

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局

(43) 国際公開日  
2025年1月16日(16.01.2025)



(10) 国際公開番号

WO 2025/013911 A1

- (51) 国際特許分類:  
C08G 77/48 (2006.01) C09D 183/04 (2006.01)  
C08K 5/00 (2006.01) C09K 3/18 (2006.01)  
C08L 83/04 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2024/025028
- (22) 国際出願日: 2024年7月10日(10.07.2024)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:  
特願 2023-113041 2023年7月10日(10.07.2023) JP
- (71) 出願人: A G C 株式会社 (AGC INC.) [JP/JP];  
〒1008405 東京都千代田区丸の内一丁目5番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 阪口 博信 (SAKAGUCHI Hironobu);  
〒1008405 東京都千代田区丸の内一丁目5番1号 A G C 株式会社内 Tokyo (JP). 安樂英一郎 (ANRAKU Eiichiro); 〒1008405 東京都千代田区丸の内一丁目5番1号 A G C 株式会社内 Tokyo (JP). 川上 汐織 (KAWAKAMI Shiori); 〒1008405 東京都千代田区丸の内一丁目5番1号 A G C 株式会社内 Tokyo (JP). 平田 泰啓 (HIRATA Yasuhiro); 〒1008405 東京都千代田区丸の内一丁目5番1号 A G C 株式会社内 Tokyo (JP). 遠田 豊和 (ENTA Toyokazu); 〒1008405 東京都千代田区丸の内一丁目5番1号 A G C 株式会社内 Tokyo (JP). 原口 将幸 (HARAGUCHI Masayuki); 〒1008405 東京都千代田区丸の内一丁目5番1号 A G C 株式会社内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 家入 健 (IEIRI Takeshi); 〒2210835 神奈川県横浜市神奈川区鶴屋町三丁目3番8 アーバンセンター横浜ウエスト5階 響国際特許事務所 Kanagawa (JP).
- (81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- 添付公開書類:  
— 国際調査報告 (条約第21条(3))

(54) Title: COMPOUND, COMPOSITION, SURFACE TREATMENT AGENT, METHOD FOR PRODUCING ARTICLE, AND ARTICLE

(54) 発明の名称: 化合物、組成物、表面処理剤、物品の製造方法、及び物品

(57) Abstract: Provided are: a novel compound and composition that are each useful as a surface treatment agent capable of forming a surface treatment layer having exceptional light resistance on a base material; a surface treatment agent capable of forming the surface treatment layer; a method for producing an article having the surface treatment layer; and the article. The compound is represented by formula (1-1) or formula (1-2). Formula (1-1):  $T-O-(Si(R^2)_2-O)_m-Si(R^2)_2-A-(Si(R)_nL_{3-n})_q$ ; Formula (1-2):  $((R)_nL_{3-n}Si)_q-A-(Si(R^2)_2-O)_m-Si(R^2)_2-A-(Si(R)_nL_{3-n})_q$

(57) 要約: 基材に対して、耐光性に優れた表面処理層を形成し得る表面処理剤として有用な新規な化合物及び組成物、上記表面処理層を形成し得る表面処理剤、上記表面処理層を有する物品の製造方法、並びに、上記物品の提供。式(1-1)又は式(1-2)で表される化合物。  $T-O-(Si(R^2)_2-O)_m-Si(R^2)_2-A-(Si(R)_nL_{3-n})_q$  (1-1)  $((R)_nL_{3-n}Si)_q-A-(Si(R^2)_2-O)_m-Si(R^2)_2-A-(Si(R)_nL_{3-n})_q$  (1-2)

WO 2025/013911 A1

## 明 細 書

発明の名称：

化合物、組成物、表面処理剤、物品の製造方法、及び物品

### 技術分野

[0001] 本開示は、化合物、組成物、表面処理剤、物品の製造方法、及び物品に関する。

### 背景技術

[0002] 近年、外観、視認性等の性能を向上させるために、物品の表面に指紋を付きにくくする技術や、汚れを落としやすくする技術が求められている。具体的な方法として、物品の表面に表面処理剤を用いて表面処理を行う方法が知られている。

[0003] 例えば、特許文献1には、上記表面処理剤に用いられる特定のシロキサン基を有するシラン化合物が記載されている。

### 先行技術文献

#### 特許文献

[0004] 特許文献1：国際公開第2023/017830号

### 発明の概要

#### 発明が解決しようとする課題

[0005] 一方、特許文献1に記載のシラン化合物を用いて表面処理層を形成したところ、形成される表面処理層の耐光性についてさらなる改良が必要であることを知見した。

[0006] 本開示はこのような事情に鑑みてなされたものであり、本発明の一実施形態が解決しようとする課題は、基材に対して、耐光性に優れた表面処理層を形成し得る表面処理剤として有用な新規な化合物及び組成物を提供することにある。

本発明の一実施形態が解決しようとする課題は、基材に対して、耐光性に優れた表面処理層を形成し得る表面処理剤を提供することにある。

本発明の一実施形態が解決しようとする課題は、耐光性に優れた表面処理層を有する物品の製造方法及び物品を提供することにある。

### 課題を解決するための手段

[0007] 本開示は以下の態様を含む。

[1]

後述する式(1-1)又は後述する式(1-2)で表される化合物。

[2]

式(1-1)で表される化合物が、後述する式(2)で表される化合物、後述する式(3)で表される化合物、又は、後述する式(4)で表される化合物である、[1]に記載の化合物。

[3]

mが2～600の整数である、[1]に記載の化合物。

[4]

qが1～4の整数である、[1]又は[3]に記載の化合物。

[5]

mが2～600の整数である、[2]に記載の化合物。

[6]

qが1～4の整数である、[2]又は[5]に記載の化合物。

[7]

[1]～[6]のいずれかに記載の化合物と、液状媒体と、を含む組成物。

[8]

[1]～[6]のいずれかに記載の化合物を含む、表面処理剤。

[9]

[1]～[6]のいずれかに記載の化合物と、液状媒体と、を含む、表面処理剤。

[10]

基材に対して、[8]に記載の表面処理剤を用いて表面処理を行い、基材

上に表面処理層が形成された物品を製造する、物品の製造方法。

〔11〕

基材と、上記基材上に配置され、〔8〕に記載の表面処理剤で表面処理された表面処理層と、を含む物品。

〔12〕

光学部材である、〔11〕に記載の物品。

〔13〕

ディスプレイ又はタッチパネルである、〔11〕又は〔12〕に記載の物品。

〔14〕

基材に対して、〔9〕に記載の表面処理剤を用いて表面処理を行い、基材上に表面処理層が形成された物品を製造する、物品の製造方法。

〔15〕

基材と、上記基材上に配置され、〔9〕に記載の表面処理剤で表面処理された表面処理層と、を含む物品。

〔16〕

光学部材である、〔15〕に記載の物品。

〔17〕

ディスプレイ又はタッチパネルである、〔15〕又は〔16〕に記載の物品。

## 発明の効果

[0008] 本発明の一実施形態によれば、基材に対して、耐光性に優れた表面処理層を形成し得る表面処理剤として有用な新規な化合物及び組成物が提供される。

本発明の一実施形態によれば、基材に対して、耐光性に優れた表面処理層を形成し得る表面処理剤が提供される。

本発明の一実施形態によれば、耐光性に優れた表面処理層を有する物品の製造方法及び物品が提供される。

## 発明を実施するための形態

[0009] 本明細書において「～」を用いて示された数値範囲には、「～」の前後に記載される数値がそれぞれ最小値及び最大値として含まれる。

本明細書中に段階的に記載されている数値範囲において、一つの数値範囲で記載された上限値又は下限値は、他の段階的な記載の数値範囲の上限値又は下限値に置き換えてもよい。また、本明細書中に記載されている数値範囲において、その数値範囲の上限値又は下限値は、実施例に示されている値に置き換えてもよい。

本明細書において、「表面処理層」とは、基材の表面に、表面処理によって形成される層を意味する。

本明細書において、「Me」は、メチル基を意味する。

本明細書において、化合物又は基が特定の式(X)で表される場合、当該式(X)で表される化合物又は基をそれぞれ化合物(X)若しくは化合物X、及び基(X)若しくは基Xと記すことがある。

[0010] 本明細書において表記される2価の基の結合方向は、特段の断りがない限り、制限されない。例えば、「X-Y-Z」なる式で表される化合物中の、Yが-COO-である場合、Yは、-CO-O-であってもよく、-O-CO-O-であってもよい。また、上記化合物は「X-CO-O-Z」であってもよく「X-O-CO-Z」であってもよい。

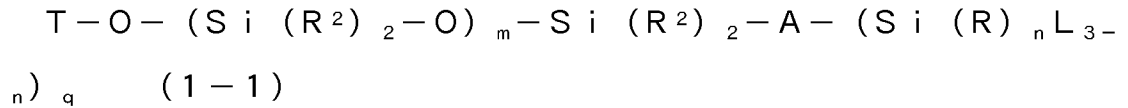
[0011] [化合物]

本開示の化合物は、後述する式(1-1)で表される化合物又は後述する式(1-2)で表される化合物である。本明細書において、本開示の化合物とは、式(1-1)で表される化合物及び式(1-2)で表される化合物の少なくとも一方の化合物をいう。

[0012] 本開示の化合物は、特定の箇所にヘテロ原子を有していてもよい脂環構造を有する連結基を有する。詳細な理由は定かではないが、このような本開示の化合物を用いることにより、耐光性に優れた表面処理層を形成できる。

[0013] 以下、本開示の化合物について、詳細に説明する。

[0014] <式(1-1)で表される化合物>



式(1-1)中、

Tは、 $(R^1)_3Si-$ 、1価の環状のポリシロキサン残基、又は1価のかご状のポリシロキサン残基であり、

$R^1$ は、それぞれ独立に、炭化水素基、又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

$R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基、又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

Aは、ヘテロ原子を有していてもよい脂環構造を有する $(q+1)$ 価の連結基であり、

Rは、それぞれ独立に、炭化水素基であり、

Lは、それぞれ独立に、加水分解性基、加水分解性基を有する基、又は水酸基であり、 $m$ は、0以上の数であり、

$n$ は、それぞれ独立に、0~2の整数であり、

$q$ は、1以上の整数である。

[0015] 式(1-1)中、Tは、 $(R^1)_3Si-$ 、1価の環状のポリシロキサン残基、又は、1価のかご状のポリシロキサン残基である。

[0016]  $R^1$ で表される炭化水素基としては、例えば、脂肪族炭化水素基及び芳香族炭化水素基が挙げられる。中でも、炭化水素基は、脂肪族炭化水素基が好ましく、アルキル基がより好ましい。アルキル基は、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。アルキル基の炭素数は1~10が好ましく、1~6がより好ましく、1~4がさらに好ましい。 $R^1$ で表される炭化水素基としては、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、又は $n$ -ブチル基がさらに好ましく、メチル基が特に好ましい。

[0017]  $R^1$ で表されるトリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基は、直鎖

状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。R<sup>1</sup>で表されるトリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基の炭素数は1～10が好ましく、1～6がより好ましく、1～4がさらに好ましい。R<sup>1</sup>で表されるトリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基としては、メチル基、エチル基、n-プロピル基、又はn-ブチル基がより好ましく、メチル基がさらに好ましい。

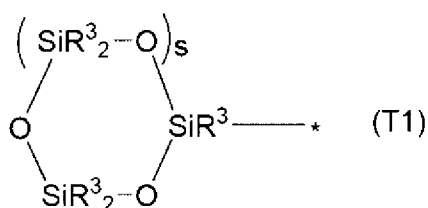
[0018] 複数のR<sup>1</sup>は同一であってもよく、互いに異なっていてもよく、製造容易性の観点から、同一であることが好ましい。

[0019] 中でも、表面処理層の撥水性を向上させる観点から、R<sup>1</sup>は、直鎖状アルキル基、又は、アルキル基が直鎖状アルキル基であるトリアルキルシリルオキシ基が好ましく、メチル基、エチル基、n-プロピル基、n-ブチル基、又はトリメチルシリルオキシ基がより好ましく、メチル基又はトリメチルシリルオキシ基がさらに好ましい。

(R<sup>1</sup>)<sub>3</sub>Si-で表される基としては、例えば、メチルジエチルシリル基、メチルエチルプロピルシリル基、メチルエチルブチルシリル基、メチルジプロピルシリル基、メチルプロピルブチルシリル基、メチルジブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルプロピルシリル基、ジメチルブチルシリル基、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリーn-プロピルシリル基、トリーイソプロピルシリル基、トリス(トリメチルシリルオキシ)シリル基、メチルビス(トリメチルシリルオキシ)シリル基、及び、ジメチル(トリメチルシリルオキシ)シリル基が挙げられる。

[0020] 1価の環状のポリシロキサン残基は、式(T1)で表される基が好ましい。

[0021] [化1]



[0022] 式 (T1) 中、

$R^3$  はそれぞれ独立に、炭化水素基、置換基を有する炭化水素基、又は  $-O-SiR^{51}_3$  で表される基であり、

$s$  は 1 ~ 4 の整数であり、

$R^{51}$  は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

\* は、結合位置である。

[0023]  $R^3$  で表される炭化水素基としては、例えば、脂肪族炭化水素基及び芳香族炭化水素基が挙げられる。中でも、炭化水素基は、脂肪族炭化水素基が好ましく、アルキル基がより好ましい。

[0024]  $R^3$  で表される炭化水素基の一態様としてのアルキル基は、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。アルキル基の炭素数は 1 ~ 10 が好ましく、1 ~ 8 がより好ましく、1 ~ 4 がさらに好ましい。具体的に、 $R^3$  で表されるアルキル基は、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、 $n$ -ブチル基、イソブチル基、又はヘプチル基が好ましく、メチル基がより好ましい。

[0025]  $R^3$  で表される置換基を有する炭化水素基に含まれる炭化水素基としては、例えば、脂肪族炭化水素基及び芳香族炭化水素基が挙げられる。中でも、炭化水素基は、脂肪族炭化水素基が好ましく、アルキル基がより好ましい。アルキル基は、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。置換アルキル基に含まれるアルキル基の炭素数は 1 ~ 10 が好ましく、1 ~ 8 がより好ましく、2 ~ 4 がさらに好ましい。

[0026]  $R^3$  で表される置換基を有する炭化水素基における置換基としては、例えば、ハロゲン原子、水酸基、アルコキシ基、トリアルキルシリルエーテル基、トリアルキルシリル基、アミノ基、ニトロ基、シアノ基、スルホニル基、トリフルオロメチル基、及び  $-SiR^{52}_3$  で表される基が挙げられる。 $R^{52}$  は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基である。

[0027]  $R^{52}$ で表される炭化水素基としては、 $R^3$ で表される炭化水素基と同様のものが挙げられる。

$R^{52}$ で表されるトリアルキシルシリルオキシ基に含まれるアルキル基としては、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。アルキル基の炭素数は1～10が好ましく、1～8がより好ましく、1～4がさらに好ましく、1が特に好ましい。トリアルキシルシリルオキシ基に含まれる3つのアルキル基は同一であってもよく、互いに異なってもよい。

[0028] 3つの $R^{52}$ は同一であってもよく、互いに異なってもよいが、製造容易性の観点から、同一であることが好ましい。

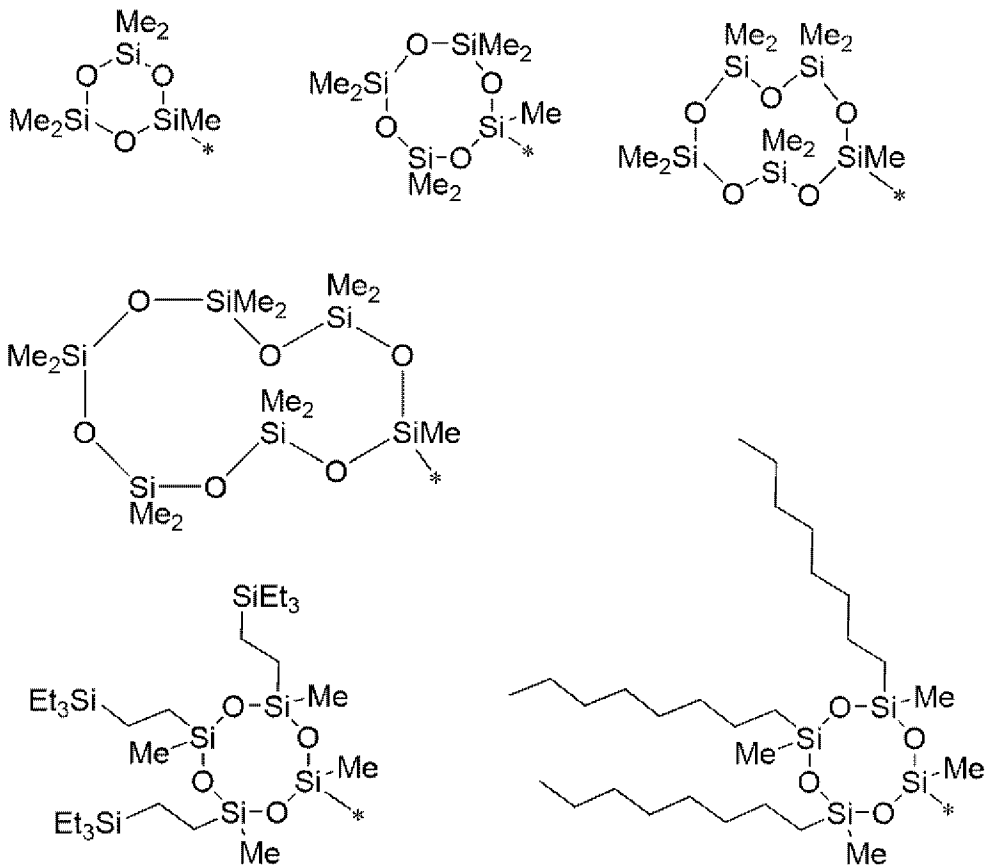
[0029]  $R^3$ で表される、 $-O-SiR^{51}_3$ で表される基において、 $R^{51}$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキシルシリルオキシ基である。 $R^{51}$ で表される炭化水素基としては、 $R^3$ で表される炭化水素基と同様のものが挙げられる。 $R^{51}$ で表されるトリアルキシルシリルオキシ基としては、 $R^{52}$ で表されるトリアルキシルシリルオキシ基と同様のものが挙げられる。

[0030] 複数の $R^3$ は同一であってもよく、互いに異なってもよいが、製造容易性の観点から、同一であることが好ましい。

[0031] 1価の環状のポリシロキサン残基としては、例えば、以下の基が挙げられる。\*は、結合位置である。

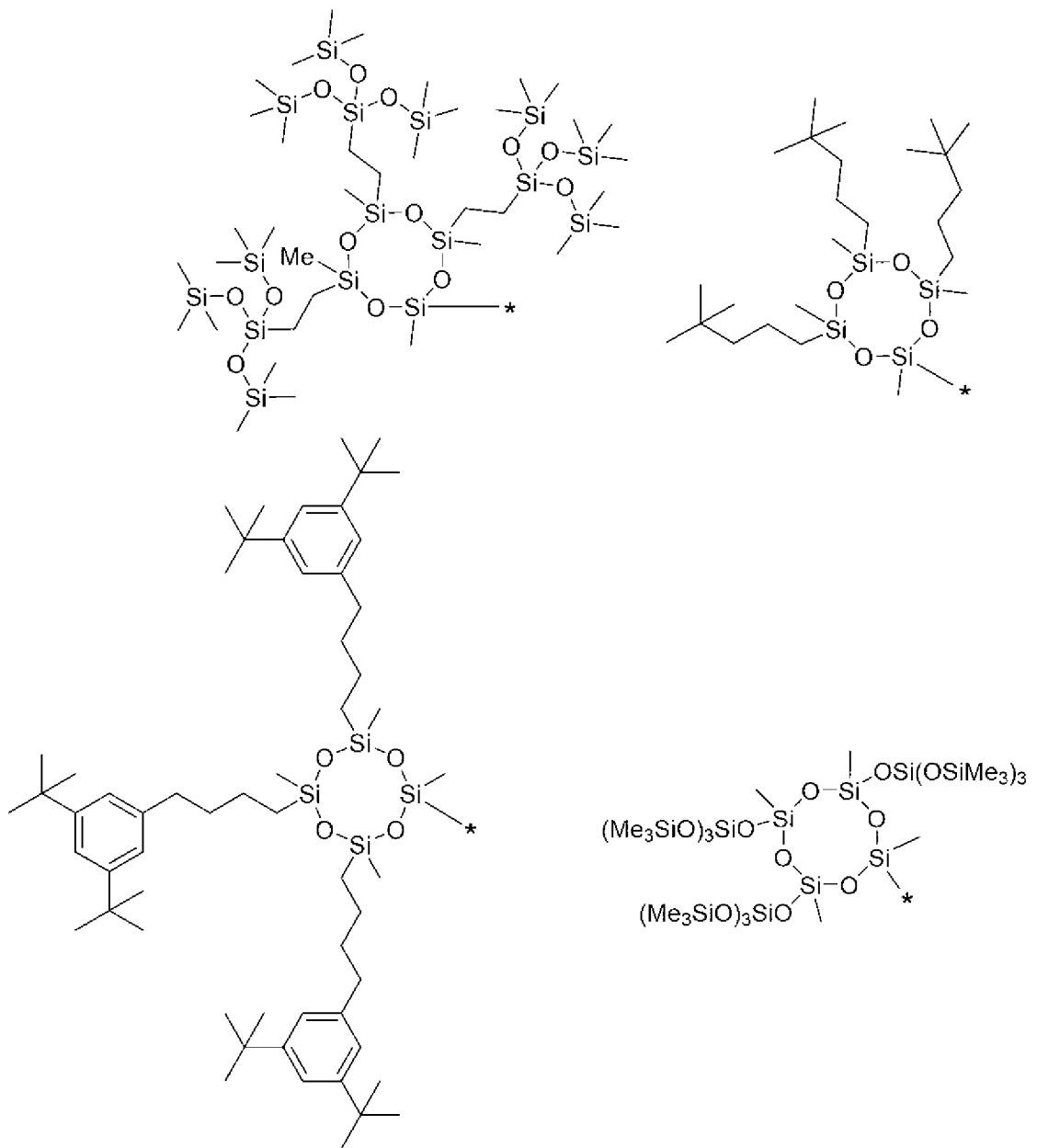
[0032]

[化2]



[0033]

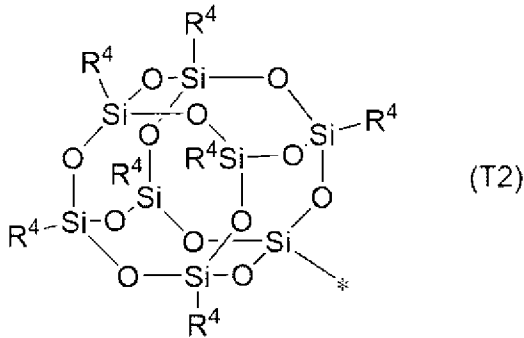
[化3]



[0034] 1個のかご状のポリシロキサン残基は、式(T2)で表される基が好ましい。

[0035]

[化4]



[0036] 式 (T2) 中、

$R^4$ はそれぞれ独立に、炭化水素基、又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

\*は、結合位置である。

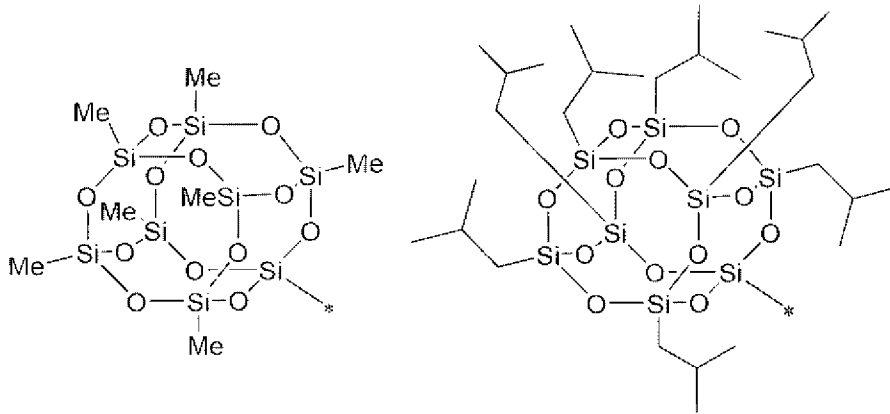
[0037]  $R^4$ で表される炭化水素基としては、例えば、脂肪族炭化水素基及び芳香族炭化水素基が挙げられる。中でも、炭化水素基は、脂肪族炭化水素基が好ましく、アルキル基がより好ましい。アルキル基は、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基又は分岐鎖状アルキル基が好ましい。アルキル基の炭素数は1～10が好ましく、1～6がより好ましく、1～4がさらに好ましい。 $R^4$ で表される炭化水素基としては、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、 $n$ -ブチル基、又はイソブチル基がさらに好ましく、イソブチル基が特に好ましい。

[0038]  $R^4$ で表されるトリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基は、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。 $R^4$ で表されるトリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基の炭素数は1～10が好ましく、1～6がより好ましく、1～4がさらに好ましい。 $R^1$ で表される炭化水素基としては、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、又は $n$ -ブチル基がより好ましく、メチル基がさらに好ましい。

[0039] 複数の $R^4$ は同一であってもよく、互いに異なっていてもよく、製造容易性の観点から、同一であることが好ましい。

[0040] 1価のかご状のポリシロキサン残基としては、例えば、以下の基が挙げられる。\*は、結合位置である。

[0041] [化5]



[0042] 式(1-1)中、 $R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基である。 $R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基が好ましい。

$R^2$ の炭素数は、1~10が好ましく、1~6がより好ましく、1~4がさらに好ましい。

[0043]  $R^2$ が炭化水素基の場合、炭化水素基は、脂肪族炭化水素基が好ましく、アルキル基がより好ましい。アルキル基は、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。アルキル基の炭素数は1~10が好ましく、1~6がより好ましく、1~4がさらに好ましい。炭化水素基としては、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、又は*n*-ブチル基がさらに好ましく、メチル基が特に好ましい。

[0044]  $R^2$ がトリアルキルシリルオキシ基の場合、トリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基は、直鎖状アルキル基、分岐鎖状アルキル基、及び環状アルキル基のいずれであってもよいが、直鎖状アルキル基が好ましい。トリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基の炭素数は1~10が好ましく、1~6がより好ましく、1~4がさらに好ましい。トリアルキルシリルオキシ基に含まれるアルキル基としては、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、又は*n*-ブチル基がより好ましく、メチル基がさらに好ましい。

[0045] 式(1-1)中、Rは、それぞれ独立に、炭化水素基である。

Rで表される炭化水素基としては、例えば、R<sup>2</sup>で表される炭化水素基が挙げられる。

[0046] 式(1-1)中、Lは、それぞれ独立に、加水分解性基、加水分解性基を有する基、又は水酸基である。

加水分解性基は、加水分解反応により水酸基となる基である。すなわち、Si-Lで表される加水分解性を有するシリル基は、加水分解反応によりSi-OHで表されるシラノール基となる。シラノール基は、さらにシラノール基間で反応してSi-O-Si結合を形成する。また、シラノール基は、基材の表面に存在する酸化物に由来するシラノール基と脱水縮合反応して、Si-O-Si結合を形成できる。

[0047] 加水分解性基としては、例えば、アルコキシ基、アリアルオキシ基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、及びイソシアナト基(-NCO)が挙げられる。アルコキシ基は、炭素数1~4のアルコキシ基であることが好ましい。アリアルオキシ基は、炭素数3~10のアリアルオキシ基であることが好ましい。ただし、アリアルオキシ基のアリアル基は、ヘテロアリアル基を含む。ハロゲン原子は、塩素原子が好ましい。アシル基は、炭素数1~6のアシル基が好ましい。アシルオキシ基は、炭素数1~6のアシルオキシ基が好ましい。

