

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成20年9月4日 (2008.9.4)

【公開番号】特開2006-45226(P2006-45226A)

【公開日】平成18年2月16日 (2006.2.16)

【年通号数】公開・登録公報2006-007

【出願番号】特願2005-213262(P2005-213262)

【国際特許分類】

C 0 7 D 251/50 (2006.01)

C 0 7 D 251/70 (2006.01)

C 0 7 D 251/52 (2006.01)

C 0 7 D 403/14 (2006.01)

A 6 1 K 8/00 (2006.01)

A 6 1 Q 5/10 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 D 251/50 C S P D

C 0 7 D 251/70 F

C 0 7 D 251/52 D

C 0 7 D 403/14

A 6 1 K 7/13

【手続補正書】

【提出日】平成20年7月22日 (2008.7.22)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

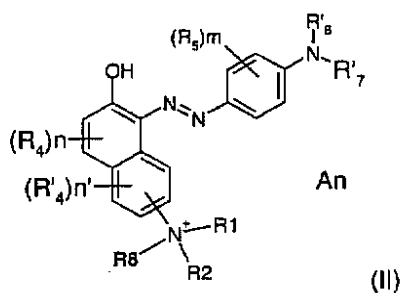
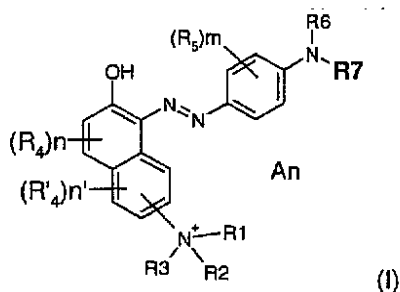
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下式 (I) 及び (II) :

【化 1】



[式中、

R1、R2、及びR3は同一または相違してよく、

- ・直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基であって、無置換であるかまたは
 - ヒドロキシル基；
 - 直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基；
 - アミノ基；
 - 同一もしくは相違してよい、一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄ヒドロキシアルキル基で置換されたアミノ基で置換されており、

R1、R2、またはR3基の二つが、酸素及び窒素から選択される別のヘテロ原子を任意に含み、且つ任意に置換されている、飽和もしくは不飽和の5員もしくは6員の複素環を任意に形成可能であり；

R4、R'4、及びR5は同一または相違してよく、

- ・ハロゲン原子；
- ・ヒドロキシル基；
- ・ニトロもしくはシアノ基；
- ・直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基であって、少なくとも1つのヒドロキシル基、少なくとも1つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基、少なくとも1つのアミノ基及び/または、同一もしくは相違して良い一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基で置換された少なくとも1つのアミノ基を任意に担持するもの；

- ・直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基；
- ・アミノ基；
- ・下記：

- ヒドロキシル基；
- アミノ基；
- 同一もしくは相違してよい、一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基もしくはC₁-C₄ヒドロキシアルキル基で置換されたアミノ基；
- 置換アミノ基であって、ここで酸素及び窒素から選択される別のヘテロ原子を任意に含む、飽和もしくは不飽和の5員もしくは6員の複素環が形成されているもの、前記複素環が任意に置換されているもの；

から選択されるから選択される、一つまたは二つの基で置換されたアミノ基；

- ・ - SO₂NHR基であって、Rは水素原子、または任意に一つ以上のヒドロキシル基で置換されたC₁-C₄アルキル基、アミノ基、または同一もしくは相違してよい、一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基もしくは直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄ヒドロキシアルキル基で置換されたアミノ基、

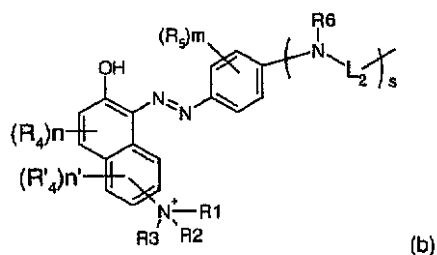
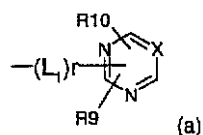
二つの隣接する炭素原子によって担持される二つの基R5は、各々が結合する炭素原子と共に任意に置換された6員の芳香環を形成することも可能であり；

