

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2016-532740

(P2016-532740A)

(43) 公表日 平成28年10月20日(2016.10.20)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
CO8L 83/07 (2006.01)	CO8L 83/07	4CO83
CO8L 83/05 (2006.01)	CO8L 83/05	4CO84
CO8L 83/06 (2006.01)	CO8L 83/06	4HO17
CO8K 3/36 (2006.01)	CO8K 3/36	4J002
A61K 45/00 (2006.01)	A61K 45/00	4J036
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求		(全 42 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2016-525476 (P2016-525476)
 (86) (22) 出願日 平成26年7月10日 (2014.7.10)
 (85) 翻訳文提出日 平成28年2月23日 (2016.2.23)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2014/046090
 (87) 国際公開番号 W02015/006531
 (87) 国際公開日 平成27年1月15日 (2015.1.15)
 (31) 優先権主張番号 61/845,103
 (32) 優先日 平成25年7月11日 (2013.7.11)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(71) 出願人 508229301
 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
 アメリカ合衆国ニューヨーク州12188
 , ウォーターフォード, ハドソン・リバー
 ・ロード・260
 (74) 代理人 100087642
 弁理士 古谷 聡
 (74) 代理人 100082946
 弁理士 大西 昭広
 (74) 代理人 100121061
 弁理士 西山 清春
 (74) 代理人 100195693
 弁理士 細井 玲

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 二様式硬化性シリコーン組成物

(57) 【要約】

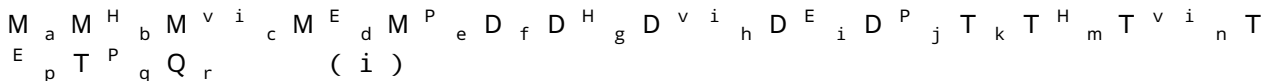
少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン、少なくとも一つの不飽和官能性シリコーンおよび少なくとも一つのエポキシもしくはオキサタン官能性シリコーンの反応産物を含むシリコーン組成物が提供される。シリコーン組成物は、二つの異なる硬化様式によって硬化できるか、またはそれらの異なる硬化様式を用いて同時に硬化できる。生じるシリコーン組成物は、劇的に向上した親水性、物理特性および光学特性を持つ。

【選択図】 図 1

【特許請求の範囲】

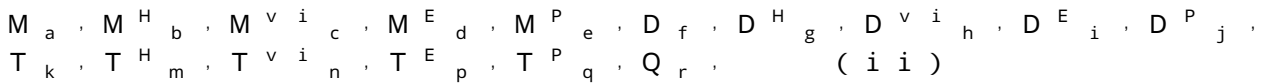
【請求項1】

a) 式 (i)



を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

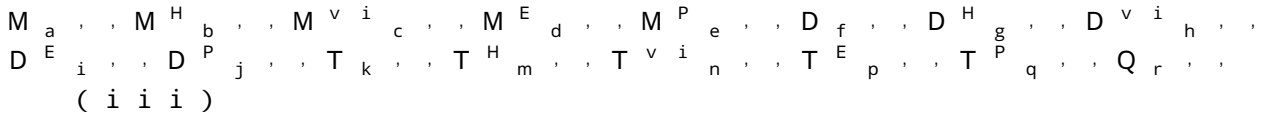
b) 式 (ii)



を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

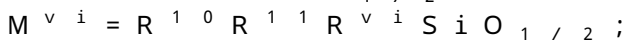
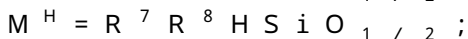
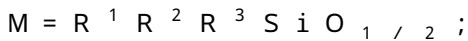
10

c) 式 (iii)

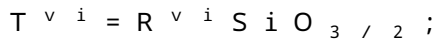
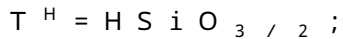
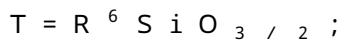
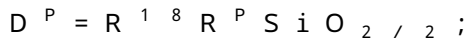
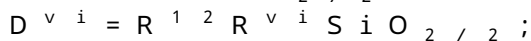
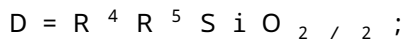
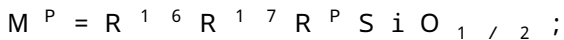
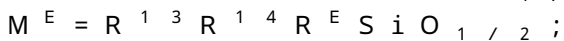


を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキシタンの官能性シリコンの反応産物を含むシリコン組成物であって、

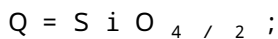
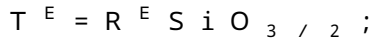
式中、