[0048] 加水分解性基を有する基としては、例えば、上記で例示される加水分解性基を有する基が挙げられる。加水分解性基を有する基は、-O-L<sup>A</sup>-L<sup>B</sup>が好ましい。L<sup>A</sup>はアルキレン基であり、L<sup>B</sup>は加水分解性基である。アルキレン基の炭素数は、1~10が好ましい。L<sup>B</sup>で表される加水分解性基は、上述したLで表される加水分解性基と同義であり、好適態様も同じである。

[0049] 中でも、Lは、化合物の製造容易性の観点から、炭素数1~4のアルコキシ基又はハロゲン原子が好ましい。Lは、塗布時のアウトガスが少なく、化合物の保存安定性がより優れる点から、炭素数1~4のアルコキシ基が好ましく、エトキシ基又はメトキシ基がより好ましい。

[0050] 式(1-1)中、 $m$ は、0以上の数である。 $m$ は、1以上であってもよい。

$m$ は、2~600の数が好ましく、3~500の数がより好ましく、9~50の数がさらに好ましく、11~30の数が特に好ましく、11~25の数が最も好ましい。

式(1-1)又は式(1-2)中、「 $(Si(R^2)_2-O)$ 」で表される繰り返し単位の数 $m$ は、化合物を核磁気共鳴法(NMR)により測定して得られるデータから算出される平均値である。

[0051] 式(1-1)中、 $n$ は、それぞれ独立に、0~2の整数である。

$n$ は、0又は1が好ましく、0がより好ましい。 $L$ が複数存在することによって、表面処理層の基材への密着性がより強固になる。

$n$ が1以下である場合、1分子中に存在する複数の $L$ は、同じであってもよく、互いに異なってもよい。原料の入手容易性、及び、化合物の製造容易性の観点から、複数の $L$ は同じであることが好ましい。 $n$ が2である場合、1分子中に存在する複数の $R$ は同じであってもよく、互いに異なってもよい。原料の入手容易性、及び、化合物の製造容易性の観点から、複数の $R$ は同じであることが好ましい。

[0052] 式(1-1)中、 $q$ は、1以上の整数である。

表面処理層の耐光性がより優れる点から、 $q$ は、1~15の整数が好ましく、1~6の整数がより好ましく、1~4の整数がさらに好ましく、1~3の整数が特に好ましい。

$q$ が2以上の整数である場合、複数の $[Si(R)_nL_{3-n}]$ は同一であってもよく、互いに異なってもよい。原料の入手容易性、及び、化合物の製造容易性の観点から、複数の $[Si(R)_nL_{3-n}]$ は同じであることが好ましい。

[0053] 式(1-1)中、 $A$ は、ヘテロ原子を有していてもよい脂環構造を有する $(q+1)$ 価の連結基である。

以下、本開示の化合物が有するヘテロ原子を有していてもよい脂環構造を

構成する環を「特定環構造」とも記す。

[0054] Aが有する特定環構造は、芳香族性を有さない環である限り、単環、縮合多環、橋かけ環、スピロ環、及び集合多環のいずれであってもよく、環を構成する原子は、炭素原子のみからなる炭素環でもよく、2価以上の原子価を有するヘテロ原子と炭素原子とからなるヘテロ環でもよい。また、環を構成する原子間の結合は、単結合であってもよく、環が非芳香族性である限りにおいて多重結合であってもよい。

単環としては、4～8員環が好ましく、5員環又は6員環がより好ましい。

縮合多環としては、4～8員環の2以上が縮合した縮合多環が好ましく、5員環及び6員環から選ばれる環の2～4個が結合した縮合多環、又は、5員環及び6員環から選ばれる環の1若しくは2個と4員環1個が結合した縮合多環がより好ましい。

橋かけ環としては、5員環又は6員環を最大の環とする橋かけ環が好ましく、アダマンタン環がより好ましい。

スピロ環としては、4～6員環の2つからなるスピロ環が好ましい。

集合多環としては、5員環及び6員環から選ばれる環の2又は3個が単結合を介して結合した集合多環が好ましい。

特定環構造を構成するヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子又はケイ素原子が好ましく、窒素原子又は酸素原子がより好ましい。特定環構造を構成するヘテロ原子の数は3個以下が好ましい。また、特定環構造を構成するヘテロ原子の数が2個以上の場合、それらのヘテロ原子は同じであっても異なってもよい。

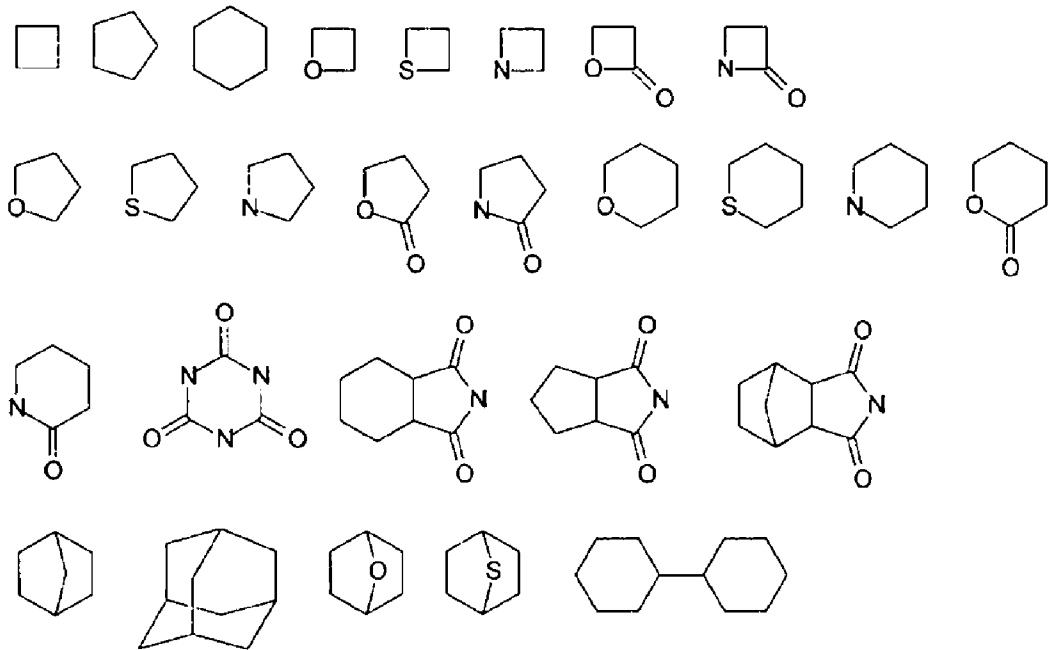
[0055] 特定環構造としては、化合物が製造しやすく、表面処理層の耐光性がさらに優れる点から、3～8員環の脂肪族環、3～8員環のヘテロ脂肪族環、これらの環のうちの2～4個が縮合した縮合環、5員環又は6員環を最大の環とする橋かけ環、及び、これらの環のうちの2つ以上を有し、単結合で連結された集合多環からなる群から選ばれる1種が好ましい。

好ましい環は、5員環又は6員環の脂肪族環、窒素原子又は酸素原子を有する5員環又は6員環のヘテロ環、5員環又は6員環の炭素環の2～4個が縮合した縮合環、5員環又は6員環を最大の環とする橋かけ環、又は、5員環若しくは6員環を最大の環とする橋かけ環と5員環のヘテロ環との縮合環である。

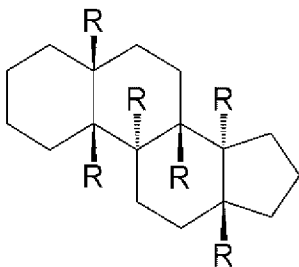
特定環構造としては、例えば、以下に示す環と、1,3-シクロヘキサジエン環、1,4-シクロヘキサジエン環、シクロプロパン環、ノルボルネン環、ノルボルナジエン環、モルホリン環、アジリジン環、ピラン環、及びインデン環が挙げられる。なお、以下には、オキソ基(=O)を有する環も示す。

下記の縮合環におけるRは、水素原子又はメチル基である。

[0056] [化6]



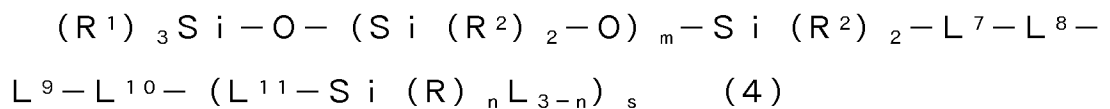
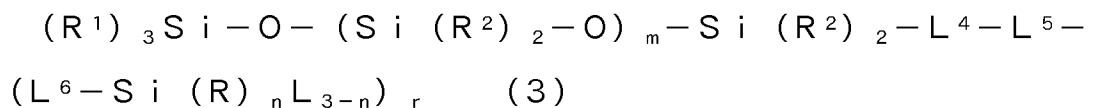
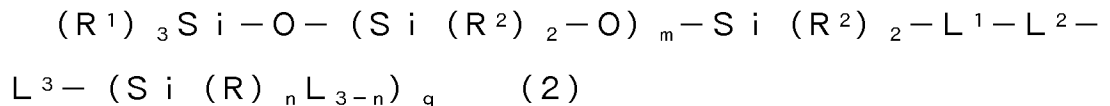
[0057] [化7]



[0058] 式(1-1)中、Aは、特定環構造のみで構成されていてもよく、少なくとも1つの特定環構造と少なくとも1つの2価以上の連結基とを組み合わせた基であってもよい。

Aが有してもよい2価以上の連結基としては、本開示の効果を損なわない基であればよく、例えば、エーテル性酸素原子又は2価のオルガノポリシロキサン残基を有していてもよいアルキレン基、炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、及び、2~8価のオルガノポリシロキサン残基、並びに、後述する式(2)中の $[-L^1-L^2-L^3-]$ 、式(3)中の $[-L^4-L^5-(L^6-* )_r]$ 、及び式(4)中の $[-L^7-L^8-L^9-L^{10}-(L^{11}-*)_s]$ が挙げられる。なお、\*は $[Si(R)_nL_{3-n}]$ との結合位置を表す。

[0059] 式(1-1)で表される化合物としては、下式(2)で表される化合物、下式(3)で表される化合物、又は、下式(4)で表される化合物が好ましい。



式(2)中、 $L^1$ は、単結合又は2価の連結基であり、 $L^2$ は、ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基であり、 $L^3$ は、 $(q+1)$ 価の連結基である。

式(3)中、 $L^4$ は、単結合又は2価の連結基であり、 $L^5$ は、 $(r+1)$ 価のヘテロ原子を有していてもよい脂環基であり、 $L^6$ は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基であり、 $r$ は、1以上の整数である。

式(4)中、 $L^7$ 及び $L^9$ は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基であり、 $L^8$ は、ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基であり、 $L^{10}$ は、 $(r+1)$ 価のヘテロ原子を有していてもよい脂環基であり、 $L^{11}$ は、それ

それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基であり、 $s$ は、1以上の整数である。

中でも、式(2)で表される化合物、又は式(4)で表される化合物がより好ましい。

[0060] 以下、式(2)で表される化合物、式(3)で表される化合物、及び、式(4)で表される化合物について、それぞれ説明する。

[0061] 式(1-1)で表される化合物は、上記式(2)で表される化合物であってよい。

式(2)中、 $L^1$ は、単結合又は2価の連結基である。

2価の連結基としては、例えば、2価の炭化水素基、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-Si(R^a)_2-$ 、及びこれらを2種以上組み合わせた基が挙げられる。

ただし、 $L^1$ の $-Si(R^a)_2-$ 側の末端は $-O-Si(R^a)_2-$ ではない。

また、 $L^1$ である2価の連結基は、ヘテロ原子を有してもよい2価の脂環基以外の2価の基であることが好ましい。

上記2価の炭化水素基は、2価の直鎖状又は分岐鎖状の飽和炭化水素基、アルケニレン基、又はアルキニレン基であってもよい。2価の直鎖状又は分岐鎖状の飽和炭化水素基としては、例えば、アルキレン基が挙げられる。アルキレン基の炭素数は、1~30が好ましく、1~20がより好ましく、4~20がさらに好ましく、5~15が特に好ましい。アルケニレン基の炭素数は2~20が好ましく、アルキニレン基の炭素数は2~20が好ましい。

上記 $R^a$ は、アルキル基（好ましくは炭素数1~10）である。上記 $R^d$ は、水素原子又はアルキル基（好ましくは炭素数1~10）である。

なお、上記これらを2種以上組み合わせた基としては、例えば、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)O-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキ

レン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-SO_2N(R^d)-$ を有するアルキレン基、及びアルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基が挙げられる。

中でも、 $L^1$ は、単結合、2価のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-Si(R^a)_2-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)O-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-SO_2N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又はアルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基が好ましく、単結合、アルキレン基、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又は、アルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基がより好ましく、単結合、アルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、又はアルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基がさらに好ましい。

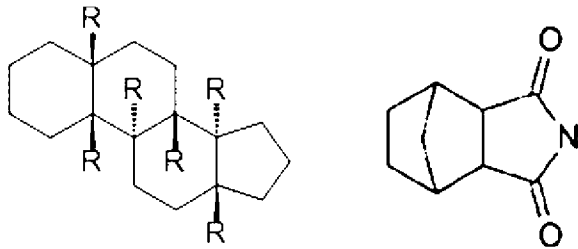
[0062] 式(2)中、 $L^2$ は、ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基である。

ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基は、上述した特定環構造からなる基であり、好適態様も同じである。

中でも、 $L^2$ は、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、アダマンタン環、ピペリジン環、及び、下記の縮合環からなる群より選択される環を含むことが好ましく、アダマンタン環を含むことがより好ましい。

Rの定義は、上述した通りである。

[0063] [化8]



[0064] 特定環構造を構成する原子の環を構成しない結合手は、 $L^1$ 又は $L^3$ に結合する結合手である。残余の結合手がある場合には、残余の結合手は、水素原子又は置換基に結合している。該置換基としては、例えば、ハロゲン原子、アルキル基（炭素-炭素原子間にエーテル性酸素原子を含んでいてもよい。）、アルケニル基、アリル基、アルコキシ基、及びオキソ基(=O)が挙げられる。残余の結合手は、水素原子又はアルキル基に結合していることが好ましく、水素原子に結合していることがより好ましい。アルキル基の炭素数は、1~5が好ましく、1~3がより好ましく、1がさらに好ましい。

[0065] 式(2)中、 $L^3$ は $(q+1)$ 価の連結基である。

$L^3$ は、基(3-1A)又は基(3-1B)が好ましく、基(3-1A)がより好ましい。

[0066]  $-Q^a-X^{31}(-Q^b-*)_n(-R^{31})_i$  (3-1A)

$-Q^c-[CH_2C(R^{32})(-Q^d-*)]_y-R^{33}$  (3-1B)

なお、式(3-1A)及び式(3-1B)中、\*は、 $[-Si(R)_nL_{3-n}]$ との結合位置である。

[0067] 式(3-1A)中、 $Q^a$ は、単結合又は2価の連結基である。

ただし、 $X^{31}$ がアルキレン基の場合、 $Q^a$ の $X^{31}$ と結合する側の末端は、アルキレン基ではない。

2価の連結基の定義は、上述した $L^1$ で説明した定義と同義である。

中でも、 $Q^a$ は、2価のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-Si(R^a)_2-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R$

d) C(O)O-, -SO<sub>2</sub>N(R<sup>d</sup>)-, -C(O)N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、-OC(O)N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、-S-を有するアルキレン基、-C(O)O-を有するアルキレン基、-C(O)S-を有するアルキレン基、-N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、-N(R<sup>d</sup>)C(O)N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、-SO<sub>2</sub>N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、又はアルキレン基-C(O)N(R<sup>d</sup>)-アルキレン基が好ましく、アルキレン基、-C(O)O-, -C(O)N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、-OC(O)N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、-S-を有するアルキレン基、-C(O)O-を有するアルキレン基、-C(O)S-を有するアルキレン基、-N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、-N(R<sup>d</sup>)C(O)N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、又は、アルキレン基-C(O)N(R<sup>d</sup>)-アルキレン基がより好ましく、アルキレン基、-C(O)N(R<sup>d</sup>)-を有するアルキレン基、又はアルキレン基-C(O)N(R<sup>d</sup>)-アルキレン基がさらに好ましい。R<sup>a</sup>及びR<sup>d</sup>の定義及び好適態様は、上述した通りである。

[0068] 式(3-1A)中、X<sup>31</sup>は、アルキレン基、窒素原子、炭素原子、ケイ素原子、又は2~8価のオルガノポリシロキサン残基である。

なお、上記アルキレン基は、-O-、2価のオルガノポリシロキサン残基又はジアルキルシリレン基を有していてもよい。アルキレン基は、-O-、2価のオルガノポリシロキサン残基、及びジアルキルシリレン基からなる群から選択される基を複数有していてもよい。

X<sup>31</sup>で表されるアルキレン基の炭素数は、1~20が好ましく、1~10がより好ましい。

2~8価のオルガノポリシロキサン残基としては、例えば、2価のオルガノポリシロキサン残基、及び後述する(w+1)価のオルガノポリシロキサン残基が挙げられる。

[0069] 中でも、X<sup>31</sup>は、表面処理層の耐光性を向上させる観点から、窒素原子、

炭素原子、ケイ素原子、又は、4～8価のオルガノポリシロキサン残基が好ましく、炭素原子がより好ましい。

[0070] 式(3-1A)中、 $Q^b$ は、単結合又は2価の連結基である。

2価の連結基の定義は、上述した $Q^a$ で説明した定義と同義である。

$Q^b$ が2個以上ある場合は、2個以上の $Q^b$ は、同一であっても異なってもよい。

[0071] 中でも、 $Q^b$ は、エーテル性酸素原子を有してもよいアルキレン基であることが好ましい。アルキレン基の炭素数は、1～30が好ましく、1～20がより好ましく、2～20がさらに好ましく、2～10であってもよく、2～6であってもよく、2～5であってもよい。例えば、2、3、8、9、及び11が挙げられる。また、上記炭素数は1～10であってもよい。

[0072] 式(3-1A)中、 $R^{31}$ は、水素原子、水酸基又はアルキル基である。

$R^{31}$ が2個以上ある場合は、2個以上の( $-R^{31}$ )は、同一であっても異なってもよい。

アルキル基の炭素数は、1～5が好ましく、1～3がより好ましく、1がさらに好ましい。

[0073]  $X^{31}$ が単結合又はアルキレン基の場合、 $h$ は1であり、 $i$ は0であり、

$X^{31}$ が窒素原子の場合、 $h$ は1～2の整数であり、 $i$ は0～1の整数であり、 $h+i=2$ を満たし、

$X^{31}$ が炭素原子又はケイ素原子の場合、 $h$ は1～3の整数であり、 $i$ は0～2の整数であり、 $h+i=3$ を満たし、

$X^{31}$ が2～8価のオルガノポリシロキサン残基の場合、 $h$ は1～7の整数であり、 $i$ は0～6の整数であり、 $h+i=1\sim7$ を満たす。

[0074] 中でも、表面処理層の耐光性を向上させる観点から、 $i$ は0又は1が好ましい。

また、表面処理層の耐光性を向上させる観点から、 $h$ は2又は3が好ましい。

[0075] 式(3-1B)中、 $Q^c$ は、単結合又は2価の連結基である。

2価の連結基の定義は、上述したL<sup>1</sup>で説明した定義と同義である。

[0076] 式(3-1B)中、R<sup>32</sup>は、水素原子又は炭素数1~10のアルキル基であり、化合物を製造しやすい点から、水素原子であることが好ましい。

アルキル基としては、メチル基が好ましい。

[0077] 式(3-1B)中、Q<sup>d</sup>は、単結合又はアルキレン基である。アルキレン基の炭素数は、1~30が好ましく、1~20がより好ましく、1~10であってもよく、1~6であってもよい。また、上記炭素数は2~20であってもよい。

[0078] 式(3-1B)中、R<sup>33</sup>は、水素原子又はハロゲン原子であり、化合物を製造しやすい点から、水素原子であることが好ましい。

[0079] yは、1~10の整数であり、1~6の整数であることが好ましい。

2個以上の[CH<sub>2</sub>C(R<sup>32</sup>)(-Q<sup>d</sup>-\*)]は、同一であっても異なってもよい。

[0080] -L<sup>3</sup>-(Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub>)<sub>q</sub>で表され、L<sup>3</sup>が基(3-1A)である基としては、基(3-1A-1)~(3-1A-7)が好ましい。

[0081] -L<sup>a</sup>-(X<sup>32</sup>)<sub>s1</sub>-Q<sup>b1</sup>-Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub> (3-1A-1)

-L<sup>a</sup>-(X<sup>33</sup>)<sub>s2</sub>-Q<sup>a2</sup>-N[-Q<sup>b2</sup>-Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub>]<sub>2</sub> (3-1A-2)

-Q<sup>a3</sup>-Si(R<sup>g</sup>)[-Q<sup>b3</sup>-Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub>]<sub>2</sub> (3-1A-3)

-L<sup>a</sup>-[Q<sup>e</sup>]<sub>s4</sub>-Q<sup>a4</sup>-(O)<sub>t4</sub>-C[-(O)<sub>u4</sub>-Q<sup>b4</sup>-Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub>]<sub>3-w1</sub>(-R<sup>31</sup>)<sub>w1</sub> (3-1A-4)

-Q<sup>a5</sup>-Si[-Q<sup>b5</sup>-Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub>]<sub>3</sub> (3-1A-5)

-L<sup>a</sup>-[Q<sup>e</sup>]<sub>v</sub>-Q<sup>a6</sup>-Z<sup>a</sup>[-Q<sup>b6</sup>-Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub>]<sub>w2</sub> (3-1A-6)

-L<sup>a</sup>-[Q<sup>e</sup>]<sub>s4</sub>-Q<sup>a4</sup>-(O)<sub>t4</sub>-Z<sup>c</sup>[-(O-Q<sup>b4</sup>)<sub>u4</sub>-Si(R)<sub>n</sub>L<sub>3-n</sub>]<sub>w3</sub>(-OH)<sub>w4</sub> (3-1A-7)

なお、式(3-1A-1)~(3-1A-7)中、R、L、及びnの定義

及び好適態様は、上述した通りである。

[0082] 中でも、基 (3-1A) は、基 (3-1A-1) 又は基 (3-1A-4) から  $S_i(R)_n L_{3-n}$  を除いた基が好ましく、基 (3-1A-4) から  $S_i(R)_n L_{3-n}$  を除いた基がより好ましい。

[0083] 式 (3-1A-1)、(3-1A-2)、(3-1A-4)、(3-1A-6) 及び (3-1A-7) 中、 $L^a$  は、単結合又はアルキレン基である。

上記アルキレン基としては、例えば、 $L^1$  で表される 2 価の連結基として例示されるアルキレン基と同義であり、好適態様も同じである。

[0084] 基 (3-1A-1) において、 $X^{3,2}$  は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-OC(O)N(R^d)-$ 、又は  $-C(O)N(R^d)-$  である (ただし、式中の  $N$  は  $Q^{b1}$  に結合する)。

$R^d$  の定義及び好適態様は、上述した通りである。

$s_1$  は、0 又は 1 である。

[0085] 中でも、 $X^{3,2}$  は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-OC(O)N(R^d)-$ 、又は  $-C(O)N(R^d)-$  が好ましく、 $-C(O)O-$  又は  $-C(O)N(R^d)-$  がより好ましい。

[0086]  $Q^{b1}$  は、単結合又はアルキレン基である。なお、アルキレン基は、 $-O-$ 、又はジアルキルシリレン基を有していてもよい。アルキレン基は、 $-O-$ 、2 価のオルガノポリシロキサン残基及びジアルキルシリレン基からなる群から選択される基を複数有していてもよい。

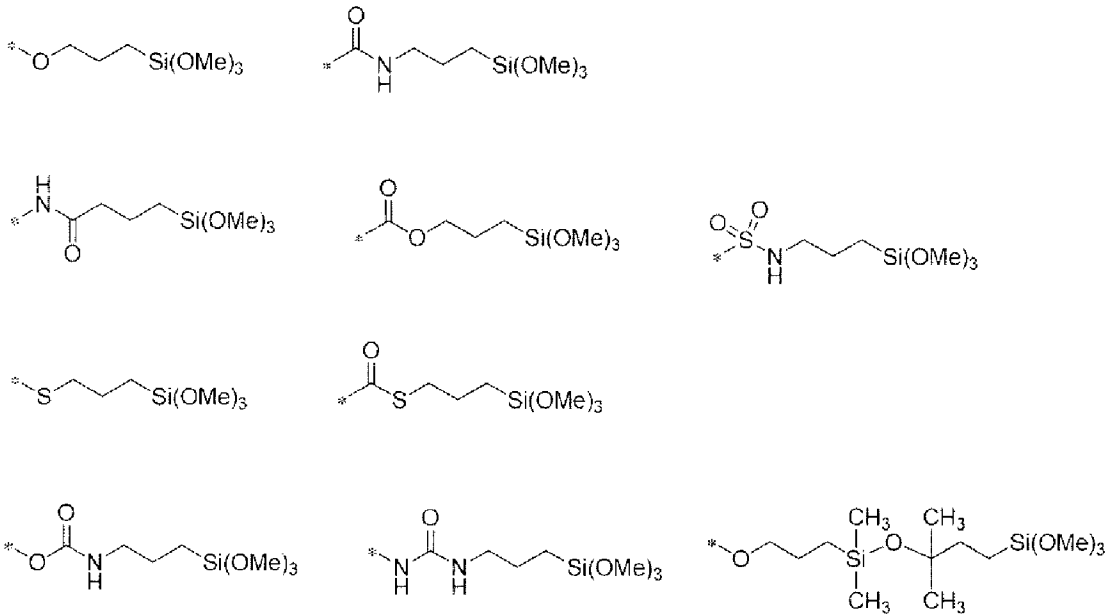
なお、アルキレン基が  $-O-$ 、2 価のオルガノポリシロキサン残基又はジアルキルシリレン基を有する場合、炭素原子-炭素原子間にこれらの基を有することが好ましい。

$Q^{b1}$  で表されるアルキレン基の炭素数は、1~30 が好ましく、1~20 がより好ましく、2~20 がさらに好ましく、2~6 が特に好ましい。また、上記炭素数は 1~10 であってもよい。

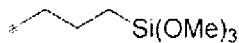
[0087] 中でも、 $s_1$ は1であることが好ましく、 $Q^{b1}$ は、炭素数2～6のアルキレン基が好ましい。

[0088] 基(3-1A-1)における $[-(X^{32})_{s_1}-Q^{b1}-Si(R)_nL_{3-n}]$ としては、例えば、以下の基が挙げられる。下記式中、\*は、 $L^2$ との結合位置である。

[0089] [化9]



[0090] [化10]



[0091] 基(3-1A-2)において、 $X^{33}$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-OC(O)N(R^d)-$ 、又は $-C(O)N(R^d)-$ である。

$R^d$ の定義及び好適態様は、上述した通りである。

$s_2$ は、0又は1である。 $s_2$ は、化合物を製造しやすい点から、0が好ましい。

[0092]  $Q^{a2}$ は、単結合、アルキレン基、 $-C(O)-$ 、又は、炭素数2以上のア

ルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)O-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、若しくは $-NH-$ を有する基である。

$R^d$ の定義及び好適態様は、上述した通りである。

$Q^{a2}$ で表されるアルキレン基の炭素数は、 $1\sim 20$ が好ましく、 $1\sim 10$ がより好ましく、 $1\sim 6$ がさらに好ましく、 $1\sim 3$ が特に好ましい。

$Q^{a2}$ で表される炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子、 $-C(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)O-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、若しくは $-NH-$ を有する基の炭素数は、 $2\sim 10$ が好ましく、 $2\sim 6$ がより好ましい。

[0093]  $Q^{a2}$ は、化合物を製造しやすい点から、単結合が好ましい。

[0094]  $Q^{b2}$ は、アルキレン基、又は、炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間に、2価のオルガノポリシロキサン残基、エーテル性酸素原子若しくは $-NH-$ を有する基である。

