

【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3区分

【発行日】令和6年10月21日(2024.10.21)

【国際公開番号】WO2023/167021

【出願番号】特願2024-504616(P2024-504616)

【国際特許分類】

C 0 8 G 1 8 / 3 8 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 8 G 1 8 / 6 1 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 8 G 7 7 / 1 6 (2 0 0 6 . 0 1)

10

【F I】

C 0 8 G 1 8 / 3 8 0 9 3

C 0 8 G 1 8 / 6 1

C 0 8 G 7 7 / 1 6

【手続補正書】

【提出日】令和6年8月8日(2024.8.8)

【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

20

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

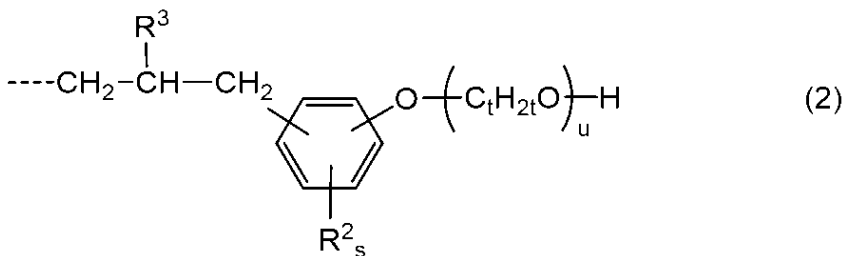
(A) 下記一般式(1)で表される水酸基含有有機ケイ素化合物

$$(R^1)_3SiO_{1/2})_k (R^1)_2SiO_{2/2})_p (R^1)SiO_{3/2})_q (SiO_{4/2})_r \quad (1)$$

[式(1)中、 R^1 は、互いに独立して、炭素数1~10の1価炭化水素基及び下記式(2)で表される基から選ばれる基であり、ただし、全 R^1 基中の少なくとも1個は、下記式(2)で表される基である。 k 、 p 、 q 及び r は、それぞれ、 $k > 0$ の数、 $p \geq 0$ の数、 $q \geq 0$ の数、 $r \geq 0$ の数であり、ただし、 $k + p + q \geq 2$ の数である。また、括弧内に示される各シロキサン単位の結合順序は、任意である。]

30

【化1】



40

(式(2)中、 R^2 は、互いに独立して、水素原子又は炭素数1~5の1価炭化水素基及び炭素数1~5のアルコキシ基から選ばれる基であり、 R^3 は、水素原子又はメチル基である。 s は、0~4の整数であり、 t は、2~4の整数であり、 u は、1~3の数である。破線は、結合手を表す。)

(B) イソシアネート基を1分子中に2個以上有するイソシアネート化合物

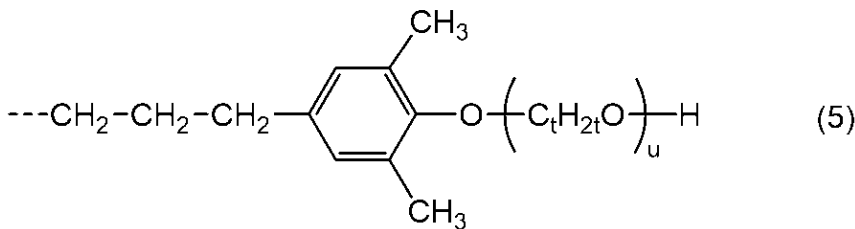
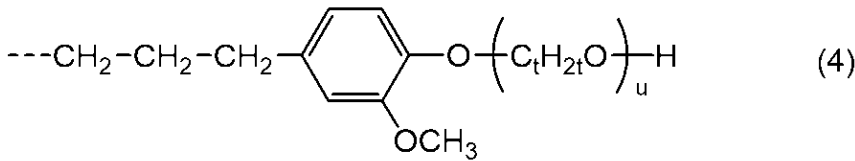
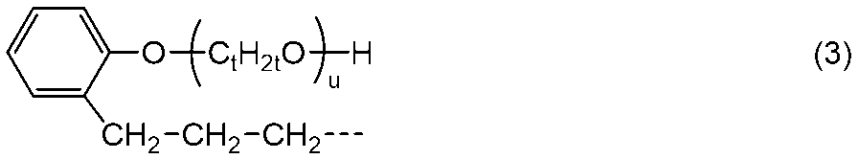
(C) イソシアネート基と反応し得る官能基を1分子中に2個以上有する有機化合物を含むシロキサン変性ポリウレタン組成物。

