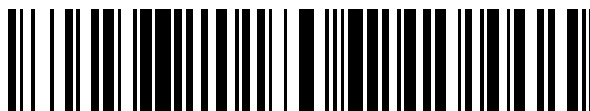


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 539 623**

51 Int. Cl.:

A61K 8/85 (2006.01)

A61K 8/90 (2006.01)

A61Q 5/06 (2006.01)

C08C 19/30 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **15.01.2010** **E 10700678 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **18.03.2015** **EP 2387386**

54 Título: **Compuestos β -aminoéster y usos de los mismos**

30 Prioridad:

15.01.2009 US 354697

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

02.07.2015

73 Titular/es:

LIVING PROOF, INC. (100.0%)
61 Rogers Street
Cambridge, MA 02142, US

72 Inventor/es:

PUERTA, DAVID THOMAS;
WILLIAMS, SUSAN ALICE;
MCLAUGHLIN, RONALD P. y
ANDERSON, DANIEL GRIFFITH

74 Agente/Representante:

ISERN JARA, Jorge

ES 2 539 623 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCION

Compuestos β -aminoéster y usos de los mismos.

5 ANTECEDENTES DE LA INVENCION

Campo de la Invención

La invención está dirigida a composiciones y métodos para tratamiento del cabello, y en particular a métodos y composiciones para impartir abundancia, volumen, textura y definición, que permiten una estilización mejorada.

DESCRIPCION DE LA TÉCNICA AFÍN

Los productos de tratamiento del cabello en el mercado utilizan típicamente polímeros comerciales para impartir volumen, textura, definición y abundancia. Las personas con cabello fino o delgado utilizan regularmente productos "voluminizadores" en forma de champúes, acondicionadores, pulverizaciones de estilización, cremas, geles, o espumas en un esfuerzo para aumentar el volumen y cuerpo de su cabello. Muchos de estos materiales son combinaciones de polivinil-pirrolidona/poli(acetato de vinilo) (PVP/VA). Estos materiales crean volumen en el cabello por fijación unas a otras de fibras múltiples de cabello en puntos de soldadura, de tal manera que una gotita del producto se deposita sobre una sección del cabello uniéndose con ello sobre sí misma una fibra de cabello y/o enlazando dos o más fibras, creando un cabello más fuerte, más resistente, por ejemplo, a caer liso sobre la cabeza. Esta tecnología adolece de varios inconvenientes, dado que los beneficios visuales obtenidos no son duraderos y el cabello queda con tacto rígido o crujiente. Así, se desea identificar y desarrollar composiciones que alcancen estos resultados con mayor facilidad de uso, menos pesadez y menos sensación expresa de residuo pegajoso, y que impartan brillo o una sensación crujiente o rígida al cabello, y que impartan brillo y suavidad al cabello, así como volumen y abundancia.

La preparación de poli(β -aminoésteres) por adición de conjugados de bis-(aminas secundarias) o aminas primarias a un bis(acrilato-éster) se describe en las patentes U.S. Núms. 6.998.115 y 7.427.394, y solicitudes afines. Se dice que muchos de los compuestos comprendidos dentro del alcance de la descripción son biodegradables y biocompatibles, diciéndose además que son útiles en una diversidad de sistemas de suministro de fármacos. Sin embargo, el uso en cosméticos no se contempla en estas patentes.

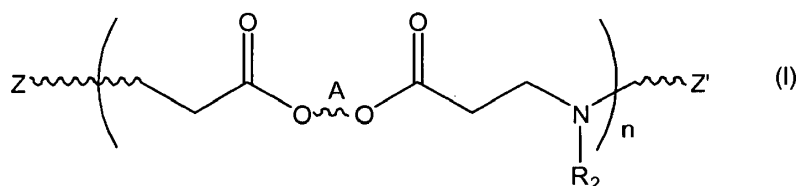
EP 1.837.353 se refiere a compuestos de poliuretano y su uso en composiciones cosméticas o farmacéuticas.

US 7.101.538 se refiere a un compuesto de poliesteramina para uso en una composición cosmética.

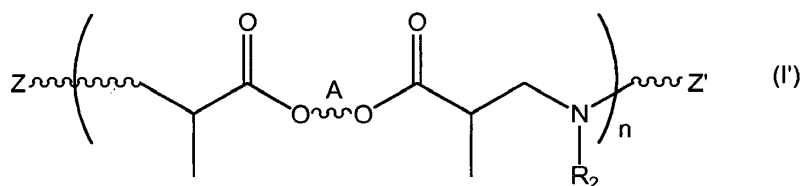
US 4.070.340 se refiere a una composición de caucho sintético de resistencia en crudo mejorada, y a un proceso para su preparación.

40 SUMARIO DE LA INVENCION

En tanto que los avances en la técnica implican típicamente nuevas formulaciones de compuestos conocidos, los autores de esta invención han aplicado la innovación real al campo del tratamiento del cabello al nivel de compuestos, desarrollando nuevas entidades moleculares para uso en estilización del cabello. De particular interés son composiciones de estilización del cabello que evitan la dependencia de compuestos PVP/VA convencionales de peso molecular alto, que proporcionan una sensación más ligera y más natural, proporcionando todavía abundancia, textura, volumen y definición. En un aspecto, la invención implica indicar el uso de compuestos tales como se describen en las patentes U.S. Núms. 7.427.394 y 6.928.115; las Publicaciones de Solicitud de Patente U.S. Núms. US 2004/0071.654 y US 2005/0265.961; y las Solicitudes Internacionales Núms. WO 02/31.025; WO 04/106411 y WO 07/143.659 con un excipiente cosméticamente aceptable en una composición para tratamiento del cabello. Así, en un aspecto, la invención es una composición de tratamiento del cabello que comprende un compuesto según la fórmula (I) en un excipiente cosméticamente aceptable:



55



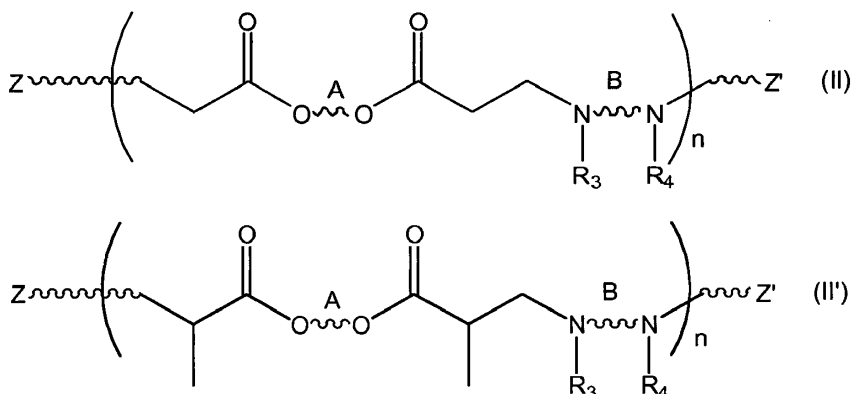
Los compuestos de fórmula (I') no son un aspecto de la presente invención.

En las fórmulas (I) y (I'), n es un número entero entre 1 y 10.000; y Z y Z', junto con los átomos a los que están unidos, representan grupos terminales acrilato, metacrilato o amino.

El sustituyente R₂ es el residuo de un material de partida amina primaria, que puede reaccionar con un material de partida diacrilato o dimetacrilato, para formar el compuesto según la fórmula (I) o (I'), como se describe con mayor detalle más adelante. Por ejemplo, R₂ puede seleccionarse del grupo constituido por grupos alquilo, alquenoilo, alquinoilo, acilo, alcoxi, alcoxiálquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alquiltioéter, carbamoilo, carbonildioxilo, éster carboxílico, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático y ureido, cada uno de cuyos grupos puede estar sustituido con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alquilo, alquenoilo, alquinoilo, acilo, alcoxi, alcoxiálquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halógeno, hidroxilo, ciano, carbamoilo, ácido carboxílico, carbonildioxilo, alquiltioéter, siloxilo, y tiohidroxilo.

A es una cadena de carbonos o una cadena de carbonos que contiene heteroátomos, sustituida opcionalmente por al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alquilo, alquenoilo, alquinoilo, amino, alquilamino, dialquilamino, trialquilamino, aminoalquilarilo, ureido, heterocíclico, heterocíclico aromático, cíclico, cíclico-aromático, halógeno, hidroxilo, alcoxi, ciano, amido, carbamoilo, ácido carboxílico, éster, carbonilo, carbonildioxilo, alquiltioéter, y tiol; en donde dichos sustituyentes pueden estar unidos para formar uno o más anillos. A se define más estrechamente en las reivindicaciones.

Alternativamente, se utiliza como material de partida una bis(amina) y se hace reaccionar con el material de partida diacrilato o dimetacrilato de tal modo que la composición de tratamiento del cabello comprende un compuesto según la fórmula (II):



Los compuestos de fórmula (II') no son un aspecto de la presente invención.

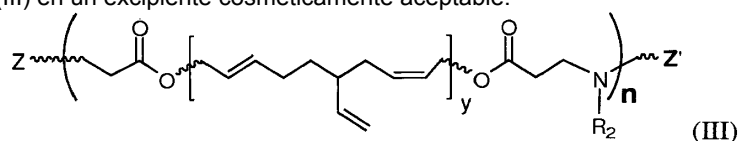
En las fórmulas (II) y (II'), A, n, Z y Z' son como se defina para la fórmula (I); R₃ y R₄ se definan como para R₂ en la fórmula (I); y B y A son, independientemente, una cadena de carbonos o una cadena de carbonos que contiene heteroátomos, sustituida opcionalmente con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alquilo, alquenoilo, alquinoilo, amino, alquilamino, dialquilamino, trialquilamino, aminoalquilo, arilo, ureido, heterocíclico, heterocíclico aromático, cíclico, cíclico aromático, halógeno, hidroxilo, alcoxi, ciano, amido, carbamoilo, ácido carboxílico, éster, carbonilo, carbonildioxilo, alquiltioéter, y tiol.

En otro aspecto de la invención, se proporcionan oligómeros que tienen unidades monómeras de β-aminoéster unidas a bloques de unidades monómeras que se repiten (tales como bloques de polibutadieno). En particular, se ha encontrado ahora que compuestos que tienen un resto β-aminoéster y el resto caucho en composiciones de tratamiento del cabello nuevas y útiles evitan los inconvenientes de los productos voluminizadores conocidos en la técnica anterior.

Sin desear ligarse a ninguna teoría particular, se cree que los compuestos β -aminoéster descritos aquí se fijan a las fibras del cabello aumentando la fricción inter-fibras y proporcionan beneficios no proporcionados por la tecnología convencional. La composición de inventiva aumenta la fricción en el cabello en tanto que permite que las fibras del cabello permanezcan con libertad de movimientos, haciendo posible un tacto más natural. Adicionalmente, las composiciones de inventiva proporcionan mayor duración y estilos remodelables del cabello. Las fibras tienen libertad de separarse y reunificarse en puntos diferentes, permitiendo un tacto y movimiento más naturales. Estos efectos se consiguen según la invención utilizando las composiciones y métodos descritos aquí. Como resultado, se cree que las composiciones y métodos de la presente invención evitan que el tacto del cabello se sienta tieso o crujiante.