$Q^{b2}$ で表されるアルキレン基の炭素数は、 $1\sim 30$ が好ましく、 $1\sim 20$ がより好ましく、 $2\sim 20$ がさらに好ましく、 $2\sim 10$ であってもよく、 $2\sim 6$ であってもよい。例えば2、3、8、9、11が挙げられる。また、炭素数は $1\sim 10$ であってもよい。

$Q^{b2}$ で表される炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間に、2価のオルガノポリシロキサン残基、エーテル性酸素原子又は $-NH-$ を有する基の炭素数は、 $2\sim 10$ が好ましく、 $2\sim 6$ がより好ましい。

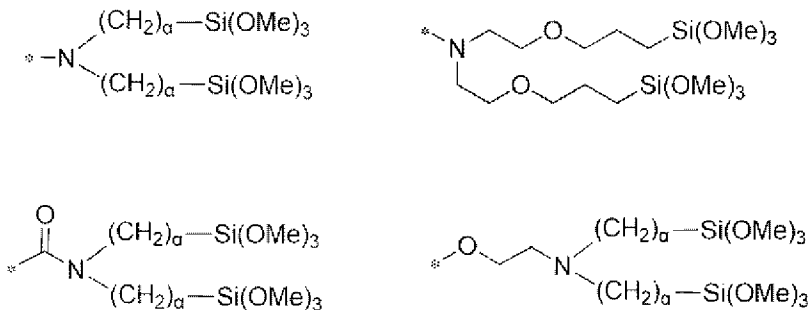
[0095]  $Q^{b2}$ としては、化合物を製造しやすい点から、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2OCH_2CH_2CH_2-$ が好ましい（ただし、右側がSiに結合する）。

[0096] 2個の $[-Q^{b2}-Si(R)_nL_{3-n}]$ は、同一であっても異なってもよい。

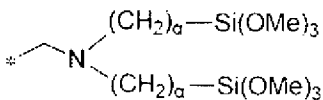
[0097] 基(3-1A-2)における $[-(X^{33})_{s2}-Q^{a2}-N[-Q^{b2}-Si(R)_nL_{3-n}]_2]$ としては、例えば、以下の基が挙げられる。下記式中、\*は、 $L^2$ との結合位置である。

また、式中、反応性シリル基に結合する $(CH_2)_\alpha$ における $\alpha$ はメチレン基の数を表す整数であり、1~30が好ましく、1~20がより好ましく、2~20がさらに好ましく、2~10であってもよく、2~6であってもよい。例えば、2、3、8、9、及び11が挙げられる。また、上記炭素数は1~10であってもよい。同一化合物中に含まれる複数の $\alpha$ は同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。例えば、同一化合物中に含まれる複数の $\alpha$ が全て2、3、8、9、11である。以下同様である。

[0098] [化11]



[0099] [化12]



[0100] 基(3-1A-3)において、 $Q^{a3}$ は、単結合、又は、エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基である。化合物を製造しやすい点から、 $Q^{a3}$ は、単結合が好ましい。

エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基の炭素数は、1~10が好ましく、2~6がより好ましい。

[0101]  $R^9$ は、水素原子、水酸基又はアルキル基である。

$R^9$ としては、化合物を製造しやすい観点からは、水素原子又はアルキル基が好ましい。アルキル基の炭素数は1~10が好ましく、1~4がより好ま

しく、メチル基がさらに好ましい。

[0102]  $Q^{b3}$ は、アルキレン基、又は、炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子若しくは2価のオルガノポリシロキサン残基を有する基である。

$Q^{b3}$ で表されるアルキレン基の炭素数は、1~30が好ましく、1~20がより好ましく、2~20がさらに好ましく、2~10であってもよく、2~6であってもよい。例えば、2、3、8、9、及び11が挙げられる。また、上記炭素数は1~10であってもよい。

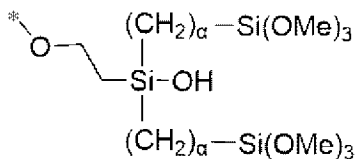
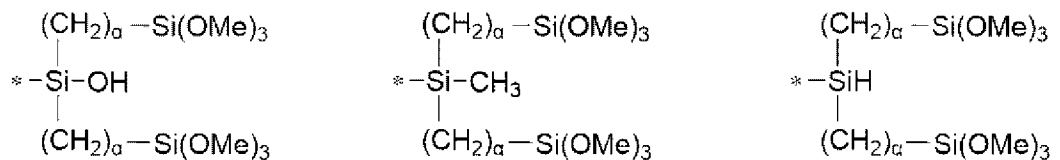
$Q^{b3}$ で表される炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子又は2価のオルガノポリシロキサン残基を有する基の炭素数は、2~20が好ましく、2~10がより好ましく、2~6がさらに好ましい。

$Q^{b3}$ は、化合物を製造しやすい点から、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、又は $-CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2-$ が好ましい。

[0103] 2個の $[-Q^{b3}-Si(R)_nL_{3-n}]$ は、同一であっても異なってもよい。

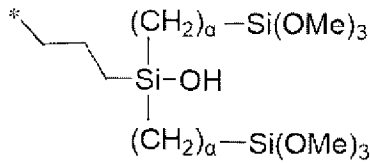
[0104] 基(3-1A-3)としては、例えば、以下の基が挙げられる。下記式中、\*は、 $L^2$ との結合位置である。

[0105] [化13]



[0106]

[化14]



[0107] 基(3-1A-4)において、 $Q^e$ は、 $-C(O)O-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、又は、 $-C(O)N(R^d)-$ である。

$R^{31}$ の定義は、上述した通りである。 $w_1$ が1又は2である場合、 $R^{31}$ は水素原子であることが好ましい。

$s_4$ は、0又は1である。

$Q^{a4}$ は、単結合、又は、エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基である。

エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基の炭素数は、1~20が好ましく、1~10がより好ましく、1~6がさらに好ましく、1~3が特に好ましい。

$t_4$ は、0又は1である。ただし、 $Q^{a4}$ が単結合の場合は0である。

$-Q^{a4}-(O)_{t_4}-$ としては、化合物を製造しやすい点から、 $s_4$ が0の場合は、単結合、 $-CH_2O-$ 、 $-CH_2OCH_2-$ 、 $-CH_2OCH_2CH_2O-$ 、 $-CH_2OCH_2CH_2OCH_2-$ 、又は $-CH_2OCH_2CH_2CH_2CH_2OCH_2-$ が好ましく(ただし、左側が $L^2$ に結合する。)、 $s_4$ が1の場合は、単結合、 $-CH_2-$ 、又は $-CH_2CH_2-$ が好ましい。

[0108]  $Q^{b4}$ は、アルキレン基であり、上記アルキレン基は $-O-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ ( $R^d$ の定義は、上述した通りである。)、2価のオルガノポリシロキサン残基、又はジアルキルシリレン基を有していてもよい。

なお、アルキレン基が $-O-$ を有する場合、炭素原子-炭素原子間に $-O-$ を有することが好ましい。また、アルキレン基が $-C(O)N(R^d)-$ 、ジアルキルシリレン基又は2価のオルガノポリシロキサン残基を有する場合、炭素原子-炭素原子間又は $(O)_{u_4}$ と結合する側の末端にこれらの基を有することが好ましい。

$Q^{b4}$ で表されるアルキレン基の炭素数は、1～30が好ましく、1～20がより好ましく、2～20がさらに好ましく、2～11であってもよく、2～6であってもよい。例えば、2、3、8、9、11が挙げられる。また、上記炭素数は1～11であってもよい。

[0109]  $u_4$ は、0又は1である。

—  $(O)_{u_4}-Q^{b4}$ —としては、化合物を製造しやすい点から、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_b-$ 、 $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{OSi}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{OSi}(\text{CH}_3)_2\text{OSi}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{PhSi}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ が好ましい（ただし、右側がSiに結合する。）。 $b$ は、4～11の整数である。

[0110]  $w_1$ は、0～2の整数であり、0又は1が好ましく、0がより好ましい。

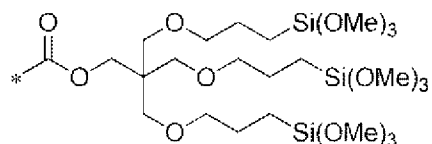
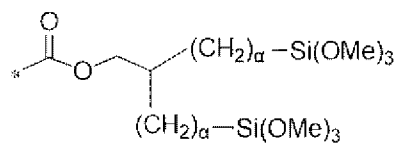
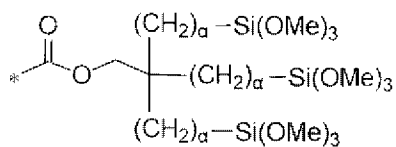
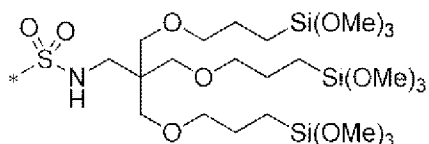
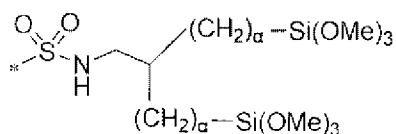
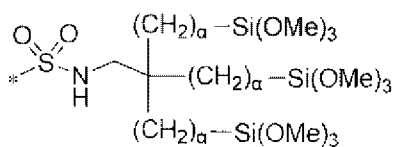
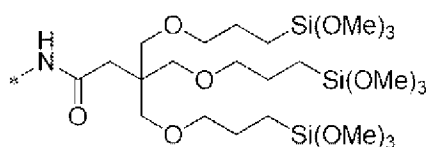
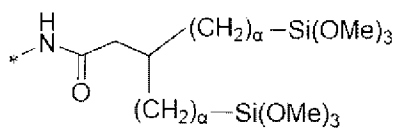
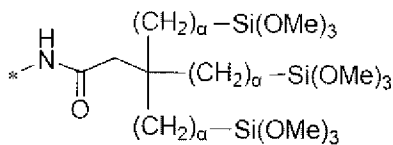
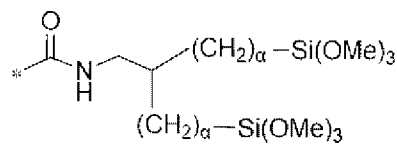
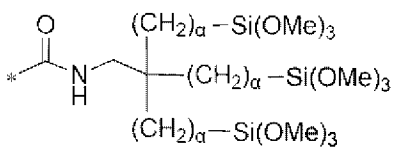
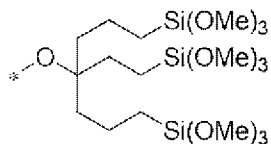
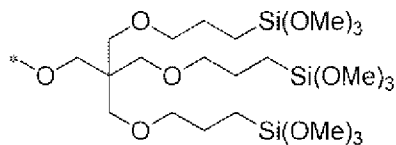
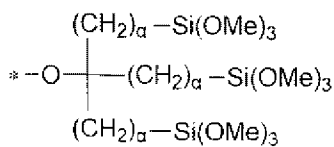
$[-(O)_{u_4}-Q^{b4}-\text{Si}(\text{R})_n\text{L}_{3-n}]$ が2個以上ある場合は、2個以上の $[-(O)_{u_4}-Q^{b4}-\text{Si}(\text{R})_n\text{L}_{3-n}]$ は、同一であっても異なってもよい。

$\text{R}^{31}$ が2個以上ある場合は、2個以上の $(-\text{R}^{31})$ は、同一であっても異なってもよい。

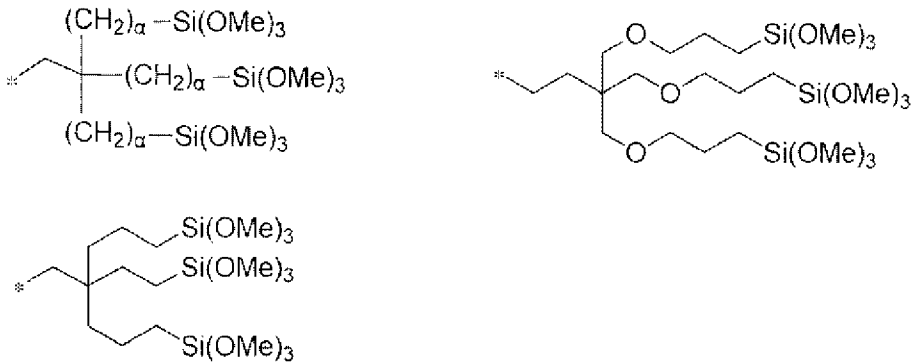
[0111] 基(3-1A-4)における $[-[Q^e]_{s_4}-Q^{a4}-(O)_{t_4}-C[-(O)_{u_4}-Q^{b4}-\text{Si}(\text{R})_n\text{L}_{3-n}]_{3-w_1}(-\text{R}^{31})_{w_1}]$ としては、例えば、以下の基が挙げられる。下記式中、\*は、 $\text{L}^2$ との結合位置である。

[0112]

[化15]



[0113] [化16]



[0114] 基(3-1A-5)において、 $Q^{a5}$ は、エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基である。

エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基の炭素数は、1~10が好ましく、2~6がより好ましい。

$Q^{a5}$ としては、化合物を製造しやすい点から、 $-OCH_2CH_2CH_2-$ 、 $-OCH_2CH_2OCH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、又は $-CH_2CH_2CH_2-$ が好ましい(ただし、右側がSiに結合する。)

[0115]  $Q^{b5}$ は、アルキレン基、又は、炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子若しくは2価のオルガノポリシロキサン残基を有する基である。

$Q^{b5}$ で表されるアルキレン基の炭素数は、1~30が好ましく、1~20がより好ましく、2~20がさらに好ましく、2~10であってもよく、2~6であってもよい。例えば、2、3、8、9、及び11が挙げられる。また、上記炭素数は1~10であってもよい。

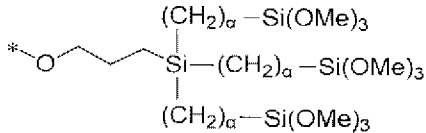
$Q^{b5}$ で表される炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子又は2価のオルガノポリシロキサン残基を有する基の炭素数は、2~20が好ましく、2~10がより好ましく、2~6がさらに好ましい。

$Q^{b5}$ としては、化合物を製造しやすい点から、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、又は、 $-CH_2CH_2OCH_2CH_2CH_2-$ が好ましい(ただし、右側が $Si(R)_nL_{3-n}$ に結合する。)

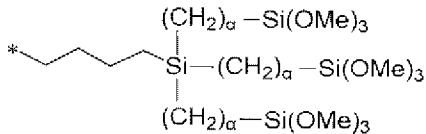
[0116] 3個の  $[-Q^{b5}-Si(R)_nL_{3-n}]$  は、同一であっても異なってもよい。

[0117] 基 (3-1A-5) としては、例えば、以下の基が挙げられる。下記式中、\*は、 $L^2$ との結合位置である。

[0118] [化17]



[0119] [化18]



[0120] 基 (3-1A-6) 中の  $Q^e$  の定義は、上述の基 (3-1A-4) において定義した通りである。

$v$  は、0又は1である。

[0121]  $Q^{a6}$  は、エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基である。

エーテル性酸素原子を有していてもよいアルキレン基の炭素数は、1~10が好ましく、2~6がより好ましい。

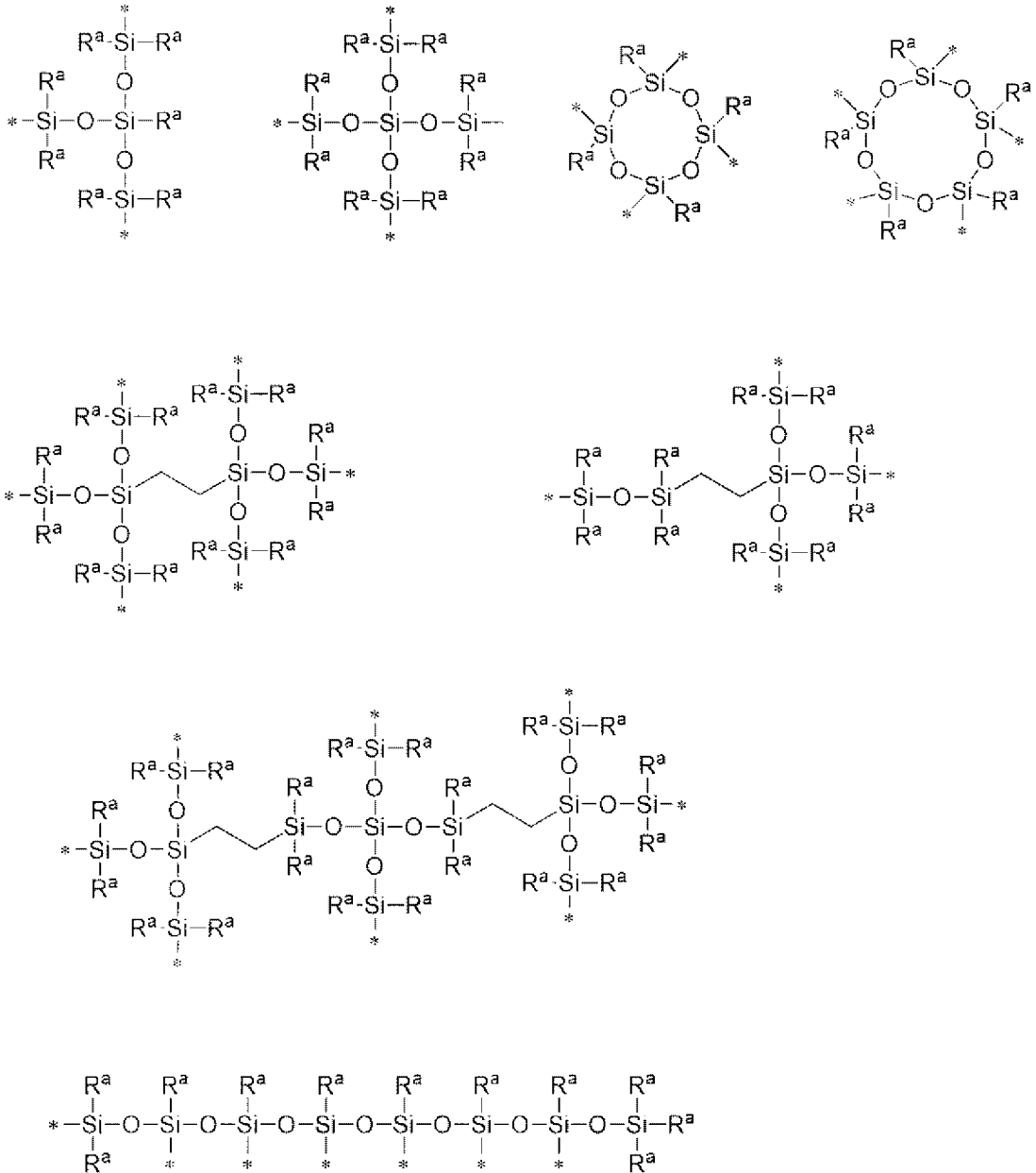
$Q^{a6}$  としては、化合物を製造しやすい点から、 $-CH_2OCH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2OCH_2CH_2OCH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、又は $-CH_2CH_2CH_2-$ が好ましい（ただし、右側が $Z^a$ に結合する。）。

[0122]  $Z^a$  は、 $(w2+1)$  価のオルガノポリシロキサン残基、又は、 $(w2+1)$  価であって、オルガノポリシロキサン残基とオルガノポリシロキサン残基との間にアルキレン基を有する基である。

$w2$  は、2~7の整数である。

$(w2+1)$  価のオルガノポリシロキサン残基、及び、 $(w2+1)$  価であって、オルガノポリシロキサン残基とオルガノポリシロキサン残基との間にアルキレン基を有する基としては、下記の基が挙げられる。ただし、下式における $R^a$ は、上述の通りである。\*は、結合位置である。

[0123] [化19]



[0124] Q<sup>b6</sup>は、アルキレン基、又は、炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子若しくは2価のオルガノポリシロキサン残基を有する基である。

Q<sup>b6</sup>で表されるアルキレン基の炭素数は、1~30が好ましく、1~20がより好ましく、2~20がさらに好ましく、2~10であってもよく、2~6であってもよい。例えば、2、3、8、9、及び11が挙げられる。また、上記炭素数は1~10であってもよい。

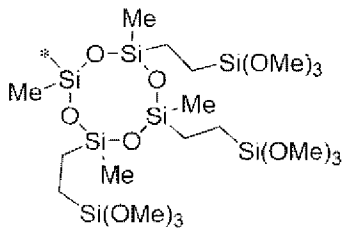
$Q^{b6}$ で表される炭素数2以上のアルキレン基の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子又は2価のオルガノポリシロキサン残基を有する基の炭素数は、2~20が好ましく、2~10がより好ましく、2~6がさらに好ましい。

$Q^{b6}$ としては、化合物を製造しやすい点から、 $-CH_2CH_2-$ 、又は $-CH_2CH_2CH_2-$ が好ましい。

w2個の $[-Q^{b6}-Si(R)_nL_{3-n}]$ は、同一であっても異なってもよい。

[0125] 基(3-1A-6)における $[-[Q^e]_v-Q^{a6}-Z^a[-Q^{b6}-Si(R)_nL_{3-n}]_{w2}]$ としては、例えば、以下の基が挙げられる。下記式中、\*は、 $L^2$ との結合位置である。

[0126] [化20]



[0127] 基(3-1A-7)において、 $Z^o$ は $(w3+w4+1)$ 価の炭化水素基である。

$w3$ は、4以上の整数である。

$w4$ は、0以上の整数である。

$Q^e$ 、 $s4$ 、 $Q^{a4}$ 、 $t4$ 、 $Q^{b4}$ 、及び $u4$ の定義及び好ましい範囲は基(3-1A-4)中の各符号の定義と同じである。

[0128]  $Z^o$ は炭化水素鎖からなってもよく、炭化水素鎖の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子を有してもよく、炭化水素鎖からなることが好ましい。

$Z^o$ の価数は5~20価が好ましく、5~10価がより好ましく、5~8価がさらに好ましく、5~6価が特に好ましい。

$Z^o$ の炭素数は3~50が好ましく、4~40がより好ましく、5~30がさらに好ましい。

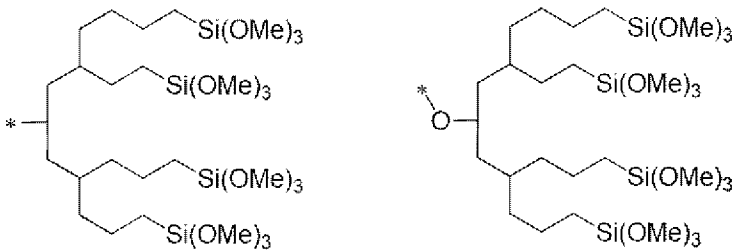
w3は、4～20が好ましく、4～16がより好ましく、4～8がさらに好ましく、4～5が特に好ましい。

w4は、0～10が好ましく、0～8がより好ましく、0～6がさらに好ましく、0～3が特に好ましく、0～1が最も好ましい。

$[-(O-Q^{b4})_{u4}-Si(R)_nL_{3-n}]$ が2個以上ある場合は、2個以上の $[-(O-Q^{b4})_{u4}-Si(R)_nL_{3-n}]$ は、同一であっても異なってもよい。

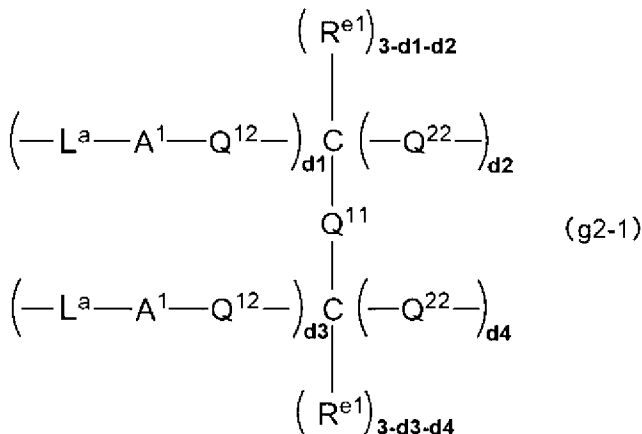
[0129] 基(3-1A-7)における $[-[Q^e]_{s4}-Q^{a4}-(O)_{t4}-Z^c[-(O-Q^{b4})_{u4}-Si(R)_nL_{3-n}]_{w3}(-OH)_{w4}]$ としては、例えば、以下の基が挙げられる。下記式中、\*は、L<sup>2</sup>との結合位置である。

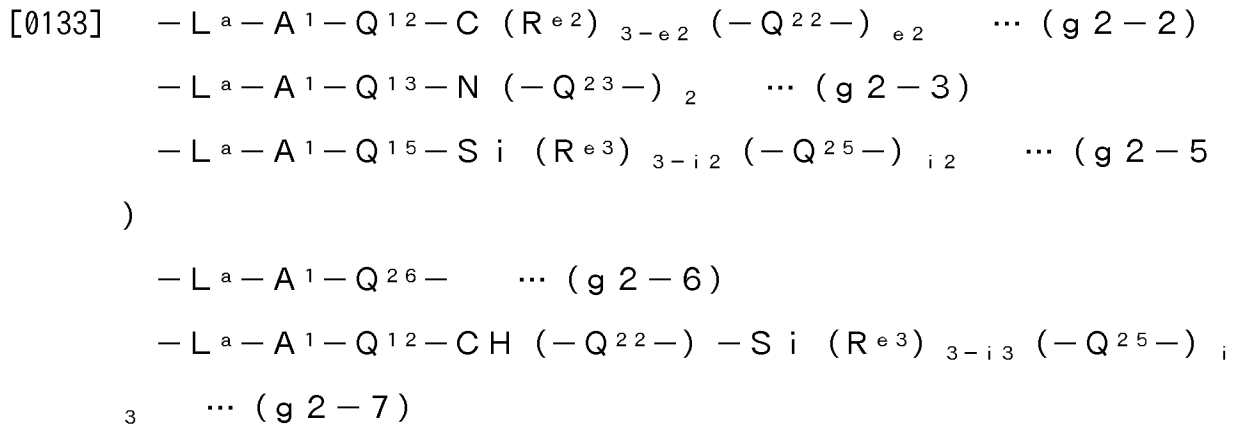
[0130] [化21]



[0131] 式(2)におけるL<sup>3</sup>は、基(g2-1) (ただし、d1+d3=1、q=d2+d4である。)、基(g2-2) (ただし、q=e2である。)、基(g2-3) (ただし、q=2である。)、基(g2-5) (ただし、q=i2である。)、基(g2-6) (ただし、q=1である。)、又は、基(g2-7) (ただし、q=i3+1である。)であってもよい。

[0132] [化22]





[0134] ただし、式 (g2-1) ~ (g2-3) 及び (g2-5) ~ (g2-7) においては、 $L^a$ 側が $L^2$ と結合し、 $Q^{22}$ 、 $Q^{23}$ 、 $Q^{25}$ 又は $Q^{26}$ 側が $[-Si(R)_nL_{3-n}]$ と結合する。

$L^a$ の定義及び好適態様は、上述した通りである。

$A^1$ は、単結合、 $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-OC(O)O-$ 、 $-NHC(O)O-$ 、 $-NHC(O)NR^6-$ 、 $-O-$ 又は $-SO_2NR^6-$ である。

$Q^{11}$ は、単結合、 $-O-$ 、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $O-$ を有する基である。

$Q^{12}$ は、単結合、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基である。

$Q^{13}$ は、単結合(ただし、 $A^1$ は $-C(O)-$ である。)、アルキレン基、炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基、又はアルキレン基のN側の末端に $-C(O)-$ を有する基である。

$Q^{15}$ は、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基である。

$Q^{22}$ は、アルキレン基、炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間

に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基、アルキレン基の $S_i$ に接続しない側の末端に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有しかつ $S_i$ に接続しない側の末端に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基であり、 $Q^{22}$ が2以上存在する場合、2以上の $Q^{22}$ は同一であっても異なってもよい。