R6、R'6、及びR7は、同一もしくは相違し、

- ・水素原子；
- ・無置換の、あるいは、ヒドロキシル基、直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基、アミノ基、または同一または相違して良い一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄ヒドロキシアルキル基で置換されたアミノ基で置換された、直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₈アルキル基であって；酸素及び窒素から選択されるヘテロ原子によって、または好ましくはCOもしくはSO₂などのヘテロ原子を含む基によって介入可能であり；
- ・R'6及びR'7基が、酸素と窒素から選択される別のヘテロ原子を任意に含む、飽和または不飽和の5員もしくは6員の複素環を任意に形成することが可能であり；前記複素環は任意に置換されており；

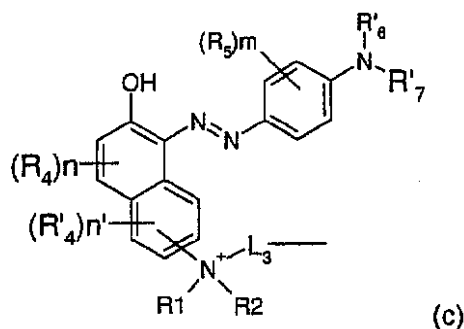
R7は下記：

【化 2】



より選択される基を表し、
R8は下記の基：

【化 3】



を表し、

R1、R2、R3、R4、R'4、R5、R6、R'6、及びR'7は、式(a)、(b)、及び(c)において上記と同様の意味を有し；

R9及びR10は同一または相違して良く、

- ・水素原子、
- ・ハロゲン原子、
- ・ニトロもしくはシアノ基；
- ・直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基であって、少なくとも1つのヒドロキシル基、少なくとも1つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基、少なくとも1つのアミノ基及び/または、同一もしくは相違して良い一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基で置換された少なくとも1つのアミノ基を任意に担持するもの；
- ・ヒドロキシル基、
- ・直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基；
- ・アミノ基；
- ・一つ以上のアミノ、ヒドロキシル、アンモニウムもしくは(C₁-C₄)アルキルアンモニウム、イミダゾリウム、ピラゾリウム、またはピリジニウム基から選択される同一もしくは相違して良い一つ以上の基で置換されたアミノ基、あるいは同一もしくは相違して良い一つ以上の直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基で置換されたアミノ基、
- ・置換アミノ基であって、ここで酸素及び窒素から選択される別のヘテロ原子を任意に含む、飽和もしくは不飽和の5員もしくは6員の複素環が形成されているもの、前記複素環が任意に置換されているもの；
- ・R9及びR10は、同一もしくは相違してよく、同時には塩素もしくはフッ素原子を表すことができず；

Xは窒素原子、-CR¹¹を表し；

R¹¹は下記：

- ・水素原子、
- ・ハロゲン原子；
- ・ニトロもしくはシアノ基；
- ・直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基であって、少なくとも1つのヒドロキシル基、少なくとも1つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基、少なくとも1つのアミノ基、及び/または、同一もしくは相違して良い一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基で置換された少なくとも1つのアミノ基を任意に担持するもの；
- ・直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルコキシ基；
- ・アミノ基；
- ・一つ以上のアミノ基で任意に置換された直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₆アルキル基、ヒドロキシル基、あるいは、同一もしくは相違して良い、一つまたは二つの直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄ヒドロシアルキル基で置換されたアミノ基から選択される、同一もしくは相違して良い一つまたは二つの基で置換されたアミノ基、
- ・置換アミノ基であって、ここで酸素及び窒素から選択される別のヘテロ原子を任意に含む、飽和もしくは不飽和の5員もしくは6員の複素環が形成されているもの、前記複素環が任意に置換されているもの；

L¹は、カチオン性もしくは非カチオン性であってよく、直鎖状、分枝状、もしくは環状の飽和もしくは不飽和のC₂-C₂₀炭化水素ベースの鎖を表し、これは一つ以上のヘテロ原子を含む基によって任意に介入もしくは終端され、一つ以上の芳香族もしくは非芳香族の置換もしくは無置換の複素環もしくは環によって任意に介入されており；

