



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년05월31일

(11) 등록번호 10-2404293

(24) 등록일자 2022년05월27일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C08G 77/442* (2006.01) *C08G 77/08* (2006.01)  
*C08G 77/12* (2006.01) *C10M 173/02* (2006.01)

(52) CPC특허분류  
*C08G 77/442* (2013.01)  
*C08G 77/08* (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-7027242

(22) 출원일자(국제) 2015년04월02일  
 심사청구일자 2020년03월26일

(85) 번역문제출일자 2016년09월30일

(65) 공개번호 10-2016-0142301

(43) 공개일자 2016년12월12일

(86) 국제출원번호 PCT/EP2015/057364

(87) 국제공개번호 WO 2015/155127  
 국제공개일자 2015년10월15일

(30) 우선권주장  
 1406234.3 2014년04월07일 영국(GB)

(56) 선행기술조사문헌  
 US20020183445 A1  
 US05959056 A  
 JP2011111524 A

(73) 특허권자  
**헨켈 아게 운트 코. 카게아아**  
 독일 40589 뒤셀도르프 헨켈스트라쎄 67

(72) 발명자  
**코크 다우베-마르텐**  
 네덜란드 엔엘-9679 씨엘 썬다 토룸 8  
**슬라흐트 마르틴 쿼코**  
 네덜란드 엔엘-9526 티씨 브론네헤르펜 도르프스  
 스트라트 10  
 (뒷면에 계속)

(74) 대리인  
**특허법인코리아나**

전체 청구항 수 : 총 14 항

심사관 : 정태광

(54) 발명의 명칭 무-왁스 다이 캐스팅 윤활제용 신규 개질된 실리콘 오일

**(57) 요약**

본 발명은, 단일불포화 올레핀의 혼합물을 히드로실릴화 촉매 존재 하에서일정량의 하나 이상의 폴리알킬히드로실록산과 반응시키는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득가능한 폴리알킬실록산의 혼합물에 관한 것이다. 나아가, 본 발명은 탄소수 40 내지 60 의, 탄소수 16 내지 30 의, 및 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 알킬 측쇄를 포함하는 폴리알킬실록산에 관한 것이다. 또한, 본 발명은, 폴리알킬실록산의 혼합물, HLB 값이 8 이상인 비이온성 계면활성제, 및 20 wt.-% 미만의 왁스를 포함하는, 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서 사용하기에 적합한 수계 조성물에 관한 것이다. 또한, 본 발명은 폴리알킬실록산 및 폴리알킬실록산의 혼합물의 용도에 관한 것이다.

(52) CPC특허분류

**C08G 77/12** (2013.01)

**C10M 173/02** (2013.01)

**C10M 2229/041** (2013.01)

**C10M 2229/044** (2013.01)

**C10N 2040/36** (2020.05)

(72) 발명자

**오딩크 헤리트 얀**

네덜란드 엔엘-9674 제이엔 빈쇼텐 슬레도른벡 179

**브람 요한네스 헨드리쿠스 헤르하르두스 프란시스  
쿠스**

네덜란드 엔엘-9502 브이브이 스타드스카날 뢰베리  
크호프 22

## 명세서

## 청구범위

### 청구항 1

- a) 1-20 mol % 의, 탄소수 40 내지 60 의 올레핀,
- b) 1-20 mol % 의, 탄소수 16 내지 30 의 올레핀, 및
- c) 60-98 mol % 의, 탄소수 6 내지 15 의 올레핀

으로 이루어진 단일불포화 올레핀의 혼합물을,

히드로실릴화 촉매 존재 하에서 일정량의 하나 이상의 폴리알킬히드로실록산과 반응시키는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득가능한 폴리알킬실록산의 혼합물로서,

단, 각각의 폴리알킬히드로실록산이 일반 구조 (I) 에 따른 반복 단위를 포함하는 폴리알킬실록산의 혼합물:



(여기서, n 은 5 내지 10,000 범위의 반복 단위의 수를 나타내고;

잔기  $\text{R}^1$  은 탄소수 6 미만의 선형 또는 분지형 알킬기로부터 선택됨).

### 청구항 2

제 1 항에 있어서, 폴리알킬히드로실록산을 화학량론적 양의 60 % 이상, 또는 80 % 이상이거나, 화학량론적 양 이하의 양으로 이용하여 수행되는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된 폴리알킬실록산의 혼합물.

### 청구항 3

제 1 항에 있어서, 폴리메틸히드로실록산으로부터 적어도 부분적으로 선택되는 폴리알킬히드로실록산, 또는 80 mol% 이상의 일반 구조 (I) 에 따른 반복 단위가 메틸기인 잔기  $\text{R}^1$  을 갖는 폴리알킬히드로실록산을 이용하여 수행되는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된 폴리알킬실록산의 혼합물.

### 청구항 4

제 1 항에 있어서, 80 mol% 이상의 단일불포화 올레핀이  $\alpha$ -올레핀으로부터 선택되는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된 폴리알킬실록산의 혼합물.

### 청구항 5

제 1 항에 있어서, 히드로실릴화 촉매가 백금 촉매, speier 촉매 또는 karstedt 촉매인, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된 폴리알킬실록산의 혼합물.

### 청구항 6

제 1 항에 있어서, 반응 혼합물을 80 내지 180 °C 범위의 온도에서, 10 mol% 이하의 Si-H 결합을 함유하는 폴리알킬실록산의 혼합물을 수득하기에 충분한 시간 동안 유지시키는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된 폴리알킬실록산의 혼합물.

### 청구항 7

제 1 항에 있어서,

- i) 하나 이상의 폴리알킬히드로실록산 및/또는 단일불포화 올레핀의 혼합물의 양에 대하여 용매로서 작용

하는 불활성 액체 비히클의 중량 분율이, 20 wt.-% 미만, 또는 10 wt.-% 미만, 또는 1 wt.-% 미만이고/이거나;

ii) 폴리알킬실록산의 혼합물이 오일인,

히드로실릴화 반응을 통해 수득된 폴리알킬실록산의 혼합물.

#### 청구항 8

일반 구조 (II) 에 따른 반복 단위를 포함하는 폴리알킬실록산:



(여기서, n 은 폴리알킬실록산 내에 포함되는 반복 단위의 수를 나타내고, 여기서 n 은 5 내지 10,000 의 정수이고, 잔기 R<sup>1</sup> 은 탄소수 6 미만의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

여기서,

- a) 반복 단위 중 1-20 % 에서, R<sup>2</sup> 는 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- b) 반복 단위 중 1-20 % 에서, R<sup>2</sup> 는 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 및
- c) 반복 단위 중 60-98 % 에서, R<sup>2</sup> 는 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되며,
- d) 반복 단위 중 0-10 %, 또는 10 % 미만에서, R<sup>2</sup> 는 H 임).

#### 청구항 9

제 8 항에 있어서,

- i) 반복 단위 중 2-10 % 에서, R<sup>2</sup> 가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고;
  - ii) 반복 단위 중 2-15 % 에서, R<sup>2</sup> 가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고;
  - iii) 반복 단위 중 75-96 % 또는 75-90 % 에서, R<sup>2</sup> 가 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고;
  - iv) a) 에 따른 반복 단위 대 b) 에 따른 반복 단위의 비가 2 : 3 내지 3 : 2 범위이고;
  - v) 폴리알킬실록산이 오일이고/오일이거나;
  - vi) 각각의 일반 구조 (II) 에 따른 반복 단위의 R<sup>1</sup> 이 메틸기인,
- 폴리알킬실록산.