$Q^{23}$ は、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $O-$ を有する基であり、2個の $Q^{23}$ は同一であっても異なってもよい。

$Q^{25}$ は、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基であり、 $Q^{25}$ が2以上存在する場合、2以上の $Q^{25}$ は同一であっても異なってもよい。

$Q^{26}$ は、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 又は $-O-$ を有する基である。

$Q^{22}$ 、 $Q^{23}$ 、 $Q^{25}$ 、 $Q^{26}$ がアルキレン基の場合、炭素数は1~20が好ましく、1~10がより好ましく、1~6がさらに好ましい。

$R^{e1}$ は、水素原子又はアルキル基であり、2以上の $R^{e1}$ は同一であっても異なってもよい。

$R^{e2}$ は、水素原子、水酸基、アルキル基又はアシルオキシ基である。

$R^{e3}$ は、アルキル基である。

$R^6$ は、水素原子、炭素数1~6のアルキル基又はフェニル基である。

[0135]  $d_1$ は、0又は1である。 $d_3$ は、0又は1である。また $d_1 + d_3$ は1である。

$d_2$ は0~3の整数である。 $d_4$ は0~3の整数である。また $d_2 + d_4$ は1~5の整数である。

$d_1 + d_2$  は、1～3の整数である。

$d_3 + d_4$  は、1～3の整数である。

$e_2$  は、1～3の整数であり、2又は3であることが好ましい。

$i_2$  は、1～3の整数であり、2又は3であることが好ましい。

$i_3$  は、2又は3である。

[0136]  $Q^{12}$ 、 $Q^{13}$ 、 $Q^{15}$ 、 $Q^{22}$ 、 $Q^{23}$ 、 $Q^{25}$ 及び $Q^{26}$ のアルキレン基の炭素数は、化合物を製造しやすい点、及び表面処理層の耐光性がさらに優れる点から、1～30が好ましく、1～20がより好ましく、2～20がさらに好ましく、2～10であってもよく、2～6であってもよい。例えば2、3、8、9、11が挙げられる。また、上記炭素数は1～10でもよく、1～6でもよく、1～4でもよい。ただし、炭素-炭素原子間に特定の結合を有する場合のアルキレン基の炭素数の下限値は2である。

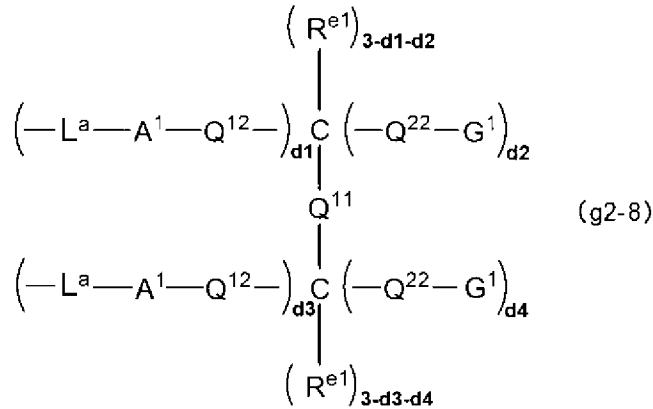
[0137]  $R^{e2}$ 又は $R^{e3}$ のアルキル基の炭素数は、化合物を製造しやすい点から、1～6が好ましく、1～3がより好ましく、1～2が特に好ましい。

$R^{e2}$ のアシルオキシ基のアルキル基部分の炭素数は、化合物を製造しやすい点から、1～6が好ましく、1～3がより好ましく、1～2がさらに好ましい。

[0138] 式(2)における $L^3$ の他の形態としては、基( $g_2-8$ ) (ただし、 $d_1 + d_3 = 1$ 、 $q = d_2 \times k_3 + d_4 \times k_3$ である。)、基( $g_2-9$ ) (ただし、 $q = e_2 \times k_3$ である。)、基( $g_2-10$ ) (ただし、 $q = 2 \times k_3$ である。)、基( $g_2-12$ ) (ただし、 $q = i_2 \times k_3$ である。)、基( $g_2-13$ ) (ただし、 $q = k_3$ である。)、又は基( $g_2-14$ ) (ただし、 $q = i_3 \times k_3 + k_3$ である。)が挙げられる。

[0139]

[化23]



[0140]  $-L^a-A^1-Q^{12}-C(R^{e2})_{3-e2}(-Q^{22}-G^1)_{e2} \dots (g2-9)$   
 )

$-L^a-A^1-Q^{13}-N(-Q^{23}-G^1)_2 \dots (g2-10)$

$-L^a-A^1-Q^{15}-Si(R^{e3})_{3-i2}(-Q^{25}-G^1)_{i2} \dots (g2-12)$

$-L^a-A^1-Q^{26}-G^1 \dots (g2-13)$

$-L^a-A^1-Q^{12}-CH(-Q^{22}-G^1)-Si(R^{e3})_{3-i3}(-Q^{25}-G^1)_{i3} \dots (g2-14)$

[0141] ただし、式 (g2-8) ~ (g2-10) 及び (g2-12) ~ (g2-14) においては、 $L^a$ 側が  $L^2$ と結合し、 $G^1$ 側が  $[-Si(R)_nL_{3-n}]$ と結合する。

[0142]  $G^1$ は、下記基 (g3) であり、 $A$ が有する2以上の $G^1$ は同一であっても異なってもよい。 $G^1$ 以外の符号は、式 (g2-1) ~ (g2-3) 及び (g2-5) ~ (g2-7) における符号と同じである。

$-Si(R^8)_{3-k3}(-Q^3-)_{k3} \dots (g3)$

ただし、基 (g3) においては、 $Si$ 側が  $Q^{22}$ 、 $Q^{23}$ 、 $Q^{25}$ 又は $Q^{26}$ に接続し、 $Q^3$ 側が  $[-Si(R)_nL_{3-n}]$ に接続する。 $R^8$ は、アルキル基である。 $Q^3$ は、アルキレン基、炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$ 若しくは  $-O-$ を有する基、又は  $(OSi(R^9)_2)_p-O-$ であり、2以上の $Q^3$ は同一であっても異

なっているもよい。k 3は、2又は3である。R<sup>6</sup>は、水素原子、炭素数1～6のアルキル基又はフェニル基である。R<sup>9</sup>は、アルキル基、フェニル基又はアルコキシ基であり、2個のR<sup>9</sup>は同一であっても異なっているもよい。pは、0～5の整数であり、pが2以上の場合、2以上の(OSi(R<sup>9</sup>)<sub>2</sub>)は同一であっても異なっているもよい。

[0143] Q<sup>3</sup>のアルキレン基の炭素数は、化合物を製造しやすい点、並びに、表面処理層の耐光性がさらに優れる点から、1～30が好ましく、1～20がより好ましく、2～20がさらに好ましく、2～10であってもよく、2～6であってもよい。例えば2、3、8、9、11が挙げられる。また、上記炭素数は1～10であってもよく、1～6であってもよく、1～4であってもよい。ただし、炭素-炭素原子間に特定の結合を有する場合のアルキレン基の炭素数の下限値は2である。

R<sup>8</sup>のアルキル基の炭素数は、化合物を製造しやすい点から、1～6が好ましく、1～3がより好ましく、1～2がさらに好ましい。

R<sup>9</sup>のアルキル基の炭素数は、化合物を製造しやすい点から、1～6が好ましく、1～3がより好ましく、1～2がさらに好ましい。

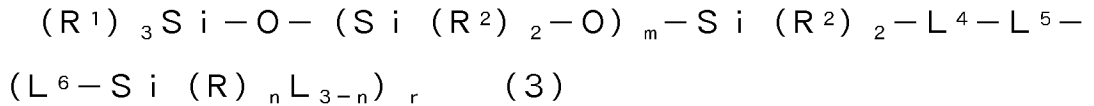
R<sup>9</sup>のアルコキシ基の炭素数は、化合物の保存安定性に優れる点から、1～6が好ましく、1～3がより好ましく、1～2がさらに好ましい。

pは、0又は1が好ましい。

[0144] 化合物(2)としては、L<sup>1</sup>はアルキレン基、L<sup>2</sup>は特定環構造、L<sup>3</sup>はアルキレン基である化合物であってもよい。L<sup>1</sup>及びL<sup>3</sup>中のアルキレン基は、直鎖状でも分岐状でもよいが、直鎖状が好ましい。L<sup>1</sup>及びL<sup>3</sup>中のアルキレン基の炭素数は、1～30であることが好ましく、1～25、1～20、1～10、5～10であってもよい。例えば、L<sup>1</sup>及びL<sup>3</sup>が炭素数1～10若しくは5～10のアルキレン基であり、L<sup>2</sup>は特定環構造の組み合わせであってもよい。なお、以上の好ましい範囲及び好ましい組み合わせである化合物は、qが1であってもよい。

[0145] 式(1-1)で表される化合物は、式(3)で表される化合物であってよ

い。



[0146] 式(3)における $R^1$ 、 $R^2$ 、 $m$ 、 $R$ 、 $L$ 及び $n$ の定義は、式(2)における $R^1$ 、 $R^2$ 、 $m$ 、 $R$ 、 $L$ 及び $n$ と同義であり、好適態様も同じである。

[0147] 式(3)中、 $L^4$ は、単結合又は2価の連結基である。

$L^4$ で表される2価の連結基としては、上記式(2)における $L^1$ で表される2価の連結基と同義であり、好適態様も同じである。

[0148] 中でも、 $L^4$ は、2価のアルキレン基、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-Si(R^a)_2-$ 、 $-OC(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)O-$ 、 $-OC(O)N(R^d)-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)SO_2-$ 、 $-C(O)-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-SO_2N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又はアルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基が好ましく、アルキレン基、 $-OC(O)-$ 、 $-C(O)-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又は、アルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基がより好ましく、 $-C(O)-$ を有するアルキレン基、又はアルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$

ーアルキレン基がさらに好ましい。

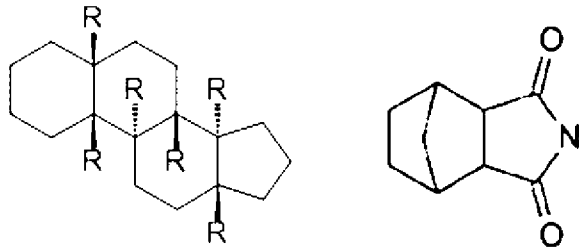
[0149] 式(3)中、 $L^5$ は、 $(r+1)$ 価のヘテロ原子を有していてもよい脂環基である。

ヘテロ原子を有していてもよい脂環基は、上述した特定環構造からなる基であり、好適態様も同じである。

中でも、 $L^5$ は、シクロペンタン環、ピロリジン環、シクロヘキサン環、アダマンタン環、ピペリジン環、及び、下記の縮合環からなる群より選択される環を含むことが好ましく、アダマンタン環を含むことがより好ましい。

Rの定義は、上述した通りである。

[0150] [化24]



[0151] 上記脂環基の環構成原子の1個が、 $L^4$ 又は $(L^6-Si(R)_nL_{3-n})$ に結合する結合手を2つ有する場合、その1個の環構成原子に $L^4$ と $(-L^6-Si(R)_nL_{3-n})$ とが結合していてもよく、2つの $(-L^6-Si(R)_nL_{3-n})$ が結合していてもよい。 $L^4$ と $(-L^6-Si(R)_nL_{3-n})$ とは別の環構成原子に結合していることが好ましい。 $r$ が2以上の整数である場合、 $r$ 個の $(-L^6-Si(R)_nL_{3-n})$ はそれぞれ別個の環構成原子に結合してもよく、そのうちの2個は1個の環構成炭素原子に結合してもよく、さらに2個の $(-L^6-Si(R)_nL_{3-n})$ が結合した環構成炭素原子は2個以上存在してもよい。

[0152] 上記脂環基の環構成原子において、環を構成する結合手、及び、 $L^4$ 又は $L^6$ に結合する結合手以外に残余の結合手がある場合、残余の結合手は、水素原子又は置換基に結合している。該置換基としては、例えば、ハロゲン原子、炭素-炭素原子間にエーテル性酸素原子を含んでいてもよいアルキル基、アルケニル基、アリル基、アルコキシ基、及びオキソ基(=O)が挙げられる

。残余の結合手は、水素原子又はアルキル基に結合していることが好ましく、水素原子に結合していることがより好ましい。アルキル基の炭素数は、1～5が好ましく、1～3がより好ましく、1がさらに好ましい。

[0153] 式(3)中、 $L^6$ は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基である。

$L^6$ で表される2価の連結基としては、上記式(2)における $L^1$ で表される2価の連結基と同義であり、好適態様も同じである。

$L^6$ が2個以上ある場合は、2個以上の $L^6$ は、同一であっても異なってもよい。

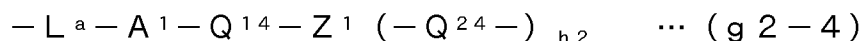
[0154] 中でも、 $L^6$ は、エーテル性酸素原子を有してもよいアルキレン基であることが好ましい。アルキレン基の炭素数は、1～30が好ましく、1～20がより好ましく、2～20がさらに好ましく、2～10であってもよく、2～6であってもよく、2～5であってもよい。例えば、2、3、8、9、及び11が挙げられる。また、上記炭素数は1～10であってもよい。

[0155] 式(3)中、 $r$ は、1以上の整数である。

$r$ は、1～15の整数が好ましく、1～6の整数がより好ましく、2～4の整数がさらに好ましく、2又は3の整数が特に好ましい。

$r$ が2以上の整数である場合、複数の $[-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ は同一であってもよく、互いに異なってもよい。原料の入手容易性、及び、化合物の製造容易性の観点から、複数の $[-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ は同じであることが好ましい。

[0156] 式(3)における $-L^4-L^5-(L^6-Si(R)_nL_{3-n})_r$ から $[-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ を取り除いてなる基は、以下の基(g2-4)(ただし、 $r = h2$ である。)であってもよい。



$L^a$ の定義は、式(3-1A-1)中の $L^a$ と同義であり、好適態様も同じである。

$A^1$ は、単結合、 $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-OC(O)O-$ 、 $-NHC(O)O-$ 、 $-NHC(O)NR^6-$ 、 $-O-$ 又は $SO_2NR^6-$ であ

る。

Q<sup>14</sup>は、Q<sup>14</sup>が結合するZ<sup>1</sup>における原子が炭素原子の場合、単結合、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に-C(O)NR<sup>6</sup>-、-C(O)-、-NR<sup>6</sup>-又はO-を有する基であり、Q<sup>14</sup>が結合するZ<sup>1</sup>における原子が窒素原子の場合、単結合(ただし、A<sup>1</sup>は-C(O)-である。)、アルキレン基、炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に-C(O)NR<sup>6</sup>-、-C(O)-、-NR<sup>6</sup>-又は-O-を有する基、又はアルキレン基のN側の末端に-C(O)-を有する基である。

Q<sup>24</sup>は、Q<sup>24</sup>が結合するZ<sup>1</sup>における原子が炭素原子の場合、アルキレン基、炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に-C(O)NR<sup>6</sup>-、-C(O)-、-NR<sup>6</sup>-又は-O-を有する基、アルキレン基のS<sub>i</sub>に接続しない側の末端に-C(O)NR<sup>6</sup>-、-C(O)-、-NR<sup>6</sup>-又は-O-を有する基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に-C(O)NR<sup>6</sup>-、-C(O)-、-NR<sup>6</sup>-又は-O-を有しかつS<sub>i</sub>に接続しない側の末端に-C(O)NR<sup>6</sup>-、-C(O)-、-NR<sup>6</sup>-又は-O-を有する基である。Q<sup>24</sup>が結合するZ<sup>1</sup>における原子が窒素原子の場合、アルキレン基、又は炭素数2以上のアルキレン基の炭素-炭素原子間に-C(O)NR<sup>6</sup>-、-C(O)-、-NR<sup>6</sup>-又はO-を有する基である。Q<sup>24</sup>が2以上存在する場合、2以上のQ<sup>24</sup>は同一であっても異なってもよい。

R<sup>6</sup>は、水素原子、炭素数1~6のアルキル基又はフェニル基である。

[0157] Q<sup>14</sup>及びQ<sup>24</sup>のアルキレン基の炭素数は、化合物を製造しやすい点、及び表面処理層の耐光性がさらに優れる点から、1~30が好ましく、1~20がより好ましく、2~20がさらに好ましく、2~10であってもよく、2~6であってもよい。例えば2、3、8、9、11が挙げられる。また、上記炭素数は1~10でもよく、1~6でもよく、1~4でもよい。ただし、炭素-炭素原子間に特定の結合を有する場合のアルキレン基の炭素数の下限値は2である。

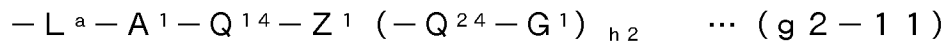
[0158] Z<sup>1</sup>は、Q<sup>14</sup>が直接結合する炭素原子又は窒素原子を有し、かつ、Q<sup>24</sup>が直

接結合する炭素原子又は窒素原子を有する(1+h2)価の脂環基である。

Z<sup>1</sup>で表される上記脂環基としては、上述した特定環構造が挙げられ、好適態様も同様である。なお、Z<sup>1</sup>で表される脂環基にはQ<sup>14</sup>やQ<sup>24</sup>が直接結合するため、例えば、環構造にアルキレン基が連結して、そのアルキレン基にQ<sup>14</sup>やQ<sup>24</sup>が連結することはない。

[0159] h2は、1以上の整数であり、化合物を製造しやすい点、並びに、表面処理層の耐光性がさらに優れる点から、2~6が好ましく、2~4がより好ましく、2又は3がさらに好ましい。

[0160] 式(3)における $-L^4-L^5-(L^6-Si(R)_nL_{3-n})_r$ から $[-Si(R)_nL_{3-n}]$ を取り除いてなる基の他の形態としては、基(g2-11)(ただし、 $r=h2 \times k3$ である。)が挙げられる。

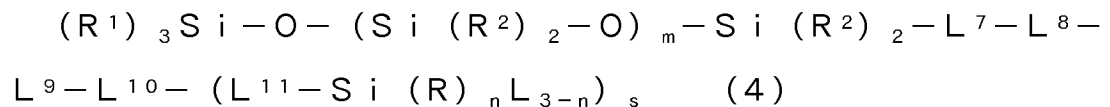


ただし、式(g2-11)においては、L<sup>4</sup>側が $[Si(R^2)_2-O]$ と結合し、G<sup>1</sup>側が $[-Si(R)_nL_{3-n}]$ と結合する。

G<sup>1</sup>の定義は、上記基(g2-9)におけるG<sup>1</sup>と同義であり、好適態様も同じである。

L<sup>a</sup>、A<sup>1</sup>、Q<sup>14</sup>、Z<sup>1</sup>及びQ<sup>24</sup>の定義及び好適態様は、上述した通りである。

[0161] 式(1-1)で表される化合物は、式(4)で表される化合物であってよい。



[0162] 式(4)におけるR<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、m、R、L及びnの定義は、式(2)におけるR<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、m、R、L及びnと同義であり、好適態様も同じである。

[0163] 式(4)中、L<sup>7</sup>及びL<sup>9</sup>は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基である。

L<sup>7</sup>及びL<sup>9</sup>で表される2価の連結基としては、上記式(2)におけるL<sup>1</sup>で表される2価の連結基と同義であり、好適態様も同じである。

[0164] 中でも、 $L^7$ は、単結合、アルキレン基、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-Si(R^a)_2-$ 、 $-OC(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)O-$ 、 $-OC(O)N(R^d)-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)SO_2-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-SO_2N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又はアルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基が好ましく、単結合、アルキレン基、 $-OC(O)-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又は、アルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基がより好ましく、単結合、アルキレン基、又はエーテル性酸素原子を有するアルキレン基がさらに好ましい。

[0165] また、 $L^9$ は、単結合、アルキレン基、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-N(R^d)-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-Si(R^a)_2-$ 、 $-OC(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-C(O)S-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)-$ 、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)C(O)O-$ 、 $-OC(O)N(R^d)-$ 、 $-SO_2N(R^d)-$ 、 $-N(R^d)SO_2-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)-$ を有するア

ルキレン基、 $-OC(O)-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-SO_2N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又はアルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基が好ましく、単結合、アルキレン基、 $-C(O)-$ 、 $-OC(O)-$ 、 $-C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-OC(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、エーテル性酸素原子を有するアルキレン基、 $-S-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)O-$ を有するアルキレン基、 $-C(O)S-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)-$ を有するアルキレン基、 $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$ を有するアルキレン基、又は、アルキレン基 $-C(O)N(R^d)-$ アルキレン基がより好ましく、単結合、 $-C(O)-$ 、又は $-C(O)-$ を有するアルキレン基がさらに好ましい。

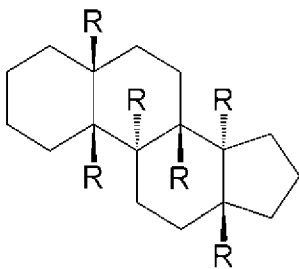
[0166] 式(4)中、 $L^8$ は、ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基である。

ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基は、上述した特定環構造からなる基であり、好適態様も同じである。

中でも、 $L^8$ は、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、アダマンタン環、ピペリジン環、及び、下記の縮合環からなる群より選択される環を含むことが好ましく、アダマンタン環を含むことがより好ましい。

$R$ の定義は、上述した通りである。

[0167] [化25]



[0168]  $L^8$ が有する特定環構造を構成する原子の環を構成しない結合手は、 $L^7$ 又は $L^9$ に結合する結合手である。残余の結合手がある場合、残余の結合手は、水素原子又は置換基に結合している。該置換基としては、例えば、ハロゲン

原子、アルキル基（炭素-炭素原子間にエーテル性酸素原子を含んでいてもよい。）、アルケニル基、アリル基、アルコキシ基、及びオキソ基（=O）が挙げられる。残余の結合手は、水素原子又はアルキル基に結合していることが好ましく、水素原子に結合していることがより好ましい。アルキル基の炭素数は、1~5が好ましく、1~3がより好ましく、1がさらに好ましい。

[0169] 式(4)中、 $L^{10}$ は、 $(s+1)$ 価のヘテロ原子を有していてもよい脂環基である。

ヘテロ原子を有していてもよい脂環基は、上述した特定環構造からなる基であり、好適態様も同じである。

中でも、 $L^{10}$ は、シクロペンタン環、ピロリジン環、シクロヘキサン環、アダマンタン環、ピペリジン環、及び、下記の縮合環からなる群より選択される環を含むことが好ましく、アダマンタン環を含むことがより好ましい。

[0170] 上記脂環基の環構成原子の1個が、 $L^9$ 又は $(L^{11}-Si(R)_nL_{3-n})$ に結合する結合手を2つ有する場合、その1個の環構成原子に $L^9$ と $(-L^{11}-Si(R)_nL_{3-n})$ とが結合していてもよく、2つの $(-L^{11}-Si(R)_nL_{3-n})$ が結合していてもよい。 $L^9$ と $(-L^{11}-Si(R)_nL_{3-n})$ とは別の環構成原子に結合していることが好ましい。 $s$ が2以上の整数である場合、 $s$ 個の $(-L^{11}-Si(R)_nL_{3-n})$ はそれぞれ別個の環構成原子に結合してもよく、そのうちの2個は1個の環構成炭素原子に結合してもよく、さらに2個の $(-L^{11}-Si(R)_nL_{3-n})$ が結合した環構成炭素原子は2個以上存在してもよい。

[0171] 上記脂環基の環構成原子において、環を構成する結合手、及び、 $L^9$ 又は $L^{11}$ に結合する結合手以外に残余の結合手がある場合、残余の結合手は、水素原子又は置換基に結合している。該置換基としては、例えば、ハロゲン原子、アルキル基（炭素-炭素原子間にエーテル性酸素原子を含んでいてもよい。）、アルケニル基、アリル基、アルコキシ基、及びオキソ基（=O）が挙げられる。残余の結合手は、水素原子又はアルキル基に結合していることが

好ましく、水素原子に結合していることがより好ましい。アルキル基の炭素数は、1～5が好ましく、1～3がより好ましく、1がさらに好ましい。

[0172] 式(4)中、 $L^{11}$ は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基である。

$L^{11}$ で表される2価の連結基としては、上記式(2)における $L^1$ で表される2価の連結基と同義であり、好適態様も同じである。

$L^{11}$ が2個以上ある場合は、2個以上の $L^{11}$ は、同一であっても異なってもよい。

[0173] 中でも、 $L^{11}$ は、単結合、又はエーテル性酸素原子を有してもよいアルキレン基であることが好ましい。アルキレン基の炭素数は、1～30が好ましく、1～20がより好ましく、2～20がさらに好ましく、2～10であってもよく、2～6であってもよく、2～5であってもよい。例えば、2、3、8、9、及び11が挙げられる。また、上記炭素数は1～10であってもよい。

[0174] 式(4)中、 $s$ は、1以上の整数である。

$s$ は、1～15の整数が好ましく、1～6の整数がより好ましく、1～4の整数がさらに好ましく、1～3の整数が特に好ましい。

$s$ が2以上の整数である場合、複数の $[-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ は同一であってもよく、互いに異なってもよい。原料の入手容易性、及び、化合物の製造容易性の観点から、複数の $[-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ は同じであることが好ましい。

[0175] 式(4)における $-L^9-L^{10}-[L^{11}-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ から $[-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ を取り除いてなる基としては、上述した基(g2-4)(ただし、 $s=h2$ である。)であってもよい。

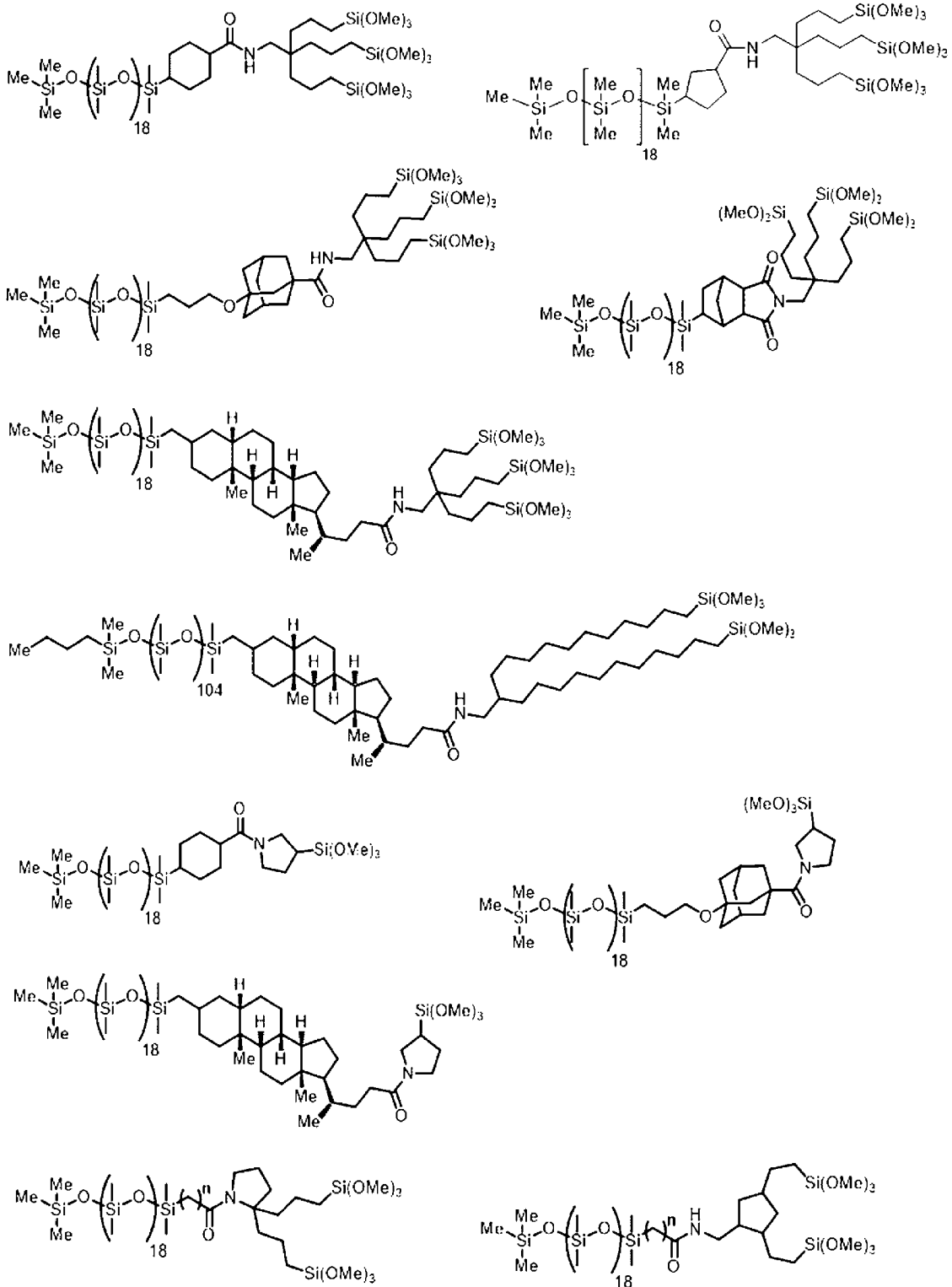
式(4)における $-L^9-L^{10}-[L^{11}-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ から $[-Si(R)_nL_{3-n}]_r$ を取り除いてなる基の他の形態としては、上述した基(g2-11)(ただし、 $s=h2 \times k3$ である。)が挙げられる。