L²は、カチオン性もしくは非カチオン性であってよく、

- ・飽和もしくは不飽和の、直鎖状、分枝状、もしくは環状のC₁-C₂₀炭化水素ベースの鎖であって、一つ以上のヘテロ原子を含む基によって任意に介入もしくは終端され、一つ以上の任意に置換された芳香族もしくは非芳香族の複素環もしくは環によって任意に介入もしくは終端されたもの；
- ・芳香族もしくは非芳香族の（複素）環基であって、任意に少なくとも1つのヘテロ原子を含む基、好ましくはCOもしくはSO₂基によって窒素原子に結合したもの；

を表し；

L³は、カチオン性もしくは非カチオン性であってよく、直鎖状、分枝状、もしくは環状の飽和もしくは不飽和のC₂-C₂₀炭化水素ベースの鎖を表し、これは一つ以上のヘテロ原子を含む基によって任意に介入もしくは終端され、一つ以上の任意に置換された芳香族もしくは非芳香族の複素環もしくは環によって任意に介入されており；

係数 n は 2 以下であり；

係数 n' は 3 以下であり；

係数 m は 4 以下であり；

係数 r は 0 または 1 であり；

係数 s は 0 または 1 であり；

Anは、式（I）及び（II）の化合物またはその塩の電気的中性を担保するための、化粧品として許容される一つ以上のカウンターイオンを表す]

の化合物及びその付加塩。

【請求項 2】

R¹、R²、及びR³基が同一または相違してよく、無置換もしくはヒドロキシル基で置換された、直鎖状のC₁-C₄アルキル基を表すことを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

R⁴、R'⁴、及びR⁵が、

- ・ハロゲン原子、
- ・ヒドロキシル基、

- ・ニトロ基、
- ・一つ以上のヒドロキシル基で任意に置換された直鎖状 C_1-C_2 アルキル基、
- ・直鎖状 C_1-C_2 アルコキシ基

を表すことを特徴とする、請求項 1 または 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

R6、R'6及びR'7基が、同一もしくは相違して良く、水素原子または直鎖状の C_1-C_4 アルキル基を表すことを特徴とする、請求項 1 乃至 3 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 5】

R9及びR10が、同一もしくは相違してよく、

- ・水素原子、
- ・ハロゲン原子、
- ・ヒドロキシル基、
- ・アミノ基、
- ・ヒドロキシルで任意に置換された直鎖状の C_1-C_4 アルキル基または一つまたは二つの同一の直鎖状 C_1-C_4 アルキル基、アンモニウムもしくは (C_1-C_4) アルキルアンモニウム基またはイミダゾリウム基で置換されたアミノ基、
- ・置換アミノ基であって、ここで窒素を任意に含む5員もしくは6員の不飽和複素環が形成されており、前記複素環が任意に置換されているもの；

を表すことを特徴とする、請求項 1 乃至 4 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 6】

R11基が、

- ・ハロゲン原子、
- ・ニトロもしくはシアノ基、
- ・ヒドロキシル基、
- ・直鎖状もしくは分枝状の C_1-C_4 アルコキシ基、
- ・アミノ基、
- ・一つ以上のヒドロキシル基、アミノ基、または同一もしくは相違して良い一つ以上の直鎖状もしくは分枝状の C_1-C_6 アルキル基または C_1-C_4 ヒドロキシアルキル基で任意に置換されたアミノ基で任意に置換された、直鎖状もしくは分枝状の C_1-C_6 アルキル基から選択される、同一もしくは相違して良い一つ以上の基で置換されたアミノ基、
- ・置換アミノ基であって、ここで酸素及び窒素から選択される別のヘテロ原子を任意に含む5員もしくは6員の不飽和複素環が形成されており、前記複素環が任意に置換されており、ピロリジン、3-ヒドロキシピロリジン、3-アミノピロリジン、3-ピロリジン、3-N,N-ジメチルアミノピロリジン、3-トリメチルアンモニウムピロリジン、3-アセタミドピロリジン、3-(メチルスルホニルアミノ)ピロリジン、プロリン、3-ヒドロキシプロリン、ピペリジン、ヒドロキシピペリジン、ホモピペリジン、ジアゼパン、N-メチルホモピペラジン、及びN- -ヒドロキシエチルホモピペラジンから選択されることを特徴とする、請求項 1 乃至 5 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 7】