Así, en este aspecto adicional, la invención es una composición de tratamiento del cabello que comprende un compuesto según la fórmula (I) o la fórmula (II) en donde A es un resto caucho que tiene un peso molecular en el intervalo de 1000 g/mol a 10.000 g/mol, constituido por una o más unidades de butadieno, isopreno, cloropreno, estireno-butadieno, o mezclas de los mismos.

En realizaciones preferidas, una composición de tratamiento del cabello según la invención comprende un compuesto de fórmula (III) en un excipiente cosméticamente aceptable:



En la fórmula (III) anterior, n es un número entero entre 1 y 100; y es un número entero entre 1 y 100; y R_2 es como se defina en la reivindicación 15.

Los métodos según la invención comprenden el paso de poner en contacto el cabello del cuero cabelludo con la composición que contiene un compuesto según cualquiera de las fórmulas (I) a (III) en un excipiente cosméticamente aceptable, como se escribe con mayor detalle en la descripción detallada que sigue.

DESCRIPCIÓN DETALLADA DE LAS REALIZACIONES PREFERIDAS

Las ventajas de las composiciones y formulaciones según la invención se logran por incorporación de restos β -aminoéster específicos y restos enlazadores específicos según la invención. En algunos casos (que no deben considerarse como limitantes), las formulaciones se han adaptado para conformación del cabello. Se ha encontrado que algunas de estas composiciones proporcionan al usuario no sólo la posibilidad de dar forma al cabello, sino la posibilidad de remodelar un estilo después que el mismo ha sido alterado significativamente (después de dormir durante una noche, por ejemplo). Los métodos y ejemplos específicos de hacer reaccionar diacrilatos y aminas, y los compuestos y resultados funcionales logrados de este modo, se describen con mayor detalle en la descripción detallada siguiente de la invención.

Definiciones

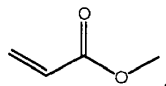
A continuación se describen con mayor detalle definiciones de grupos funcionales y términos químicos específicos. Para los propósitos de esta invención, los elementos químicos se identifican según la Tabla Periódica de los Elementos, versión CAS, Handbook of Chemistry and Physics, edición 75ª, y grupos funcionales específicos se definan generalmente como se describe en dicho lugar. Adicionalmente, los principios generales de química orgánica, así como restos funcionales específicos y su reactividad, se describen en Organic Chemistry, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito (1999).

En general, el término “sustituido”, precedido o no por el término “opcionalmente”, y los sustituyentes contenidos en las fórmulas de esta invención, se refieren al reemplazamiento de átomos de hidrógeno en una estructura dada con un sustituyente especificado. A no ser que se indique de otro modo, cuando más de una posición en cualquier estructura dada puede estar sustituida con más de un sustituyente seleccionado de un grupo especificado, el siguiente puede ser el mismo o diferente en cada posición. Como se utiliza aquí, se considera que el término “sustituido” incluye todos los sustituyentes permisibles de compuestos orgánicos. En un aspecto general, los sustituyentes permisibles incluyen sustituyentes acíclicos y cíclicos, ramificados y no ramificados, carbocíclicos y heterocíclicos, aromáticos y no aromáticos de compuestos orgánicos. Para los propósitos de esta invención, heteroátomos tales como nitrógeno, oxígeno o azufre, pueden estar unidos a átomos de hidrógeno o estar sustituidos con cualesquiera sustituyentes permisibles de opuestos orgánicos descritos aquí que satisfagan las valencias de los heteroátomos.

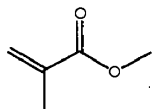
En el caso de que un átomo de carbono en una cadena pueda estar reemplazado con un heteroátomo, se hace referencia a veces a esto como una “sustitución”.

El término *acilo*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo que tiene la fórmula general $-C(O)R$, donde R es alquilo, alquenilo, alquinilo, arilo, carbocíclico, heterocíclico, o heterocíclico aromático. Un ejemplo de un grupo acilo es acetilo.

Como se utiliza aquí, un radical y/o grupo terminal *acrilato* tiene la estructura



Un radical y/o grupo terminal *metacrilato* tiene la estructura



El término *alifático*, como se utiliza aquí, incluye hidrocarburos alifáticos tanto saturados como insaturados, de cadena lineal (*es decir*, no ramificados), ramificados, acíclicos, cíclicos, o policíclicos, que están sustituidos opcionalmente con uno o más grupos funcionales. Como será apreciado por una persona con experiencia ordinaria en la técnica, "alifático" debe entenderse aquí que incluye, pero sin carácter limitante, restos alquilo, alquenilo, alquinilo, cicloalquilo, cicloalquenilo, y cicloalquinilo.

El término *alquilo*, como se utiliza aquí, se refiere a radicales hidrocarbonados saturados, de cadena lineal o ramificada, derivados de un hidrocarburo que contiene entre 1 y 20 átomos de carbono por eliminación de un solo átomo de hidrógeno. En algunas realizaciones, el grupo alquilo contiene 1-10 átomos de carbono. En otra realización, el grupo alquilo contiene 1-8 átomos de carbono. En otras realizaciones adicionales, el grupo alquilo contiene 1-6 átomos de carbono. En otra realización adicional, el grupo alquilo contiene 1-4 carbonos. Ejemplos de radicales alquilo incluyen, pero sin carácter limitante, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, sec-butilo, sec-pentilo, iso-pentilo, terc-butilo, n-pentilo, neopentilo, n-hexilo, sec-hexilo, n-heptilo, n-octilo, n-decilo, n-undecilo, dodecilo, que pueden llevar uno o más sustituyentes. Como se utiliza aquí, el término "alquilo" incluye grupos alquilo lineales, ramificados y cíclicos. Una convención análoga se aplica a otros términos genéricos tales como "alquenilo" y "alquinilo". Adicionalmente, como se utiliza aquí, los términos "alquilo", "alquenilo", "alquinilo" abarcan grupos tanto sustituidos como no sustituidos. En ciertas realizaciones, como se utiliza aquí, se utiliza "alquilo inferior" para indicar aquellos grupos alquilo (cíclicos, acíclicos, sustituidos, insustituidos, ramificados o no ramificados) que tienen 1-6 átomos de carbono.

El término *alcoxi*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo saturado (*es decir*, alquil-O-) o insaturado (*es decir*, alquenil-O- y alquinil-O-) unido al resto molecular paterno por un átomo de oxígeno. En ciertas realizaciones, el grupo alquilo, alquenilo o alquinilo contiene 1-20 átomos de carbono alifáticos. En ciertas otras realizaciones, los grupos alquilo, alquenilo y alquinilo empleados en los grupos alcoxi de la invención contienen 1-8 átomos de carbono alifáticos. En otras realizaciones adicionales, el grupo alquilo contiene 1-6 átomos de carbono alifáticos. En todavía otras realizaciones, el grupo alquilo contiene 1-4 átomos de carbono alifáticos. Ejemplos incluyen, pero sin carácter limitante, metoxi, etoxi, propoxi, isopropoxi, n-butoxi, *terc*-butoxi, isobutoxi, sec-butoxi, neopentoxi y n-hexoxi.

El término *alquenilo* denota un grupo monovalente derivado de un resto hidrocarbonado que tiene al menos un enlace doble carbono-carbono por la eliminación de un solo átomo de hidrógeno. En ciertas realizaciones, el grupo alquenilo empleado en la invención contiene 1-20 átomos de carbono. En algunas realizaciones, el grupo alquenilo empleado en la invención contiene 1-10 átomos de carbono. En otra realización, el grupo alquenilo empleado contiene 1-8 átomos de carbono. En otras realizaciones adicionales, el grupo alquenilo contiene 1-6 átomos de carbono. En todavía otras realizaciones, el grupo alquenilo contiene 1-4 átomos de carbono. Grupos alquenilo incluyen, por ejemplo, etenilo, propenilo, butenilo, 1-metil-2-buten-1-ilo.

El término *alquinilo*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo monovalente derivado de un hidrocarburo que tiene al menos un enlace triple carbono-carbono por la eliminación de un solo átomo de hidrógeno. En ciertas realizaciones, el grupo alquinilo empleado en la invención contiene 1-20 átomos de carbono. En algunas realizaciones, el grupo alquinilo empleado en la invención contiene 1-10 átomos de carbono. En otra realización, el grupo alquinilo empleado contiene 1-8 átomos de carbono. En todavía otras realizaciones, el grupo alquinilo contiene 1-6 átomos de carbono. Grupos alquinilo representativos incluyen, pero sin carácter limitante, etinilo, 2-2-propinilo (propargilo), y 1-propinilo.

Los términos *alquilamino*, *dialquilamino* y *trialquilamino*, como se utilizan aquí, se refieren a uno, dos o tres, respectivamente, grupos alquilo, como se han definido anteriormente, unidos al resto molecular paterno por un átomo de nitrógeno. El término *alquilamino* se refiere a un grupo que tiene la estructura $-NHR'$ en donde R' es un grupo alquilo, como se ha definido previamente; y el término *dialquilamino* se refiere a un grupo que tiene la

estructura $-NR'R''$, en donde R' y R'' se seleccionan cada uno independientemente del grupo constituido por grupos alquilo. El término *trialquilamino* se refiere a un grupo que tiene la estructura $-NR'R''R'''$, en donde R' , R'' y R''' se seleccionan cada uno independientemente del grupo constituido por grupos alquilo. En ciertas realizaciones, el grupo alquilo contiene 1-20 átomos de carbono alifáticos. En ciertas otras realizaciones, el grupo alquilo contiene 1-10 átomos de carbono alifáticos. En todavía otras realizaciones, el grupo alquilo contiene 1-8 átomos de carbono alifáticos. En otras realizaciones adicionales, el grupo alquilo contiene 1-6 átomos de carbono alifáticos. En todavía otras realizaciones, el grupo alquilo contiene 1-4 átomos de carbono alifáticos. Adicionalmente, R' , R'' , y/o R''' , considerados juntos, pueden ser opcionalmente $-(CH_2)_k$ donde k es un número entero de 2 a 6, para formar un anillo. Ejemplos incluyen, pero sin carácter limitante, metilamino, dimetilamino, etilamino, dietilamino, dietilaminocarbonilo, metiletilamino, isopropilamino, piperidino, trimetilamino, y propilamino.

Un grupo *amino*, como se utiliza aquí, abarca grupos alquilamino, dialquilamino y trialquilamino (como se definen anteriormente), y *aminoalquilo* incluye análogamente $-RNH_2$, $RNHR'$, $-RNR'R''$ y $-RNR'R''R'''$. En realizaciones preferidas según la invención, un grupo aminoalquilo sustituido, tal como un grupo dietanolaminopropilo, está sustituido en el átomo de nitrógeno del resto β-aminoéster del compuesto.