#### 청구항 10

- a) 1-50 wt.-% 의, 제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 따른 폴리알킬실록산의 혼합물, 또는 제 8 항 또는 제 9 항에 따른 폴리알킬실록산 하나 이상,
- b) 1-15 wt.-% 의, HLB 값이 8 이상인 비(非)이온성 계면활성제, 및

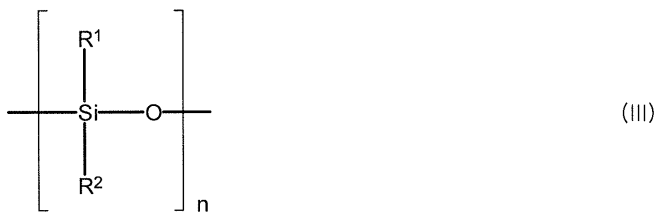
c) 20 wt.-% 미만, 또는 10 wt.-% 미만, 또는 1 wt.-% 미만, 또는 0.1 wt.-% 미만의, 왁스를 포함하는,  
금속 캐스팅 공정에서 이형제로서 사용하기에 적합한 수계 (water-based) 조성물.

#### 청구항 11

금속 캐스팅 공정에서 이형제로서 사용되는 폴리알킬실록산으로서,  
여기서

- i) 폴리알킬실록산이 제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 따른 폴리알킬실록산의 혼합물이거나,
- ii) 폴리알킬실록산이 제 8 항 또는 제 9 항에 따른 폴리알킬실록산이거나, 또는
- iii) 폴리알킬실록산이 하기 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위를 포함하는,

폴리알킬실록산:



(여기서, n 은 5 내지 10,000 범위의 반복 단위의 수를 나타내고;

각각의 반복 단위에 있어서, 잔기  $\text{R}^1$  은 독립적으로 탄소수 6 미만의 선형 알킬기로부터 선택되고; 및

각각의 반복 단위에 있어서, 잔기  $\text{R}^2$  는 독립적으로 수소 또는 탄소수 6 내지 15, 탄소수 16 내지 30 또는 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기로부터 선택되며, 단, 잔기  $\text{R}^2$  가 수소인 반복 단위의 분율은 0.1 미만이고, 잔기  $\text{R}^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.01-0.2 범위이고, 잔기  $\text{R}^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.01-0.2 범위이고, 및 잔기  $\text{R}^2$  가 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.6-0.98 범위임).

#### 청구항 12

제 11 항에 있어서, 여기서 옵션 iii) 에 있어서,

- a)  $\text{R}^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 분율이, 0.02 이상, 또는 0.05 이상이지만, 0.15 이하이고;
- b)  $\text{R}^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 분율이, 0.02 이상, 또는 0.05 이상이지만, 0.10 이하이고/이거나;
- c) 잔기  $\text{R}^2$  가 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 분율이, 0.96 이하, 또는 0.90 이하이지만, 0.75 이상인,

폴리알킬실록산.

#### 청구항 13

제 11 항에 있어서, 잔기  $\text{R}^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위 대 잔기  $\text{R}^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 비가 2 : 3 내지 3 : 2 인 폴리알킬실록산.

## 청구항 14

제 11 항에 있어서,

i) 각각의 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 잔기  $R^1$  이 메틸기이고;

ii) 폴리알킬실록산의 동점도 (kinematic viscosity) 가 25 °C 에서 200 내지 20000 mPa · s, 또는 25 °C 에서 200 내지 7000 mPa · s 이고/이거나;

iii) 폴리알킬실록산이 오일인,

폴리알킬실록산.

## 발명의 설명

### 기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 실리콘, 이의 제조 방법 및 이의 용도, 예를 들어 다이 캐스팅 (die casting) 윤활제로서의 용도에 관한 것이다.

### 배경 기술

[0002] 왁스는 통상적으로 가압 다이 캐스팅 이형체에, 주로 수성 에멀전으로서 사용되어, 특히 크고 무거운 캐스팅에 대하여 양호한 윤활 및 이형을 제공한다. 하지만, 왁스의 사용은 스프레이 노즐 상에의 왁스를 축적을 유도하고, 이는 결과적으로 스프레이 노즐을 막아, 스프레이 장비의 정기적인 대규모 세척을 필요로 한다. 나아가, 몰드에 접촉되는 잔류 왁스로 인해, 상기와 같은 공정은 또한 캐스팅 장비의 수반되는 정지시간 (downtime) 을 이용한 몰드의 정기적인 세척을 필요로 한다. 또한, 왁스의 사용은 이의 만족스러운 페인팅 또는 플레이팅 (plating) 을 달성하기 위하여 캐스팅의 과도한 세척을 수반할 수도 있다.

[0003] US 6,635,606 B2 에는, 디메틸 실리콘 및 탄소수 6-18 의 알킬쇄를 갖는 알킬-개질된 실리콘의 혼합물, 계면활성제, 및 물을 포함하는 수성 에멀전인 이형체가 개시되어 있다. 알킬-개질된 실리콘의 동점도 (kinematic viscosity) 는 25 °C 에서 100-3000 cSt 이다.

[0004] US 6,211,323 B1 은, 트리오르가노실록시-말단블록화된 폴리(메틸(C6-C40알킬)실록산)-폴리(메틸(아르알킬)실록산)-폴리(메틸(C2-C4알킬)실록산) 삼원중합체 및 이형체로서의 이의 용도에 관한 것이다.

[0005] US 2005/0167071 A1 에는, 분자량 9,000 내지 50,000 및 용융점 약 90 내지 220 °F 의 실리콘 왁스 화합물을 포함하는, 다이 캐스트 몰드에서의 윤활을 위한 다이 캐스트 이형체로서, 여기서 실리콘 왁스 화합물이 탄소수 18 이상의 알킬 측쇄를 갖는 다이 캐스트 이형체가 개시되어 있다. 또한, 중쇄 (medium length) 알킬기로 관능화된 폴리실록산 기재의 몇몇의 무(無)-왁스 가압 다이 캐스팅 이형체가 시판되고 있다. 하지만, 모든 이러한 윤활제들은 특히 크고 무거운 캐스팅에 있어서, 왁스 함유 제품과 완전하게 경쟁할 수가 없다.

### 발명의 내용

[0006] 따라서, 본 발명의 목적은 왁스계 가압 다이 캐스팅 이형체와 동일한 윤활 특성 및 캐스팅 이형 속도를 갖고, 이에 관련된 단점, 예를 들어 캐스트의 이형 후 몰딩 세척의 필요, 및 캐스팅의 페인팅 또는 플레이팅 전 캐스팅 세척의 필요를 갖지 않는, 대안적인 가압 다이 캐스팅 이형체를 제공하는 것이다.