【請求項2】

前記式(2)で表される基が、下記式(3)~(5)で表されるいずれかの基である請求項1記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。

50

【化 2】



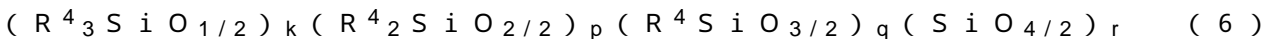
(式中、t 及び u は、前記と同じである。破線は、結合手を表す。)

【請求項 3】

前記 (A) 成分の式 (1) において、k が、2 ~ 5 の数であり、p が、2 ~ 100 の数であり、q が、0 ~ 3 の数であり、r が、0 であり、全 R¹ 基中の 2 ~ 5 個が、式 (2) で表される基である請求項 1 記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。

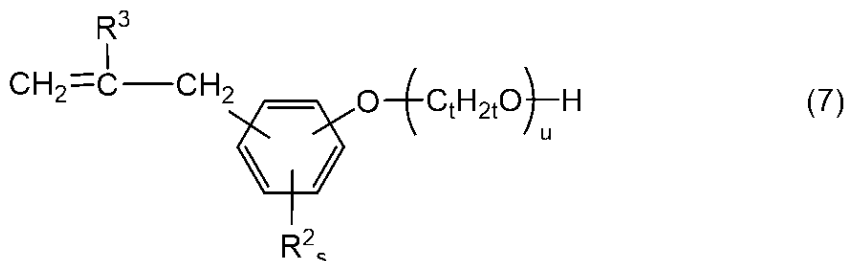
【請求項 4】

前記 (A) 成分が、下記一般式 (6) で表されるオルガノヒドロジェンポリシロキサンと、下記一般式 (7) で表される水酸基及び脂肪族不飽和基を含有する化合物との付加反応物である請求項 1 記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。



(式 (6) 中、R⁴ は、互いに独立して、水素原子又は炭素数 1 ~ 10 の 1 価炭化水素基であり、ただし、全 R⁴ 基中の少なくとも 1 個は、水素原子である。k、p、q 及び r は、前記と同じである。また、括弧内に示される各シロキサン単位の結合順序は、任意である。)

【化 3】



(式 (7) 中、R²、R³、s、t 及び u は、前記と同じである。)

【請求項 5】

前記式 (7) で表される水酸基及び脂肪族不飽和基を含有する化合物が、下記式 (8) ~ (10) で表されるいずれかの化合物である請求項 4 記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。

10

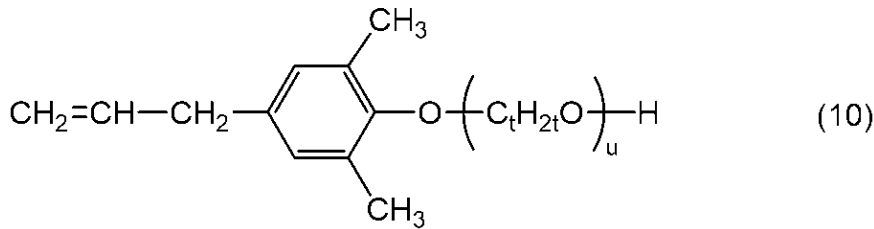
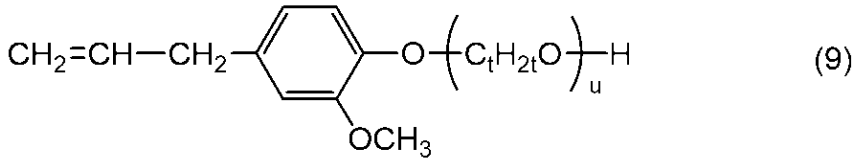
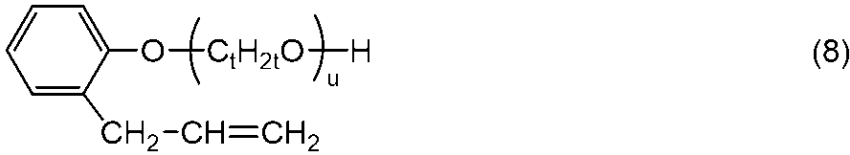
20