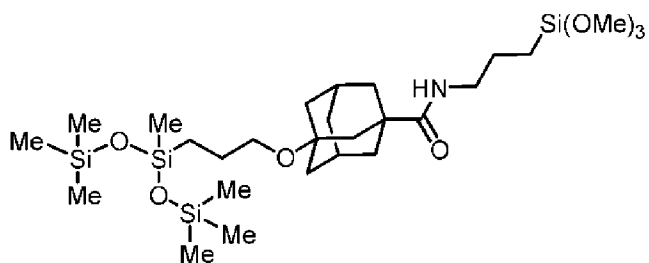
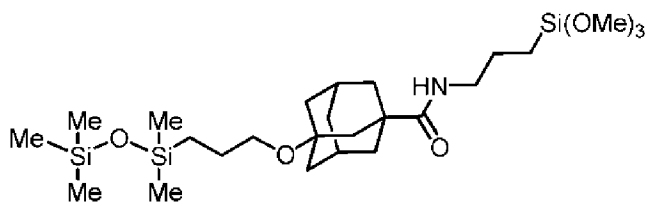
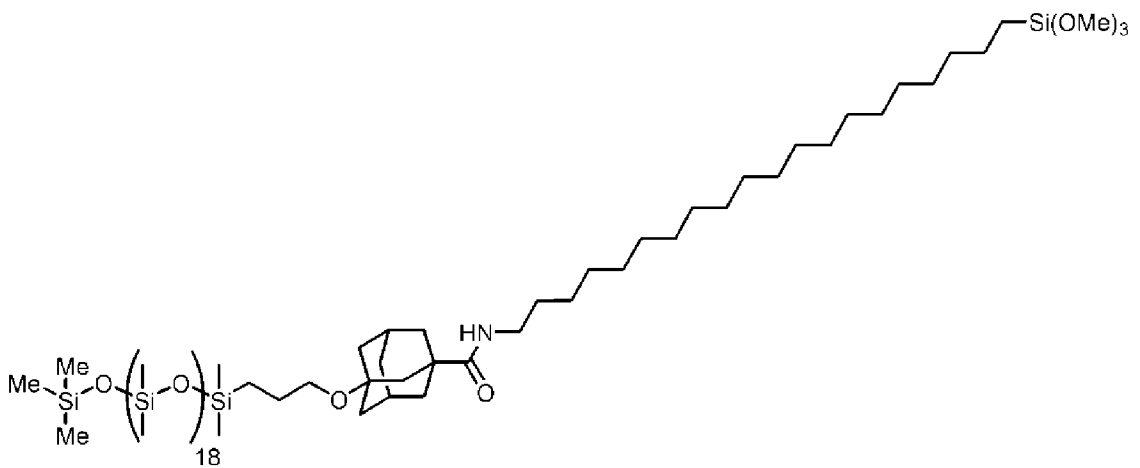
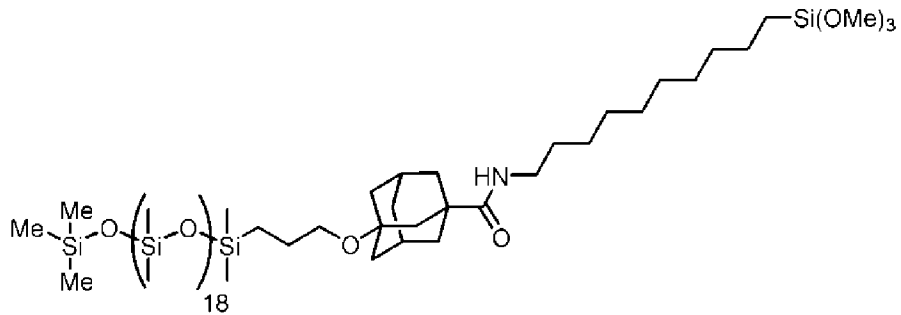
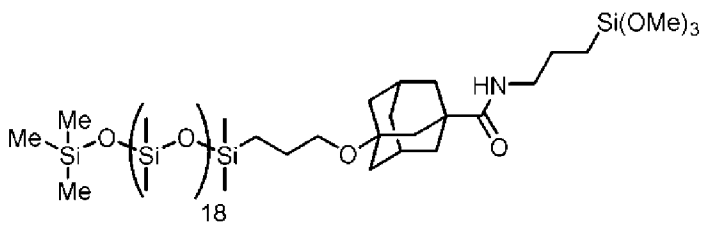
[0176] 式(1-1)で表される化合物としては、例えば、下式の化合物が挙げられる。下式の化合物は、工業的に製造しやすく、取扱いやすく、表面処理層

の耐光性がさらに優れる点から好ましい。下式の化合物における  $R^t$  は、上述した式 (1-1) における  $[T-O-(Si(R^2)_2-O)_m-Si(R^2)_2]$  と同様であり、好ましい形態も同様である。また、下式の化合物における  $n$  は、1~30であり、1~20が好ましく、1~12がより好ましい。

[0177]

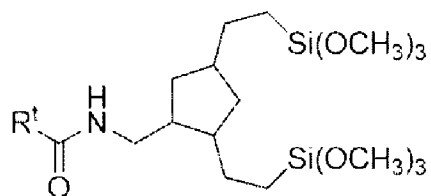
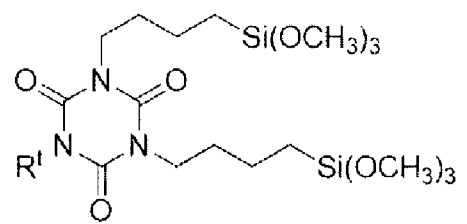
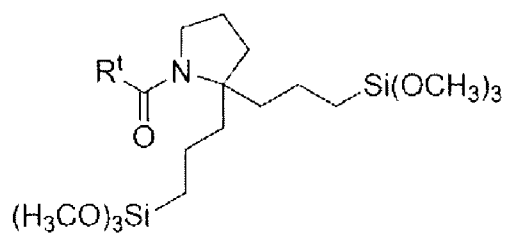
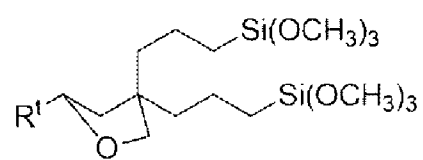
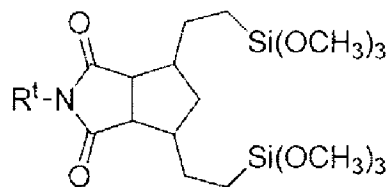
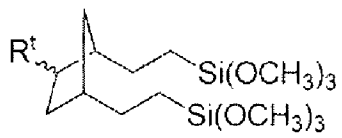
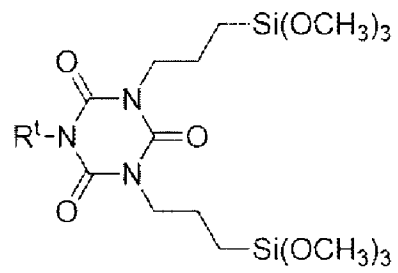
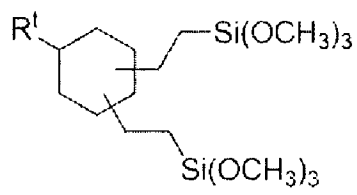
[化26]





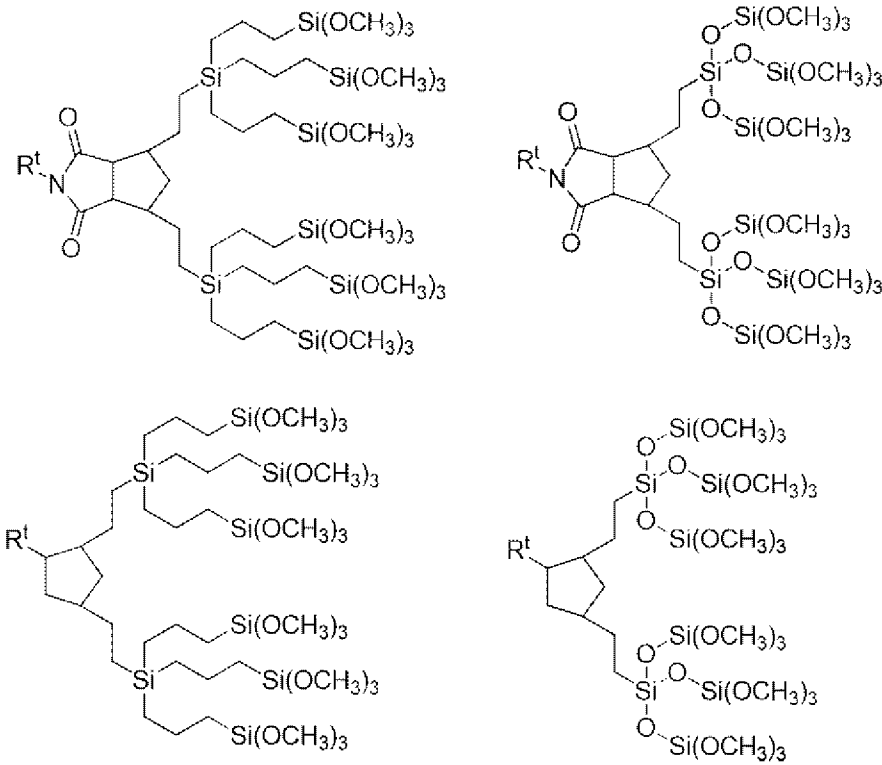
[0178]

[化27]



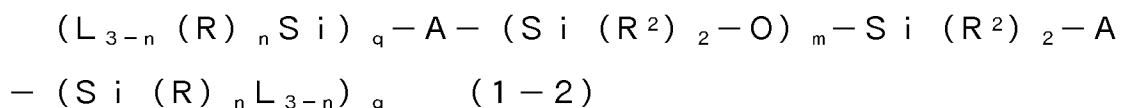
[0179]

[化28]



[0180] また、化合物（1-1）としては、 $L^1$ はアルキレン基、 $L^2$ は特定環構造、 $L^3$ はアルキレン基である化合物であってもよい。 $L^1$ 及び $L^3$ のアルキレン基は、直鎖状でも分岐状でもよいが、直鎖状が好ましい。 $L^1$ 及び $L^3$ 中のアルキレン基の炭素数は、1～30であることが好ましく、1～25、1～20、1～10、5～10であってもよい。例えば、 $L^1$ 及び $L^3$ が炭素数1～10若しくは5～10のアルキレン基であり、 $L^2$ は特定環構造の組み合わせであってもよい。なお、以上の好ましい範囲及び好ましい組み合わせである化合物は、 $q$ が1であってもよい。

[0181] <式（1-2）で表される化合物>



式（1-2）中、

$R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

$A$ は、それぞれ独立に、ヘテロ原子を有してもよい脂環構造を有する

( $q + 1$ ) 価の連結基であり、

Rは、それぞれ独立に、炭化水素基であり、

Lは、それぞれ独立に、加水分解性基、加水分解性基を有する基、又は水酸基であり、

mは、0以上の数であり、

nは、それぞれ独立に、0～2の整数であり、

qは、それぞれ独立に、1以上の整数である。

[0182] 式(1-2)における各基は、それぞれ式(1-1)における各基と同義であり、好適態様も同じである。

[0183] また、化合物(1-2)としては、 $L^1$ はアルキレン基、 $L^2$ は特定環構造、 $L^3$ はアルキレン基である化合物であってもよい。 $L^1$ 及び $L^3$ のアルキレン基は、直鎖状でも分岐状でもよいが、直鎖状が好ましい。 $L^1$ 及び $L^3$ 中のアルキレン基の炭素数は、1～30であることが好ましく、1～25、1～20、1～10、5～10であってもよい。例えば、 $L^1$ 及び $L^3$ が炭素数1～10若しくは5～10のアルキレン基であり、 $L^2$ は特定環構造の組み合わせであってもよい。なお、以上の好ましい範囲及び好ましい組み合わせである化合物は、qが1であってもよい。

[0184] 本開示の化合物の数平均分子量( $M_n$ )は、500～20,000であることが好ましく、600～18,000であることがより好ましく、700～15,000であることがさらに好ましい。

$M_n$ が500以上であれば、表面処理層の耐光性がより優れる。 $M_n$ が20,000以下であれば、粘性を適切な範囲内に調節しやすく、また溶解性が向上するので、成膜時のハンドリング性が優れる。

[0185] [組成物]

本開示の組成物は、本開示の化合物を含んでいればよく、本開示の化合物以外の成分は特に限定されない。

つまり、本開示の組成物は、式(1-1)で表される化合物及び式(1-2)で表される化合物の少なくとも一方を含んでいればよい。なお、本開示

の組成物は、式（1-1）で表される化合物及び式（1-2）で表される化合物の両方を含んでもよい。

本開示の組成物は、本開示の化合物と、液状媒体と、を含むことが好ましい。液状媒体を含む場合、本開示の組成物は、液状であればよく、溶液であってもよく、分散液であってもよい。

本開示の組成物は、本開示の化合物を含んでいればよく、本開示の化合物の製造工程で生成した副生物等の不純物を含んでもよい。

[0186] 本開示の化合物の含有量は、本開示の組成物の全量に対して、0.001～40質量%が好ましく、0.01～20質量%がより好ましく、0.1～10質量%がさらに好ましい。ウェットコーティング法に使用する本開示の組成物の場合には、本開示の化合物の含有量は、本開示の組成物の全量に対して、0.01～10質量%が好ましく、0.02～5質量%がより好ましく、0.03～3質量%がさらに好ましく、0.05～2質量%が特に好ましい。

本開示の組成物に含まれる液状媒体は1種のみであってもよく、2種以上であってもよい。

[0187] 液状媒体としては、有機溶媒が好ましい。

[0188] 有機溶媒としては、水素原子及び炭素原子のみからなる化合物、並びに、水素原子、炭素原子及び酸素原子のみからなる化合物が挙げられ、具体的には、炭化水素系有機溶媒、ケトン系有機溶媒、エーテル系有機溶媒、エステル系有機溶媒、グリコール系有機溶媒、及びアルコール系有機溶媒が挙げられる。中でも、有機溶媒は、エステル系有機溶媒が好ましい。

[0189] 炭化水素系有機溶媒の具体例としては、ペンタン、ヘキサン、ヘプタン、オクタン、ヘキサデカン、イソヘキサン、イソオクタン、イソノナン、シクロヘプタン、シクロヘキサン、ビスシクロヘキシル、ベンゼン、トルエン、エチルベンゼン、*o*-キシレン、*m*-キシレン、*p*-キシレン、*o*-ジエチルベンゼン、*m*-ジエチルベンゼン、*p*-ジエチルベンゼン、*n*-ブチルベンゼン、*sec*-ブチルベンゼン、及び*tert*-ブチルベンゼンが挙げられ

る。

ケトン系有機溶媒の具体例としては、アセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、ジイソブチルケトン、シクロヘキサノン、2-ヘプタノン、4-ヘプタノン、3, 5, 5-トリメチル-2-シクロヘキセン-1-オン、3, 3, 5-トリメチルシクロヘキサノン、及びイソホロンが挙げられる。

エーテル系有機溶媒の具体例としては、ジエチルエーテル、シクロペンチルメチルエーテル、テトラヒドロフラン、及び1, 4-ジオキサンが挙げられる。

エステル系有機溶媒の具体例としては、酢酸メチル、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、酢酸tert-ブチル、酢酸アミル、酢酸イソアミル、3-エトキシプロピオン酸エチル、乳酸エチルエチレングリコールモノブチルエーテルアセテート、ジエチレングリコールモノブチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート、ジプロピレングリコールメチルエーテルアセテート、3-メトキシ-3-メチルブチルアセテート、3-メトキシブチルアセテート、プロピレングリコールモノメチルアセテート、プロピレングリコールジメチルアセテート、エチレングリコールモノエチルエーテルアセテート、エチレングリコールモノメチルエーテルアセテート、ジエチレングリコールモノエチルエーテルアセテート、シクロヘキサノールアセテート、プロピレングリコールジアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルプロピオネート、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノブチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノプロピルエーテルアセテート、プロピレングリコールジアセテート、ジプロピレングリコールメチルエーテルアセテート、1, 3-ブチレングリコールジアセテート、1, 4-ブタンジオールジアセテート、1, 3-ブチレングリコールジアセテート、1, 6-ヘキサジオールジアセテート、 $\gamma$ -ブチロラクトン、トリア

セチン、及び2, 2, 4-トリメチル-1, 3-ペンタンジオールモノイソブチレートが挙げられる。

グリコール系有機溶媒の具体例としては、エチレングリコール、エチレングリコールモノブチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、トリエチレングリコールモノブチルエーテル、テトラエチレングリコールモノブチルエーテル、エチレングリコールモノヘキシルエーテル、ジエチレングリコールモノヘキシルエーテル、エチレングリコールモノ-2-エチルヘキシルエーテル、ジエチレングリコールモノ-2-エチルヘキシルエーテル、プロピレングリコールモノメチルエーテル、プロピレングリコールモノエチルエーテル、プロピレングリコールモノブチルエーテル、プロピレングリコールモノプロピルエーテル、エチレングリコールモノイソプロピルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノtert-ブチルエーテル、エチレングリコールモノプロピルエーテル、エチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールモノイソプロピルエーテル、ジエチレングリコールモノメチルエーテル、ジプロピレングリコールモノエチルエーテル、ジプロピレングリコールモノブチルエーテル、ジプロピレングリコールモノプロピルエーテル、ジプロピレングリコールモノメチルエーテル、トリプロピレングリコールモノブチルエーテルトリプロピレングリコールモノメチルエーテル、プロピレングリコールモノフェニルエーテル、1, 3-ブチレングリコール、プロピレングリコールn-プロピルエーテル、プロピレングリコールn-ブチルエーテル、ジエチレングリコールモノエチルエーテル、ジプロピレングリコールn-プロピルエーテル、ジプロピレングリコールn-ブチルエーテル、トリプロピレングリコールメチルエーテル、トリプロピレングリコールn-ブチルエーテル、エチレングリコールジメチルエーテル、エチレングリコールジエチルエーテル、エチレングリコールジブチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジプロピレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、テトラエチレングリ

コールジメチルエーテル、ジプロピレングリコールジメチルエーテルペンタン、トリエチレングリコールジメチルエーテル、及びポリエチレングリコールジメチルエーテルが挙げられる。

アルコール系有機溶媒の具体例としては、メタノール、エタノール、1-プロパノール、イソプロピルアルコール、n-ブタノール、ジアセトンアルコール、イソブタノール、sec-ブタノール、tert-ブタノール、ペンタノール、3-メチル-1, 3-ブタンジオール、1, 3-ブタンジオール、1, 3-ブチレングリコール、オクタンジオール、2, 4-ジエチルペンタンジオール、ブチルエチルプロパンジオール、2-メチル-1, 3-プロパンジオール、4-ヒドロキシ-4-メチル-2-ペンタノン、2-エチル-1-ヘキサノール、3, 5, 5-トリメチル-1-ヘキサノール、イソデカノール、イソトリデカノール、3-メトキシ-3-メチル-1-ブタノール、2-メトキシブタノール、3-メトキシブタノール、シクロヘキサノール、フルフリルアルコール、テトラヒドロフルフリルアルコール、ベンジルアルコール、及びメチルシクロヘキサノールが挙げられる。

[0190] また、有機溶媒としては、ハロゲン系有機溶媒、含フッ素系有機溶媒、含窒素化合物、含硫黄化合物、及び本開示の化合物以外のシロキサン化合物が挙げられる。

[0191] ハロゲン系有機溶媒の具体例としては、ジクロロメタン、クロロホルム、四塩化炭素、ジクロロエタン、クロロベンゼン、o-クロロトルエン、m-クロロトルエン、p-クロロトルエン、m-ジクロロベンゼン、及び1, 2, 3-トリクロロプロパンが挙げられる。

含フッ素系有機溶媒としては、例えば、ポリフルオロ芳香族炭化水素（例えば、1, 3-ビス（トリフルオロメチル）ベンゼン）；ポリフルオロ脂肪族炭化水素（例えば、 $C_6F_{13}CH_2CH_3$ （例えば、AGC社製のアサヒクリン（登録商標）AC-6000）、1, 1, 2, 2, 3, 3, 4-ヘプタフルオロシクロペンタン（例えば、日本ゼオン社製のゼオローラ（登録商標）H））；ヒドロフルオロエーテル（HFE）（例えば、パーフルオロプロピ

ルメチルエーテル ( $C_3F_7OCH_3$ ) (例えば、住友スリーエム社製のNov ec (商標) 7000)、パーフルオロブチルメチルエーテル ( $C_4F_9OCH_3$ ) (例えば、住友スリーエム社製のNov ec (商標) 7100)、パーフルオロブチルエチルエーテル ( $C_4F_9OC_2H_5$ ) (例えば、住友スリーエム社製のNov ec (商標) 7200)、パーフルオロヘキシルメチルエーテル ( $C_2F_5CF(OCH_3)C_3F_7$ ) (例えば、住友スリーエム社製のNov ec (商標) 7300) 等のアルキルパーフルオロアルキルエーテル (パーフルオロアルキル基及びアルキル基は直鎖又は分枝状であってよい)、並びに  $CF_3CH_2OCF_2CHF_2$  (例えば、AGC社製のアサヒクリン (登録商標) AE-3000) ; ハイドロフルオロオレフィン (HFO) (例えば、1-クロロ-2, 3, 3-トリフルオロ-1-プロペン ( $HCF_2O-1233yd$ ) (例えば、AGC社製のアモレア (登録商標) AS-300) ) が挙げられる。

含窒素化合物としては、ニトロベンゼン、アセトニトリル、ベンゾニトリル、N, N-ジメチルホルムアミド、N, N-ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドン、及び1, 3-ジメチル-2-イミダゾリジノンが挙げられる。

含硫黄化合物としては、二硫化炭素、及びジメチルスルホキッドが挙げられる。

本開示の化合物以外のシロキサン化合物としては、例えば、ヘキサメチルジシロキサン、ヘキサエチルジシロキサン、オクタメチルトリシロキサン、オクタエチルトリシロキサン、ヘキサメチルシクロトリシロキサン、ヘキサエチルシクロトリシロキサン、オクタメチルシクロテトラシロキサン、オクタエチルシクロテトラシロキサン、及びデカメチルテトラシロキサンが挙げられる。

[0192] 液状媒体の含有量は、本開示の組成物の全量に対して、60~99.99質量%が好ましく、80~99.99質量%がより好ましく、90~99.9質量%がさらに好ましい。ウェットコーティング法に使用する本開示の

組成物の場合には、液状媒体の含有量は、本開示の組成物の全量に対して、  
 90～99.99質量%が好ましく、95～99.98質量%がより好ましく、  
 97～99.97質量%がさらに好ましく、98～99.95質量%が特に好ましい。

[0193] 本開示の組成物は、本開示の化合物及び液状媒体以外に、本開示の効果を損なわない範囲で、他の成分を含んでいてもよい。

他の成分としては、添加剤が挙げられ、具体的には、反応性シリル基の加水分解と縮合反応を促進する酸触媒、塩基触媒等の触媒が挙げられる。

[0194] 触媒としては、例えば、任意の適切な酸又は塩基、遷移金属（例えば、Ti、Ni、Sn、Zr、Al、B等）、分子構造内に非共有電子対を有する含硫黄化合物、含窒素化合物（例えば、スルホキシド化合物、脂肪族アミン化合物、芳香族アミン化合物、リン酸アミド化合物、アミド化合物、尿素化合物）等を使用できる。

酸触媒としては、酢酸、ギ酸、トリフルオロ酢酸、塩酸、硝酸、硫酸、リン酸、スルホン酸、メタンスルホン酸、及びp-トルエンスルホン酸が挙げられる。

また、塩基触媒としては、例えば、アンモニア、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム；及びトリエチルアミン、ジエチルアミン等の有機アミンが挙げられる。

[0195] また、他の成分としては、加水分解性基を有する金属化合物（以下、「特定金属化合物」ともいう。）も挙げられる。本開示の組成物が特定金属化合物を含む場合、表面処理層の滑り性及び防汚性をより向上し得る。特定金属化合物としては、式(M1)～式(M3)のいずれかで表される金属化合物が挙げられる。

[0196]  $M(X^{b1})_{m1}(X^{b2})_{m2}(X^{b3})_{m3} \dots (M1)$

$Si(X^{b4})(X^{b5})_3 \dots (M2)$

$(X^{b6})_3Si-(Y^{b1})-Si(X^{b7})_3 \dots (M3)$

ただし、式(M3)で表される金属化合物は、上述した式(1-2)で表

される化合物を含まない。

[0197] 式 (M1) 中、

Mは、3価又は4価の金属原子であり、

$X^{b1}$ はそれぞれ独立に、加水分解性基であり、

$X^{b2}$ はそれぞれ独立に、シロキサン骨格含有基であり、

$X^{b3}$ はそれぞれ独立に、炭化水素鎖含有基であり、

$m1$ は2～4の整数であり、

$m2$ 及び $m3$ はそれぞれ独立に、0～2の整数であり、

Mが3価の金属原子の場合、 $m1 + m2 + m3$ は3であり、Mが4価の金属原子の場合、 $m1 + m2 + m3$ は4である。

[0198] 式 (M2) 中、

$X^{b4}$ は、加水分解性シランオリゴマー残基であり、

$X^{b5}$ は、それぞれ独立に、加水分解性基又は炭素数1～4のアルキル基である。

[0199] 式 (M3) 中、

$X^{b6}$ 及び $X^{b7}$ は、それぞれ独立に、加水分解性基又は水酸基であり、

$Y^{b1}$ は、2価の有機基である。

[0200] 式 (M1) 中、Mで表される金属には、Si、Ge等の半金属も包含される。Mとしては、3価金属及び4価金属が好ましく、Al、Fe、In、Hf、Si、Ti、Sn、又はZrがより好ましく、Al、Si、Ti、又はZrがさらに好ましく、Siが特に好ましい。

[0201] 式 (M1) 中、 $X^{b1}$ で表される加水分解性基としては、上記式 (1-1) におけるLで表される加水分解性基と同義であり、好適態様も同じである。