[0007] 따라서, 제 1 측면에서, 본 발명은

[0008] a) 1-20 mol % 의, 탄소수 40 내지 60 의 올레핀,

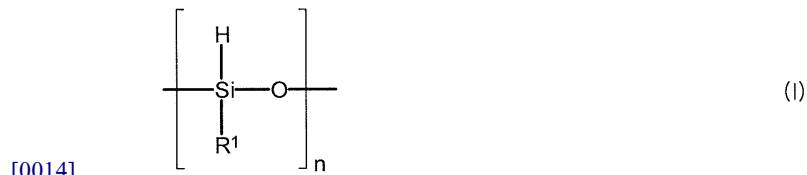
[0009] b) 1-20 mol % 의, 탄소수 16 내지 30 의 올레핀, 및

[0010] c) 60-98 mol % 의, 탄소수 6 내지 15 의 올레핀

[0011] 으로 이루어진 단일불포화 올레핀의 혼합물을,

[0012] 히드로실릴화 촉매 존재 하에서 일정량의 하나 이상의 폴리알킬히드로실록산과 반응시키는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득가능한 폴리알킬실록산의 혼합물로서,

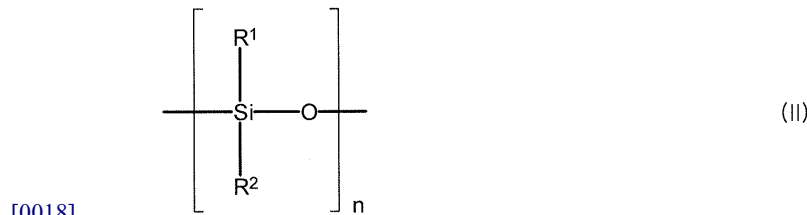
[0013] 단, 각각의 폴리알킬히드로실록산이 일반 구조 (I) 에 따른 반복 단위를 포함하는 폴리알킬실록산의 혼합물에 관한 것이다:



[0015] (여기서, n 은 5 내지 10,000 범위의 반복 단위의 수를 나타내고;

[0016] 잔기 R<sup>1</sup> 은 탄소수 6 미만의 선형 또는 분지형 알킬기로부터 선택됨).

[0017] 또 다른 측면에서, 본 발명은 일반 구조 (II) 에 따른 반복 단위를 포함하는 폴리알킬실록산에 관한 것이다:



[0019] (여기서, n 은 폴리알킬실록산 내에 포함되는 반복 단위의 수를 나타내고, 여기서 n 은 5 내지 10,000 의 정수 이고, 잔기 R<sup>1</sup> 은 탄소수 6 미만의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0020] 여기서,

[0021] a) 반복 단위 중 1-20 % 에서, R<sup>2</sup> 는 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0022] b) 반복 단위 중 1-20 % 에서, R<sup>2</sup> 는 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 및

[0023] c) 반복 단위 중 60-98 % 에서, R<sup>2</sup> 는 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

[0024] d) 반복 단위 중 0-10 %, 바람직하게는 10 % 미만에서, R<sup>2</sup> 는 H 임).

[0025] 추가의 측면에서, 본 발명은

[0026] a) 1-50 wt.-% 의, 상기 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산의 혼합물 또는 폴리알킬실록산,

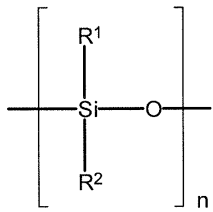
[0027] b) 1-15 wt.-% 의, HLB 값이 8 이상인 비(非)이온성 계면활성제, 및

[0028] c) 20 wt.-% 미만, 바람직하게는 10 wt.-% 미만, 더욱 바람직하게는 1 wt.-% 미만, 보다 더욱 바람직하게는 0.1 wt.-% 미만의, 왁스

[0029] 를 포함하는,

[0030] 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서 사용하기에 적합한 수계 (water-based) 조성물에 관한 것이다.

[0031] 또 다른 측면에서, 본 발명은 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서의 폴리알킬실록산의 용도로서, 여기서 i) 폴리알킬실록산이 본원에 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산의 혼합물이거나, ii) 폴리알킬실록산이 본원에 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산이거나, 또는 iii) 폴리알킬실록산이 하기 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위를 포함하는, 폴리알킬실록산의 용도에 관한 것이다:



(III)

[0032]

[0033]

(여기서,  $n$  은 5 내지 10,000 범위의 반복 단위의 수를 나타내고;

[0034]

각각의 반복 단위에 있어서, 잔기  $R^1$  은 독립적으로 탄소수 6 미만의 선형 알킬기로부터 선택되고; 및

[0035]

각각의 반복 단위에 있어서, 잔기  $R^2$  는 독립적으로 수소 또는 탄소수 6 내지 15, 탄소수 16 내지 30 또는 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기로부터 선택되며, 단, 잔기  $R^2$  가 수소인 반복 단위의 분율은 0.1 미만이고, 잔기  $R^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.01-0.2 범위이고, 잔기  $R^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.01-0.2 범위이고, 및 잔기  $R^2$  가 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.6-0.98 범위임).

[0036]

추가구현예는 첨부된 청구항에 정의되어 있다.

[0037]

본 발명의 발명자들은 놀랍게도, 폴리실록산 내 장쇄 알킬기의 혼입이, 폴리실록산 중합체에 가압 다이 캐스팅 이형제에서의 왁스의 특성과 유사한 윤활 특성을 부여한다는 것을 발견하였다. 나아가, 본 발명자들은 폴리실록산 골격에의 단쇄, 중쇄 및 장쇄 알킬기의 혼합물의 사용이, 이의 점도에 대한 탁월한 조절을 제공한다는 것을 발견하였다. 특정 이론에 구애됨 없이, 장쇄 알킬기는 가압 다이 캐스팅에 수반되는 유리한 특징을 갖는 왁스형 특징을 폴리실록산에 제공하며, 단쇄 및 중쇄 알킬기는 동시에 왁스-함유 이형제의 단점을 제거하는 것으로 여겨진다.

[0038]

이러한 특징은 무-왁스 가압 다이 캐스팅 이형제 중의 이러한 화합물의 적용에 유리하다. 특히, 가압 다이 캐스팅 이형제 중의 이러한 개질된 폴리실록산의 적용은, 스프레이 노즐 및 몰드 상에의 왁스의 불리한 축적, 및 왁스-함유 이형제가 직면하는 페인팅성 (paintability) 문제 없이, 왁스의 유리한 윤활 특성들을 조합한다.

[0039]

따라서, 무-왁스 윤활제의 사용은 페인팅 또는 플레이팅 전 세척을 불필요하게 한다.

[0040]

나아가, 윤활제 중 부가적인 왁스의 부재 (absence) 는 노즐 및 다이 상에의 고체 왁스 잔류물의 축적을 방지한다. 이는 스프레이 장비의 정기적인 시간 소비적 세척을 필요하지 않게 한다. 나아가, 수득되는 캐스팅은 보다 깨끗하고, 부가적인 세척 단계의 필요 없이 후속 페인팅 또는 플레이팅에 보다 적합하다. 또한, 본 발명의 윤활제는 현재의 무-왁스 다이 캐스팅 윤활제와 비교시, 보다 우수한 성능을 나타낸다.

[0041]

이러한 신규하고 개선된 폴리알킬실록산 유도체는 실리콘 오일 형태일 수 있다.

[0042]

이러한 화합물은 가압 다이 캐스팅에서 윤활제로서 직접 사용되거나 또는 무-왁스 이형제 중에 포함될 수 있다.

[0043]

신규한 폴리알킬실록산 유도체는 수계 에멀전으로서가 특히 유리하다.

[0044]

하지만, 본 출원의 제 2 분야는, 실리콘 오일이 몰드 상에 직접 (에멀전으로서가 아님) 적용되는 캐스팅 공정에서의 신규 개질된 실리콘 오일의 용도이다. 왁스는 실리콘 오일 중에서의 이의 불용성으로 인해 이러한 기법에 적용될 수 없다. 따라서, 이러한 기법에서의 신규 개질된 실리콘 오일의 사용은 실리콘 오일 중에서의 왁스형 특징의 혼입을 가능하게 한다.