20



30



であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{Vi} であり、

40

それぞれの R^{Vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキシタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ 、または一価の

50

ポリエーテル部分 $(C_S H_{2S} O)_x$ および $(C_T H_{2T} O)_Y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 S および T が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および Y が 1 から約 30 のいずれかであり、

下付文字、 $a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, m, n, p, q$ および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e = 2$ かつ $b + g + m = 2$ という制限に従い、

下付文字 $a', b', c', d', e', f', g', h', i', j', k', m', n', p', q$ および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' = 2$ かつ $c' + h' + n' = 2$ という制限に従い、そして、

下付文字 $a'', b'', c'', d'', e'', f'', g'', h'', i'', j'', k'', m'', n'', p'', q''$ および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' = 2$ かつ $d'' + i'' + p'' = 1$ という制限に従う、

シリコーン組成物。

【請求項 2】

$R^1, R^2, R^3, R^4, R^5, R^6, R^7, R^8$ および R^9 がそれぞれ独立して、メチル、エチル、イソプロピル、sec-ブチルおよびtert-ブチルからなる群より選択される、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 3】

それぞれの R^{Vi} が独立して、エテニル、2-プロペニル、3-ブテニル、5-ヘキセニル、7-オクテニルおよびエテニルフェニルからなる群より選択される、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 4】

それぞれの R^E が独立して、2-(3,4-エポキシシクロヘキシル)エチル、2-(3,4-エポキシシクロペンチル)エチル、2-(3,4-エポキシシクロヘキシル)プロピルおよび2-(3,4-エポキシシクロペンチル)プロピルからなる群より選択される、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 5】

それぞれの R^P がアルキル-ポリ(エチレンオキシド-コ-プロピレンオキシド)である、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 6】

ヒドリド官能性シリコーン(i)が、シリコーン組成物の全重量の約 1 重量% から約 50 重量% の量で使用される、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 7】

ヒドリド官能性シリコーン(i)が、グラム当たり約 0.3 マイクロモルからグラム当たり約 15 マイクロモルの範囲でヒドリド含量を持つ、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 8】

不飽和官能性シリコーン(ii)が、組成物の全重量の約 0.1 重量% から約 99 重量% の量で使用される、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 9】

不飽和官能性シリコーン(ii)が、グラム当たり約 0.01 マイクロモルからグラム当たり約 2 マイクロモルの範囲で不飽和部分含量を持つ、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 10】

エポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン(iii)が、組成物の全重量の約 0.1 重量% から約 98 重量% の量で使用される、請求項 1 に記載のシリコーン組成物。

【請求項 11】

エポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン(iii)が、グラム当たり約 0.1 マ

10

20

30

40

50

イクロモルからグラム当たり約 1 . 5 マイクロモルの範囲でエポキシもしくはオキセタン含量を持つ、請求項 1 に記載のシリコン組成物。

【請求項 1 2】

触媒をさらに含む、請求項 1 に記載のシリコン組成物。

【請求項 1 3】

触媒が、⁵ - シクロペンタジエニル白金 (I V) 錯体、ビス (- ジケトナート) 白金 (I I) 錯体、ビス (ホスフィン) 白金 (I I) 錯体、シクロオクタジエン白金 (I I) 錯体、およびそれらの混合物、好ましくはトリメチル (メチルシクロペンタジエニル) 白金 (I V) (C p P t) もしくは白金 (I I) アセチルアセトナート (P t (a c a c) 2) からなる群より選択される光活性化白金触媒である、請求項 1 2 に記載のシリコン組成物。

10

【請求項 1 4】

触媒が、塩化白金酸のような白金化合物、もしくは白金 / ビニルシロキサン錯体のような白金錯体、またはそれらの混合物からなる群より選択される熱活性化白金触媒である、請求項 1 2 に記載のシリコン組成物。

【請求項 1 5】

触媒が、100 万当たり約 0 . 1 部から 100 万当たり約 500 部の量で元素白金の含量を持つ白金触媒である、請求項 1 2 に記載のシリコン組成物。

【請求項 1 6】

光開始剤、充填剤、光増感剤、安定剤、阻害剤および接着促進剤の少なくとも一つをさらに含む請求項 1 に記載のシリコン組成物。

20

【請求項 1 7】

光開始剤が、ベンゼンシクロペンタジエニル鉄 (I I) ヘキサフルオロホスファートの鉄 (I I) サンドイッチ錯体、シクロペンタジエニル鉄 (I I) ジカルボニル二量体の鉄 (I I) 錯体、 $P F_6^-$ のビス (4 - アルキルフェニル) イオドニウム塩、 $S b F_6^-$ のビス (4 - アルキルフェニル) イオドニウム塩、ならびにそれらの混合物からなる群より選択される、請求項 1 6 に記載のシリコン組成物。