El término *aromático*, como se utiliza aquí, se refiere a un resto que tiene electrones deslocalizados debido a enlaces dobles conjugados, que pueden formar un anillo (como en un resto arilo); *heteroaromático* significa un compuesto aromático el cual un carbono está reemplazado con uno o más átomos de nitrógeno, oxígeno, fósforo, silicio o azufre.

En general, los términos *arilo* y *heteroarilo*, como se utilizan en esta memoria, se refieren a restos mono- o policíclicos, heterocíclicos, y poliheterocíclicos insaturados que tienen preferiblemente 3-14 átomos de carbono, cada uno de los cuales puede estar sustituido o insustituido. Sustituyentes incluyen, pero sin carácter limitante, cualquiera de los sustituyentes mencionados anteriormente, es decir, los sustituyentes citados para restos alifáticos, o para otros restos que se describen aquí, dando como resultado la formación de un compuesto estable. En ciertas realizaciones de la presente invención, *arilo* se refiere a un sistema de anillos carbocíclicos mono- o bicíclico que tiene uno o dos anillos aromáticos que incluyen, pero sin carácter limitante, fenilo, naftilo, tetrahidronaftilo, indanilo, o indenilo. En ciertas realizaciones de la presente invención, el término *heteroarilo*, como se utiliza aquí, se refiere a un radical cíclico aromático que tiene de 5 a 10 átomos de anillo, de los cuales un átomo de anillo se selecciona de S, O, y N; cero, uno o dos átomos de anillo son heteroátomos adicionales seleccionados independientemente de S, O, y N; y los átomos de anillo restantes son carbono, estando unido el radical al resto de la molécula por cualquiera de los átomos de anillo, tales como, por ejemplo, piridilo, pirazinilo, pirimidinilo, pirrolilo, pirazolilo, imidazolilo, tiazolilo, oxazolilo, isooxazolilo, tiadiazolilo, oxadiazolilo, tiofenilo, furanilo, quinolinilo o isoquinolinilo.

Se apreciará que los grupos *arilo* y *heteroarilo* pueden estar insustituídos o sustituidos, en donde la sustitución incluye el reemplazamiento de 1, 2, 3, o más de los átomos de hidrógeno de los mismos independientemente con uno cualquiera o más de los restos siguientes que incluyen, pero sin carácter limitante: alifático; heteroalifático; arilo; heteroarilo; aril-alquilo; heteroarilalquilo; alcoxi; ariloxi; heteroalcoxi; heteroariloxi; alquiltio; ariltio; heteroalquiltio; heteroariltio; $-F$; $-Cl$; $-Br$; $-I$; $-OH$; $-NO_2$; $-CN$; $-CF_3$; $-CH_2CF_3$; $-CHCl_2$; $-CH_2OH$; $-CH_2CH_2OH$; $-CH_2NH_2$; $-CH_2SO_2CH_3$; $-C(O)R_x$; $-CO_2(R_x)$; $-CON(R_x)_2$; $-OC(O)R_x$; $-OCO_2R_x$; $-OCON(R_x)_2$; $-N(R_x)_2$; $-S(O)_2R_x$; $-NR_x(CO)R_x$, en donde cada aparición de R_x incluye independientemente, pero sin carácter limitante, alifático, heteroalifático, arilo, heteroarilo, aril-alquilo, o heteroarilalquilo en donde cualquiera de los sustituyentes alifático, heteroarilo, aril-alquilo, o heteroarilalquilo descritos anteriormente y aquí pueden ser insustituídos o insustituídos, ramificados o no ramificados, cíclicos o acíclicos, y en donde cualquiera de los sustituyentes arilo o heteroarilo descritos anteriormente y aquí pueden ser sustituidos o insustituídos. Ejemplos adicionales de sustituyentes generalmente aplicables se ilustran por las realizaciones específicas que se muestran en los Ejemplos que se describen aquí.

El término *ácido carboxílico*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo de fórmula $-CO_2H$.

Los términos *halo* y *halógeno* como se utilizan aquí, se refieren a un átomo seleccionado de flúor, cloro, bromo, yodo.

El término *heteroalifático*, como se utiliza aquí, se refiere a restos alifáticos que contienen uno o más átomos de oxígeno, azufre, nitrógeno, fósforo, o silicio, v.g., en lugar de átomos de carbono. Los restos heteroalifáticos pueden ser ramificados, no ramificados, cíclicos o acíclicos e incluyen heterociclos saturados e insaturados tales como morfolino y pirrolidinilo. En ciertas realizaciones, los restos heteroalifáticos están sustituidos por reemplazamiento independiente de uno o más de los átomos de hidrógeno de los mismos con uno o más restos que incluyen, pero sin carácter limitante, alifático; heteroalifático; arilo; heteroarilo; aril-alquilo; heteroarilalquilo; alcoxi; ariloxi; heteroalcoxi; heteroariloxi; alquiltio; ariltio; heteroalquiltio; heteroariltio; $-F$; $-Cl$; $-Br$; $-I$; $-OH$; $-NO_2$; $-CN$; $-CF_3$; $-CH_2CF_3$; $-CHCl_2$; $-CH_2OH$; $-CH_2CH_2OH$; $-CH_2NH_2$; $-CH_2SO_2CH_3$; $-C(O)R_x$; $-CO_2(R_x)$; $-CON(R_x)_2$; $-OC(O)R_x$; $-OCO_2R_x$; $-OCON(R_x)_2$; $-N(R_x)_2$; $-S(O)_2R_x$; $-NR_x(CO)R_x$, en donde cada aparición de R_x incluye independientemente, pero sin carácter limitante, alifático, heteroalifático, arilo, heteroarilo, arilalquilo, o heteroarilalquilo, en donde cualquiera de los sustituyentes alifático, heteroalifático, aril-alquilo, o heteroarilalquilo descritos anteriormente y aquí puede ser

sustituido o insustituido ramificado o no ramificado, cíclico o acíclico, y en donde cualquiera de los sustituyentes arilo o heteroarilo descritos anteriormente y aquí puede ser sustituido o insustituido. Ejemplos adicionales de sustituyentes generalmente aplicables se ilustran por las realizaciones específicas que se muestran en los Ejemplos que se describen aquí.

El término *heterocíclico*, como se utiliza aquí, se refiere a un sistema de anillos aromático o no aromático, parcialmente insaturado o totalmente saturado, de 3 a 10 miembros, que incluye anillos simples de 3 a 8 átomos de tamaño y sistemas de anillos bi- y tri-cíclicos que pueden incluir grupos heterocíclicos arilo o aromáticos de 5 ó 6 miembros fusionados a un anillo no aromático. Estos anillos heterocíclicos incluyen aquéllos que tienen de 1 a tres heteroátomos seleccionados independientemente de oxígeno, azufre, y nitrógeno, en los cuales los heteroátomos nitrógeno y azufre pueden estar oxidados opcionalmente y el heteroátomo nitrógeno puede estar cuaternizado opcionalmente. En ciertas realizaciones, el término heterocíclico se refiere a un anillo no aromático de 5, 6, o 7 miembros o un grupo policíclico en el cual al menos un átomo de anillo es un heteroátomo seleccionado de O, S, y N (en donde los heteroátomos nitrógeno y azufre pueden estar oxidados opcionalmente), que incluyen, pero sin carácter limitante, un grupo bi- o tri-cíclico, que comprende anillos fusionados de 6 miembros que tienen entre 1 y 3 heteroátomos seleccionados independientemente de oxígeno, azufre, y nitrógeno, en donde (i) cada anillo de 5 miembros tiene 0 a 2 enlaces dobles, cada anillo de 6 miembros tienen 0 a 2 enlaces dobles, y cada anillo de 7 miembros tienen 0 a 3 enlaces dobles, (ii) los heteroátomos nitrógeno y azufre pueden estar oxidados opcionalmente, (iii) el heteroátomo nitrógeno puede estar cuaternizado opcionalmente, y (iv) cualquiera de los anillos heterocíclicos anteriores puede estar fusionado a un anillo arilo o heteroarilo.

El término *aromático heterocíclico*, como se utiliza aquí, se refiere a un radical cíclico aromático que tiene de 5 a 10 átomos de anillo, de los cuales un átomo de anillo se selecciona de azufre, oxígeno, y nitrógeno; 0, 1, o 2 átomos de anillo son heteroátomos adicionales seleccionados independientemente de azufre, oxígeno, y nitrógeno; y los átomos de anillo restantes son carbono, estando unido el radical al resto de la molécula por cualquiera de los átomos de anillo, tales como, por ejemplo, piridilo, pirazinilo, pirimidinilo, pirrolilo, pirazolilo, imidazolilo, tiazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, tiadiazolilo, oxadiazolilo, tiofenilo, furanilo, quinolinilo, o isoquinolinilo. Los grupos heterocíclicos aromáticos pueden ser insustituídos o sustituidos con sustituyentes seleccionados del grupo constituido por alquilo ramificado y no ramificado, alquenilo, alquinilo, haloalquilo, alcoxi, tioalcoxi, amino, alquilamino, dialquilamino, trialquilamino, acilamino, ciano, hidroxilo, halo, mercapto, nitro, carboxialdehído, carboxi, alcocarbonilo, y carboxamida.

El término *carbonildioxilo*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo carbonato de la fórmula $-O-CO-OR$.

El término *carbamoilo*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo amida de la fórmula $-CONH_2$.

El término *hidrocarburo*, como se utiliza aquí, se refiere a cualquier grupo químico que comprende hidrógeno y carbono. El hidrocarburo puede ser sustituido o insustituido. El hidrocarburo puede ser insaturado, saturado, ramificado, no ramificado, cíclico, policíclico, o heterocíclico. Hidrocarburos ilustrativos incluyen, por ejemplo, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, ciclopropilo, arilo, vinilo, n-butilo, terc-butilo, etinilo, ciclohexilo, metoxi, y dietilamino. Como sería conocido para un experto en esta técnica, todas las valencias tienen que satisfacerse al hacer cualesquiera sustituciones.

El término *tiohidroxilo* o *tiol*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo de la fórmula $-SH$.

El término *ureido*, como se utiliza aquí, se refiere a un grupo de la fórmula $-NH-CO-NH_2$.

Los siguientes son términos más generales utilizados a lo largo de la presente solicitud:

Como se utilizan aquí, las formas singulares “un”, “una” y “el/la” incluyen las referencias plurales a no ser que el contexto indique claramente otra cosa. Así, por ejemplo, una referencia a “un monómero” incluye una pluralidad de tales monómeros.

El término “queratina”, como se utiliza aquí, se refiere a una cualquiera de una clase de proteínas estructurales fibrosas encontradas en pelo, lana, y uñas. Las proteínas de queratina contienen una gran cantidad de residuos cisteína. El cabello humano es una queratina que tiene aproximadamente 15% de residuos cisteína reticulados por puentes disulfuro.

Como se utiliza aquí, un “monómero” es una unidad estructural repetida que aparece en un polímero o un oligómero. Así, por ejemplo, el polímero polibutadieno está constituido por unidades que se repiten derivadas de butadieno.

El término “oligómero”, como se utiliza aquí, se refiere a un compuesto químico con menos de 10 unidades estructurales que se repiten. En particular, un compuesto según la invención que contiene menos de 10 grupos β -aminoéster se considera un oligómero, cualquiera que sea el tamaño del bloque que conecta los grupos aminoéster.