L1またはL3基が、ピペラジン、ホモピペラジン、ジアゼパン、ピロリジン、(ホモ)ピペリジン、及びトリアジン複素環から選択される、少なくとも1つの任意に置換された、カチオン性もしくは非カチオン性の芳香族もしくは非芳香族の複素環もしくは環によって介入された、 C_1-C_{20} のアルキレン鎖を表すか、あるいは、

L1及びL3は、直鎖状 C_1-C_8 アルキレン鎖を表し、これは少なくとも1つの酸素原子によって、少なくとも1つの-NR-基(Rは水素原子を表す)によって、直鎖状 C_1-C_4 アルキル基によって、あるいは少なくとも1つの基-N⁺(R')(R")-(R'及びR"は同一であり、直鎖状 C_1-C_4 アルキル基を表す)によって任意に介入されたものを表すことを特徴とする、請求項 1 乃至 6 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 8】

係数 r が 0 であることを特徴とする、請求項 1 乃至 7 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 9】

L2が、ピペラジン、ホモピペラジン、ジアゼパン、及びトリアジン複素環から選択される、少なくとも1つの置換もしくは無置換の芳香族もしくは非芳香族複素環もしくは環によって介入もしくは終端されたC₁-C₂₀のアルキレン鎖を表すか、あるいは、

L2が、

・直鎖状C₁-C₈アルキレン鎖であって、少なくとも一つの酸素原子、少なくとも一つの-NR-基（Rは水素原子または直鎖状C₁-C₄アルキル基を表す）、あるいは少なくとも一つの基-N⁺(R')(R'')-（R'及びR''は同一もしくは相違してよく、直鎖状C₁-C₄アルキル基、イミダゾリウムを表し、少なくとも一つの任意に置換された芳香族または非芳香族複素環、好ましくは任意に置換されたトリアジンで任意に介入されたもの；

・フェニレン；

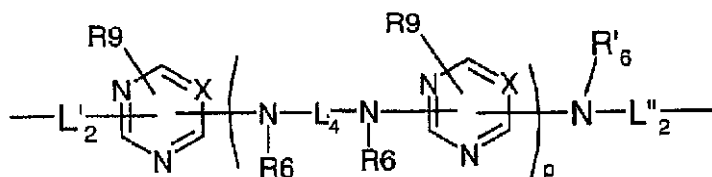
・前記R6及びこれを担持する窒素原子、無置換のピペラジンまたはホモピペラジン複素環；

を表すことを特徴とする、請求項1乃至8のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 10】

L2が、下式（d）：

【化 4】



〔式中、

R1、R2、R3、R4、R5、R6、R'6、R9、及びXは上記と同様の意味を有し、

L'2及びL''2は同一もしくは相違し、単結合、C₁-C₆アルキレン鎖を表し、L'2がNR6基に結合しており、

L4は置換もしくは無置換の、直鎖状もしくは分枝状の、C₁-C₂₀アルキレン鎖を表し、これが少なくとも一つの酸素原子によって、少なくとも一つの-NR-（Rは水素原子または直鎖状もしくは分枝状C₁-C₄アルキル基または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄ヒドロキシアルキル基を表す）あるいは少なくとも一つの-N⁺(R')(R'')-基（R'及びR''は同一もしくは相違してよく、直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基、または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄ヒドロキシアルキル基を表す）によって任意に介入されており；