[0045]

따라서, 본 발명은 최신 방법론에 따른 폴리메틸히드로실록산과 단쇄 (C6-C15), 중쇄 (C16-C30), 및 장쇄  $\alpha$ -올레핀 (> C40, 바람직하게는 C40-C60) 의 혼합물의 히드로실틸화에 의해 제조되는, 개질된 폴리실록산에 관한 것이다.  $\alpha$ -올레핀의 구성비는, 폴리실록산 액체가 25 °C 에서 200-20000 mPa·s 의 동점도를 갖도록 유지하면서, 고 함량의 장쇄 알킬기를 갖는 개질된 폴리실록산을 제공하도록 선택된다. 이와 같이 형성된 개질된 폴리실록산은 무-왁스 다이 캐스팅 이형제에 적용될 수 있다.

[0046]

특정 구현예에서, 개질된 폴리실록산은 몰드에 직접 적용될 수 있다.

[0047]

추가 구현예에서, 개질된 폴리실록산은 수성 에멀전 중에 포함될 수 있다.



[0048] 더욱 특히, 다이 캐스팅 이형제는 개질된 폴리실록산 (5-50 wt.-%), 계면활성제 혼합물 (1-15 wt.-%) 및 물 (총 함이 100 wt.-% 가 되는 양) 을 포함하는 수성 에멀전일 수 있다.

[0049] 통상적으로, 개질된 폴리실록산은 하기와 같이 제조된다: 개질된 실리콘 오일은, Si-H 전환율 >94% 를 제공하는 백금 촉매를 사용하여, 적합한  $\alpha$ -올레핀의 혼합물의 폴리메틸히드로실록산에의 첨가에 의해 제조된다. 개질된 폴리실록산은 장쇄 알킬기 (>C40, 바람직하게는 C40-C60, 1-20 mol%), 중쇄 알킬기 (C16-C30, 1-20 mol%), 및 나머지 단쇄 알킬기 (C6-C15) 의 혼합물로 관능화된 폴리메틸실록산일 수 있다. 개질된 폴리실록산은 바람직하게는 성공적인 에멀전화를 가능하게 하도록 25 °C 에서 20000 mPa · s 미만, 바람직하게는 7000 mPa · s 미만의 동점도를 갖는다.

[0050] 따라서, 본 발명은

[0051] a) 1-20 mol % 의, 탄소수 40 내지 60 의 올레핀,

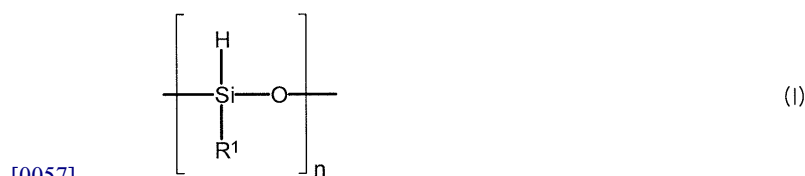
[0052] b) 1-20 mol % 의, 탄소수 16 내지 30 의 올레핀, 및

[0053] c) 60-98 mol % 의, 탄소수 6 내지 15 의 올레핀

[0054] 으로 이루어진 단일불포화 올레핀의 혼합물을,

[0055] 히드로실릴화 촉매 존재 하에서 일정량의 하나 이상의 폴리알킬히드로실록산과 반응시키는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득가능한 폴리알킬실록산의 혼합물로서,

[0056] 단, 각각의 폴리알킬히드로실록산이 일반 구조 (I) 에 따른 반복 단위를 포함하는 폴리알킬실록산의 혼합물에 관한 것이다:



[0057] (여기서, n 은 5 내지 10,000 범위의 반복 단위의 수를 나타내고;

[0059] 잔기  $\text{R}^1$  은 탄소수 6 미만의 선형 또는 분지형 알킬기로부터 선택됨).

[0060] 본원에 사용된 바, 용어 "올레핀" 은, 단일불포화 올레핀, 단일 에틸렌계 이중 결합을 갖는 탄화수소, 예컨대 직쇄 및 분지쇄 지방족 올레핀을 의미한다. 올레핀은 이중 불포화 결합을 포함하지 않는다.

[0061] 용어 "단쇄" 올레핀 또는 알킬은, C6-C15 올레핀 또는 알킬을 나타낸다. 용어 "중쇄" 올레핀 또는 알킬은, C16-C30 올레핀 또는 알킬을 나타낸다. 용어 "장쇄" 올레핀 또는 알킬은, C40-C60 올레핀 또는 알킬을 나타낸다.

[0062] 용어 "mol% 의 올레핀" 은, 반응 중 올레핀의 총 몰에 대한 반응 중 단쇄, 중쇄, 또는 장쇄 올레핀의 몰비를 나타낸다.

[0063] 용어 "폴리알킬히드로실록산" 은, 일반 구조 (I) 에 따른 반복 단위를 포함하는 중합체를 의미한다. 특정 구현예에서, 중합체는 종결부위로서 트리메틸기를 추가로 포함한다.

[0064] 용어 "히드로실릴화" 는 또한 촉매적 히드로실릴화로서 지칭되며, 이는 불포화 결합을 가로지르는 Si-H 결합의 첨가를 나타낸다. 통상적으로, 반응은 촉매적으로 수행되고, 통상적으로 기질은 불포화 유기 화합물이다. 알켄 및 알킨이 알킬 및 비닐 실란으로 수득된다. 백금 촉매가 통상적으로 이용된다.

[0065] 탄소수 6 내지 15 의 올레핀은 바람직하게는 탄소수 10 내지 14 의 올레핀의 군으로부터 선택된다. 가장 바람직하게는, 본 발명에서의 사용을 위해 선택되는 탄소수 6 내지 15 의 올레핀은, 1-도데센이다.

[0066] 일부 구현예에서, 2-10 mol%, 바람직하게는 약 5 mol% 의 올레핀은, 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진다.

[0067] 각종 구현예에서, 2-15 mol%, 바람직하게는 약 5 mol% 의 올레핀은, 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진다.