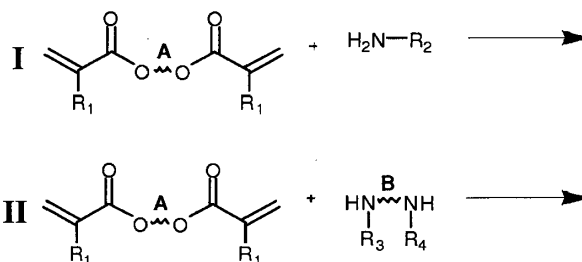
El término "polímero", como se utiliza aquí, se refiere a un compuesto químico de unidades estructurales que se repiten (monómeros) conectadas por enlaces covalentes. Un polímero es típicamente de peso molecular alto, comprendiendo decenas hasta centenas o millares, o incluso más monómeros. Sin embargo, como se utiliza aquí, el término "polímero" incluye también "oligómeros".

El término "caucho", como se utiliza aquí, significa un compuesto que contienen unidades butadieno, isopreno, cloropreno, estireno-butadieno, o variaciones de las mismas que se repiten, e incluye también etileno-acetato de vinilo (EVA) (tal como se vende con el nombre comercial Elvax®), caucho de uretano, caucho de silicona o elastómero de silicona. Estas unidades incorporadas en una molécula constituyen el "resto caucho" de la molécula, como se utiliza dicho término aquí.

El símbolo $\sim$ en una estructura química, significa que pueden encontrarse diferentes átomos y/o enlaces en dicha posición. Así, en la fórmula (I), A se designa con el símbolo $\sim$ debido a que existen varias opciones para la configuración de A. En conexión con los grupos terminales, para formar un grupo terminal acrilato o metacrilato, por ejemplo, Z $\sim$ significa que Z y el carbono al que está unido forman un término $\text{CH}_2=$ del grupo terminal acrilato o metacrilato. Alternativamente, en la misma fórmula, el símbolo $\sim$ puede representar un enlace con el grupo repetitivo monómero siguiente.

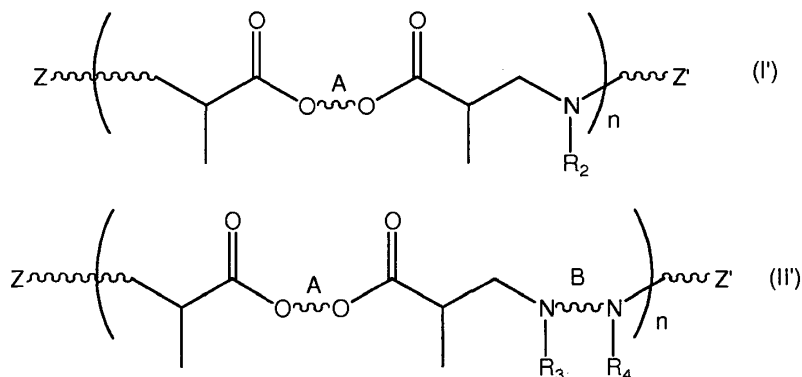
Realizaciones preferidas

Las composiciones de tratamiento del cabello según la invención comprenden un compuesto β -aminoéster que puede estar formado por reacción de un diacrilato o dimetacrilato con una amina según uno de los esquemas de reacción generales siguientes:

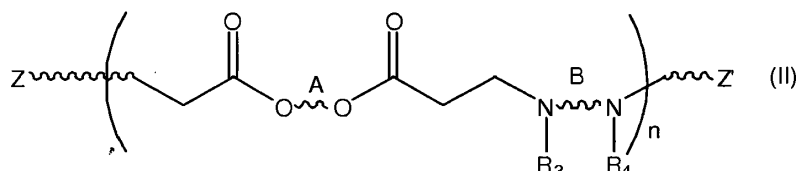
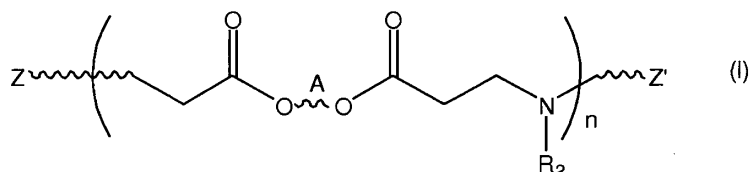


En estas fórmulas, R_1 es un hidrógeno o metilo, lo cual define el material de partida como un diacrilato o un dimetacrilato. R_2 , R_3 , y R_4 se seleccionan del grupo constituido por grupos alquilo, alquenoilo, alquinilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alquiltioéter, carbamoilo, carbonildioxilo, carboxil-éster, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático y ureido, cada uno de cuyos grupos puede estar sustituido con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alquilo, alquenoilo, alquinilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halógeno, hidroxilo, ciano, carbamoilo, ácido carboxílico, carbonildioxilo, alquiltioéter, siloxilo, y tiohidroxilo.

Si el material de partida es un dimetacrilato, las reacciones anteriores forman compuestos representados por las fórmulas (I') y (II') correspondientes, en donde A, B, Z, Z' y n son como se refiere arriba para las fórmulas (I) y (II):



Donde el material de partida es un diacrilato, las reacciones anteriores forman compuestos representados por las fórmulas correspondientes (I) y (II):



5

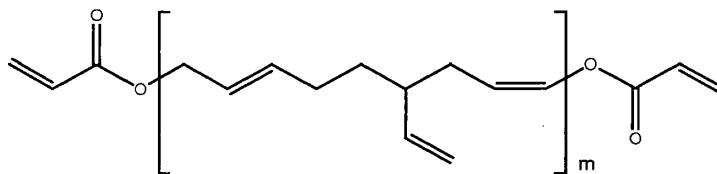
Tales compuestos incluyen, sin limitación, los compuestos descritos en las patentes y solicitudes publicadas mencionadas anteriormente.

10 En una realización de la presente invención, n está comprendido en el intervalo de 1 a 10.000. En ciertas otras realizaciones de la presente invención, n está comprendido en el intervalo de 1 a 1000, 1 a 100 o 3 a 10.

Los restos acrilato en los compuestos están enlazados por un resto de peso molecular relativamente alto A que tiene un peso molecular comprendido en el intervalo de 1000 g/mol a 10.000 g/mol. A es un resto caucho, que incluye monómeros seleccionados de butadieno, estireno-butadieno, cloropreno, e isopreno.

15

Materiales que contienen caucho que pueden hacerse reaccionar para formar un polímero según la invención incluyen, sin limitación, poli(butadieno-diacrilato), que se representa por la fórmula

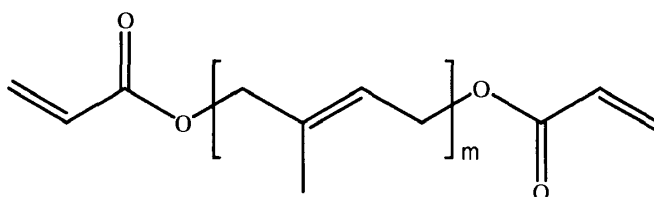


20

o su dimetacrilato correspondiente.

También puede utilizarse poli(isopreno-diacrilato), representado por la fórmula siguiente,

25

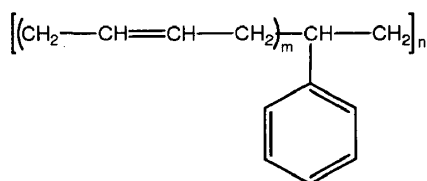


También puede utilizarse el dimetacrilato correspondiente.

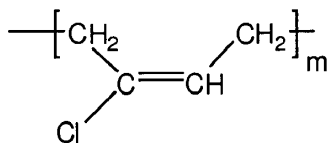
30 En estos materiales de partida, m puede ser 1 a 60, y en ciertas realizaciones 1 a 40, 1 a 30 ó 20 a 30.

Alternativamente, los cauchos de policloropreno o estireno-butadieno pueden modificarse a diacrilatos o dimetacrilatos, que pueden hacerse reaccionar luego según los esquemas de reacción generales I y II anteriores. Los cauchos estireno/butadieno tienen la estructura general siguiente:

35



El poli-cloropreno tiene la estructura general



En realizaciones actualmente preferidas se emplean polibutadieno-diacrilatos (PBDs) como material de partida. Aunque no son limitantes de la invención, pueden utilizarse diacrilatos y dimetacrilatos que tienen un peso molecular medio en el intervalo de 1000 g/mol a 5.000 g/mol. En los ejemplos detallados más adelante, se utilizaron dos materiales de partida diferentes, que tenían un peso molecular medio numérico de 1400 g/mol y 3000 g/mol, respectivamente.

El material de partida diacrilato o dimetacrilato puede hacerse reaccionar con aminas que tienen grupos funcionales variables en ratios variables. Por ejemplo, ratios PBD: amina aceptables pueden oscilar desde aproximadamente 1:2 a aproximadamente 2:1. En los ejemplos expuestos más adelante, las ratios PBD: amina oscilaban entre 1:1,8 y 1:1,2.

Los compuestos según la invención, que resultan de la reacción arriba descrita, tienen algunas veces pequeñas cantidades de amina sin reaccionar. En realizaciones preferidas, el compuesto utilizado en la composición según la invención contiene menos de 1% en peso, preferiblemente menos de 0,1% en peso, y más preferiblemente menos de 0,01% en peso de amina sin reaccionar.

Un diacrilato o dimetacrilato adecuado puede hacerse reaccionar con una amina primaria que tiene una fórmula en NH_2R_2 (donde R_2 es como se refiere arriba) por Adición de Michael. El grupo R_2 en la amina primaria puede seleccionarse para impartir propiedades deseadas a la composición. Así, la amina puede seleccionarse para modificar las propiedades impartidas a la composición por el resto caucho, para reducir un tacto grasiento y pesado al tiempo que mantiene los atributos de fricción obtenidos con el caucho, por ejemplo. Alternativamente, pueden incorporarse al compuesto grupos hidrófilos por la amina a fin de mejorar la solubilidad en agua. Análogamente, pueden utilizarse grupos hidrófobos para mejorar la formulación de la fase aceitosa y/o la interacción con los lípidos del cabello. Pueden utilizarse restos aromáticos y restos que contienen estireno para aumentar la rigidez de los compuestos acabados.