[0202]  $X^{b2}$ で表されるシロキサン骨格含有基は、シロキサン単位 ( $-Si-O-$ ) を有し、直鎖状及び分岐鎖状のいずれであってもよい。シロキサン単位としては、ジアルキルシリルオキシ基が好ましく、ジメチルシリルオキシ基、ジエチルシリルオキシ基等が挙げられる。シロキサン骨格含有基におけるシロキサン単位の繰り返し数は、1以上であり、1～5が好ましく、1～4が

より好ましく、1～3がさらに好ましい。

シロキサン骨格含有基は、シロキサン骨格の一部に2価の炭化水素基を含んでいてもよい。具体的には、シロキサン骨格の一部の酸素原子が2価の炭化水素基で置き換わっていてもよい。2価の炭化水素基としては、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、ブチレン基等のアルキレン基が挙げられる。

シロキサン骨格含有基の末端のケイ素原子には、加水分解性基、炭化水素基（好ましくはアルキル基）等が結合していてもよい。

シロキサン骨格含有基の元素数は、100以下が好ましく、50以下がより好ましく、30以下がさらに好ましい。元素数の上限は、10以上が好ましい。

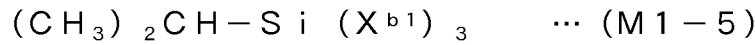
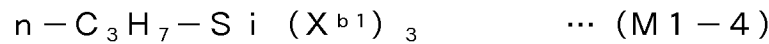
シロキサン骨格含有基としては、 $* - (O - Si(CH_3)_2)_n CH_3$ で表される基が好ましく、ここで、 $n$ は1～5の整数であり、 $*$ は隣接原子との結合部位を表す。

[0203]  $X^{b3}$ で表される炭化水素鎖含有基は、炭化水素鎖のみからなる基でもよく、炭化水素鎖の炭素原子-炭素原子間にエーテル性酸素原子を有する基でもよい。炭化水素鎖は直鎖状でも分岐鎖状でもよく、直鎖状が好ましい。炭化水素鎖は飽和炭化水素鎖でも不飽和炭化水素鎖でもよく、飽和炭化水素鎖が好ましい。炭化水素鎖含有基の炭素数は、1～3が好ましく、1～2がより好ましく、1がさらに好ましい。炭化水素鎖含有基としては、アルキル基が好ましく、メチル基、エチル基、又はプロピル基がより好ましい。

[0204]  $m1$ は3又は4であることが好ましい。

[0205] 式(M1)で表される化合物としては、 $M$ が $Si$ である式(M1-1)～式(M1-5)のいずれかで表される化合物が好ましく、式(M1-1)で表される化合物がより好ましい。式(M1-1)で表される化合物としては、テトラエトキシシラン、テトラメトキシシラン、又はトリエトキシメチルシランが好ましい。

[0206]  $Si(X^{b1})_4 \quad \dots (M1-1)$



[0207] 式 (M2) 中、 $\text{X}^{\text{b}4}$  で表される加水分解性シランオリゴマー残基に含まれるケイ素原子の数は、3以上が好ましく、5以上がより好ましく、7以上がさらに好ましい。上記ケイ素原子の数は、15以下が好ましく、13以下がより好ましく、10以下がさらに好ましい。

加水分解性シランオリゴマー残基は、ケイ素原子に結合するアルコキシ基を有していてもよい。上記アルコキシ基としては、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基等が挙げられ、メトキシ基又はエトキシ基が好ましい。加水分解性シランオリゴマー残基は、これらアルコキシ基の1種又は2種以上を有してもよく、1種を有することが好ましい。

加水分解性シランオリゴマー残基としては、 $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{Si}-(\text{OSi}(\text{OC}_2\text{H}_5)_2)_4\text{O}-*$ 等が挙げられる。ここで、\*は隣接原子との結合部位を表す。

[0208] 式 (M2) 中、 $\text{X}^{\text{b}5}$  で表される加水分解性基としては、上記式 (1-1) におけるLで表される加水分解性基と同様のもの、シアノ基、水素原子、及びアシル基が挙げられ、アルコキシ基又はイソシアナト基が好ましい。アルコキシ基としては、炭素数1~4のアルコキシ基が好ましい。

$\text{X}^{\text{b}5}$  としては、加水分解性基が好ましい。

[0209] 式 (M2) で表される化合物としては、 $(\text{H}_5\text{C}_2\text{O})_3-\text{Si}-(\text{OSi}(\text{OC}_2\text{H}_5)_2)_4\text{OC}_2\text{H}_5$ 等が挙げられる。

[0210] 式 (M3) で表される化合物は、2価の有機基の両末端に反応性シリル基を有する化合物、すなわち、ビスシランである。

式 (M3) 中、 $\text{X}^{\text{b}6}$  及び  $\text{X}^{\text{b}7}$  で表される加水分解性基としては、アルコキシ基、アシロキシ基、ケトオキシム基、アルケニルオキシ基、アミノ基、アミノキシ基、アミド基、イソシアナト基、及びハロゲン原子が挙げられ、ア

ルコキシ基又はイソシアナト基が好ましい。アルコキシ基としては、炭素数 1～4 のアルコキシ基が好ましく、メトキシ基又はエトキシ基がより好ましい。

式 (M3) において、 $X^{b6}$  及び  $X^{b7}$  は互いに同じ基でもよく、互いに異なる基でもよい。入手しやすさの点で、 $X^{b6}$  及び  $X^{b7}$  は互いに同じ基であることが好ましい。

[0211] 式 (M3) 中、 $Y^{b1}$  は、両末端の反応性シリル基を連結する 2 価の有機基である。2 価の有機基の  $Y^{b1}$  の炭素数は 1～8 が好ましく、1～3 がより好ましい。

$Y^{b1}$  としては、アルキレン基、フェニレン基、炭素原子間にエーテル性酸素原子を有するアルキレン基が挙げられる。例えば、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2C(CH_3)_2CH_2-$ 、 $-C(CH_3)_2CH_2CH_2C(CH_3)_2-$ 、 $-CH_2CH_2OCH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2OCH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH(CH_3)CH_2OCH_2CH(CH_3)-$ 、及び  $-C_6H_4-$  が挙げられる。

[0212] 式 (M3) で表される化合物としては、 $(CH_3O)_3Si(CH_2)_2Si(OCH_3)_3$ 、 $(C_2H_5O)_3Si(CH_2)_2Si(OC_2H_5)_3$ 、 $(OCN)_3Si(CH_2)_2Si(NCO)_3$ 、 $Cl_3Si(CH_2)_2SiCl_3$ 、 $(CH_3O)_3Si(CH_2)_6Si(OCH_3)_3$ 、及び  $(C_2H_5O)_3Si(CH_2)_6Si(OC_2H_5)_3$  が挙げられる。

[0213] 本開示の組成物に含まれてもよい他の成分の含有量は、本開示の組成物の全量に対して、10質量%以下が好ましく、1質量%以下がより好ましい。本開示の組成物が特定金属化合物を含む場合、特定金属化合物の含有量は、本開示の組成物の全量に対して、0.01～30質量%が好ましく、0.01～10質量%がより好ましく、0.05～5質量%がさらに好ましい。

[0214] 本開示の化合物と他の成分の合計含有量（以下、「固形分濃度」ともいう。）は、本開示の組成物の全量に対して、0.001～40質量%が好まし

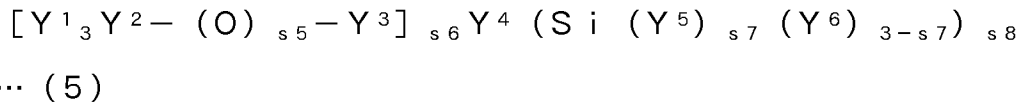
く、0.01～20質量%がより好ましく、0.1～10質量%がさらに好ましい。本開示の組成物の固形分濃度は、加熱前の組成物の質量と、120℃の対流式乾燥機にて4時間加熱した後の質量とから算出される値である。

[0215] 本開示の組成物は、液状媒体を含むことから、コーティング用途として有用であり、コーティング液として用いることができる。

[0216] 本開示の組成物は、本開示の化合物と液状媒体の他に、本開示の効果を損なわない範囲で、本開示の化合物と液状媒体以外の他の成分を含んでもよい。他の成分としては、たとえば、加水分解性シリル基の加水分解と縮合反応を促進する酸触媒や塩基性触媒等の公知の添加剤が挙げられる。

本表面処理剤における、他の成分の含有量は、10質量%以下が好ましく、1質量%以下がより好ましい。

[0217] 他の成分としては、下式(5)で表される化合物も挙げられる。



式(5)中、Y<sup>1</sup>はそれぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

Y<sup>2</sup>は、Si、Sn、又はGeであり、

s<sub>5</sub>は0又は1であり、

Y<sup>3</sup>は、それぞれ独立に、アルキレン鎖若しくはポリアルキレンオキシド鎖であるか、又は、アルキレン鎖と2価のポリシロキサン残基との組み合わせであり、

Y<sup>4</sup>は、単結合又はs<sub>6</sub> + s<sub>8</sub>価の連結基であり、

Y<sup>5</sup>はそれぞれ独立に、炭化水素基であり、

Y<sup>6</sup>はそれぞれ独立に、加水分解性基又は水酸基であり、

s<sub>7</sub>はそれぞれ独立に、0～2の整数であり、

s<sub>6</sub>及びs<sub>8</sub>はそれぞれ独立に、1以上の整数である。

[0218] 式(5)で表される化合物としては、Y<sup>3</sup>がアルキレン鎖若しくはポリアルキレンオキシド鎖である化合物が好ましい。



、ドット状に点在していてもよい。

表面処理層において、本開示の化合物は、反応性シリル基（ $(Si(R)_nL_{3-n})$ ）の一部又は全部の加水分解が進行し、かつ、シラノール基の脱水縮合反応が進行した状態で含まれる。

[0223] 表面処理層の厚さは、1～100nmが好ましく、1～50nmがより好ましい。表面処理層の厚さが1nm以上であれば、表面処理による効果が十分に得られやすい。表面処理層の厚さが100nm以下であれば、利用効率が高い。表面処理層の厚さは、薄膜解析用X線回折計（製品名「ATX-G」、RIGAKU社製）を用いて、X線反射率法によって反射X線の干渉パターンを得て、干渉パターンの振動周期から算出できる。

[0224] 基材の種類は特に限定されず、例えば、撥水性の付与が求められている基材が挙げられる。基材として、例えば、他の物品（例えば、スタイラス）又は人の手指を接触させて使用することがある基材；操作時に人の手指で持つことがある基材；及び、他の物品（例えば、載置台）の上に置くことがある基材が挙げられる。

基材の材料としては、金属、樹脂、ガラス、サファイア、セラミック、半導体、石、繊維、不織布、紙、木、毛皮、天然皮革、人工皮革、陶磁器、及びこれらの複合材料が挙げられる。ガラスは化学強化されていてもよい。

[0225] 基材としては、建材、装飾建材、インテリア用品、輸送機器（例えば、自動車）、看板、掲示板、飲用器、食器、水槽、観賞用器具（例えば、額、箱）、実験器具、家具、繊維製品、包装容器；アート、スポーツ、ゲーム等に使用する、ガラス又は樹脂；携帯電話（例えば、スマートフォン）、携帯情報端末、ゲーム機、リモコン等の機器における外装部分（表示部を除く）に使用する、ガラス又は樹脂が挙げられる。基材の形状は、板状であってもよく、フィルム状であってもよい。

[0226] 基材としては、タッチパネル用基材、ディスプレイ用基材、メガネレンズが好適であり、タッチパネル用基材が特に好適である。タッチパネル用基材の材料としては、ガラス又は透明樹脂が好ましい。

- [0227] 基材は、一方の表面又は両面が、コロナ放電処理、プラズマ処理、プラズマグラフト重合処理等の表面処理が施された基材であってもよい。表面処理が施された基材は、表面処理層との密着性がより優れ、表面処理層の耐光性がより向上する。そのため、基材の表面処理層と接する側の表面に表面処理を施すことが好ましい。また、表面処理が施された基材は、後述する下地層が設けられる場合には、下地層との密着性がより優れ、表面処理層の耐光性がより向上する。そのため、下地層が設けられる場合には、基材の下地層と接する側の表面に表面処理を施すことが好ましい。
- [0228] 表面処理層は、基材の表面上に直接設けられていてもよく、基材と表面処理層との間に下地層が設けられていてもよい。表面処理層の耐光性をより向上させる観点から、本開示の物品は、基材と、基材上に配置された下地層と、下地層上に配置された本開示の表面処理剤で表面処理された表面処理層と、を含むことが好ましい。
- [0229] 下地層は、ケイ素と、周期表の第1族元素、第2族元素、第4族元素、第5族元素、第13族元素、及び第15族元素からなる群から選択される少なくとも1つの特定元素とを含む酸化物を含む層が好ましい。
- [0230] 周期表の第1族元素（以下、「第1族元素」ともいう。）とは、リチウム、ナトリウム、カリウム、ルビジウム及びセシウムを意味する。第1族元素としては、下地層上に表面処理層を欠陥なくより均一に形成できる点、又は、サンプル間での下地層の組成のバラツキがより抑制される観点から、リチウム、ナトリウム、カリウムが好ましく、ナトリウム、カリウムがより好ましい。下地層には、第1族元素が2種以上含まれていてもよい。
- [0231] 周期表の第2族元素（以下、「第2族元素」ともいう。）とは、ベリリウム、マグネシウム、カルシウム、ストロンチウム及びバリウムを意味する。第2族元素としては、下地層上に表面処理層を欠陥なくより均一に形成できる点、又は、サンプル間での下地層の組成のバラツキがより抑制される観点から、マグネシウム、カルシウム、バリウムが好ましく、マグネシウム、カルシウムがより好ましい。下地層には、第2族元素が2種以上含まれていて

もよい。

[0232] 周期表の第4族元素（以下、「第4族元素」ともいう。）とは、チタン、ジルコニウム、及びハフニウムを意味する。第4族元素としては、下地層上に表面処理層を欠陥なくより均一に形成できる観点、又は、サンプル間での下地層の組成のバラツキがより抑制される観点から、チタン、ジルコニウムが好ましく、チタンがより好ましい。下地層には、第4族元素が2種以上含まれていてもよい。

[0233] 周期表の第5族元素（以下、「第5族元素」ともいう。）とは、バナジウム、ニオブ及びタンタルを意味する。第5族元素としては、表面処理層の耐光性がより優れる観点から、バナジウムが特に好ましい。下地層には、第5族元素が2種以上含まれていてもよい。

[0234] 周期表の第13族元素（以下、「第13族元素」ともいう。）とは、ホウ素、アルミニウム、ガリウム及びインジウムを意味する。第13族元素としては、下地層上に表面処理層を欠陥なくより均一に形成できる点、又は、サンプル間での下地層の組成のバラツキがより抑制される観点から、ホウ素、アルミニウム、ガリウムが好ましく、ホウ素、アルミニウムがより好ましい。下地層には、第13族元素が2種以上含まれていてもよい。

[0235] 周期表の第15族元素（以下、「第15族元素」ともいう。）とは、窒素、リン、ヒ素、アンチモン及びビスマスを意味する。第15族元素としては、下地層上に表面処理層を欠陥なくより均一に形成できる観点、又は、サンプル間での下地層の組成のバラツキがより抑制される観点から、リン、アンチモン、ビスマスが好ましく、リン、ビスマスがより好ましい。下地層には、第15族元素が2種以上含まれていてもよい。

[0236] 下地層に含まれる特定元素としては、第1族元素、第2族元素、第13族元素が表面処理層の耐光性がより優れるため好ましく、第1族元素、第2族元素がより好ましく、第1族元素がさらに好ましい。

特定元素として、1種だけの元素が含まれていても2種以上の元素が含まれていてもよい。

[0237] 下地層に含まれる酸化物は、上記元素（ケイ素及び特定元素）単独の酸化物の混合物（例えば、酸化ケイ素と、特定元素の酸化物と、の混合物）であってもよいし、上記元素を2種以上含む複合酸化物であってもよいし、上記元素単独の酸化物と複合酸化物との混合物であってもよい。

[0238] 下地層中のケイ素のモル濃度に対する、下地層中の特定元素の合計モル濃度の比（特定元素／ケイ素）は、表面処理層の耐光性がより優れる観点から、0.02～2.90であるのが好ましく、0.10～2.00であるのがより好ましく、0.20～1.80であるのがさらに好ましい。

下地層中の各元素のモル濃度（モル%）は、例えば、イオンスパッタリングを用いたX線光電子分光法（XPS）による深さ方向分析によって測定できる。

[0239] 下地層は、単層であっても複層であってもよい。下地層は、表面に凹凸を有していてもよい。

下地層の厚さは、1～100nmが好ましく、1～50nmがより好ましく、2～20nmがさらに好ましい。下地層の厚さが上記下限値以上であれば、下地層による表面処理層の密着性がより向上して、表面処理層の耐光性がより優れる。下地層の厚さが上記上限値以下であれば、下地層自体の耐光性が優れる。

下地層の厚さは、透過電子顕微鏡（TEM）による下地層の断面観察によって測定される。

[0240] 下地層は、例えば、蒸着材料を用いた蒸着法、又は、ウェットコーティング法により形成できる。

[0241] 蒸着法で用いる蒸着材料は、ケイ素及び特定元素を含む酸化物を含有することが好ましい。

蒸着材料の形態の具体例としては、粉体、熔融体、焼結体、造粒体、破砕体が挙げられ、取り扱い性の観点から、熔融体、焼結体、造粒体が好ましい。

ここで、熔融体とは、蒸着材料の粉体を高温で熔融させた後、冷却固化し

て得られた固形物を意味する。焼結体とは、蒸着材料の粉体を焼成して得られた固形物を意味し、必要に応じて、蒸着材料の粉体の代わりに、粉体をプレス形成して成形体を用いてもよい。造粒体とは、蒸着材料の粉体と液状媒体（例えば、水、有機溶媒）とを混練して粒子を得た後、粒子を乾燥させて得られた固形物を意味する。

[0242] 蒸着材料は、例えば、以下の方法で製造できる。

- ・酸化ケイ素の粉体と、特定元素の酸化物の粉体と、を混合して、蒸着材料の粉体を得る方法。

- ・上記蒸着材料の粉体及び水を混練して粒子を得た後、粒子を乾燥させて、蒸着材料の造粒体を得る方法。

- ・ケイ素を含む粉体（例えば、酸化ケイ素からなる粉体、珪砂、シリカゲル）と、特定元素を含む粉体（例えば、特定元素の酸化物の粉体、炭酸塩、硫酸塩、硝酸塩、シュウ酸塩、水酸化物）と、水と、を混合した混合物を乾燥させた後、乾燥後の混合物又はこれをプレス成形した成形体を焼成して、焼結体を得る方法。

- ・ケイ素を含む粉体（例えば、酸化ケイ素からなる粉体、珪砂、シリカゲル）と、特定元素を含む粉体（例えば、特定元素の酸化物の粉体、炭酸塩、硫酸塩、硝酸塩、シュウ酸塩、水酸化物）と、を高温で熔融させた後、熔融物を冷却固化して、溶融体を得る方法。

[0243] 蒸着材料を用いた蒸着法の具体例としては、真空蒸着法が挙げられる。真空蒸着法は、蒸着材料を真空槽内で蒸発させ、基材の表面に付着させる方法である。

蒸着時の温度（例えば、真空蒸着装置を用いる際には、蒸着材料を配置するボートの温度）としては、100～3,000℃が好ましく、500～3,000℃がより好ましい。

蒸着時の圧力（例えば、真空蒸着装置を用いる際には、蒸着材料を配置する槽内の圧力）としては、1 Pa以下が好ましく、0.1 Pa以下がより好ましい。

蒸着材料を用いて下地層を形成する場合、1つの蒸着材料を用いてもよいし、異なる元素を含む2つ以上の蒸着材料を用いてもよい。

[0244] 蒸着材料の蒸発方法の具体例としては、高融点金属製抵抗加熱用ボート上で蒸着材料を溶融し、蒸発させる抵抗加熱法、電子ビームを蒸着材料に照射し、蒸着材料を直接加熱して表面を溶融し、蒸発させる電子銃法が挙げられる。蒸着材料の蒸発方法としては、局所的に加熱できるため高融点物質も蒸発できる点、電子ビームが当たっていないところは低温であるため容器との反応や不純物の混入のおそれがない観点から、電子銃法が好ましい。

蒸着材料の蒸発方法としては、複数のボートを用いてもよく、単独のボートに全ての蒸着材料を入れて用いてもよい。蒸着法は、共蒸着であってもよく、交互蒸着等でもよい。具体的には、シリカと特定源を同一のボートに混合して用いる例、シリカと特定元素源とを別々のボートに入れて共蒸着する例、同様に別々のボートに入れて交互蒸着する例が挙げられる。蒸着の条件、順番等は下地層の構成により適宜選択される。

[0245] ウェットコーティング法では、ケイ素を含む化合物と、特定元素を含む化合物と、液状媒体と、を含むコーティング液を用いたウェットコーティング法によって、基材上に下地層を形成することが好ましい。

[0246] ケイ素化合物の具体例としては、酸化ケイ素、ケイ酸、ケイ酸の部分縮合物、アルコキシシラン、アルコキシシランの部分加水分解縮合物が挙げられる。

[0247] 特定元素を含む化合物の具体例としては、特定元素の酸化物、特定元素のアルコキシド、特定元素の炭酸塩、特定元素の硫酸塩、特定元素の硝酸塩、特定元素のシュウ酸塩、特定元素の水酸化物が挙げられる。

[0248] 液状媒体としては、本開示の組成物に含まれる液状媒体と同様のものが挙げられる。

[0249] 液状媒体の含有量は、下地層の形成に使用するコーティング液の全量に対して、0.01~20質量%が好ましく、0.1~10質量%がより好ましい。

[0250] 下地層を形成するためのウェットコーティング法の具体例としては、スピンコート法、ワイプコート法、スプレーコート法、スキージーコート法、ディップコート法、ダイコート法、インクジェット法、フローコート法、ロールコート法、キャスト法、ラングミュア・プロジェクト法、及びグラビアコート法が挙げられる。

[0251] コーティング液をウェットコーティングした後、塗膜を乾燥させるのが好ましい。塗膜の乾燥温度としては、20～200℃が好ましく、80～160℃がより好ましい。

[0252] 本開示の物品は、表面処理層を最外層に有する光学材料であってもよい。光学材料としては、ディスプレイ等に関する光学材料のほか、多種多様な光学材料が好ましく挙げられる。

光学材料としては、例えば、陰極線管（CRT；例えば、パソコンモニター）、液晶ディスプレイ、プラズマディスプレイ、有機ELディスプレイ、無機薄膜ELドットマトリクスディスプレイ、背面投写型ディスプレイ、蛍光表示管（VFD）、電界放出ディスプレイ（FED；Field Emission Display）等のディスプレイ又はそれらのディスプレイの保護板、又はそれらの表面に反射防止膜処理を施したものが挙げられる。

[0253] 本開示の物品は、光学部材であることが好ましい。光学部材としては、例えば、カーナビゲーション、携帯電話、スマートフォン、デジタルカメラ、デジタルビデオカメラ、PDA、ポータブルオーディオプレーヤー、カーオーディオ、ゲーム機器、眼鏡レンズ、カメラレンズ、レンズフィルター、サングラス、胃カメラ等の医療用器機、複写機、PC、ディスプレイ（例えば、液晶ディスプレイ、有機ELディスプレイ、プラズマディスプレイ、タッチパネルディスプレイ）、タッチパネル、保護フィルム、及び反射防止フィルムが挙げられる。

また、光学部材としては、PDP、LCD等のディスプレイの前面保護板、反射防止板、偏光板、アンチグレア板；ブルーレイ（Blu-ray（登録商標））ディスク、DVDディスク、CD-R、MO等の光ディスクのデ

ィスク面；光ファイバー；時計の表示面も挙げられる。

特に、本開示の物品は、ディスプレイ又はタッチパネルであることが好ましい。

[0254] 本開示の物品は、医療機器又は医療材料であってもよい。また、本開示の物品は、自動車内外装部材であってもよい。外装材としては、例えば、ウィンドウ、ライトカバー、社外カメラカバーが挙げられる。内装材としては、例えば、インパネカバー、ナビゲーションシステムタッチパネル、加飾内装材が挙げられる。

[0255] 本開示の物品が光学部材である場合、基材の表面を構成する材料は、光学部材用材料、例えば、ガラス又は透明プラスチックである。また、本開示の物品が光学部材である場合、基材の表面（最外層）に、ハードコート層、反射防止層等の機能性層が形成されていてもよい。反射防止層は、単層反射防止層及び多層反射防止層のいずれであってもよい。

反射防止層に使用可能な無機物の例としては、 $\text{SiO}_2$ 、 $\text{SiO}$ 、 $\text{ZrO}_2$ 、 $\text{TiO}_2$ 、 $\text{TiO}$ 、 $\text{Ti}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Ti}_2\text{O}_5$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Ta}_2\text{O}_5$ 、 $\text{Ta}_3\text{O}_5$ 、 $\text{Nb}_2\text{O}_5$ 、 $\text{HfO}_2$ 、 $\text{Si}_3\text{N}_4$ 、 $\text{CeO}_2$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{Y}_2\text{O}_3$ 、 $\text{SnO}_2$ 、 $\text{MgF}_2$ 、及び $\text{WO}_3$ が挙げられる。これらの無機物は、単独で、又はこれらの2種以上を組み合わせ（例えば混合物として）使用してもよい。多層反射防止層とする場合、その最外層には $\text{SiO}_2$ 及び／又は $\text{SiO}$ を用いることが好ましい。本開示の物品が、タッチパネル用の光学ガラス部品である場合、透明電極、例えば酸化インジウムスズ（ITO）や酸化インジウム亜鉛等を用いた薄膜を、基材（ガラス）の表面の一部に有していてもよい。また、基材は、その具体的仕様等に応じて、絶縁層、粘着層、保護層、装飾枠層（ICON）、霧化膜層、ハードコーティング膜層、偏光フィルム、相位差フィルム、及び液晶表示モジュール等を有していてもよい。

[0256] [物品の製造方法]

本開示の物品の製造方法は、例えば、基材に対して、本開示の表面処理剤を用いて表面処理を行い、基材上に表面処理層が形成された物品を製造する

という方法である。表面処理としては、ドライコーティング法及びウェットコーティング法が挙げられる。

[0257] ドライコーティング法としては、真空蒸着、CVD、スパッタリング等の手法が挙げられる。ドライコーティング法としては、化合物の分解を抑える点、及び装置の簡便さの観点から、真空蒸着法が好ましい。真空蒸着時には、鉄、鋼等の金属多孔体に、本開示の化合物を含浸させたペレット状物質を用いてもよい。本開示の化合物及び液状媒体を含む組成物を、鉄、鋼等の金属多孔体に含浸させ、液状媒体を乾燥させて、本開示の化合物を含浸させたペレット状物質を用いてもよい。

[0258] ウェットコーティング法としては、例えば、スピコート法、ワイプコート法、スプレーコート法、スキージーコート法、ディップコート法、ダイコート法、インクジェット法、フローコート法、ロールコート法、キャスト法、ラングミュア・プロジェクト法、グラビアコート法が挙げられる。

[0259] 表面処理層の耐光性を向上させるために、必要に応じて、本開示の化合物と基材との反応を促進させるための操作を行ってもよい。該操作としては、加熱、加湿、光照射等が挙げられる。

例えば、水分を有する大気中で表面処理層が形成された基材を加熱して、加水分解性基の加水分解反応、基材の表面の水酸基等とシラノール基との反応、シラノール基の縮合反応によるシロキサン結合の生成、等の反応を促進できる。

表面処理後、表面処理層中の化合物であって、他の化合物又は基材と化学結合していない化合物は、必要に応じて除去してもよい。除去する方法としては、例えば、表面処理層に溶媒をかけ流す方法、溶媒をしみ込ませた布でふき取る方法等が挙げられる。

## 実施例

[0260] 以下に例を用いて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらの例に限定されるものではない。

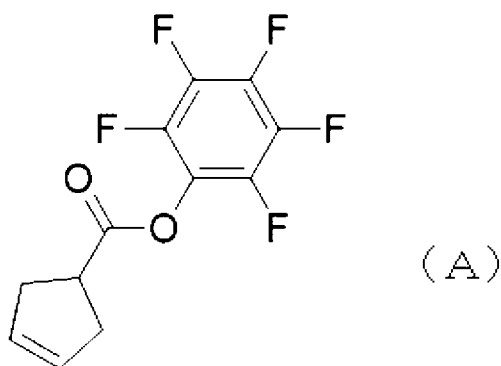
[0261] [例1：化合物(D)]

<工程 1-1 : 化合物 (A) の合成>

窒素雰囲気下、100 mL フラスコに 2, 3, 4, 5, 6-ペンタフルオロフェノール (6.8 g)、THF (テトラヒドロフラン、42 mL)、トリエチルアミン (5.1 g) を加え、25°C で攪拌した。次いで、3-シクロペンテン-1-カルボン酸クロライド (5.0 g) を滴下し、1 時間攪拌した。反応液を濾過し、溶媒と低沸点成分を減圧留去し、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒 : ヘキサン / 酢酸エチル) を行うことで、化合物 (A) を 7.9 g 得た。化合物 (A) の構造は、以下の NMR データより確認した。

[0262]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  5.72 (s, 2H), 3.45 (m, 1H), 2.85 (m, 4H).