- [0068] 특정 구현예에서, 60-96 mol% 또는 75-96 mol%, 바람직하게는 60-90 mol% 또는 75-90 mol% 의 올레핀은, 탄소 수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진다.
- [0069] 특정 구현예에서,  $n$  은 5 내지 10,000, 5 내지 7,000, 또는 5 내지 5,000 의 정수이다. 바람직하게는,  $n$  은 5 내지 2,500, 5 내지 1,000, 또는 5 내지 500 의 정수이다. 더욱 바람직하게는,  $n$  은 5 내지 250, 5 내지 200, 5 내지 100 의 정수이다. 보다 더욱 바람직하게는,  $n$  은 5 내지 50, 5 내지 40, 5 내지 30, 5 내지 29, 5 내지 28, 5 내지 27, 5 내지 26, 또는 5 내지 25 의 정수이다.
- [0070] 일부 구현예에서,  $R^1$  은 메틸, 에틸, 선형 또는 분지형 C3-C5 알킬로 이루어진 군으로부터 선택된다. 일부 구현예에서,  $R^1$  은 메틸, 에틸,  $n$ -프로필, 1-메틸-에틸,  $n$ -부틸, tert-부틸, 1-메틸 프로필, 2-메틸 프로필,  $n$ -펜틸, 2-펜틸, 3-펜틸, 2-메틸 부틸, 3-메틸 부틸, 3-메틸 부트-2-일, 2-메틸 부트-2-일, 및 2,2,-디메틸 프로필로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정 구현예에서,  $R^1$  은 H, 에틸,  $n$ -프로필, 1-메틸 에틸로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정 구현예에서,  $R^1$  은 H 이다.
- [0071] 통상적으로, 수득되는 폴리알킬실록산의 혼합물은 오일이다.
- [0072] 특정 구현예에서, 폴리알킬실록산의 혼합물은, 폴리알킬히드로실록산을 화학량론적 양의 60 % 이상, 바람직하게는 80 % 이상이지만, 바람직하게는 화학량론적 양 이하의 양으로 이용하여 수행되는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된다. 특정 구현예에서, 반응은 폴리알킬히드로실록산을 화학량론적 양의 60 %, 70 %, 80 %, 90 %, 95 %, 97.5 %, 99 %, 또는 99.5 % 이상의 양으로 이용하여 수행된다.
- [0073] 일부 구현예에서, 폴리알킬실록산의 혼합물은, 폴리메틸히드로실록산으로부터 적어도 부분적으로 선택되는 폴리알킬히드로실록산, 및 바람직하게는 80 mol% 이상의 일반 구조 (I) 에 따른 반복 단위가 메틸기인 잔기  $R^1$  을 갖는 폴리알킬히드로실록산을 이용하여 수행되는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된다.
- [0074] 하지만, 본 발명의 방법의 일부 구현예에서, 80, 85, 95, 97.5, 98, 99, 또는 99.5 mol% 이상의 일반 구조 (I) 에 따른 반복 단위가 메틸기인 잔기  $R^1$  을 갖는 폴리알킬히드로실록산이 이용된다.
- [0075] 추가 구현예에서, 폴리알킬실록산의 혼합물은, 80 mol% 이상의 단일불포화 올레핀이  $\alpha$ -올레핀으로부터 선택되는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된다.
- [0076] 바람직하게는, 폴리알킬실록산의 혼합물은, 80 mol%, 90 mol %, 95 mol%, 97.5 mol%, 99 mol%, 또는 99.5 mol% 이상의 단일불포화 올레핀이  $\alpha$ -올레핀으로부터 선택되는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된다.
- [0077] 각종 구현예에서, 폴리알킬실록산의 혼합물은, 히드로실릴화 촉매가 백금 촉매인, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된다. 백금 촉매는 염화백금산, 알코올 개질된 염화백금산, 염화백금산의 올레핀 착물, 염화백금산 및 디비닐테트라메틸디실록산의 착물, 탄소 지지체 상에 흡착된 미세 백금 입자, 백금 블랙, 백금 아세틸아세토네이트, 백금 할로겐화물, 예컨대  $PtCl_2$ ,  $PtCl_4$ ,  $Pt(CN)_2$ , 백금 할로겐화물과 에틸렌, 프로필렌, 및 오르가노비닐실록산과 같은 불포화 화합물의 착물, 스티렌 헥사메틸디백금,  $RhCl_3(Bu_2S)_3$ , speier 촉매, 및 karstedt 촉매로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다. 바람직하게는, 백금 촉매는 speier 또는 karstedt 촉매, 더욱 바람직하게는 speier 촉매이다.
- [0078] 일부 구현예에서, 폴리알킬실록산의 혼합물은, 반응 혼합물을 80 내지 180 °C 범위의 온도에서, 바람직하게는 10 mol% 이하의 Si-H 결합을 함유하는 폴리알킬실록산의 혼합물을 수득하기에 충분한 시간 동안 유지시키는, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된다. 바람직하게는, 반응은 10, 9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2, 또는 1 mol% 이하의 Si-H 결합을 함유하는 폴리알킬실록산의 혼합물을 수득하기에 충분한 시간 동안 수행된다. 바람직하게는, 반응은 6 mol% 이하의 Si-H 결합을 함유하는 폴리알킬실록산의 혼합물을 수득하기에 충분한 시간 동안 수행된다.
- [0079] 특정 구현예에서, 폴리알킬실록산의 혼합물은, 하나 이상의 폴리알킬히드로실록산 및/또는 단일불포화 올레핀의 혼합물의 양에 대하여 용매로서 작용하는 불활성 액체 비히클의 중량 분율이, 20 wt.-% 미만, 바람직하게는 10 wt.-% 미만, 더욱 바람직하게는 1 wt.-% 미만인, 히드로실릴화 반응을 통해 수득된다. 적합한 불활성 액체 비히클은, 비제한적으로, 비(非)양성자성 용매, 예컨대 톨루엔 또는 테트라히드로푸란으로부터 선택될 수 있다. 반응은 바람직하게는 임의의 상기와 같은 불활성 액체 비히클 없이 수행된다. 임의의 잔류 용매는 바람

직하게는 반응의 완결 후 제거된다. 측매는 당업계에 공지된 방법에 의해 반응 혼합물로부터 제거될 수 있다.

[0080] 추가 구현예에서, 혼합물은, 탄소수 16 내지 30의 선형 또는 분지형 알킬기의 범위에 속하는  $R^2$  대 탄소수 40 내지 60의 선형 또는 분지형 알킬기의 범위에 속하는  $R^2$ 의 비가 2 : 3 내지 3 : 2 범위인, 폴리알킬실록산을 포함한다. 이는, 폴리알킬실록산이, 일부 치환기  $R^2$ 가 탄소수 40 내지 60의 선형 또는 분지형 알킬기의 범위에 속하고, 다른 치환기  $R^2$ 가 탄소수 16 내지 30의 선형 또는 분지형 알킬기의 범위에 속하는 반복 단위를 포함한다는 것을 의미한다.

[0081] 또 다른 측면에서, 본 발명은 일반 구조 (II)에 따른 반복 단위를 포함하는 폴리알킬실록산에 관한 것이다:



[0082]

[0083] (여기서, n은 폴리알킬실록산 내에 포함되는 반복 단위의 수를 나타내고, 여기서 n은 5 내지 10,000의 정수이고, 잔기  $R^1$ 은 탄소수 6 미만의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0084] 여기서,

[0085] a) 반복 단위 중 1-20%에서,  $R^2$ 는 탄소수 40 내지 60의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0086] b) 반복 단위 중 1-20%에서,  $R^2$ 는 탄소수 16 내지 30의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고, 및

[0087] c) 반복 단위 중 60-98%에서,  $R^2$ 는 탄소수 6 내지 15의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

[0088] d) 반복 단위 중 0-10%, 바람직하게는 10% 미만에서,  $R^2$ 는 H임).

[0089] 이러한 구현예에서, a)-d)에 정의된 바와 같은 반복 단위의 %의 합은 100%이다. 제시된 %는 폴리알킬실록산 내 반복 단위의 총 수에 관한 것이다.

[0090] 군 a)의  $R^2$ 는, 탄소수 40 내지 60의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된다. 반복 단위 중 1-20%에서,  $R^2$ 는 군 a)로부터 선택된다.

[0091] 군 b)의  $R^2$ 는, 탄소수 16 내지 30의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된다. 반복 단위 중 1-20%에서,  $R^2$ 는 군 b)로부터 선택된다.

[0092] 군 c)의  $R^2$ 는, 탄소수 6 내지 15의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된다. 반복 단위 중 60-98%에서,  $R^2$ 는 군 c)로부터 선택된다.