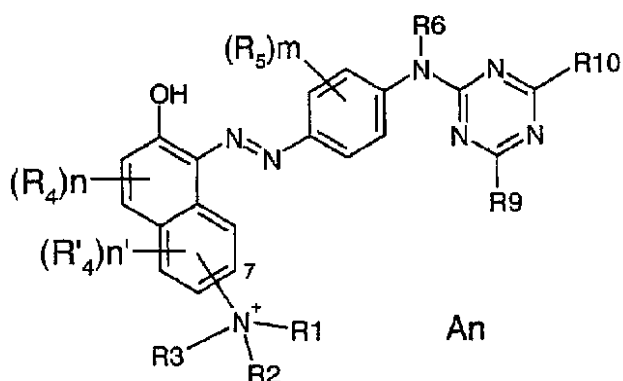
係数 p が 0 または 1 である]

の基を表すことを特徴とする、請求項1乃至9のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 11】

下式（III）：

【化 5】



[式中、

R1、R2、及びR3が、同一でも相違しても良く、直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基を表し；

R4及びR'4は水素原子を表し；

R5は水素原子またはニトロ基を表し；

R6は水素原子、または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基、好ましくはメチル基を表し；

R9及びR10は、同一でも相違しても良く、水素原子、塩素原子、フッ素原子、ヒドロキシル基、アミノ基、同一もしくは相違しても良い直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基またはC₁-C₄ヒドロキシルアルキル基の1つもしくは二つで置換されたアミノ基、同一もしくは相違しても良い直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基を持つ、好ましくはメチル基を持つトリ(C₁-C₄)アルキルアンモニウム基で任意に置換されたピロリジン環；

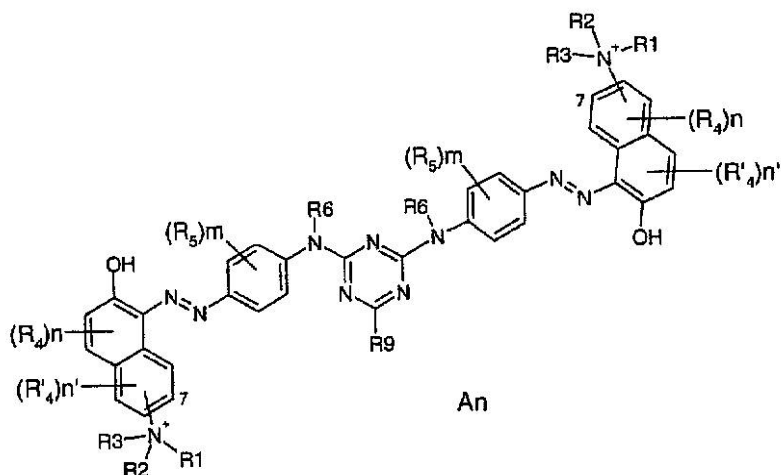
R9及びR10は、同一でも相違しても良く、同時には塩素原子またはフッ素原子を表さず；式(III)の化合物またはその塩の電気的中性が、同一でも相違しても良い1つ以上の化粧品として許容されるカウンターイオンAnによって担保され、前記アンモニウム基がナフタレン環に対して7位にある]

の化合物またはこれらの塩である、請求項1乃至10のいずれか一項に記載の化合物。

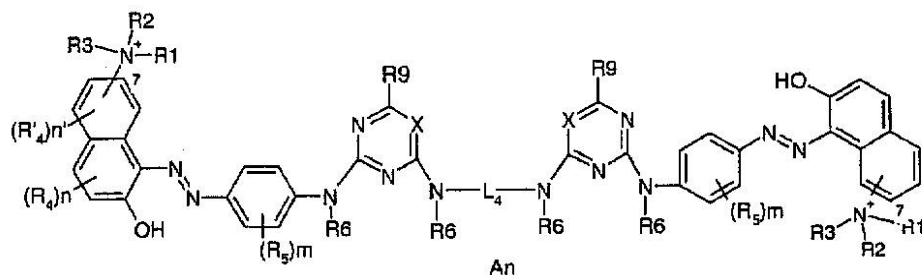
【請求項12】

請求項1乃至11のいずれか一項に記載の、下式(IVa)及び(IVb)：

【化6】



【化7】



[式中、

R1、R2、及びR3が、同一でも相違しても良く、直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基を表し；