Las aminas primarias siguientes se han utilizado para formular compuestos según la invención: propilamina; butilamina; pentilamina; hexilamina; octilamina; 1-aminodecano; isopropilamina; sec-butilamina; isobutilamina; terc-butilamina; 2-aminopentano; isopentilamina; 2-amino-6-metilheptano; 3-(dimetilamino)-1-propilamina; 2-dietilaminoetilamina; 2-(diisopropilamino)etilamina; 3-(dietilamino)propilamina; N,N-dimetiletieno-diamina; etanol amina; 3-amino-1-propanol; amino-2-propanol; 4-amino-1-butanol; 5-amino-1-pentanol; 6-amino-1-hexanol; n-(3-aminopropil)dietanolamina; 2-(2-aminoeto)etanol; 2-metoxietilamina; 3-metoxipropilamina; 3-etoxipropilamina; 3-butoxipropilamina; aminoacetaldehído-dimetil-acetal; 3-isopropoxipropilamina; aminoacetaldehído-dietil-acetal; 4-aminobutiraldehído-dietil-acetal; 3-aminopropiltriethoxisilano; 2-metoxibencilamina; 4-metoxibencilamina; 2-fenoxietilamina; 3,4-dimetoxifenetilamina; 4-metoxifenetilamina; 2-metoxifenetilamina; tiramina; bencilamina; 4-metilbencilamina; fenetilamina; 4-aminobencilamina; 4-terc-butilbencilamina; 4-fenilbencilamina; 4-yodobencilamina; 4-(aminometil)piridina; 3-picolilamina; 2-fluorobencilamina; 4-fluorobencilamina; 4-fluorofenetilamina; 3-(trifluorometil)bencilamina; 2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9-heptafluorooctilamina; ciclopropilamina; ciclopentilamina; N-(3-aminopropil)-2-pirrolidinona; ciclohexilamina; ciclohexanometilamina; 2-(1-ciclohexenil)etilamina; 1-(2-aminoetil)piperidina; 3-morfolinopropilamina; (±)-3-amino-1,2-propanodiol; 2-amino-1,3-propanodiol; 2-amino-2-metil-1,3-propanodiol; 2-amino-2-etil-1,3-propanodiol; N,N-bis(2-hidroxietil)-etilenodiamina; ácido oxámico; y 2-amino-2-(hidroximetil)propano-1,3-diol.

Aminas adecuadas que contienen sustituyentes siloxilo pueden utilizarse como materiales de partida, incluyendo, sin limitación, 3-aminopropil(dietoxi)metilsilano; 3-(2-aminoetilamino)-propildimetoximetilsilano; N-[3-(trimetoxisilil)-propil]etilenodiamina; 3-[2-(2-aminoetilamino)etilamino]propil-trimetoxisilano; y 1-[3-(trimetoxisilil)propil]urea.

Los aminoácidos, con inclusión de alanina, leucina, serina, cisteína, tirosina, ácido glutámico, glutamina, lisina, y arginina son también adecuados para formar compuestos según la invención.

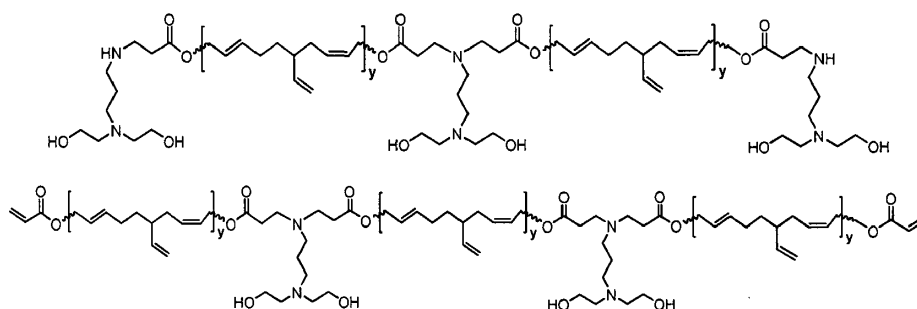
Alternativamente, se puede utilizar un material de partida de bis(amina). Los grupos amina en tales materiales de partida de bis(amina) están enlazados por un resto B, como se muestra en el esquema de reacción II anterior. En general, B es una cadena de carbonos o una cadena de carbonos que contiene uno o más heteroátomos, sustituida opcionalmente con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alquilo, alquénilo, alquínilo, amino, alquilamino, dialquilamino, trialkilamino, aminoalquil-arilo, ureido, heterocíclico, heterocíclico

aromático, cíclico, cíclico aromático, halógeno, hidroxilo, alcoxi, ciano, amido, carbamoilo, ácido carboxílico, éster, carbonilo, carbonildioxilo, alquiltioéter, y tiol.

Monómeros de bis(amina secundaria) que son útiles en la presente invención incluyen, pero sin carácter limitante, N, N'-dimetiletilenodiamina, piperazina, 2-metil-piperazina, 1,2-bis(N-etil-amino)-etileno, y 4,4'-trimetilenodipiperidina.

Los grupos terminales Z y Z', junto con los átomos a los que están unidos, representan acrilato, metacrilato o grupo terminal amino. En algunas realizaciones, Z y Z' forman un grupo amino o grupo insaturado acrilato o metacrilato en ambos términos del polímero. Así, por ejemplo, en el caso en que Z y Z', forman un resto amino, Z' es hidrógeno y Z es -NR₂-H. Cuando el grupo terminal es acrilato, Z  significa que Z y el átomo de carbono al que está unido el mismo forman un término CH₂= del grupo terminal acrilato o metacrilato, mientras que Z' forma un grupo acrilato o metacrilato.

Ejemplos no limitantes de polímeros con grupos terminales terminados en amina y grupos terminales terminados en acrilato son:



en donde y es 1 a 100.

En algunas realizaciones, n en las fórmulas (I) a (IV) puede oscilar desde 1 a 10.000. Sin embargo, los compuestos de la invención preferidos actualmente son oligómeros, que tienen 3 a 10 unidades amino-éster. Una composición según la invención puede contener una pluralidad de oligómeros de longitud diferente.

Las composiciones preferidas utilizadas en la invención incluyen un excipiente cosméticamente aceptable tal que la composición puede aplicarse al cabello sin irritación de los ojos o el cuero cabelludo. Las composiciones pueden encontrarse en la forma de una emulsión de aceite en agua, una emulsión de agua en aceite, una dispersión, una suspensión, una crema, una espuma, un gel, una pulverización, un polvo, un líquido o una pomada.

El compuesto β-aminoéster está presente generalmente en la composición en un intervalo de aproximadamente 0,01% en peso a aproximadamente 20% en peso de la composición. En algunas realizaciones, el β-aminoéster está presente en un intervalo de aproximadamente 0,1% en peso a aproximadamente 10,0% en peso de la composición; y en todavía otras realizaciones en un intervalo de aproximadamente 1,0% en peso a aproximadamente 5,0% en peso.

Las composiciones según la invención están basadas preferiblemente en agua o agua-alcohol, lo que significa que las mismas contienen más de 50% en peso de agua. Preferiblemente, el agua está presente en las composiciones según la invención en un intervalo de 60 a 99% en peso de la composición. En las realizaciones preferidas actualmente, el agua está presente en un intervalo de aproximadamente 80 a aproximadamente 95% en peso de la composición.

El excipiente cosméticamente aceptable para el compuesto contiene ingredientes utilizados convencionalmente en composiciones de tratamiento del cabello. Uno o más emulsionantes pueden incluirse en un intervalo de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 10,0% en peso. En realizaciones preferidas, en un intervalo de aproximadamente 0,5% en peso a aproximadamente 3,0% en peso. Cantidades adecuadas de la formulación pueden ser determinadas por quienes poseen experiencia ordinaria en la técnica sin experimentación excesiva, dependiendo del modo en que se vaya a administrar la composición. Emulsionantes adecuados pueden seleccionarse de los conocidos en la técnica, incluyendo sin limitación Polisorbato 20, Poliacrilato-13, Poliisobuteno, y Olet-10.

Puede proporcionarse un alcohol graso, o una mezcla, en una cantidad de 0,1 a aproximadamente 5,0% en peso de la composición para proporcionar propiedades espesantes y/o emolientes. En algunas realizaciones, puede proporcionarse un componente de alcohol graso tal como alcor cetearílico (una mezcla de alcoholes grasos), en un intervalo de aproximadamente 0,1 a 1,0% en peso de la composición.

Pueden proporcionarse uno o más ácidos grasos en un intervalo de aproximadamente 0,1% en peso a 5,0% en peso de la composición. Los ácidos grasos incluyen, sin limitación, ácido palmítico, ácido esteárico, ácido linoleico, ácido mirístico, y otros conocidos en la técnica para proporcionar propiedades espesantes y/o emolientes en una composición de tratamiento del cabello.

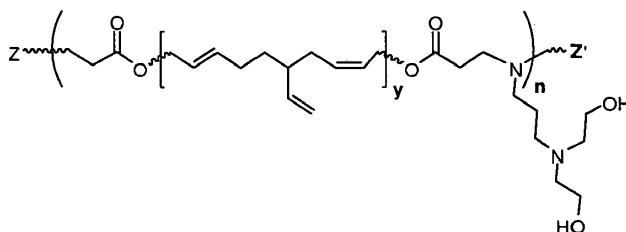
Las composiciones según la invención pueden incluir también al menos un aditivo utilizado convencionalmente en composiciones de tratamiento del cabello. Ejemplos no limitantes de aditivos adecuados incluyen emolientes, adyuvantes de procesamiento, tintes, agentes tensioactivos aniónicos, agentes tensioactivos catiónicos, agentes tensioactivos no iónicos, agentes tensioactivos anfóteros, fragancias, agentes de protección, agentes conservantes, proteínas, vitaminas, siliconas, polímeros tales como polímeros espesantes, aceites vegetales, aceites minerales, aceites sintéticos y cualquier otro aditivo utilizado convencionalmente en composiciones para cuidado y/o tratamiento de fibras queratinosas.

Procedimiento General de Síntesis

La síntesis de los compuestos descritos a continuación se realizó en vasos de vidrio claro de 30 mL con tapones fenólicos revestidos con revestimientos interiores de núcleo de polietileno, y agitados con varilla giratoria recubierta de Teflón® de 15,9 × 9,5 mm. Para cada reacción, se añadieron a cada vial 5 g de PBD. Se añadió la amina con una pipeta en el caso de líquidos o por pesada para los sólidos a las ratios deseadas. Los viales se agitaron a 90 °C durante 48 horas. La varilla de agitación se retiró mientras el material de reacción estaba todavía caliente. Se dejaron enfriar los polímeros a la temperatura ambiente antes de observar el color y la viscosidad como un monitor aproximado de la completitud de la reacción. A medida que las reacciones se aproximaban a su completitud, la viscosidad aumentaba espectacularmente y las mezclas se aproximaban más a un color amarillo/ámbar. Los productos se guardaron a 4 °C.

Las aminas primarias se obtuvieron de Sigma-Aldrich, Inc. (St. Louis, MO.) y VWR International, LCC (West Chester, Pa). Los PBDs se obtuvieron de Sartomer Company, Inc. (Exton, Pa) (producto Sartomer #CN307) y San Esters (Nueva York, NY) (producto #BAC-15 y BAC-45).

Ejemplo 1-1



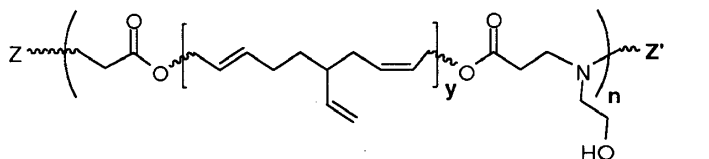
El polímero anterior se sintetizó conforme al procedimiento arriba reseñado empleando 5,0 g de polibutadieno-diacrilato (99%) que tenía un peso molecular de 3000 Da (1 equivalente) y 325,11 mg de N-(3-aminopropil)-dietanolamina (1,2 equivalentes). El material resultante se caracterizó por ¹H NMR.