[0093] 군 d)의  $R^2$ 는 H이다. 반복 단위 중 0-10%, 바람직하게는 10% 미만에서,  $R^2$ 는 군 d)로부터 선택된다.

[0094] 일반 구조 (II)의  $R^1$ 은 일반 구조 (I)의  $R^1$ 과 동일한 것으로 정의된다.

[0095] 특정 구현예에서, 폴리알킬실록산은 25 °C에서 200 내지 20000 mPa·s, 바람직하게는 25 °C에서 200 내지 7000 mPa·s의 동점도를 갖는다.

[0096] 용어 "동점도 (kinematic viscosity)"는, 역학 점도 (dynamic viscosity)  $\mu$ 를 측정하고, 역학 점도  $\mu$ 를

유체의 밀도  $\rho$  로 나누어 측정되는, 점도를 의미한다. 역학 점도의 측정 방법은 당업계에 널리 공지되어 있다.

- [0097] 추가 구현예에서, 폴리알킬실록산은 상기 정의된 바와 같고, 여기서 분획 c) 의 경우,  $R^2$  는 탄소수 10 내지 14 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 분획 c) 의  $R_2$  는 헥실, 헵틸, 옥틸, 노닐, 데실, 운데실, 및 도데실로 이루어진 군으로부터 선택된다. 바람직하게는, 분획 c) 의  $R_2$  는 도데실이다.
- [0098] 일부 구현예에서, 분획 a) 에 따른 반복 단위, 즉  $R^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위는, 폴리알킬실록산 내 총 반복 단위 중 2-10%, 바람직하게는 약 5 % 를 구성한다.
- [0099] 각종 구현예에서,  $R^2$  가 분획 b) 의 범위에 속하는 반복 단위는, 폴리알킬실록산 내 총 반복 단위 중 2-15 %, 바람직하게는 약 5 % 를 구성한다.
- [0100] 특정 구현예에서,  $R^2$  가 분획 c) 의 범위에 속하는 반복 단위는, 폴리알킬실록산 내 총 반복 단위 중 60-96 % 또는 75-96 %, 바람직하게는 60-90 % 또는 75-90% 를 구성한다.
- [0101] 일부 구현예에서, 분획 a) 대 분획 b) 의 몰비는 2:3 내지 3:2 범위이다.
- [0102] 일부 구현예에 있어서, 각각의 일반 구조 (II) 에 따른 반복 단위의 치환기  $R^1$  은 메틸기이다. 추가 구현예에서, 일반 구조 (II) 에 따른 반복 단위 중 80 % 이상에서,  $R^1$  은 메틸기이다. 특정 구현예에서, 일반 구조 (II) 에 따른 반복 단위 중 80, 90, 95, 97.5, 99, 또는 99.5 % 이상에서,  $R^1$  은 메틸기이다.
- [0103] 바람직하게는, 본 발명의 폴리알킬실록산은 오일이다. 이러한 경우, 폴리알킬실록산은 추가의 첨가제 없이 다이 캐스팅 윤활제로서 사용될 수 있다.
- [0104] 상기 언급된 바와 같이, 개질된 폴리실록산은 적합한 계면활성제 및 물과의 조합으로 수계 에멀전 중에 포함될 수 있다.
- [0105] 특정 구현예에서, 수계 에멀전은 계면활성제 혼합물을 포함한다. 계면활성제 혼합물은 개질된 폴리실록산과 안정한 에멀전을 형성할 수 있는 에멀전화제를 포함한다. 특정 구현예에서, 계면활성제 혼합물은 에톡실화 옥소-알코올의 혼합물일 수 있다.
- [0106] 용어 "에톡실화" 는, 계면활성제를 획득하기 위한 알코올에의 에틸렌 옥시드의 첨가를 의미한다.
- [0107] 용어 "옥소 알코올" 은, 히드로포르밀화 반응을 사용하여 올레핀에의 일산화탄소 (CO) 및 수소의 첨가에 의해 알데히드를 획득하고, 알데히드에의 수소첨가에 의해 알코올을 획득함으로써 제조되는 알코올을 의미한다.
- [0108] 용어 "에톡실화 옥소-알코올" 은, 에톡실화 반응을 거친 옥소-알코올을 나타낸다.
- [0109] 예를 들어, 수계 에멀전에 사용되는 계면활성제는 폴리소르베이트 85 및 에톡실화 (6-8) 트리데실 알코올의 혼합물일 수 있다.
- [0110] 일부 구현예에서, 에톡실화 옥소-알코올은 개질된 폴리실록산에 대하여 1:4 내지 1:10 의 중량비로 수계 에멀전 중에 사용된다. 부가적으로, 다른 계면활성제 (음이온성, 비이온성 및/또는 양이온성) 가 수계 에멀전 중에 사용될 수 있다.
- [0111] 따라서, 본 발명은 또한, a) 1-50 wt.-% 의, 본원에 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산의 혼합물 또는 폴리알킬실록산, b) 1-15 wt.-% 의, HLB 값이 8 이상인 비이온성 계면활성제, 및 c) 20 wt.-% 미만, 바람직하게는 10 wt.-% 미만의, 왁스를 포함하는, 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서 사용하기에 적합한 수계 조성물에 관한 것이다.
- [0112] 각종 구현예에서, 이형제는 바람직하게는 1 wt.-% 미만, 더욱 바람직하게는 0.1 wt.-% 미만, 특히 바람직하게는 0.01 wt.-% 미만의 왁스를 포함한다.
- [0113] 특정 구현예에서, 수성 에멀전 중 개질된 폴리실록산의 함량은 1- 50 wt.-%, 바람직하게는 5-50 wt.-%, 더욱 바람직하게는 5-30 wt.-% 이다.

