. Syn. Catal.*, **2020**, *362*, 5093-5104. DOI: 10.1002/adsc.202000716. "OLAPLEX® N° 0 Intensive Bond Building Hair Treatment"는 활성제, 물, 페녹시에탄올 및 벤조산나트륨을 포함하는 상업적으로 이용가능한 제품이다. 활성제는 이하 "Olaplex 활성제"로 표시된다.

**실시예 1: Olaplex 활성제의 합성**

실시예 8에서 참조 화합물로 사용된 활성제 "Olaplex 활성제"는 다음 구조를 갖는다.

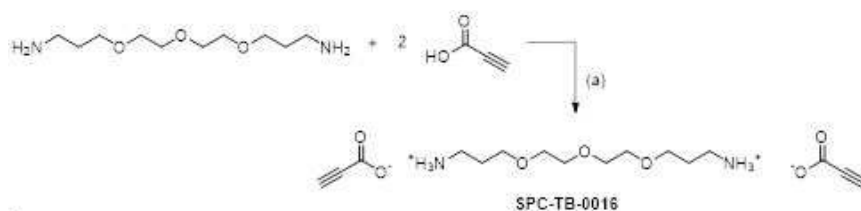


이것은 상응하는 산 2당량과 상응하는 디아민 1당량을 반응시킴에 의해 합성되었다.

**실시예 2: 염 15(SPC-TB-0015)의 합성****(a) SPC-TB-0015**

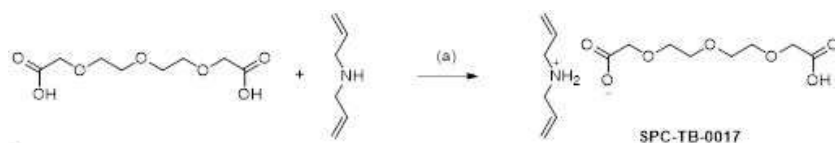
DCM(1.92mL) 내 2,2'-옥시비스(에탄-1-아민)(100mg, 1.0eq, 0.96mmol)의 용액에 프로피올산(134mg, 2.0eq., 1.92mmol)을 첨가했다. 2시간 반응 시간 후 용매를 농축하여 생성된 염을 오렌지색 오일로 얻었다(235mg, quant.).

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO)  $\delta$  8.29 (m, 6H), 3.59 (dd,  $J=5.6\text{Hz}$ , 4.4Hz, 4H), 3.16 (m, 2H), 2.97 (dd,  $J=5.6\text{Hz}$ , 4.4Hz, 4H).

**실시예 3: 염 16(SPC-TB-0016)의 합성****(a) SPC-TB-0016**

DCM(4.54mL) 내 3,3'-((옥시비스(에탄-2,1-디일))비스(옥시))비스(프로판-1-아민)(500mg, 1.0eq, 2.27mmol)의 용액에 프로피올산(318mg, 2.0eq., 4.53mmol)을 첨가했다. 2시간 반응 시간 후 용매를 농축하여 생성된 염을 오렌지색 오일로 얻었다(818mg, quant.).

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO)  $\delta$  8.08 (s, 6H), 3.55 - 3.42 (m, 12H), 2.99 (s, 2H), 2.87 - 2.76 (m, 4H), 1.78 (p,  $J = 8.0, 6.2\text{ Hz}$ , 4H).

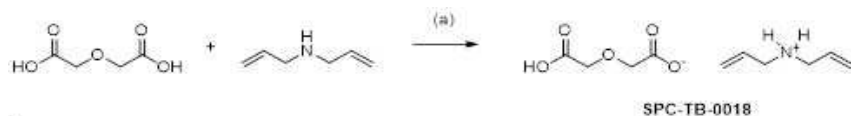
**실시예 4: 염 17(SPC-TB-0017)의 합성****(a) SPC-TB-0017**

MeCN(24.46mL)에 용해된 2,2'-((옥시비스(에탄-2,1-디일))비스(옥시))디아세트산(5.000g, 1Eq, 22.50mmol)의 용액에 디알릴아민(2.186g, 2.78mL, 1Eq, 22.50mmol)을 실온에서 천천히 첨가한다. 용액을 실온에서 2시간 동안

교반한다. 용매를 감압 하에 제거하여 생성된 염(7.179g, 22.48mmol, 99.90%)을 노란색 오일로 얻었다.