[0263] [化30]



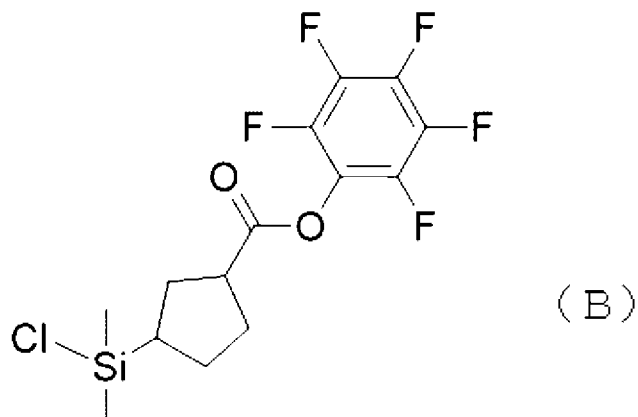
[0264] <工程 1-2 : 化合物 (B) の合成>

窒素雰囲気下、200 mL フラスコに化合物 (A) (5.6 g)、THF (5.0 mL)、クロロジメチルシラン (2.3 g) を加え、25°C で攪拌した。次いで、白金 / 1, 3-ジビニル-1, 1, 3, 3-テトラメチルジシロキサン錯体のキシレン溶液 (白金含有量 : 3 質量%、0.10 mL) を加え、70°C で 2 時間攪拌した。反応液から溶媒と低沸点成分を減圧留去することで、化合物 (B) を 7.2 g 得た。化合物 (B) の構造は、以下の NMR データより確認した。

[0265]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  3.10-2.50 (m, 1H), 2.30-1.20 (m, 7H), 0.43 - (-0.08) (m, 6H).

[0266]

[化31]



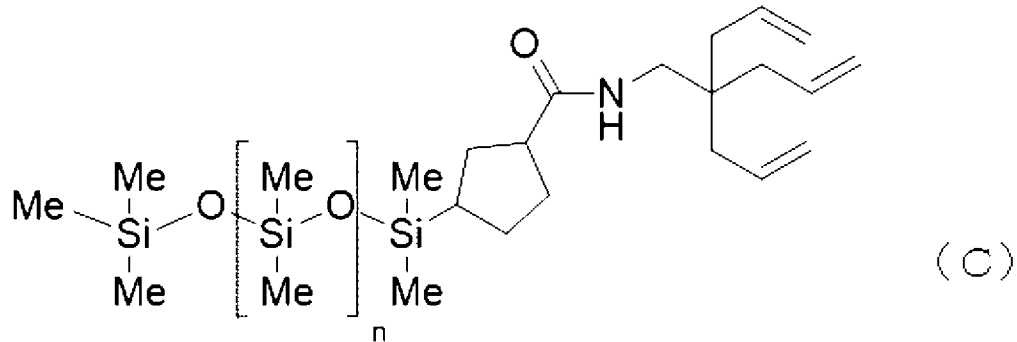
[0267] &lt;工程 1 - 3 : 化合物 (C) の合成&gt;

窒素雰囲気下、100 mL三口フラスコにトリメチルシラノール (0.19 g)、THF (5 mL) を加え、25 °C で攪拌した。次いで、0 °C に冷却し、*n*-BuLi (*n*-ブチルリチウム) のヘキサン溶液 (1.6 M、0.9 mL) を滴下した。次いで、ヘキサメチルシクロトリシロキサン の THF 溶液 (1.2 M、1 mL) を滴下し、さらにヘキサメチルシクロトリシロキサンの THF 溶液 (1.2 M、9 mL) を滴下し、2 時間攪拌した。次いで、化合物 (B) (1.28 g) を加え、1 時間攪拌した後、2, 2-ジアリルペンター-4-エン-1-アミン (0.95 g) をさらに加え、1 時間攪拌した。反応液にヘキサン、イオン交換水を順次加え、分液し、有機相を取り分けた。有機相から溶媒と低沸点成分を減圧留去した後、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒: ヘキサン/酢酸エチル) を行うことで、化合物 (C) を 1.2 g 得た。化合物 (C) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (C) 中、*n* の平均値は 18 であった。

[0268] <sup>1</sup>H-NMR (400MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ 5.80 (ddt, J=17.7, 10.6, 7.4Hz, 3H), 5.15-4.90 (m, 6H), 3.12 (d, J=6.3Hz, 2H), 3.10-2.50 (m, 1H), 2.30-1.20 (m, 7H), 0.43-(-0.08) (m, 129H).

[0269]

[化32]

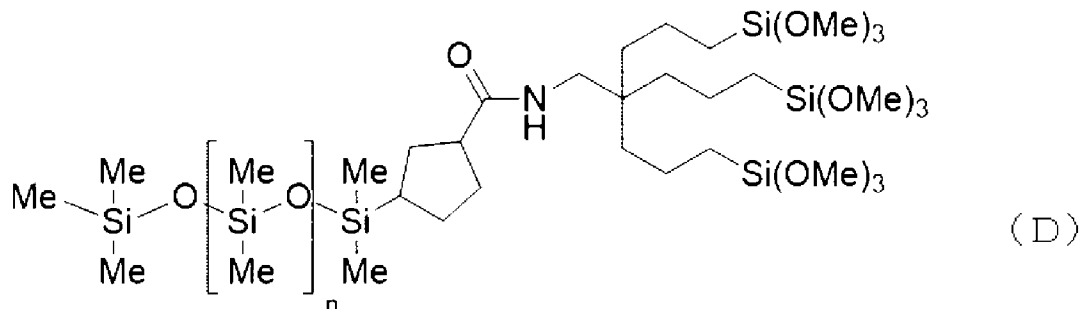


[0270] &lt;工程 1 - 4 : 化合物 (D) の合成&gt;

100 mL フラスコにジクロロメタン (10 g)、化合物 (C) (0.80 g) を加え、25°C で攪拌した。次いで、白金 / 1, 3-ジビニル-1, 1, 3, 3-テトラメチルジシロキサン錯体のトルエン溶液 (白金含有量 : 3質量%、4.1 mg)、アニリン (2.6 mg)、トリメトキシシラン (0.40 g) を加え、25°C で2時間攪拌した。反応液から溶媒を減圧留去することで、化合物 (D) を0.75 g 得た。化合物 (D) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (D) 中、n の平均値は 18 であった。

[0271]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  5.66 (d,  $J=6.4\text{Hz}$ , 1H), 3.49 (s, 27H), 3.46 (d,  $J=29.0\text{Hz}$ , 2H), 3.10-2.50 (m, 1H), 2.30-1.20 (m, 16H), 0.40 (m, 6H), 0.35-(-0.08) (m, 129H).

[0272] [化33]



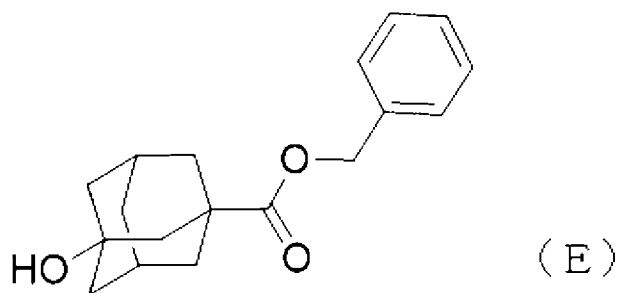
[0273] [例 2 : 化合物 (K) ]

&lt;工程 2 - 1 : 化合物 (E) の合成&gt;

300 mL フラスコに DMF (N, N-ジメチルホルムアミド、100 mL)、3-ヒドロキシ-4-アダマンタンカルボン酸 (5.0 g)、炭酸カリウム (10 g)、ベンジルブロマイド (10 g) を加え、50°C で 5 時間攪拌した。反応液にヘキサン、イオン交換水を順次加え、分液し、有機相を取り分けた。有機相から溶媒と低沸点成分を減圧留去した後、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒: ヘキサン/酢酸エチル) を行うことで、化合物 (E) を 4.0 g 得た。化合物 (E) の構造は、以下の NMR データより確認した。

[0274]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  7.38–7.26 (m, 5H), 5.13 (s, 2H), 3.67 (s, 1H), 2.65 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.10–1.60 (m, 12H).

[0275] [化34]



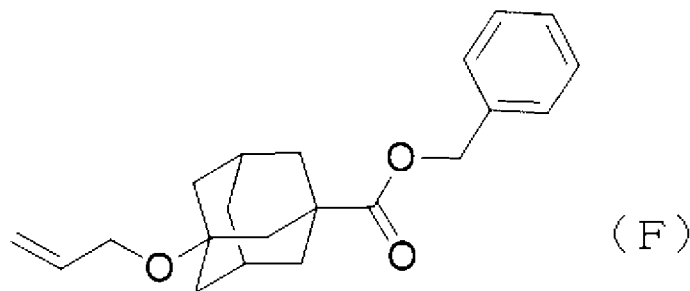
[0276] <工程 2-2: 化合物 (F) の合成>

300 mL フラスコに DMF (100 mL)、化合物 (E) (5.0 g)、炭酸カリウム (10 g)、アリルブロマイド (5 g) を加え、100°C で 5 時間攪拌した。次いで、反応液にヘキサン、イオン交換水を順次加え、分液し、有機相を取り分けた。有機相から溶媒と低沸点成分を減圧留去した後、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒: ヘキサン/酢酸エチル) を行うことで、化合物 (F) を 3.2 g 得た。化合物 (F) の構造は、以下の NMR データより確認した。

[0277]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  7.38–7.26 (m, 5H), 5.84 (m, 1H), 5.30 (m, 2H), 5.13 (s, 2H), 4.13 (m, 2H), 2.65 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.10–1.60 (m, 12H).

[0278]

[化35]

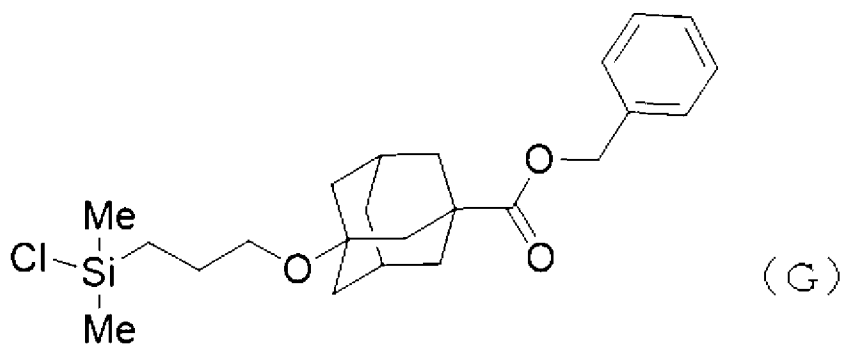


[0279] &lt;工程 2 - 3 : 化合物 (G) の合成&gt;

窒素雰囲気下、200 mL フラスコに化合物 (F) (3.0 g)、THF (5.0 mL)、クロロジメチルシラン (2.3 g) を加え、25°C で攪拌した。白金 / 1, 3 - ジビニル - 1, 1, 3, 3 - テトラメチルジシロキサン錯体のキシレン溶液 (白金含有量 : 3 質量%、0.10 mL) を加え、25°C で 2 時間攪拌した。反応液から溶媒と低沸点成分を減圧留去することで、化合物 (G) を 3.1 g 得た。化合物 (G) の構造は、以下の NMR データより確認した。

[0280]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  7.38-7.26 (m, 5H), 5.13 (s, 2H), 3.42 (m, 2H), 2.65 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.10-1.60 (m, 14H), 0.80 (m, 2H).

[0281] [化36]



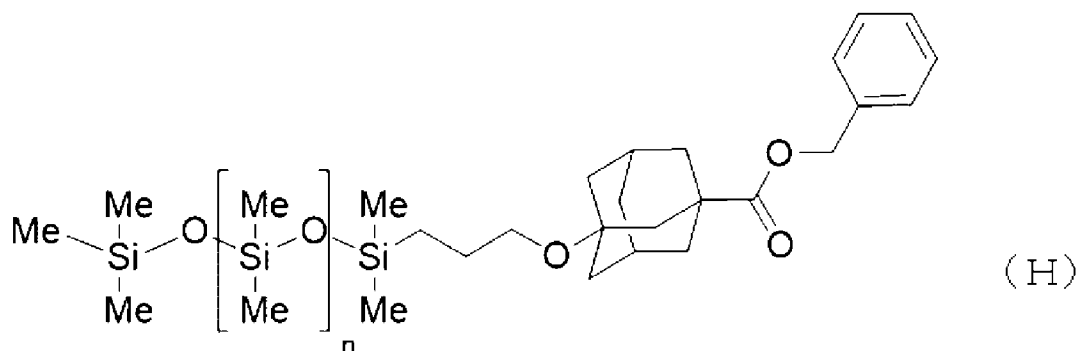
[0282] &lt;工程 2 - 4 : 化合物 (H) の合成&gt;

窒素雰囲気下、100 mL ミツロフラスコにトリメチルシラノール (0.19 g)、THF (5 mL) を加え、25°C で攪拌した。次いで、0°C に冷却し、 $n\text{-BuLi}$  のヘキサン溶液 (1.6 M、0.9 mL) を滴下した。次いで、ヘキサメチルシクロトリシロキサンの THF 溶液 (1.2 M、1 m

L) を滴下し、さらにヘキサメチルシクロトリシロキサン (THF 溶液 (1.2 M、9 mL)) を滴下し、2 時間攪拌した。次いで、化合物 (G) (1.28 g) を加え、25 °C で 1 時間攪拌した。反応液にヘキサン、イオン交換水を順次加え、分液し、有機相を取り分けた。有機相から溶媒と低沸点成分を減圧留去した後、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒: ヘキサン/酢酸エチル) を行うことで、化合物 (H) を 1.2 g 得た。化合物 (H) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (H) 中、n の平均値は 18 であった。

[0283]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  7.38–7.26 (m, 5H), 5.13 (s, 2H), 3.42 (m, 2H), 2.65 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.10–1.60 (m, 14H), 0.42 (m, 2H), 0.35–(–0.08) (m, 129H).

[0284] [化37]



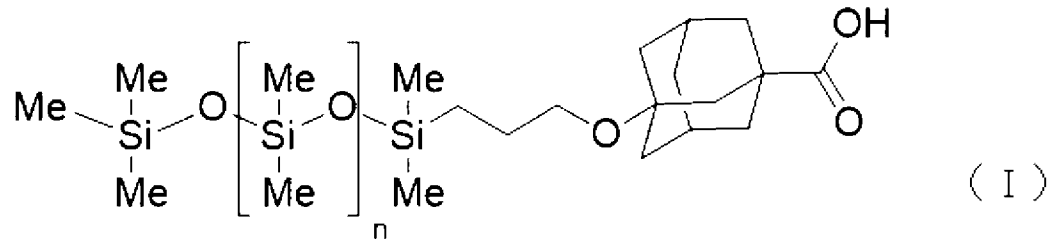
[0285] <工程 2 – 5 : 化合物 (I) の合成>

水素雰囲気下、100 mL フラスコに化合物 (H) (3.2 g)、10%パラジウム–炭素 (50%含水、320 mg)、THF (15 mL) を加え、25 °C で 4 時間攪拌した。反応液から不溶物を濾別し、濾液の溶媒を減圧下留去することで、化合物 (I) を 2.9 g 得た。化合物 (I) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (I) 中、n の平均値は 18 であった。

[0286]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  3.42 (m, 2H), 2.65 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.10–1.60 (m, 14H), 0.42 (m, 2H), 0.35–(–0.08) (m, 129H).

[0287]

[化38]

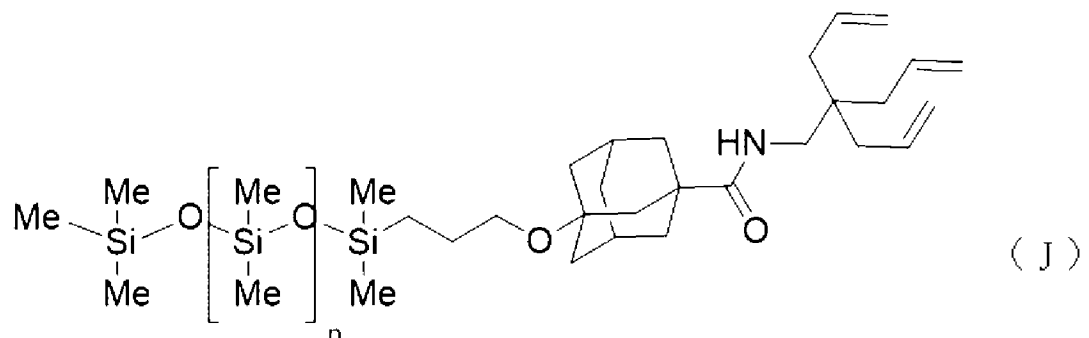


[0288] &lt;工程 2-6 : 化合物 (J) の合成&gt;

100 mL フラスコに化合物 (I) (1.5 g)、2, 2-ジアリルペンタ-4-エン-1-アミン (660 mg)、トリエチルアミン (0.70 mL)、THF (30 mL) を加え、25°C で攪拌した。次いで、1-プロパンホスホン酸無水物の酢酸エチル溶液 (50 質量%、1.5 mL) を加え、25°C で 16 時間攪拌した。反応液にイオン交換水を順次加えた後、酢酸エチルを加え、有機相として抽出した。有機相を 2 N 塩酸、飽和重層水及び飽和食塩水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した。次いで、有機相から溶媒と低沸点成分を減圧留去し、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒 : ヘキサン / 酢酸エチル) を行うことで、化合物 (J) を 1.3 g 得た。化合物 (J) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (J) 中、n の平均値は 18 であった。

[0289]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  5.81 (ddt,  $J=16.9, 10.2, 6.7\text{Hz}$ , 2H), 5.42-5.27 (m, 1H), 5.05-4.85 (m, 4H), 3.42 (m, 2H), 3.19 (m, 2H), 2.65 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.10-1.60 (m, 14H), 0.42 (m, 2H), 0.35-(-0.08) (m, 129H).

[0290] [化39]

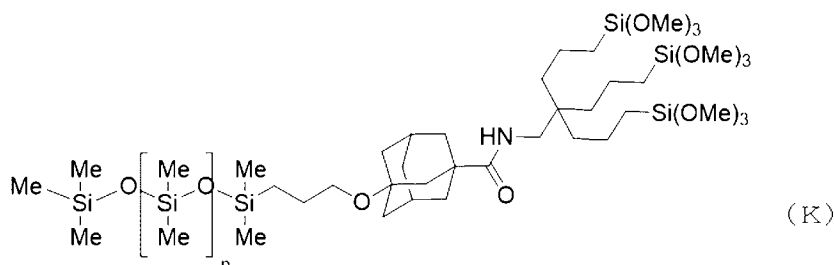


## [0291] &lt;工程 2-7 : 化合物 (K) の合成&gt;

100 mL フラスコにジクロロメタン (10 g)、化合物 (J) (0.80 g) を加え、25°C で攪拌した。白金 / 1, 3-ジビニル-1, 1, 3, 3-テトラメチルジシロキサン錯体のトルエン溶液 (白金含有量 : 3 質量%、4.1 mg)、アニリン (2.6 mg)、トリメトキシシラン (0.40 g) を加え、25°C で 2 時間攪拌した。反応液から溶媒を減圧留去することで、化合物 (K) を 0.75 g 得た。化合物 (K) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (K) 中、n の平均値は 18 であった。

[0292]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  5.66 (s, 1H), 3.42 (m, 2H), 3.19(m, 2H), 2.65 (m, 1H), 2.36 (m, 1H), 2.10-1.60 (m, 23H), 0.42 (m, 2H), 0.40 (m, 6H), 0.35-(-0.08) (m, 129H).

## [0293] [化40]



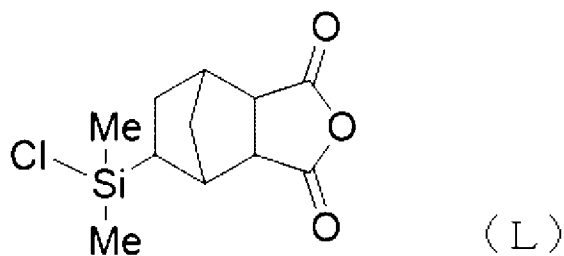
## [0294] [例 3 : 化合物 (O) ]

## &lt;工程 3-1 : 化合物 (L) の合成&gt;

窒素雰囲気下、200 mL フラスコに 5-ノルボルネン-2, 3-ジカルボン酸無水物 (3.0 g)、THF (5.0 mL)、クロロジメチルシラン (2.3 g) を加え、25°C で攪拌した。白金 / 1, 3-ジビニル-1, 1, 3, 3-テトラメチルジシロキサン錯体のキシレン溶液 (白金含有量 : 3 質量%、0.10 mL) を加え、70°C で 2 時間攪拌した。反応液から溶媒と低沸点成分を減圧留去することで、化合物 (L) を 3.1 g 得た。化合物 (L) の構造は、以下の NMR データより確認した。

[0295]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  3.75 (m, 2H), 3.15 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 2.21-1.58 (m, 5H), 0.43-(-0.08) (m, 6H).

[0296] [化41]

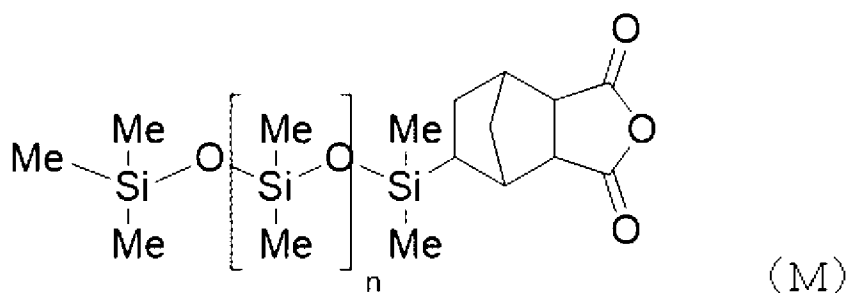


[0297] &lt;工程 3 - 2 : 化合物 (M) の合成&gt;

窒素雰囲気下、100 mL三口フラスコにトリメチルシラノール (0.19 g)、THF (5 mL) を加え、25°Cで攪拌した。次いで、0°Cに冷却し、*n*-BuLiのヘキサン溶液 (1.6 M、0.9 mL) を滴下した。次いで、ヘキサメチルシクロトリシロキサン (TMCS) のTHF溶液 (1.2 M、1 mL) を滴下し、さらにヘキサメチルシクロトリシロキサンのTHF溶液 (1.2 M、9 mL) を滴下し、2時間攪拌した。次いで、化合物 (L) (1.28 g) を加え、1時間攪拌した。反応液にヘキサン、イオン交換水を順次加え、分液し、有機相を取り分けた。有機相から溶媒と低沸点成分を減圧留去した後、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒: ヘキサン/酢酸エチル) を行うことで、化合物 (M) を1.2 g得た。化合物 (M) の構造は、以下のNMRデータより確認した。化合物 (M) 中、*n*の平均値は1.8であった。

[0298] <sup>1</sup>H-NMR (400MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ 3.75 (m, 2H), 3.15 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 2.21-1.50 (m, 5H), 0.06-(-0.10) (m, 129H)

[0299] [化42]

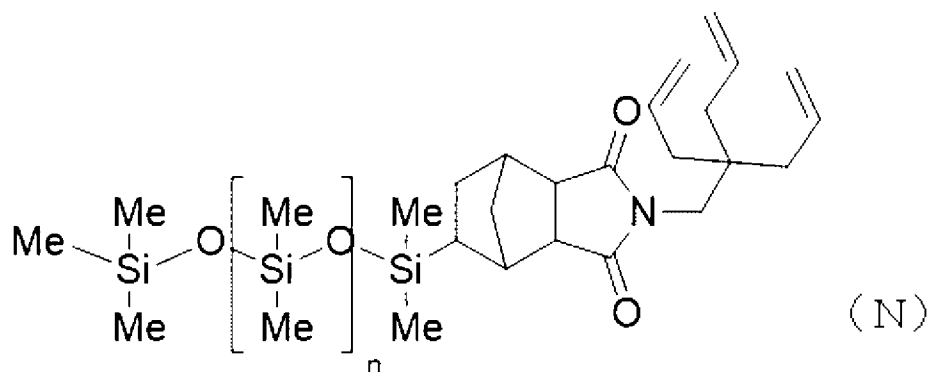


[0300] &lt;工程 3 - 3 : 化合物 (N) の合成&gt;

300 mL フラスコに DMF (100 mL)、化合物 (M) (1.0 g)、トリエチルアミン (1.0 g)、2, 2-ジアリルペンタ-4-エン-1-アミン (660 mg) を加え、一晩加熱還流を行った。反応液にヘキサン、イオン交換水を順次加え、分液し、有機相を取り分けた。有機相から溶媒と低沸点成分を減圧留去した後、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒: ヘキサン/酢酸エチル) を行うことで、化合物 (N) を 1.0 g 得た。化合物 (N) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (N) 中、n の平均値は 18 であった。

[0301]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  5.81 (m, 3H), 5.05-4.85 (m, 6H), 3.75 (m, 2H), 3.35 (m, 2H), 3.15 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 2.21-1.50 (m, 5H), 0.06-(-0.10) (m, 129H).

[0302] [化43]

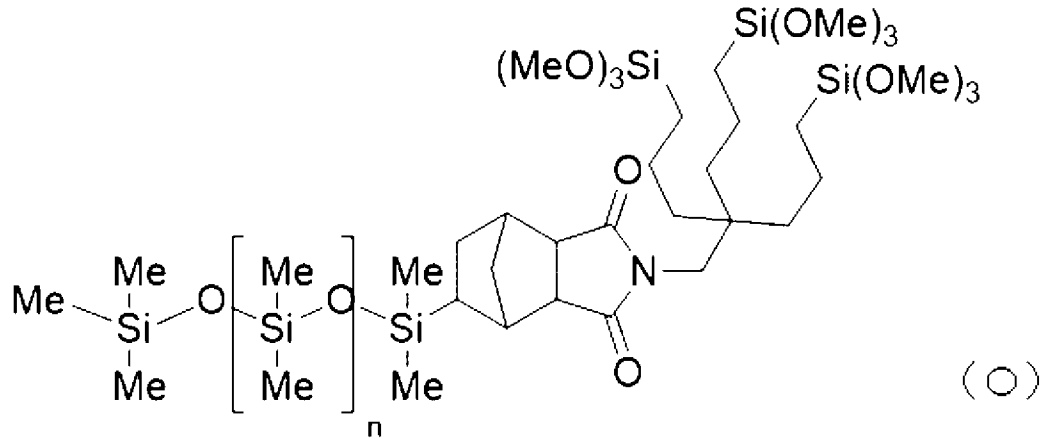


[0303] <工程 3-4 : 化合物 (O) の合成>

100 mL フラスコにジクロロメタン (10 g)、化合物 (N) (0.80 g) を加え、25°C で攪拌した。次いで、白金/1, 3-ジビニル-1, 1, 3, 3-テトラメチルジシロキサン錯体のトルエン溶液 (白金含有量: 3質量%、4.1 mg)、アニリン (2.6 mg)、トリメトキシシラン (0.40 g) を加え、25°C で 2 時間攪拌した。反応液から溶媒を減圧留去することで、化合物 (O) を 0.77 g 得た。化合物 (O) の構造は、以下の NMR データより確認した。化合物 (O) 中、n の平均値は 18 であった。

[0304]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  3.75 (m, 2H), 3.40 (s, 27H), 3.35 (m, 2H), 3.15 (m, 1H), 2.91 (m, 1H), 2.21–1.25 (m, 14H), 0.40 (m, 6H), 0.06–(–0.10) (m, 129H).