【請求項 1 8】

充填剤が、ヒュームドシリカ、沈降シリカおよびそれらの混合物からなる群より選択される、請求項 1 6 に記載のシリコン組成物。

30

【請求項 1 9】

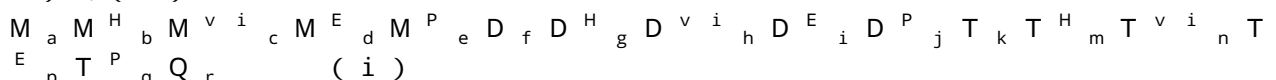
反応産物が架橋されたシリコンポリマーネットワークである、請求項 1 に記載のシリコン組成物。

【請求項 2 0】

反応産物が膨潤性であり、かつ親水性である、請求項 1 に記載のシリコン組成物。

【請求項 2 1】

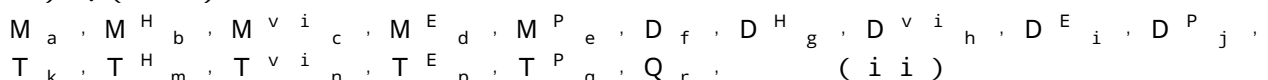
a) 式 (i)



を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

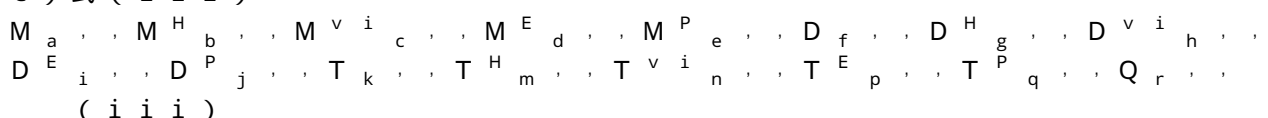
40

b) 式 (i i)



を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

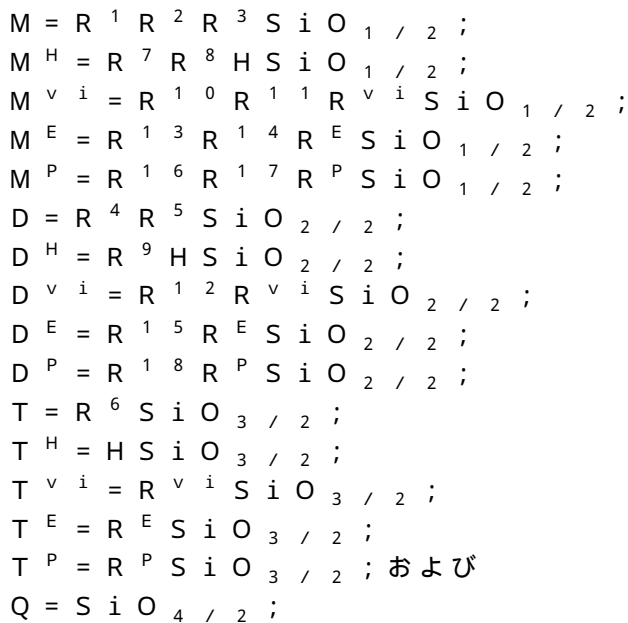
c) 式 (i i i)



を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタンの官能性シリコンの反応産物を含むシリコン組成物であって、

50

式中、



であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{Vi} であり、

それぞれの R^{Vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ および $(C_t H_{2t} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 s および t が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および y が 1 から約 30 のいずれかであり、

下付文字、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e = 2$ かつ $b + g + m = 2$ という制限に従い、

下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' = 2$ かつ $c' + h' + n' = 2$ という制限に従い、そして、

下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、 j'' 、 k'' 、 m'' 、 n'' 、 p'' 、 q'' および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' = 2$ かつ $d'' + i'' + p'' = 1$ という制限に従い、

そしてここで反応産物が、要求されるそれぞれの官能性を持たない反応産物と比較して向上した親水性を持つ、

10

20

30

40

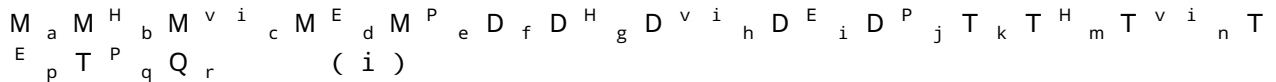
50

シリコーン組成物。

【請求項 2 2】

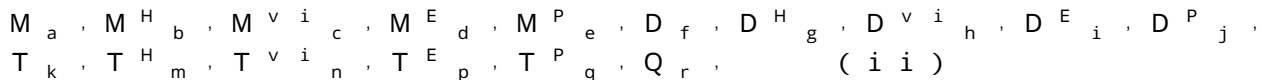
1)

a) 式 (i)