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO) δ 9.03 (s, 2H), 5.87 (ddt, *J* = 16.8, 10.4, 6.3 Hz, 2H), 5.35 - 5.17 (m, 4H), 3.88 (s, *J* = 1.5 Hz, 4H), 3.54 (dddt, *J* = 7.8, 5.8, 4.2, 2.1 Hz, 8H), 3.30 (d, *J* = 20.1 Hz, 5H).

#### 실시예 5: 염 18(SPC-TB-0018)의 합성



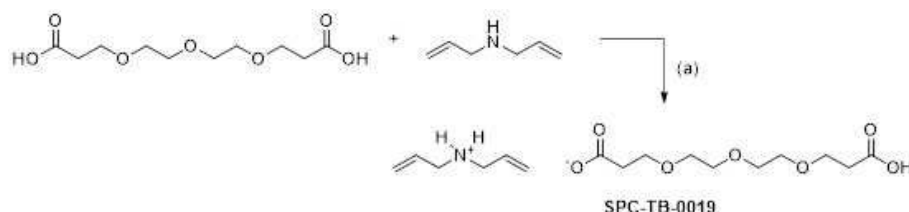
#### (a) SPC-TB-0018

15g 규모에서 절차를 변형했다.

2,2'-옥시디아세트산(15.0g, 1Eq, 112mmol)을 실온에서 MeCN(122mL)에 현탁했다. 그런 다음 디알릴아민(10.9g, 13.8mL, 1Eq, 112mmol)을 점적 부가하고(이때 모든 것이 용해됨) 용액을 실온에서 1시간 동안 교반했다. 용매를 농축하여 생성된 염을 희박색 고체로 얻었다(25.9g, quant.).

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO) δ 5.35 (m, 2H), 5.40 (m, 4H), 3.93 (s, 4H), 3.53 (d, *J*=2.7 Hz, 4H).

#### 실시예 6: 염 19(SPC-TB-0019)의 합성

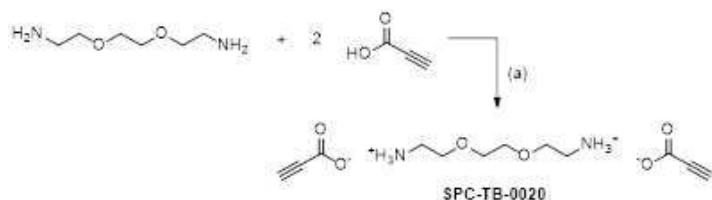


#### (a) SPC-TB-0019

DCM(16.0mL) 내 3,3'-((옥시비스(에탄-2,1-디일))비스(옥시))디프로피온산(400mg, 1.0eq, 1.60mmol)의 용액에 디알릴아민(311mg, 2.0eq., 3.20mmol)을 첨가했다. 2시간 반응 시간 후 용매를 농축하여 생성된 염을 무색 오일로 얻었다(580mg, quant.).

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO) δ 5.82 (m, 2H), 5.12 (m, 4H), 3.59 (t, *J*=6.4 Hz, 4H), 3.15 (m, 4H), 2.42 (t, *J*=6.4 Hz, 4H).

#### 실시예 7: 염 20(SPC-TB-0020)의 합성



#### (a) SPC-TB-0020

0℃에서 DCM(14.0mL) 내 2,2'-((에탄-1,2-디일비스(옥시))비스(에탄-1-아민))(5.00g, 1.00Eq, 34.0mmol)의 용액에 0℃로 예냉한 DCM(14.0mL) 내 프로피올산(4.20mL, 2.00Eq, 67.0mmol)을 첨가했다. 주의: 매우 발열성 반응이므로 매우 천천히 첨가한다. 반응 혼합물을 0℃에서 15분간 교반하고 1시간 동안 실온으로 따뜻하게 했다. 감압 하에 농축하여 오렌지색 오일(양적 수율)을 생성했다.