[0305] [化44]



[0306] [例4：化合物（R）]

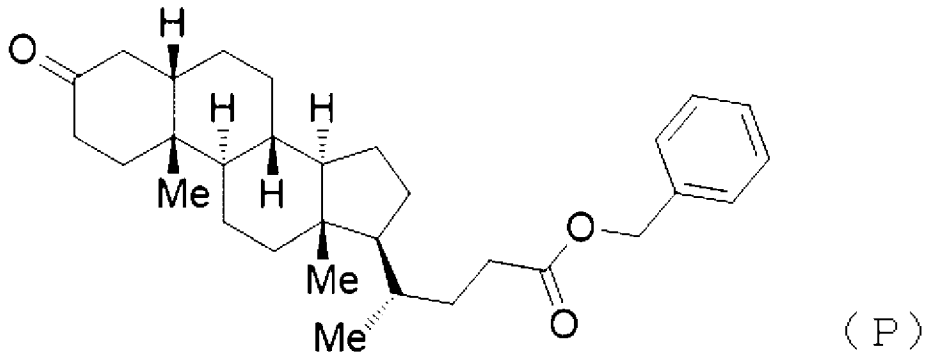
<工程4－1：化合物（P）の合成>

3－ヒドロキシ－4－アダマンタンカルボン酸に代えて3－オキソ－5 $\beta$ －コラン酸（5.2g）を原料として用いること以外は、例2の工程2－1と同様にして、化合物（P）を5.0g得た。化合物（P）の構造は、以下のNMRデータより確認した。

[0307]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  7.42–7.29 (m, 5H), 5.11 (d,  $J=2.6\text{Hz}$ , 2H), 2.51 (t,  $J=13.5\text{Hz}$ , 1H), 2.40 (ddd,  $J=15.1, 10.0, 5.0\text{Hz}$ , 1H), 2.27 (dd,  $J=15.6, 9.4, 6.7\text{Hz}$ , 1H), 2.15–1.92 (m, 3H), 1.92–1.74 (m, 4H), 1.52–0.94 (m, 19H), 0.94–0.84 (m, 8H).

[0308]

[化45]



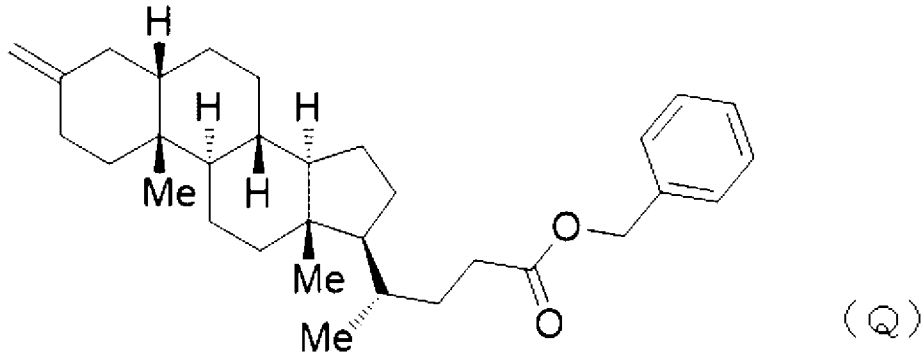
[0309] &lt;工程4-2：化合物（Q）の合成&gt;

300 mL フラスコにメチルトリフェニルホスホニウムブロミド (7.8 g)、THF (100 mL) を加え、 $-78^{\circ}\text{C}$  に冷却した。次いで、*n*-BuLi のヘキサン溶液 (33 mL、1.6 M) を加えた。次いで、 $0^{\circ}\text{C}$  に昇温し、1 時間攪拌した。再び  $-78^{\circ}\text{C}$  に冷却し、化合物 (P) (3.4 g) のテトラヒドロフラン溶液 (90 mL) を加え、 $0^{\circ}\text{C}$  で 12 時間攪拌した。反応液に塩化アンモニウム水溶液、ジエチルエーテルを順次加え、分液し、有機相を取り分けた。有機相を飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した後、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィ (展開溶媒：ヘキサン/酢酸エチル) を行うことで、化合物 (Q) を 2.2 g 得た。化合物 (Q) の構造は、以下の NMR データより確認した。

[0310]  $^1\text{H-NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  7.42–7.29 (m, 5H), 5.11 (d,  $J=2.6\text{Hz}$ , 2H), 4.64–4.49 (m, 2H), 2.51 (t,  $J=13.5\text{Hz}$ , 1H), 2.40 (ddd,  $J=15.1, 10.0, 5.0\text{Hz}$ , 1H), 2.27 (ddd,  $J=15.6, 9.4, 6.7\text{Hz}$ , 1H), 2.15–1.92 (m, 3H), 1.92–1.74 (m, 4H), 1.52–0.94 (m, 19H), 0.94–0.84 (m, 8H).

[0311]

[化46]

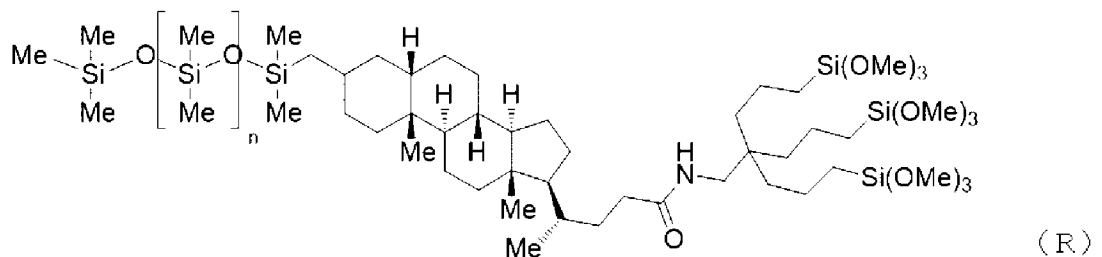


[0312] &lt;工程4-3：化合物(R)の合成&gt;

化合物(F)に代えて化合物(Q)を用いること以外は、例2の工程2-3~2-7と同様にして、化合物(R)を0.8g得た。化合物(R)の構造は、以下のNMRデータより確認した。化合物(R)中、nの平均値は18であった。

[0313]  $^1\text{H-NMR}$  (400MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  3.40 (s, 27H), 3.35 (m, 2H), 2.40 (ddd,  $J=15.1, 10.0, 5.0\text{Hz}$ , 1H), 2.27 (ddd,  $J=15.5, 9.3, 6.6\text{Hz}$ , 1H), 1.93 (d,  $J=10.7\text{Hz}$ , 1H), 1.83 (dd,  $J=10.8, 6.6\text{Hz}$ , 3H), 1.73 (d,  $J=13.1\text{Hz}$ , 1H), 1.60-0.79 (m, 95H), 0.42 (m, 2H), 0.40 (m, 6H), 0.22-(-0.24) (m, 129H).

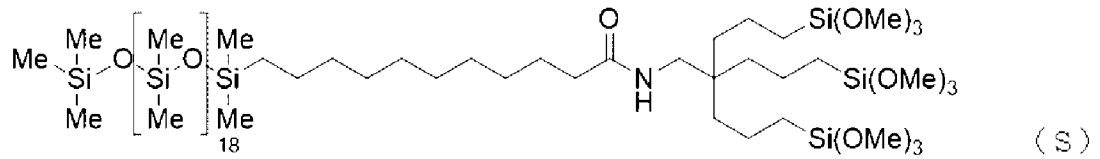
[0314] [化47]



[0315] [例5：化合物(S)]

国際公開第2023/017830号明細書の実施例1に記載の方法に従って、下記化合物(S)を合成した。下記化合物(S)中の「18」は、 $[-\text{Si}(\text{Me})_2\text{O}-]$ で表される繰り返し単位の平均値が18であったことを意味する。

[0316] [化48]



[0317] [物品の製造]

以下の方法で、例1～5で合成された各化合物を用いて基材に対して表面処理を行い、基材と、基材上に形成された表面処理層とを有する例101～105の物品をそれぞれ製造した。表面処理方法として、ウェットコーティング法を用いた。

真空蒸着装置（アルバック機工社製「VTR-350M」）内の銅製ハースに蒸着源として酸化ケイ素の30gを配置した。真空蒸着装置内にガラス基材を配置し、真空蒸着装置内を $5 \times 10^{-3}$  Pa以下の圧力になるまで排気した。上記ハースを約2000℃になるまで加熱し、基材の表面に酸化ケイ素を真空蒸着させ、厚さ約20nmの酸化ケイ素層を有する酸化ケイ素層付き基材を調製した。

酸化ケイ素層付き基材を酸化ケイ素層が表面になるように、スプレーコーター（株式会社アピロス製「API-90RS」）のサンプルステージ上に設置した。次に、各例で得られた化合物を0.2質量%含むヘプタン溶液13gを、スプレーコーター内のシリンジに投入し、霧化圧130kPa、ノズル-サンプル表面間の距離50mm、走査速度300mm/秒でスプレー塗布した（ウェットコーティング法）。その後、表面に化合物が塗布された酸化ケイ素層付き基材を140℃で30分間加熱処理し、基材、酸化ケイ素層及び表面層がこの順に積層された例101～105の評価サンプル（物品）を得た。

[0318] [評価]

ウェットコーティング法によって得られた例101～105の物品について、耐光性の評価を行った。評価方法は、以下のとおりである。

[0319] &lt;耐光性&gt;

物品の表面処理層上に、約  $2 \mu\text{L}$  の蒸留水を垂らし、接触角測定装置（製品名「DM-500」、協和界面科学社製）を用いて、水接触角を測定した。表面処理層上の5箇所測定し、測定値から算出された算術平均値を初期接触角とした。なお、水接触角の測定には  $2\theta$  法を用いた。

水銀ランプ（ウシオ電機株式会社製「SP-9250DB」）に均一照射射ユニット（ウシオ電機株式会社製）を取り付け、レンズから  $17.5 \text{ cm}$  の距離に、表面処理層が水銀ランプに対向するようにサンプルを設置した。 $200-800 \text{ nm}$  の光強度を強度計（VEGA, OPHIL社製）を用いて測定したところ、 $200 \text{ mW}/\text{cm}^2$  であった。温度  $20\sim 40^\circ\text{C}$ 、湿度  $30\sim 75\%$  の大気雰囲気下で、水銀ランプからの均一光をサンプルに  $100$  時間照射した。

照射後のサンプルの水接触角を、初期接触角と同様の方法で測定し、測定値から算出された算術平均値を照射後の水接触角とした。下記の計算式から照射前後の水接触角の差（低下度）を算出し、算出された照射前後の水接触角の差に基づいて、表面処理層の耐光性を評価した。照射前後の水接触角の差が小さいほど、耐光性に優れているといえる。

照射前後の水接触角の差 = (初期接触角) - (照射後の水接触角)

[0320] 耐光性の評価基準は以下のとおりである。

A：照射前後の水接触角の差が  $5^\circ$  未満であった。

B：照射前後の水接触角の差が  $5^\circ$  以上  $10^\circ$  未満であった。

C：照射前後の水接触角の差が  $10^\circ$  以上であった。

[0321] 評価結果を表1に示す。

例1～4及び101～104は実施例であり、例5及び105は比較例である。

表中、「化合物」の「脂環構造」欄は、各例で合成された化合物が有する脂環構造を示す。なお、「縮合環A」は「4-アザトリシクロ[5.2.1.0<sup>2,6</sup>]デカン環」を意味し、「縮合環B」は「ヘキサデカヒドロ-1H-シクロペンタ[a]フェナントレン環」を意味する。また、例5で合成され

た化合物（S）は脂環構造を有していないため、「脂環構造」欄には「なし」と記載した。

[0322] [表1]

化合物	例	1	2	3	4	5
	番号	(D)	(K)	(O)	(R)	(S)
	脂環構造	シクロペンタン環	アダーマンタン環	縮合環A	縮合環B	なし
物品	例	101	102	103	104	105
耐光性評価		B	A	B	A	C

[0323] 表1に示すように、例1～4の化合物は、例5の化合物に比べて、耐光性に優れる表面処理層を形成できることが分かった。

### 産業上の利用可能性

[0324] 本開示の化合物は、表面処理剤として有用である。表面処理剤は、例えば、タッチパネルディスプレイ等の表示装置、光学素子、半導体素子、建築材料、自動車部品、ナノインプリント技術等における基材に対して用いることができる。また、表面処理剤は、電車、自動車、船舶、航空機等の輸送機器におけるボディー、窓ガラス（フロントガラス、サイドガラス、リアガラス）、ミラー、バンパー等に対して用いることができる。さらに、表面処理剤は、建築物外壁、テント、太陽光発電モジュール、遮音板、コンクリート等の屋外物品；漁網、虫取り網、水槽に対して用いることができる。また、表面処理剤は、台所、風呂場、洗面台、鏡、トイレ周辺部品；シャンデリア、タイル等の陶磁器；人工大理石、エアコン等の各種屋内設備に対して用いることができる。また、表面処理剤は、工場内の治具、内壁、配管等の防汚処理としても用いることができる。また、表面処理剤は、ゴーグル、眼鏡、ヘルメット、パチンコ、繊維、傘、遊具、サッカーボールに対して用いることができる。また、表面処理剤は、食品用包材、化粧品用包材、ポットの内部等の各種包材の付着防止剤としても用いることができる。また、表面処理剤は、カーナビゲーション、携帯電話、スマートフォン、デジタルカメラ、デジタルビデオカメラ、PDA、ポータブルオーディオプレーヤー、カーオー

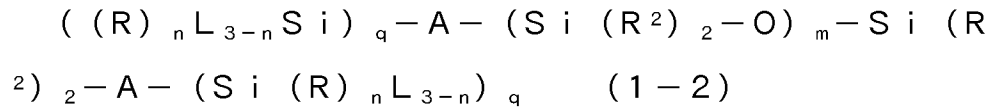
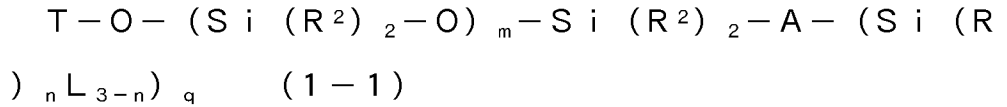
ディオ、ゲーム機器、眼鏡レンズ、カメラレンズ、レンズフィルター、サングラス、胃カメラ等の医療用器機、複写機、PC、ディスプレイ（例えば、液晶ディスプレイ、有機ELディスプレイ、プラズマディスプレイ、タッチパネルディスプレイ）、タッチパネル、保護フィルム、及び反射防止フィルム等の光学部材に対して用いることができる。

[0325] この出願は、2023年7月10日に出願された日本出願特願2023-113041を基礎とする優先権を主張し、その開示の全てをここに取り込む。

## 請求の範囲

[請求項1]

式(1-1)又は式(1-2)で表される化合物。



Tは、 $(R^1)_3Si-$ 、1価の環状のポリシロキサン残基又は1価のかご状のポリシロキサン残基であり、

$R^1$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

$R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

Aは、それぞれ独立に、ヘテロ原子を有していてもよい脂環構造を有する $(q+1)$ 価の連結基であり、

Rは、それぞれ独立に、炭化水素基であり、

Lは、それぞれ独立に、加水分解性基、加水分解性基を有する基又は水酸基であり、

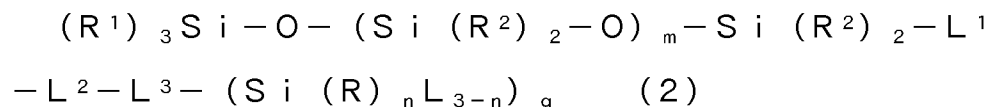
mは、0以上の数であり、

nは、それぞれ独立に、0~2の整数であり、

qは、それぞれ独立に、1以上の整数である。

[請求項2]

前記式(1-1)で表される化合物が、式(2)で表される化合物、式(3)で表される化合物、又は、式(4)で表される化合物である、請求項1に記載の化合物。



$R^1$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ基であり、

$R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシ

シ基であり、

$L^1$ は、単結合又は2価の連結基であり、

$L^2$ は、ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基であり、

$L^3$ は、 $(q + 1)$  価の連結基であり、

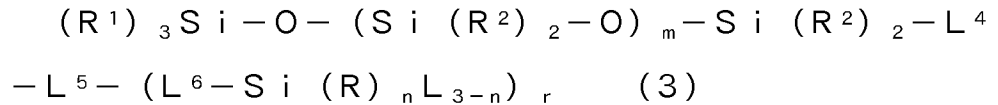
$R$ は、それぞれ独立に、炭化水素基であり、

$L$ は、それぞれ独立に、加水分解性基、加水分解性基を有する基又は水酸基であり、

$m$ は、0以上の数であり、

$n$ は、それぞれ独立に、0～2の整数であり、

$q$ は、1以上の整数である。



$R^1$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシシ基であり、

$R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシシ基であり、

$L^4$ は、単結合又は2価の連結基であり、

$L^5$ は、 $(r + 1)$  価のヘテロ原子を有していてもよい脂環基であり、

$L^6$ は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基であり、

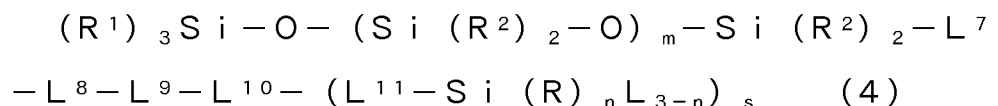
$R$ は、それぞれ独立に、炭化水素基であり、

$L$ は、それぞれ独立に、加水分解性基、加水分解性基を有する基又は水酸基であり、

$m$ は、0以上の数であり、

$n$ は、それぞれ独立に、0～2の整数であり、

$r$ は、1以上の整数である。



$R^1$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシシ基であり、

$R^2$ は、それぞれ独立に、炭化水素基又はトリアルキルシリルオキシシ基であり、

$L^7$ 及び $L^9$ は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基であり、

$L^8$ は、ヘテロ原子を有していてもよい2価の脂環基であり、

$L^{10}$ は、 $(r+1)$  価のヘテロ原子を有していてもよい脂環基であり、

$L^{11}$ は、それぞれ独立に、単結合又は2価の連結基であり、

$R$ は、それぞれ独立に、炭化水素基であり、

$L$ は、それぞれ独立に、加水分解性基、加水分解性基を有する基又は水酸基であり、

$m$ は、0以上の数であり、

$n$ は、それぞれ独立に、0～2の整数であり、

$s$ は、1以上の整数である。

[請求項3]  $m$ が2～600の数である、請求項1に記載の化合物。

[請求項4]  $q$ が1～4の整数である、請求項1に記載の化合物。

[請求項5]  $m$ が2～600の数である、請求項2に記載の化合物。

[請求項6]  $q$ が1～4の整数である、請求項2に記載の化合物。

[請求項7] 請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物と、液状媒体と、を含む組成物。

[請求項8] 請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物を含む、表面処理剤。

[請求項9] 請求項1～6のいずれか1項に記載の化合物と、液状媒体と、を含む、表面処理剤。

[請求項10] 基材に対して、請求項8に記載の表面処理剤を用いて表面処理を行い、基材上に表面処理層が形成された物品を製造する、物品の製造方法。

- [請求項11] 基材と、前記基材上に配置され、請求項8に記載の表面処理剤で表面処理された表面処理層と、を含む物品。
- [請求項12] 光学部材である、請求項11に記載の物品。
- [請求項13] ディスプレイ又はタッチパネルである、請求項11に記載の物品。
- [請求項14] 基材に対して、請求項9に記載の表面処理剤を用いて表面処理を行い、基材上に表面処理層が形成された物品を製造する、物品の製造方法。
- [請求項15] 基材と、前記基材上に配置され、請求項9に記載の表面処理剤で表面処理された表面処理層と、を含む物品。
- [請求項16] 光学部材である、請求項15に記載の物品。
- [請求項17] ディスプレイ又はタッチパネルである、請求項15に記載の物品。

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/025028

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>		
<p><i>C08G 77/48</i>(2006.01)i; <i>C08K 5/00</i>(2006.01)i; <i>C08L 83/04</i>(2006.01)i; <i>C09D 183/04</i>(2006.01)i; <i>C09K 3/18</i>(2006.01)i  FI: C08G77/48; C08L83/04; C08K5/00; C09K3/18 104; C09D183/04</p> <p>According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC</p>		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C08G77/48; C08K5/00; C08L83/04; C09D183/04; C09K3/18		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2023/017830 A1 (DAIKIN INDUSTRIES, LTD.) 16 February 2023 (2023-02-16) claims 1, 21, 24, 28-30, example 10	1-17
X	JP 2004-331596 A (SHIN-ETSU CHEMICAL CO., LTD.) 25 November 2004 (2004-11-25) claim 1, paragraph [0066], example 1, application example 1	1, 2, 4-17
X	JP 2014-514398 A (DOW CORNING CORPORATION) 19 June 2014 (2014-06-19) claims 1, 12, paragraphs [0077], [0079], examples, chemical formulas 33-37, condensation-curable silicone organic copolymer	1-17
X	JP 2012-525480 A (MOMENTIVE PERFORMANCE MATERIALS INC.) 22 October 2012 (2012-10-22) claims 1, 18, 20, table 1, examples 4, 6	1-17
X	JP 4-224589 A (KANEKAFUCHI CHEM IND CO., LTD.) 13 August 1992 (1992-08-13) claim 1, paragraphs [0055], [0059], example 13	1-17
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
<p>* Special categories of cited documents:</p> <p>“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance</p> <p>“D” document cited by the applicant in the international application</p> <p>“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date</p> <p>“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)</p> <p>“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means</p> <p>“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed</p> <p>“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention</p> <p>“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone</p> <p>“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art</p> <p>“&amp;” document member of the same patent family</p>		
Date of the actual completion of the international search <b>25 September 2024</b>		Date of mailing of the international search report <b>08 October 2024</b>
Name and mailing address of the ISA/JP <b>Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan</b>		Authorized officer  Telephone No.

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/025028

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2017/0362391 A1 (3M INNOVATIVE PROPERTIES COMPANY) 21 December 2017 (2017-12-21) claim 1, paragraphs [0147]-[0148], example 5	1-17
X	CN 113337245 A (SHENZHEN XISHUN SILICONE TECHNOLOGY CO., LTD.) 03 September 2021 (2021-09-03) claims 1, 8, examples 1-4	1-7
X	CN 111072712 A (DONGGUAN CITY BETTERLY NEW MATERIALS CO., LTD.) 28 April 2020 (2020-04-28) claims 1, 6, examples 1, 2	1, 4

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.

**PCT/JP2024/025028**

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2023/017830	A1	16 February 2023	EP 4378945 A1 claims 1, 21, 24, 28-30, example 10	
				US 2024/0199657 A1	
				CN 117813311 A	
				KR 10-2024-0035872 A	
				TW 202319487 A	
				JP 2023-25695 A	
				JP 2024-28309 A	
JP	2004-331596	A	25 November 2004	(Family: none)	
JP	2014-514398	A	19 June 2014	WO 2012/134852 A1 claims 1, 12, paragraphs [0037], [0039], examples, paragraphs [0050]-[0056], condensation-curable silicone organic copolymer	
				US 2014/0018494 A1	
				CN 103459470 A	
JP	2012-525480	A	22 October 2012	WO 2010/126937 A1 claims 1, 18, 20, table 1, examples 4, 6	
				US 2010/0317796 A1	
				CN 102459487 A	
JP	4-224589	A	13 August 1992	(Family: none)	
US	2017/0362391	A1	21 December 2017	WO 2016/094199 A1	
				CN 107001858 A	
CN	113337245	A	03 September 2021	(Family: none)	
CN	111072712	A	28 April 2020	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） C08G 77/48(2006.01)i; C08K 5/00(2006.01)i; C08L 83/04(2006.01)i; C09D 183/04(2006.01)i; C09K 3/18(2006.01)i FI: C08G77/48; C08L83/04; C08K5/00; C09K3/18 104; C09D183/04		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） C08G77/48; C08K5/00; C08L83/04; C09D183/04; C09K3/18 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2024年 日本国実用新案登録公報 1996-2024年 日本国登録実用新案公報 1994-2024年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	WO 2023/017830 A1 (ダイキン工業株式会社) 16.02.2023 (2023-02-16) 請求項1, 21, 24, 28-30, 実施例10	1-17
X	JP 2004-331596 A (信越化学工業株式会社) 25.11.2004 (2004-11-25) 請求項1, [0066], 実施例1, 応用例1	1, 2, 4-17
X	JP 2014-514398 A (ダウ コーニング コーポレーション) 19.06.2014 (2014-06-19) 請求項1, 12, [0077], [0079], [実施例], [化33]-[化37]の縮合硬化性シリコン有機ポリマー	1-17
X	JP 2012-525480 A (モメンティブ パフォーマンス マテリアルズ インコーポレイテッド) 22.10.2012 (2012-10-22) 請求項1, 18, 20, 表1, 実施例4, 6	1-17
X	JP 4-224589 A (鐘淵化学工業株式会社) 13.08.1992 (1992-08-13) 請求項1, [0055], [0059], 実施例13	1-17
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献 “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日	25.09.2024	国際調査報告の発送日 08.10.2024
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官）  今井 督 4J 5812  電話番号 03-3581-1101 内線 3495	

C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリ*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	US 2017/0362391 A1 (3M INNOVATIVE PROPERTIES COMPANY) 21.12.2017 (2017 - 12 - 21) 請求項1, [0147]-[0148], 実施例5	1-17
X	CN 113337245 A (SHENZHEN XISHUN SILICONE TECHNOLOGY CO., LTD.) 03.09.2021 (2021 - 09 - 03) 請求項1, 8, 実施例1-4	1-7
X	CN 111072712 A (DONGGUAN CITY BETTERLY NEW MATERIALS CO., LTD.) 28.04.2020 (2020 - 04 - 28) 請求項1, 6, 実施例1, 2	1, 4

国際調査報告  
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/025028

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2023/017830 A1	16.02.2023	EP 4378945 A1 請求項1, 21, 24, 28-30, 実施例10 US 2024/0199657 A1 CN 117813311 A KR 10-2024-0035872 A TW 202319487 A JP 2023-25695 A JP 2024-28309 A	
JP 2004-331596 A	25.11.2004	(ファミリーなし)	
JP 2014-514398 A	19.06.2014	WO 2012/134852 A1 請求項1, 12, [0037], [0039], [実施例], [0050]-[0056]の縮合硬化性シリコーン有機コポリマー US 2014/0018494 A1 CN 103459470 A	
JP 2012-525480 A	22.10.2012	WO 2010/126937 A1 請求項1, 18, 20, 表1, 実施例4, 6 US 2010/0317796 A1 CN 102459487 A	
JP 4-224589 A	13.08.1992	(ファミリーなし)	
US 2017/0362391 A1	21.12.2017	WO 2016/094199 A1 CN 107001858 A	
CN 113337245 A	03.09.2021	(ファミリーなし)	
CN 111072712 A	28.04.2020	(ファミリーなし)	