¹H NMR (CDCl₃): 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).

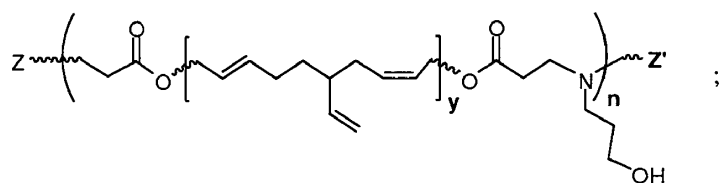
Todos los espectros NMR se registraron en un espectrómetro Varian Mercury de 300 MHz y se tomaron en CDCl₃.

De manera análoga, los ejemplos 1-2 a 1-11 siguientes se realizaron a partir de polímero de polibutadieno-diacrilato (peso molecular 1400 Da o 3000 Da) y aminas adecuadas para formar los compuestos β-aminoéster enumerados a continuación. Las composiciones se formularon y ensayaron como se indica más adelante.

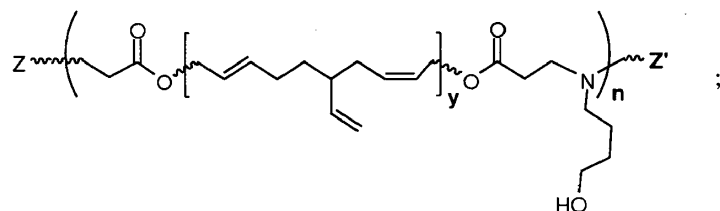
Ejemplo 1-2



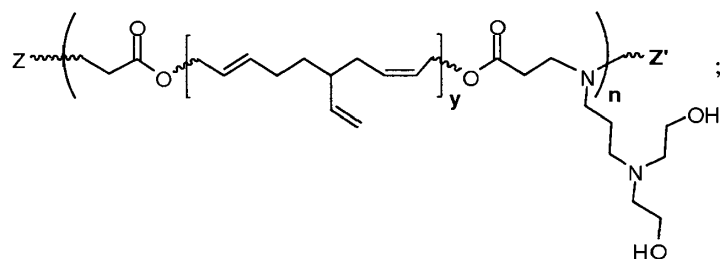
Ejemplo 1-3



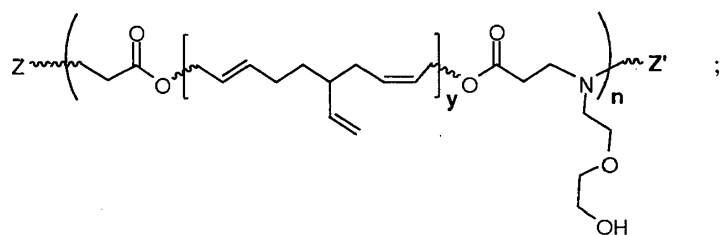
Ejemplo 1-4



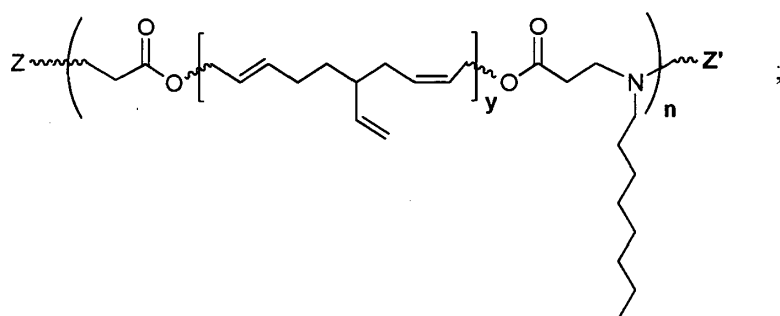
5 Ejemplo 1-5



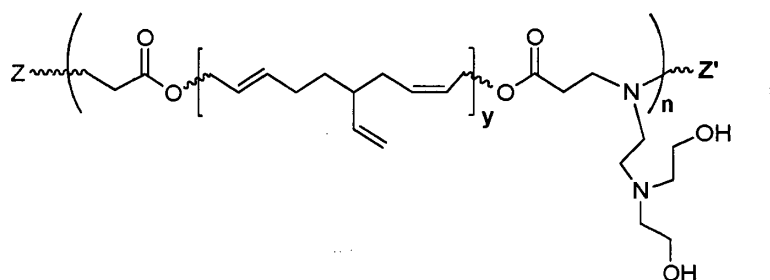
Ejemplo 1-6



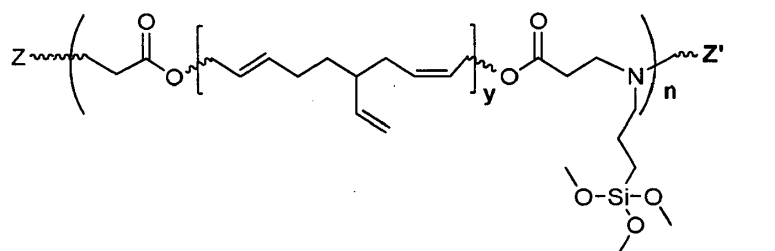
Ejemplo 1-7



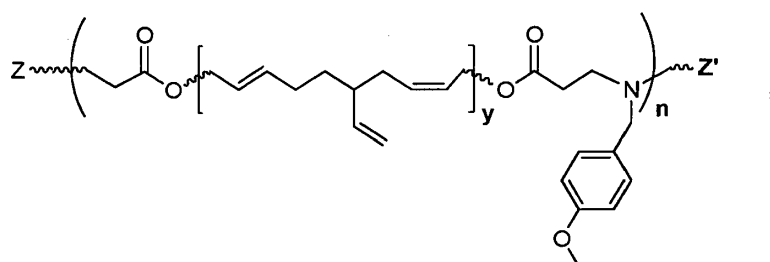
Ejemplo 1-8



Ejemplo 1-9

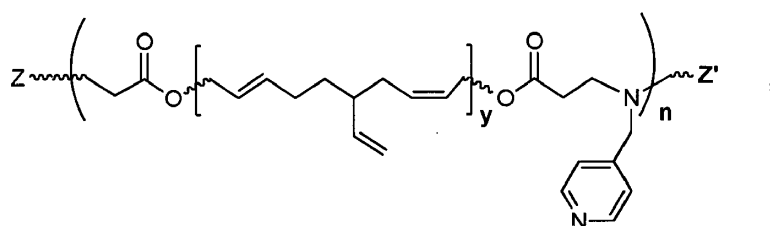


5 Ejemplo 1-10



10 y

Ejemplo 1-11



15 Ejemplo 2-1 Ensayo de Tacto

Se evaluaron las propiedades de tacto de polímeros preferidos en el cabello. Se prepararon 10 g de una solución al 1% (p/p) en THF. Las soluciones se aplicaron a trenzas de pelo secas de 1 g x 2,5 cm de anchura x 22 cm de longitud de cabello castaño medio liso natural (International Hair Importers). Las trenzas se rizaron con unas tenacillas de rizar de ½ pulgada (12,7 mm) de diámetro (Hot Tools Model 1101) en la posición de calor máximo (aproximadamente 200 °C) durante 30 s. Cada trenza se evaluó con manos limpias respecto a los atributos siguientes: pegajosidad, grasa, fricción, y la presencia de un recubrimiento. Cada atributo se calificó contra la escala siguiente: 0 = nula, 1 = ligera, 2 = moderada, 3 = excesiva.

25 Las propiedades de tacto deseadas son ausencia de grasa, ausencia de pegajosidad, recubrimiento muy escaso o totalmente nulo, y fricción leve. Los resultados obtenidos en la Tabla 1 eran ilustrativos de composiciones preferidas, basados en las propiedades de tacto obtenidas.

TABLA 1

Compuesto	Pegajosidad	Grasa	Recubrimiento	Fricción
-----------	-------------	-------	---------------	----------

PBD:amina 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-metoxibencilamina	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-aminoetoxi)etanol	1	0	0	0
PBD:amina 1:1,8				
14PBD:3-aminopropiltriethoxisilano	0	0	2	0
14PBD:4-Metoxibencilamina	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 polibutadieno diacrilato que tiene un peso molecular de 1400Da. 30PBD significa polibutadieno diacrilato que tiene un peso molecular de 3000Da.				

Ejemplo 3-1 Test de Vitalidad y Movimiento

Se evaluó el movimiento del cabello tratado con cada polímero de la Tabla 1. Se preparó una solución al 1% (p/p) de 10 g de cada polímero en THF. Las soluciones se aplicaron a trenzas de pelo secas de 1 g por 2,5 cm de anchura por 22 cm de longitud de cabello castaño medio liso natural (International Hair Importers). Las trenzas se rizaron con unas tenacillas de rizar de ½ pulgada (12,7 mm) de diámetro (Hot Tools Model 1101) en la posición de calor máximo (aproximadamente 200 °C) durante 30 s. Una vez fríos, los terminales de la trenza se extendieron en toda su longitud y se soltaron. La vitalidad se define como el retroceso inicial de la trenza, mientras que el movimiento se define como el período de tiempo después del retroceso inicial durante el cual la trenza se movía, así como la intensidad del movimiento. Ambos atributos se evaluaron contra la escala siguiente: 0 = pobre, 1 = aceptable, 2 = satisfactorio, 3 = notable, 4 = excelente. Se deseaban registros de 4 tanto para vitalidad como para movimiento.

Los resultados de vitalidad y movimiento para trece compuestos ensayados se dan en la Tabla 2.

TABLA 2

Compuesto	Vitalidad	Movimiento
PBD:amina (1:1.2)		
14PBD:octilamina	3	3
14PBD:amino 2-propanol	2	2
14PBD:n-(3-aminopropyl) dietanolamina	3	3
14PBD:4-metoxibencilamina	3	3
14PBD:4-metoxibencilamina	3	3
30PBD:4-(aminometil)piridina	2	2
30PBD:3-amino-1-propanol	0	0
30PBD:4-amino-1-butanol	2	2
PBD:amina1:1.8		
14PBD:3-aminopropiltriethoxisilano	3	3
14PBD:4-metoxibencilamina	3	3

Compuesto	Vitalidad	Movimiento
PBD:amina (1:1.2)		
14PBD:4-(aminometil)piridina	3	3
30Pet: etanolamina	3	3
30PBD:n-(3-aminopropil)-dietanolamina	2	2

Los polímeros de la Tabla 3 se seleccionaron por exhibir mejores propiedades basadas en los resultados globales obtenidos en los tests de tacto y vitalidad/movimiento. Se así no más peso a los registros de tacto que a los de vitalidad para movimiento, dado que tacto es una propiedad más deseable.