- [0114] 나아가, 수성 에멀전 중 계면활성제의 함량은 1-15 wt.-%, 바람직하게는 5-15 wt.-%, 더욱 바람직하게는 5-10 wt.-% 일 수 있다.
- [0115] 본원에 사용된 바, 용어 "왁스" 또는 "왁스들" 은, 물 중에 불용성이고, 20 °C 에서 가요성이 있으며 (plastic) (가단성이 있음 (malleable)), 45 °C 초과에서 용융되어 저 점도 액체를 제공하는 유기 화학적 화합물 계열을 나타낸다. 왁스는 물 중에 불용성이지만, 유기, 비극성 용매 중에는 가용성이다. 모든 왁스는 유기 화합물 (합성 및 천연 기원 포함) 이다.
- [0116] 왁스와 관련되어 사용된 바, 용어 "가요성이 있는" 은, 적용된 힘에 대하여 비가역적인 형태 변화를 겪게되는 경우의 이의 변형에 관한 것이다. 용어 "가단성이 있는" 은, 압축력 하에서 변형되는 왁스의 능력을 의미한다. 선행 기술 이형 조성물에 사용된 왁스의 예는, 개질될 수 있는 폴리에틸렌 및 폴리프로필렌이다. 폴리에틸렌 및 폴리프로필렌과 관련된 용어 "개질된" 은, 에스테르화 또는 비누화된 폴리에틸렌 및 폴리프로필렌을 의미한다.
- [0117] 또한, 다른 성분, 예를 들어 부식 억제제, 향미생물제, 및 각종 천연 또는 합성 오일의 에멀전이, 다이 캐스팅 이형제 중에 혼입될 수 있다.
- [0118] 바람직하게는, 본 발명에 따른 수계 조성물은 수중유 (oil-in-water) 에멀전이다.
- [0119] 본 발명은 또한 본 발명의 다이 캐스팅 이형제의 제조를 포함한다.
- [0120] 이형제는 개질된 폴리실록산, 에멀전화제, 및 물을 적합한 에멀전화 장치를 사용하여 조합함으로써 안정한 수중유 에멀전을 수득하고, 이어서 물 및 임의적 기타 구성성분을 첨가함으로써 제조될 수 있다.
- [0121] 일반적으로, 다이 캐스팅 이형제의 적용은 바람직하게는 스프레이 코팅에 의해 수행된다. 통상적으로, 다이 캐스팅 이형제는 희석액으로 이용된다. 특정 구현예에서, 다이 캐스팅 이형제는 1-200 배 희석액, 바람직하게는 1-100 배 희석액, 1-50 배 희석액, 또는 1-20 배 희석액으로 이용된다.
- [0122] 이러한 수계 조성물은, 왁스가 없거나 거의 없지만, 왁스와 유사하거나 또는 심지어 개선된 윤활 특성을 갖기 때문에 유리하다. 왁스가 없거나 거의 없기 때문에, 조성물은 왁스계 윤활제와 관련된 통상의 단점, 예를 들어 스프레이 장비, 즉 스프레이 노즐의 정기적인 대규모 세척의 필요를 갖지 않는다. 또한, 몰드에 접촉되는 잔류 왁스의 존재를 방지하기 때문에, 캐스팅 장비의 수반되는 정지시간을 이용한 몰드의 정기적인 세척을 필요로 하지 않는다. 나아가, 이의 만족스러운 페인팅 또는 플레이팅을 달성하기 위한 캐스팅의 과도한 세척을 피하게 된다.
- [0123] 일부 구현예에서, 수계 조성물은 폴리소르베이트 85 및 에톡실화 (6-8) 트리데실 알코올의 혼합물인 비이온성 계면활성제를 포함한다.
- [0124] 각종 구현예에서, 수계 조성물은 수중유 에멀전이다.
- [0125] 특정 구현예에서, 왁스는, 물 중에 불용성이고, 20 °C 에서 가요성 (가단성) 있으며, 45 °C 초과에서 용융하는, 개질되거나 개질되지 않은, 폴리에틸렌 및/또는 폴리프로필렌이다.
- [0126] 추가의 측면에서, 본 발명은, 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서의 폴리알킬실록산의 용도로서, 여기서 i) 폴리알킬실록산이 본원에 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산의 혼합물이거나, ii) 폴리알킬실록산이 본원에 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산이거나, 또는 iii) 폴리알킬실록산이 하기 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위를 포함하는, 폴리알킬실록산의 용도에 관한 것이다:



- [0127]
- [0128] (여기서, n 은 5 내지 10,000 범위의 반복 단위의 수를 나타내고;

- [0129] 각각의 반복 단위에 있어서, 잔기 R<sup>1</sup> 은 독립적으로 탄소수 6 미만의 선형 알킬기로부터 선택되고; 및



- [0130] 각각의 반복 단위에 있어서, 잔기  $R^2$  는 독립적으로 수소 또는 탄소수 6 내지 15, 탄소수 16 내지 30 또는 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기로부터 선택되고, 단, 잔기  $R^2$  가 수소인 반복 단위의 분율은 0.1 미만이고, 잔기  $R^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.01-0.2 범위이고, 잔기  $R^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.01-0.2 범위이고, 및 잔기  $R^2$  가 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기인 반복 단위의 분율은 0.6-0.98 범위임).
- [0131]  $R^1$  은 일반 구조 (I) 및 (II) 에 대하여 정의된 바와 같다.  $R^2$  는 상기 기재된 본 발명의 폴리알킬실록산에 대한 바와 같이 정의될 수 있다.
- [0132] 일부 구현예에서,  $R^2$  는 탄소수 10 내지 14 의 선형 또는 분지형 알킬기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다. 특정 구현예에서,  $R^2$  는 헥실, 헵틸, 옥틸, 노닐, 데실, 운데실, 및 도데실로 이루어진 군으로부터 선택된다. 바람직하게는,  $R^2$  는 도데실이다.
- [0133] 일부 구현예에 있어서, 각각의 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 잔기  $R^1$  은 메틸기이다. 추가 구현예에서, 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위 중 80 % 이상의 잔기  $R^1$  은 메틸기이다. 특정 구현예에서, 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위 중 80, 90, 95, 97.5, 99, 또는 99.5 % 이상의 잔기  $R^1$  은 메틸기이다.
- [0134] 특정 구현예에서, 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서의 폴리알킬실록산의 용도는, 상기 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산으로서, 여기서  $R^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 분율이 0.02 이상, 바람직하게는 0.05 이상이지만, 바람직하게는 0.15 이하이고;  $R^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 분율이 0.02 이상, 바람직하게는 0.05 이상이지만, 바람직하게는 0.10 이하이고/이거나; 잔기  $R^2$  가 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 분율이 0.96, 바람직하게는 0.90 이하이지만, 바람직하게는 0.75 이상인 폴리알킬실록산에 관한 것이다.
- [0135] 일부 구현예에서,  $R^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기의 범위에 속하는 반복 단위는, 0.02-0.10, 바람직하게는 약 0.05 의 분율을 갖는다.
- [0136] 각종 구현예에서,  $R^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기의 범위에 속하는 반복 단위는, 0.02-0.15, 바람직하게는 약 0.05 의 분율을 갖는다.
- [0137] 특정 구현예에서,  $R^2$  가 탄소수 6 내지 15 의 선형 또는 분지형 알킬기의 범위에 속하는 반복 단위는, 0.60-0.96 또는 0.75-0.96, 바람직하게는 0.60-0.90 또는 0.75-0.90 의 분율을 갖는다.
- [0138] 각종 구현예에서, 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서의 폴리알킬실록산의 용도는, 상기 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산으로서, 여기서 잔기  $R^2$  가 탄소수 16 내지 30 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위 대 잔기  $R^2$  가 탄소수 40 내지 60 의 선형 또는 분지형 알킬기인 일반 구조 (III) 에 따른 반복 단위의 몰비가 2:3 내지 3:2 범위인 폴리알킬실록산에 관한 것이다.
- [0139] 일부 구현예에서, 금속 캐스팅 공정에서 이형제로서의 폴리알킬실록산의 용도는, 상기 정의된 바와 같은 폴리알킬실록산으로서, 여기서 각각의 일반 구조 (II) 에 따른 반복 단위의 잔기  $R^1$  이 메틸기이고; 폴리알킬실록산이 25 °C 에서 200 내지 20000 mPa · s, 바람직하게는 25 °C 에서 200 내지 7000 mPa · s 의 동점도를 갖는 폴리알킬실록산에 관한 것이다.
- [0140] 나아가, 본 발명에 따라 사용되는 폴리알킬실록산은 바람직하게는 오일이다.
- [0141] 수치와 관련하여 본원에 사용된 바, 용어 "약" 은, 제시되는 수치의  $\pm$  10%를 의미한다. 결과적으로, "약 50%" 는, 45% 내지 55% 범위를 의미한다.
- [0142] "~ 로 이루어진" 은, 구절 "~ 로 이루어진" 에 후속되는 것에 제한되어 포함한다는 의미이다. 따라서, 구절

"~ 로 이루어진" 은, 열거된 요소들이 요구되거나 필수적이며, 다른 요소는 존재하지 않을 수 있다는 것을 의미한다.