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, DMSO) δ 3.63-3.56 (m, 8H), 3.04 (s, 2H), 2.95 (t, *J*=5.4Hz, 4H).

#### 실시예 8: 티올 제조합

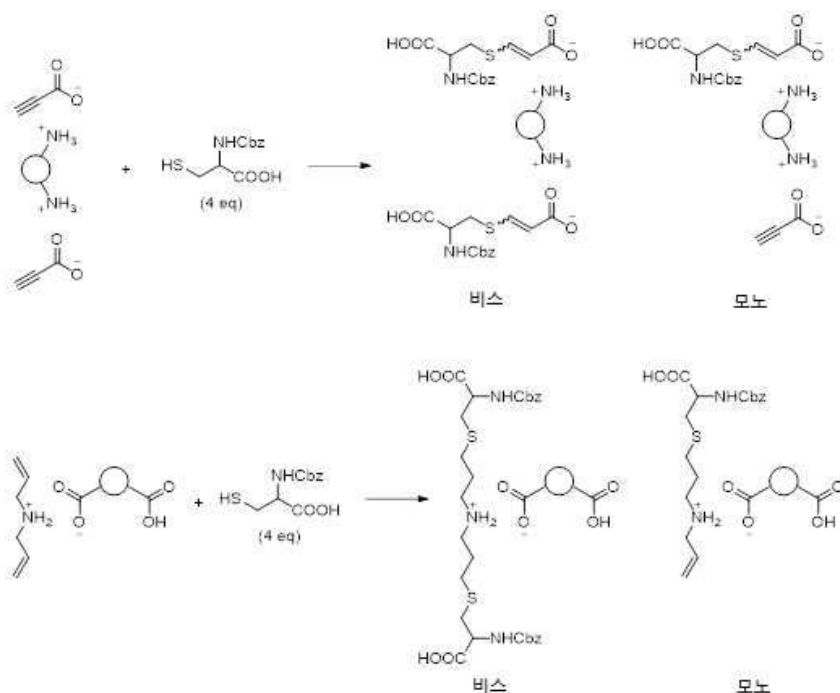
##### 일반 절차

[0256] 테스트되는 화합물(1eq.)을 수성 매질(0.02M)에 용해시키고 4당량의 시스테인 시약(N-Cbz-시스테인)을 첨가했다. 인산염 완충액(pH=5.4)을 수성 매질로 사용했다.

[0257] 인산염 완충액을 만들기 위해 시트르산 0.1-M 용액(시트르산 일수화물 사용)과  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$  0.2-M 용액( $\text{Na}_2\text{HPO}_4$  또는  $\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  사용)을 준비하고 다음 비율: 44.25mL/55.75mL = 0.1M-시트르산 mL/0.2M  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$  mL로 혼합하여 pH=5.4를 갖는 완충액을 제공했다.

[0258] 테스트는 LC-MS 바이알 또는 작은 유리 바이알에서 작은 자석 교반기로 교반하면서 30℃의 주변 온도에서 수행했다. 반응은 정상 대기 하에서 수행했다. 반응은 LC-MS로 모니터링했다. 반응 규모는 테스트된 화합물의 4 내지 10mg 사이였다. 제품으로의 전환을 계산하기 위해 다음 개략도에 도시된 시스테인 시약, 각각의 모노-에덕트(모노) 및 비스-에덕트(비스)의 비율을 비교했다.

[0259] 테스트된 화합물은 Olaplex 활성제에 비해 시스테인 유도체와의 향상된 반응성을 나타냈다.



[0260]

[0261] 결과

| 테스트 화합물      | 30 분에서 전환 | 60 분에서 전환 | 5 시간에서 전환 |
|--------------|-----------|-----------|-----------|
| Olaplex 활성제  | 4% 비스     | 7% 비스     | 18% 비스    |
| SPC-TB-0015* | -         | 12% 비스    | -         |
| SPC-TB-0018* | -         | 15% 비스    | -         |

[0262]

[0263] \* 전환은 MeCN으로 반응 혼합물의 희석 후 평가되었다.