5

TABLA 3

Compuesto	Pegajosidad	Grasa	Recubrimiento	Fricción	Vitalidad	Movimiento
PBD:amina1:1,2						
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-metoxibencilamina	0	0	1	0	3	3
14PBD:4-metoxibencilamina	0	0	1	0	3	3

Ejemplo 4-1 Test de Utilización por el Usuario

El compuesto β -aminoéster según el ejemplo 1-1 se formuló en una crema según el Ejemplo de Formulación 5-1 siguiente y una crema conforme al Ejemplo de Formulación 5-2. Estas dos formulaciones se aplicaron a 20 mujeres. Las mujeres incluidas en el estudio se mantuvieron a ciegas respecto a los ingredientes y los beneficios potenciales de eficiencia de las formulaciones. Se pidió a las mujeres que utilizaran cada producto durante una semana. Típicamente, las formulaciones se aplicaron a cabello húmedo y se secaron por soplado a un estilo deseado. Después de utilizar las dos formulaciones, las mujeres fueron entrevistadas y se les pidió que rellenaran una encuesta de eficiencia del producto. Las necesidades de las 20 mujeres comparadas con el modo en que se comportaban las dos formulaciones frente a dichas necesidades se muestran en la Tabla 4.

15

TABLA 4

Beneficio Deseado	Prioridad	Beneficio Proporcionado por la Crema	Beneficio Proporcionado por la Pulverización
Volumen y Cuerpo	Alta	Alto	Medio
Espesamiento	Alta	Alto	Medio
Ligereza	Alta	Alto	Medio
Efecto de Duración	Alta	Alto	Bajo
Facilidad de Consecución del Efecto	Alta	Medio	Bajo
Ausencia de Residuo	Media	Medio	Bajo
Suavidad	Baja	Medio	Bajo
Brillo/Acondicionamiento	Media	Medio	Bajo
Lisura	Media	Medio	Bajo
Retención /Control/Textura	Media	Medio	Bajo
Facilidad de Uso	Media	Medio	Alto
Olor Agradable	Media	Bajo	Bajo

20

Ejemplo de Formulación 5-1

Una crema de estilización que contiene compuesto β -aminoéster según la invención puede incluir lo siguiente:

Ingredientes

% p/p

Ingredientes	% p/p
Agua	cant. suf.
Compuesto β -aminoéster	0,50-6,00
Polisorbato 20 (y) Poliacrilato-13 (y) Poliisobuteno (Emulsificador)	0,50-4,00
Fragancia	0,20-3,00
Fenoxietanol (y) Metilisotiazolinona (Conservante)	0,50-1,50
Miristil-Éter-Propionato PPG-2 (Emoliente)	0,10-5,00
Olet-10 (Emulsificador)	0,10-2,00

Ejemplo de Formulación 5-2

Se preparó una crema de estilización que contenía compuesto β -aminoéster con los ingredientes siguientes:

Ingredientes	% p/p
Agua	93,00
Compuesto β -aminoéster	3,00
Polisorbato20 (y) Poliacrilato-13 (y) Poliisobuteno	1,45
Fragancia	1,00
Fenoxietanol (y) Metilisotiazolinona	0,50
Miristil-Éter-Propionato PPG-2	0,50
Olet-10	0,50

5

La composición anterior se fabricó utilizando el proceso descrito a continuación.

Se cargó un recipiente con agua (Fase A) y se calentó a 75 °C. Se añadió una Fase B constituida por Polisorbato 20, Poliacrilato-13, y poliisobuteno a la Fase A utilizando agitación enérgica y se dejó que se mezclaran ambas Fases durante 30 min o hasta homogeneidad. El compuesto β -aminoéster, Olet-10, y el miristil-éter-propionato PPG-2 se mezclaron en un recipiente separado a 75 °C hasta homogeneidad para formar una Fase C. Se añadió la Fase C a la mezcla anterior de las Fases a y B y se mezclaron los contenidos hasta homogeneidad. La mezcla se enfrió a 40 °C. Después de ello, se añadió una Fase D, constituida por fenoxietanol y metilisotiazolinona a la mezcla anterior y los contenidos se mezclaron hasta homogeneidad. La mezcla se enfrió a 30 °C. Se añadió una Fase E, constituida por la fragancia, a la mezcla anterior y los contenidos se mezclaron hasta homogeneidad. Se añadió agua (cant.suf.) a la mezcla y se homogeneizó para obtener la composición arriba indicada.

10

15

Ejemplo de Formulación 5-3

Una pulverización de estilización que contiene el compuesto β -aminoéster según la invención puede incluir lo siguiente:

20

Ingredientes	% p/p
Agua	cant. suf.
Compuesto β -aminoéster	0,50-6,00
Olet-10 (Emulsificador)	0,10-10,00
Oleato de Etoxidiglicol (Emoliente)	0,10-5,00
Fragancia	0,20-3,00
Fenoxietanol (y) Metilisotiazolinona (Conservante)	0,50-1,50
Cloruro de Sodio	0,10-1,50
Goma de Xantano (Modificador de la reología)	0,10-1,50

Ejemplo de Formulación 5-4

Se preparó una pulverización de estilización que contenía compuesto β -aminoéster con los ingredientes siguientes:

Ingredientes	% p/p
Agua	92,70
Compuesto β -aminoéster	3,00

Ingredientes	% p/p
Oleth-10	1,10
Oleato de Etoxidiglicol	1,00
Fragancia	1,00
Fenoxietanol (y) Metilisotiazolinona	0,50
Cloruro de Sodio	0,40
Goma de Xantano	0,30

La composición anterior puede fabricarse utilizando el proceso descrito a continuación.

- 5 Se cargó un recipiente con agua y se añadió goma de xantano para formar una Fase A. Se dejó que la goma de xantano se hidratara durante 20 min. La Fase A se calentó luego a 75 °C. En un recipiente separado, se calentaron el compuesto β -aminoéster, oleth-10 y oleato de etoxidiglicol a 75°C y se mezclaron para formar una Fase B homogénea. La mezcla se enfrió a 40°C. Después de ello, se añadió a la mezcla anterior una Fase C, constituida por fenoxietanol y metilisotiazolinona, y los contenidos se mezclaron hasta homogeneidad. La mezcla se enfrió a 30 °C.
- 10 Después de ello, se añadió a la mezcla anterior una Fase D, constituida por cloruro de sodio y fragancia y se mezclaron los contenidos hasta que se obtuvo una composición homogénea. Se añadió agua (cant.suf.) a la mezcla y se homogeneizó para obtener la composición anterior.

Ejemplo de Formulación 5-5

- 15 Una espuma de estilización no-aerosol que contiene compuesto β -aminoéster según la invención puede incluir lo siguiente:

Ingredientes	% p/p
Agua	cant.suf.
Compuesto β -aminoéster	0,50-6,00
Óxido de Cocoamidopropilamina (Agente tensioactivo)	0,10-10,00
Oleth-10 (Emulsificador)	0,10-10,00
Oleato de Etoxidiglicol (Emoliente)	0,10-5,00
Fragancia	0,20-3,00
Fenoxietanol (y) Metilisotiazolinona (Conservante)	0,50-1,50
Cloruro de Sodio	0,10-1,50
Goma de Xantano (Modificador de la reología)	0,10-1,50

Ejemplo de Formulación 5-6

- 20 Se preparó una espuma de estilización no-aerosol que contenía compuesto β -aminoéster con los ingredientes siguientes:

Ingredientes	% p/p
Agua	89,70
Compuesto β -aminoéster	3,00
Óxido de Cocoamidopropilamina	3,00
Oleth-10	1,10
Oleato de Etoxidiglicol	1,00
Fragancia	1,00
Fenoxietanol (y) Metilisotiazolinona	0,50
Cloruro de Sodio	0,40
Goma de xantano	0,30

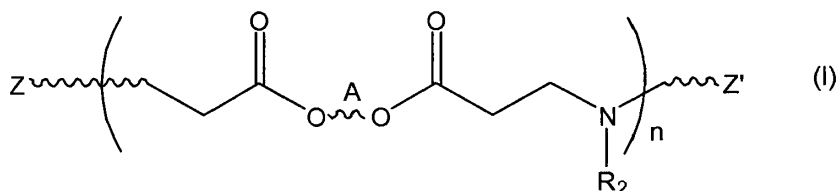
La composición anterior puede fabricarse utilizando el proceso descrito a continuación.

Se cargó un recipiente con agua y se añadió goma de xantano para formar una Fase A. Se dejó que la goma de xantano se hidratara durante 20 min. La Fase A se calentó luego a 75 °C. Para obtener la Fase B, el compuesto β -aminoéster, oleth-10 y oleato de etoxidiglicol se calentaron a 75°C en un recipiente separado. Se mezclaron los contenidos hasta homogeneidad. Se añadió la Fase B a la Fase A y se mezcló hasta homogeneidad. La mezcla se enfrió a 40°C. Después de ello, se añadió a la mezcla anterior una Fase C, constituida por fenoxietanol y metilisotiazolinona, y los contenidos se mezclaron hasta homogeneidad. La mezcla se enfrió a 30 °C. Después de ello, se añadió a la mezcla anterior de las Fases A, B, y C una Fase D, constituida por óxido de cocoamidopropilamina, cloruro de sodio y fragancia hasta que se obtuvo una composición homogénea. Se añadió agua (cant.suf.) a la mezcla y se mezcló hasta homogeneidad.

A no ser que se indique cualquier cosa en sentido contrario aquí, las realizaciones anteriores son únicamente ilustrativas y no deben considerarse como limitantes de la invención, que se define por las reivindicaciones adjuntas.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto según la fórmula (I):



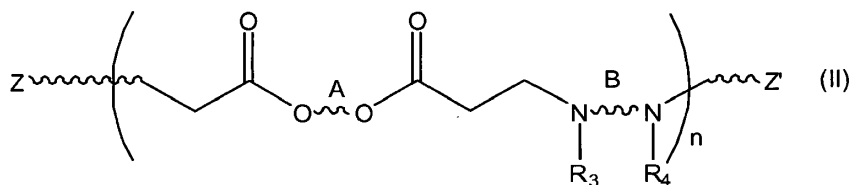
en donde n es un número entero entre 1 y 10.000;

Z y Z', junto con los átomos a los que están unidos, representan grupos terminales acrilato, metacrilato o amino;

R₂ se selecciona del grupo constituido por grupos alquilo, alquenilo, alquinilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alquiltioéter, carbamoilo, carbonildioxilo, carboxiléster, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático y ureido, cada uno de cuyos grupos puede estar sustituido con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alquilo, alquenilo, alquinilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halógeno, hidroxilo, ciano, carbamoilo, ácido carboxílico, carbonildioxilo, alquiltioéter, siloxilo, y tiohidroxilo; y

A comprende un resto caucho que tiene un peso molecular comprendido en un intervalo de 1000 g/mol a 10.000 g/mol, seleccionado del grupo constituido por unidades butadieno, cloropreno, isopreno, y estireno-butadieno.