[0143] "포함하는" 은, 비제한적으로, 단어 "포함하는" 에 후속되는 것에 제한되지 않으면서 포함한다는 의미이다. 따라서, 용어 "포함하는" 의 사용은, 열거된 요소들이 요구되거나 필수적이지만, 다른 요소가 임의적이며, 존재하거나 존재하지 않을 수 있다는 것을 의미한다.

[0144] 본원에 예시적으로 기재된 발명들은, 구체적으로 본원에 개시되지 않은, 임의의 요소 또는 요소들, 제한 또는 제한들의 부재 하에서 적합하게 수행될 수 있다. 따라서, 예를 들어, 용어 "포함하는", "포함되는", "함유하는" 등은, 확장적으로 및 비제한적으로 이해될 수 있다. 부가적으로, 본원에 이용된 용어 및 표현은 제한이 아닌 설명의 측면으로 사용되었으며, 제시 및 기재된 특징 또는 이의 일부의 임의의 등가물을 제외한 상기와 같은 용어 및 표현을 사용하려는 의도는 전혀 없으나, 청구된 본 발명의 범위 내에서 각종 변형이 이루어질 수 있다는 것은 인정된다. 따라서, 본 발명이 바람직한 구현에 및 임의적 특징에 의해 구체적으로 개시되었지만, 본원에 개시된 본 발명의 변형 또는 변화가 당업자에 의해 구현될 수 있으며, 상기와 같은 변형 또는 변화는 본 발명의 범위에 속하는 것으로 간주된다고 이해되어야 한다.

[0145] 본 발명은 본원에 광범위하게 및 일반적으로 기재되어 있다. 일반 개시에 포함되는 보다 좁은 범위의 종 및 하위계열의 그룹은 각각 본 발명의 일부를 형성한다.

[0146] 기타 구현에는 하기 청구항 및 비제한적인 예에 포함된다. 본원에 인용된 모든 문헌은, 그 전문이 본원에 참조로서 인용된다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0147] 실시예

[0148] 실시예 1:

[0149] 개질된 폴리실록산의 제조

[0150] 일반식  $(CH_3)_3SiO(CH_2HSiO)_{25}Si(CH_3)_3$  을 갖는 폴리메틸히드로실록산 (40 g, 602.5 mmol 유리된 (free) Si-H), 1-도데센 (4.76 g, 28.3 mmol) 및 일반식  $CH_3(CH_2)_{40}CH=CH_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (16.32 g, 27.1 mmol, AlphaPlus C30+HA) 의 혼합물에, 이소프로판올 중 4 ppm 의  $H_2PtCl_6$  용액 (73  $\mu$ L, 17.1 mg/mL) 을 첨가하였다. 혼합물을 80  $^{\circ}C$  까지 가열하여 발열 가열에 의해 혼합물을 140  $^{\circ}C$  까지 가열하였다. 1-도데센 (74.64 g, 443.4 mmol) 및 일반식  $CH_3(CH_2)_{19}CH=CH_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (12.17 g, 43.4 mmol) 의 혼합물을, 온도를 140-150  $^{\circ}C$  로 유지하는 속도로 첨가하였다. 첨가를 완결한 후, 혼합물을 150  $^{\circ}C$  에서 2 시간 동안 가열하였고: FTIR 분석은 남아있는 Si-H 기가 5.0% 임을 나타냈다. 생성물의 점도는 6300 mPa  $\cdot$  s 이었다.

[0151] 다이 캐스팅 이형제의 제조

[0152] 상기 언급된 개질된 폴리메틸실록산 (30.5 g) 을 에멀전화제 혼합물 (14.3 g) 에 첨가하였다. 격렬한 교반 하에서, 물을 첨가하여, 전이점 (inversion point) (7.0 g) 을 수득하였다. 부가적인 개질된 폴리메틸실록산 (59.1 g) 을 격렬한 교반 하에서 천천히 첨가하였다. 10 분 후, 물 (89.1 g) 을 첨가하고, 이어서 Acticide MV14 (Thor Chemie, 0.02 g) 를 첨가하였다. 76 gram 의 이러한 에멀전을 Mayco base RP8765 (Dover Chemical Corporatin, 2.6 g) 및 물 (120.5 gram) 의 혼합물에 첨가하였다. 이러한 혼합물에, SAG 10E (Momentive, 0.1 gram) 및 Acticide MBS (Thor Chemie 0.8 g) 를 첨가하였다.

[0153] 가압 다이 캐스팅 시험

[0154] 가압 다이 캐스팅 에멀전을 이의 사용 중 윤활제 축적을 생성하는 왁스-함유 윤활제 Deltacast CP-579 (23% 고체, 물 중 0.8% 회석액) 에 대하여 시험하였다. 신규한 윤활제 (17% 고체, 물 중 1.0% 회석액) 는 양호한 이형을 제공하고, 다이 또는 스프레이 노즐 상에의 관찰가능한 윤활제 축적 없이 양호한 깨끗한 캐스팅을 제공하였다.

[0155] 실시예 2:

[0156] 개질된 폴리실록산의 제조

- [0157] 일반식  $(\text{CH}_3)_3\text{SiO}(\text{CH}_3\text{HSiO})_{25}\text{Si}(\text{CH}_3)_3$  을 갖는 폴리메틸히드로실록산 (40 g, 602.5 mmol 유리된 Si-H), 1-도데센 (4.65 g, 27.7 mmol) 및 일반식  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{40}\text{CH}=\text{CH}_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (19.59 g, 32.5 mmol) 의 혼합물을 이용하여 실시예 1 과 유사하게 제조하였다. 1-도데센 (72.93 g, 433.3 mmol) 및 일반식  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}=\text{CH}_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (13.69 g, 48.8 mmol) 의 혼합물을 첨가하였다. FTIR 분석은 남아있는 Si-H 가 4.7% 임을 나타냈다. 생성물의 점도는 14000 mPa · s 이었다.
- [0158] 다이 캐스팅 이형제의 제조를 실시예 1 과 유사하게 수행하였다.
- [0159] 실시예 3:
- [0160] 개질된 폴리실록산의 제조
- [0161] 일반식  $(\text{CH}_3)_3\text{SiO}(\text{CH}_3\text{HSiO})_{25}\text{Si}(\text{CH}_3)_3$  을 갖는 폴리메틸히드로실록산 (60 g, 903.8 mmol 유리된 Si-H), 1-도데센 (10.27 g, 61.0 mmol), 일반식  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}=\text{CH}_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (3.76 g, 12.2 mmol) 및 일반식  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{30}\text{CH}=\text{CH}_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (3.42 g, 8.1 mmol) 의 혼합물을 이용하여 실시예 1 과 유사하게 제조하였다. 1-도데센 (92.4 g, 549.0 mmol), 일반식  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}=\text{CH}_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (33.88 g, 109.8 mmol) 및 일반식  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{30}\text{CH}=\text{CH}_2$  을 갖는  $\alpha$ -올레핀 (3.42 g, 8.1 mmol) 의 혼합물을 첨가하였다. FTIR 분석은 남아있는 Si-H 가 5.5% 임을 나타냈다. 생성물의 점도는 9100 mPa · s 이었다.
- [0162] 다이 캐스팅 이형제의 제조를 실시예 1 과 유사하게 수행하였다.