R4及びR'4は水素原子を表し；

R5は水素原子またはニトロ基を表し；

R6は水素原子、または直鎖状もしくは分枝状のC₁-C₄アルキル基を表し；

R9は水素原子、塩素原子、フッ素原子、ヒドロキシル基、アミノ基、同一もしくは相違し

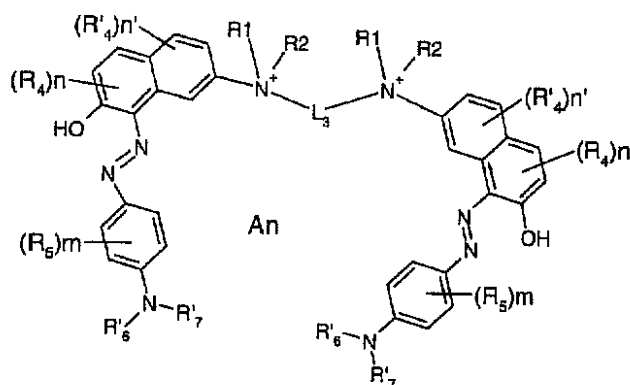
ても良い直鎖状もしくは分枝状の C_1 - C_4 アルキル基または C_1 - C_4 ヒドロキシルアルキル基の1つもしくは二つで置換されたアミノ基、同一もしくは相違して良い直鎖状もしくは分枝状の C_1 - C_4 アルキル基を持つトリ (C_1 - C_4) アルキルアンモニウム基で任意に置換されたピロリジン環を表し、

式 (IV) の化合物またはその塩の電気的中性が、以上に特に列挙したものから選択される、同一でも相違しても良い1つ以上の化粧品として許容されるカウンターイオンAnによって担保され、式 (IVa) 及び (IVb) の前記アンモニウム基が二芳香環に対して7位にある] の化合物またはこれらに対応する塩。

【請求項 13】

請求項 1 乃至 12 のいずれか一項に記載の、下式 (V) :

【化 8】



[式中、

R_4 及び $R'4$ は水素原子を表し；

R_5 は水素原子またはニトロ基を表し；

$R'6$ 及び $R'7$ は水素原子を表し、

R_{12} 及び R_{13} は、同一でも相違しても良く、水素原子、直鎖状もしくは分枝状の C_1 - C_4 アルキル基、または直鎖状もしくは分枝状の C_1 - C_4 ヒドロキシルアルキル基を表し；

L_3 は、1乃至10の炭素原子を含む、好ましくは2乃至8の炭素原子を含む直鎖状もしくは分枝状のアルキレン基を表し；

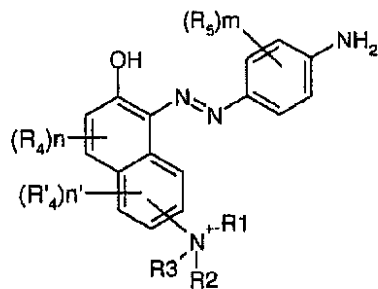
式 (V) の化合物またはその塩の電気的中性が、同一でも相違しても良い1つ以上の化粧品として許容されるカウンターイオンAnによって担保される]

の化合物。

【請求項 14】

式 (VI) :

【化 9】

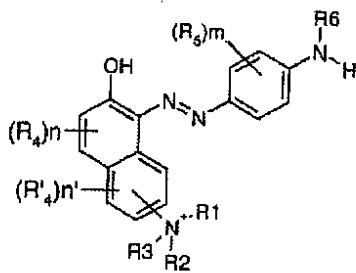


の化合物を、溶媒もしくは溶媒混合物の存在下にてハロゲン化シアヌルと接触させ、化学式 (I) (式中、 R_7 が式 (a) の基を表す) の化合物を得る、請求項 1 乃至 13 のいずれか一項に記載の化合物の調製方法。

【請求項 15】

下式 (VI) :