2. El compuesto según la reivindicación 1, en donde A está constituido por unidades butadieno.
3. El compuesto según la reivindicación 1, en donde R₂ se selecciona del grupo constituido por alquilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo y amido.
4. El compuesto según la reivindicación 1, en donde cada grupo R₂ puede estar sustituido con al menos un sustituyente seleccionado Del grupo constituido por grupos alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, heteroarilo, amido, halógeno, hidroxilo, ciano, carbamoilo, ácido carboxílico, carbonildioxilo, alquiltioéter, siloxilo, y tiohidroxilo.
5. El compuesto según la reivindicación 1, en donde R₂ es aminoalquilo.
6. El compuesto según la reivindicación 1, en donde R₂ está sustituido con hidroxilo.
7. El compuesto según la reivindicación 2, en donde n es 1 a 100.
8. Un compuesto según la fórmula (II):



en donde n es un número entero entre 1 y 10.000;

Z y Z', junto con los átomos a los que están unidos, representan grupos terminales acrilato, metacrilato o amino;

R₃ y R₄ se seleccionan independientemente del grupo constituido por grupos alquilo, alquenilo, alquinilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alquiltioéter, carbamoilo, carbonildioxilo, carboxiléster, alifático cíclico, heteroalifático cíclico, aromático, heteroaromático y ureido, cada uno de cuyos grupos puede estar sustituido con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alquilo, alquenilo, alquinilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, arilo, heteroarilo, amido, alifático cíclico, alifático heterocíclico, halógeno, hidroxilo, ciano, carbamoilo, ácido carboxílico, carbonildioxilo, alquiltioéter, siloxilo, y tiohidroxilo;

B es una cadena de 1 a 30 átomos de carbono o heteroátomos, átomos o heteroátomos que son insaturados, saturados con hidrógeno, o están sustituidos con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por alquilo, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, alcoxi, alcoxialquilo, carbamoilo, carboxil

éster, carbonildioxilo, amido, tiohidroxilo, alquiltioéter, ciano, ureido, alifático cíclico, aromático, y heteroaromático, sustituyentes que pueden estar sustituidos o insustituidos o, alternativamente, pueden estar unidos unos con otros o con un átomo de la cadena para formar un anillo; y

A comprende un resto caucho que tiene un peso molecular comprendido en un intervalo de 1000 g/mol a 10.000 g/mol, seleccionado del grupo constituido por unidades butadieno, cloropreno, isopreno, y estireno-butadieno.

9. El compuesto según la reivindicación 8, en donde A está constituido por unidades butadieno.

10. El compuesto según la reivindicación 8, en donde R₃ y R₄ se seleccionan independientemente del grupo constituido por alquilo, acilo, alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, y amido.

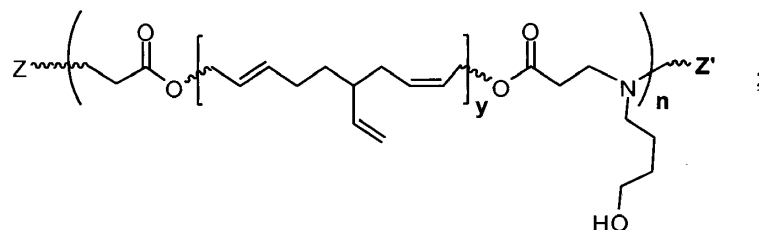
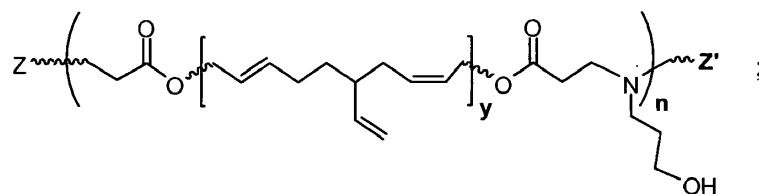
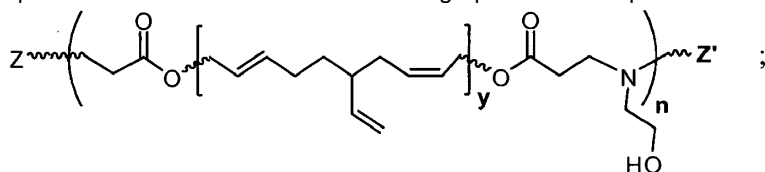
11. El compuesto según la reivindicación 8, en donde cada grupo R₃ y R₄ puede estar sustituido con al menos un sustituyente seleccionado del grupo constituido por grupos alcoxi, alcoxialquilo, amino, aminoalquilo, heteroarilo, amido, halógeno, hidroxilo, ciano, carbamoilo, ácido carboxílico, carbonildioxilo, alquiltioéter, siloxilo, y tiohidroxilo.

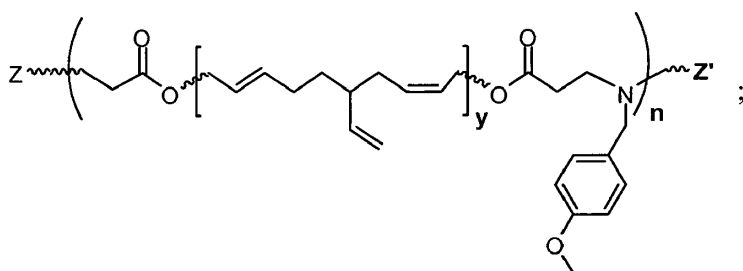
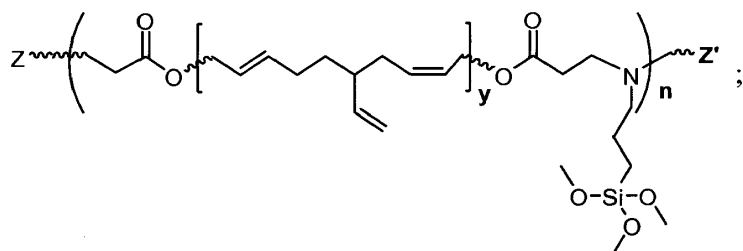
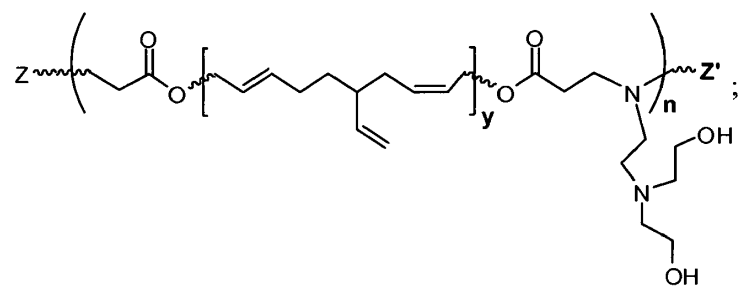
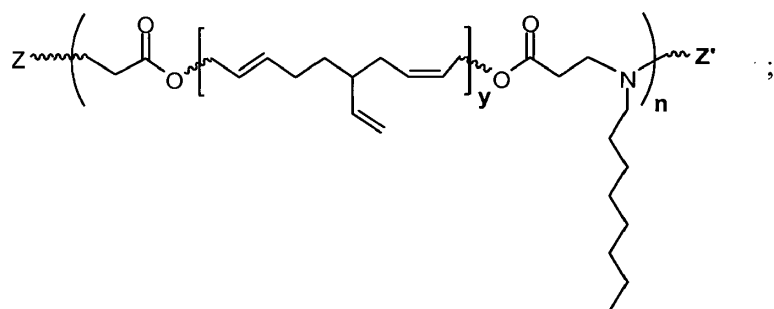
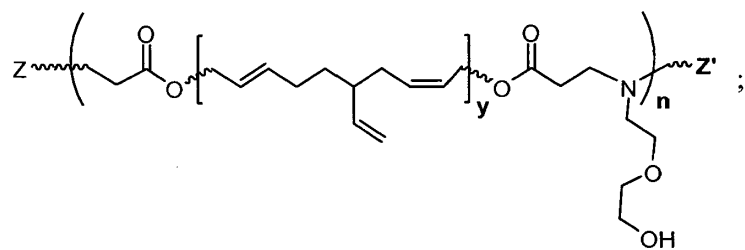
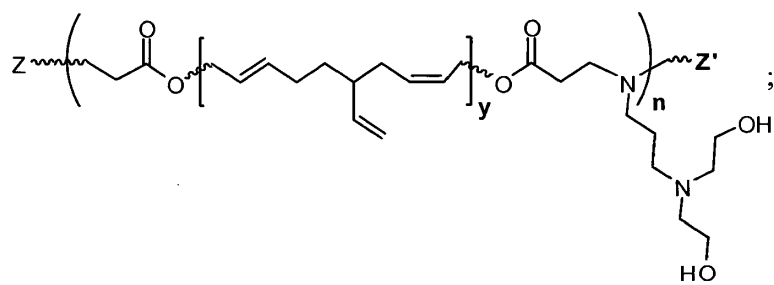
12. El compuesto según la reivindicación 8, en donde R₃ y R₄ son independientemente aminoalquilo.

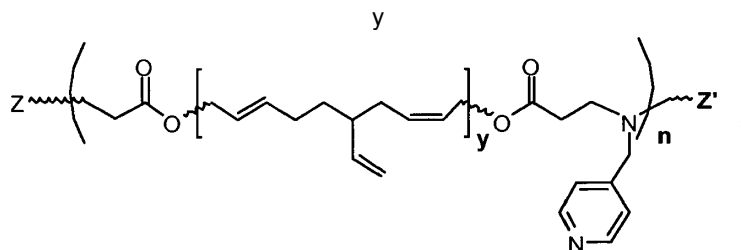
13. El compuesto según la reivindicación 8, en donde R₃ y R₄ están sustituidos con hidroxilo.

14. El compuesto según la reivindicación 9, en donde n es 1 a 100.

15. El compuesto que tiene la estructura seleccionada del grupo constituido por:

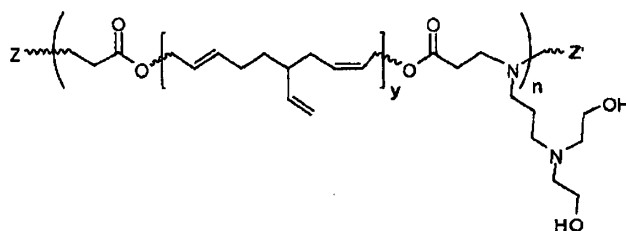






- 5 en donde y es un número entero de 1 a 100;
n es 1 a 100; y
Z y Z', junto con los átomos a los que están unidos, forman un grupo terminal acrilato, metacrilato, o amino.

- 10 16. Un compuesto según la reivindicación 15, que tiene la estructura:



- 15 en donde y es un número entero de 1 a 100;
n es 1 a 100, y
Z y Z', junto con los átomos a los que están unidos, forman un grupo terminal acrilato, metacrilato, o amino.

17. Una composición cosmética para el cabello que comprende un compuesto según una cualquiera de las reivindicaciones 1-16 y un excipiente cosméticamente aceptable.
- 20 18. La composición cosmética según la reivindicación 17, en donde la composición es un champú, acondicionador, o producto de estilización del cabello, por ejemplo, una pulverización, crema, gel, espuma o pomada.
- 25 19. Uso de una composición cosmética según la reivindicación 17 ó 18, para impartir abundancia, volumen, textura y definición al cuero cabelludo.