30

40

50

【化 4】



(式中、t及びuは、前記と同じである。)

【請求項 6】

前記式(6)において、kが、2~5の数であり、pが、2~100の数であり、qが、0~3の数であり、rが、0であり、かつ全R⁴基中の2~5個が、水素原子である請求項4記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。

【請求項 7】

前記(B)成分が、下記式(11)で表されるものである請求項1記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。



(前記式中、Qは、置換又は非置換の炭素数1~20の2価炭化水素基である。)

【請求項 8】

前記式(11)において、Qが、直鎖状若しくは分岐状アルキレン基又は脂環式構造を有するアルキレン基である請求項7記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。

【請求項 9】

前記(C)成分のイソシアネート基と反応し得る官能基が、水酸基、アミノ基、カルボキシ基及びメルカプト基から選ばれる基である請求項1記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物。

【請求項 10】

請求項1~9のいずれか1項記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物の熱硬化物。

【請求項 11】

熱可塑性を有するものである請求項10記載のシロキサン変性ポリウレタン組成物の熱硬化物。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0025

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0025】

本発明で用いられる水酸基含有有機ケイ素化合物としては、前記式(1)において、kが、2~5の数であり、pが、2~100の数であり、qが、0~3の数であり、rが、0であり、かつ全R¹基中の2~5個が、前記式(2)で表される基であるものが好まし

10

20

30

40

50

く、kが、2～4の数であり、pが、5～80の数であり、qが、0～2の数であり、rが、0であり、かつ全 R^1 基中の2又は3個が、前記式(2)で表される基であるものがより好ましい。

また、前記式(2)で表される基は、分子鎖末端(片末端又は両末端)、分子鎖途中のいずれか一方に存在していてもよいし、これらの両方に存在していてもよいが、少なくとも分子鎖末端(片末端又は両末端)に存在していることが好ましく、分子鎖両末端に存在していることがより好ましい。

【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0036

10

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0036】

式(7)で表される化合物としては、例えば、下記式で表されるものが挙げられるが、これらに限定されない。これらは、1種単独で用いても、2種以上を併用してもよい。

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0039

20

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0039】

前記式(8)～(10)で表される化合物の具体例としては、下記式で表される基が挙げられるが、これらに限定されない。これらの中でも、式(8a)、(9a)～(9e)、(10a)で表されるものが好ましい。

【手続補正5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0107

30

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0107】

[実施例8]

フラスコ内を窒素置換した後、合成例2の水酸基含有オルガノポリシロキサン17.6g、合成例7の水酸基含有オルガノポリシロキサン80.5g、ジルコニウムテトラアセチルアセトナート($Zr(acac)_4$)0.012gを仕込み、これにヘキサメチレンジイソシアネート17.0gを加え、80℃で2時間攪拌した。35℃以下まで冷却し、1,4-ブタンジオール5.9gを加え、5分間攪拌した。その後、内容物をテフロン(登録商標)バットに移し、窒素雰囲気下、120℃で24時間加熱してシロキサン変性ポリウレタン樹脂を得た。

得られた塊状物を210℃で8分間、成型圧力10MPaでプレス成型し、1mm厚の硬化シートを得て、引張強さを測定した。結果を表3に記載した。

40

【手続補正6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0112

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0112】

50

【表 3】

配合量 (g)		実施例7	実施例8	実施例9	実施例10
(A)水酸基含有 オルガノポリシロキサン	合成例9	60.4	—	—	—
	合成例2	—	17.6	—	—
	合成例7	—	80.5	83.9	—
	合成例10	—	—	—	88.6
アミノ基含有オルガノポリシロキサン(式(30))		47.4	—	—	—
ポリテトラメチレングリコール(分子量250)		—	—	6.5	—
(B)4,4'-ジシクロヘキシルメタンジイソシアネート		24.1	—	—	24.1
(B)ヘキサメチレンジイソシアネート		—	17.0	22.1	—
(C)1,4-ブタンジオール		2.7	5.9	7.7	5.4
Zr(acac) ₄		0.003	0.012	0.006	0.012
引張強さ (MPa)	初期	8.5	11	15	7.8
	120°C×3日後	8.0	9.3	11	7.7
	減少率(%)	5.9	15	27	1.3

10

20

30

40

50