【化 1 0】

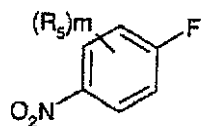


の化合物を、溶媒もしくは溶媒混合物の存在下にて L 2 の前駆体である化合物、もしくは L 2 及び化合物 (VI) のアミン官能基と反応することのできる2つの官能基を含む化合物と接触させ、化学式 (I) (式中、R7が式 (b) の基を表す) の化合物を得る、請求項 1 乃至 1 4 のいずれか一項に記載の化合物の調製方法。

【請求項 1 6】

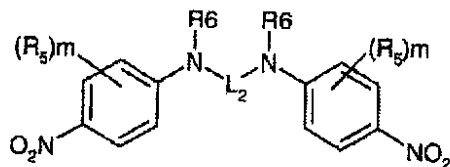
(a) 下式 (VII) :

【化 1 1】



の化合物を、式 $R_6NH-L_2-NHR_6$ のジアミンと接触させて下式 (VIII) :

【化 1 2】

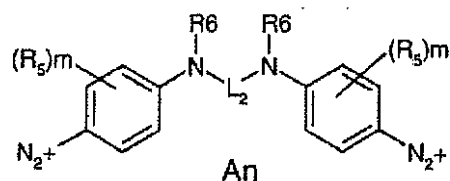


の化合物を得る工程 ;

(b) こうして得られた化合物のニトロ基の還元を水素と触媒との存在下にて行うことからなる工程 ;

(c) 前記生成物を接触させてジアゾ化を行うことにより下式 (VIII) :

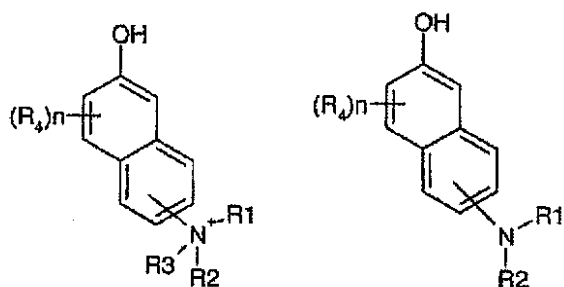
【化 1 3】



の化合物を得る工程 ;

(d) 前記生成物 (VIII) を、下式 (IXa) もしくは (IXb) :

【化 1 4】



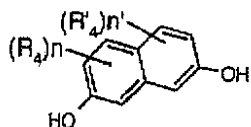
の化合物と接触させる工程、

が実行され、アミン官能基を含む前記化合物 (IXb) を使用する場合には、生成物の第四級化からなる付加的工程が実行されることを特徴とする、請求項 1 5 に記載の方法。

【請求項 1 7】

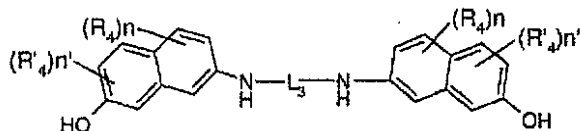
(a) 下式 (X) :

【化 1 5】



の化合物を、式 $H_2N-L_3-NH_2$ のジアミンと接触させて下式 (XI) :

【化 1 6】

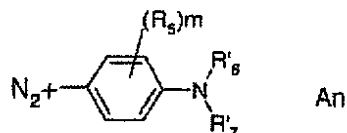


の化合物を得る工程 ;

(b) N-アルキル化を行い、次いで得られた生成物の第四級化を行う工程 ;

(c) 生成物と下式 (XII) :

【化 1 7】



の化合物を反応させて、式 (II) の化合物を得る工程 ;

を実行することを特徴とする、請求項 1 乃至 1 6 に記載の方法。

【請求項 1 8】

ケラチン繊維の染色に適した媒質中に、請求項 1 乃至 1 7 のいずれか一項から選択される少なくとも1つの直接染料を含む染色組成物。

【請求項 1 9】

請求項 1 8 に記載の染色組成物を、乾燥したもしくは湿った繊維に適用し、最終的な濯ぎを行わない、ケラチン繊維の染色方法。

【請求項 2 0】

請求項 1 8 に記載の染色組成物を、乾燥したもしくは湿った繊維に発色に十分な時間に亘って適用し、その後前記繊維を濯ぎ、且つ/またはシャンプーで洗浄する、ケラチン繊維の染色方法。