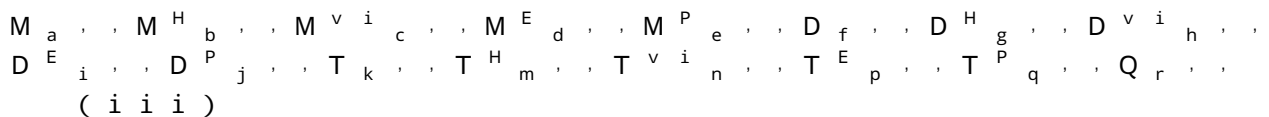
を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン、

b) 式 (ii)



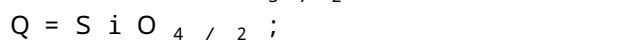
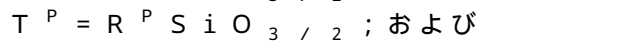
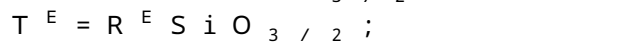
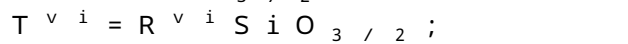
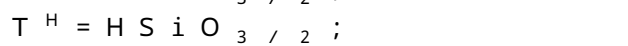
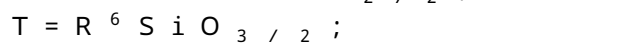
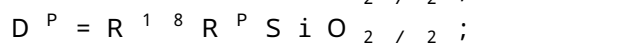
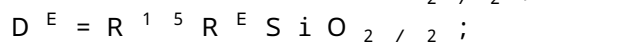
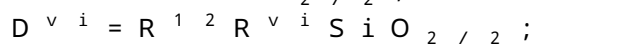
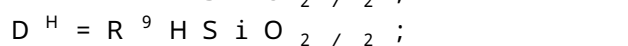
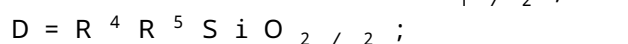
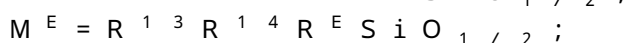
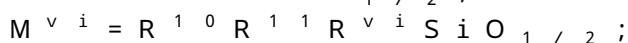
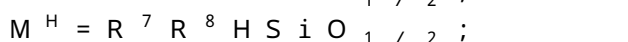
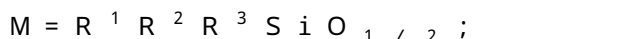
を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン、および

c) 式 (iii)



を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキシタンの官能性シリコーンの反応産物を含むシリコーン組成物であって、

式中、



であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{Vi} であり、

それぞれの R^{Vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキシタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

10

20

30

40

50

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_S H_{2S} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_S H_{2S} O)_x$ および $(C_T H_{2T} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 S および T が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および y が 1 から約 30 のいずれかであり、

下付文字、 $a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, m, n, p, q$ および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e = 2$ かつ $b + g + m = 2$ という制限に従い、

下付文字 $a', b', c', d', e', f', g', h', i', j', k', m', n', p', q$ および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' = 2$ かつ $c' + h' + n' = 2$ という制限に従い、そして、

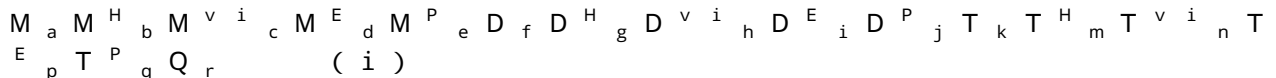
下付文字 $a'', b'', c'', d'', e'', f'', g'', h'', i'', j'', k'', m'', n'', p'', q''$ および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' = 2$ かつ $d'' + i'' + p'' = 1$ という制限に従う、

シリコン組成物、ならびに

2) 少なくとも一つの医薬品有効成分を含む、ドラッグデリバリーデバイス。

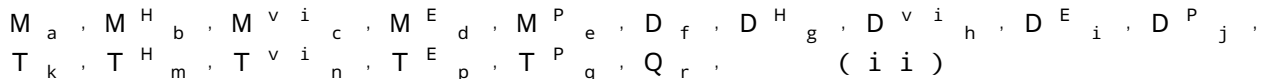
【請求項 23】

a) 式 (i)



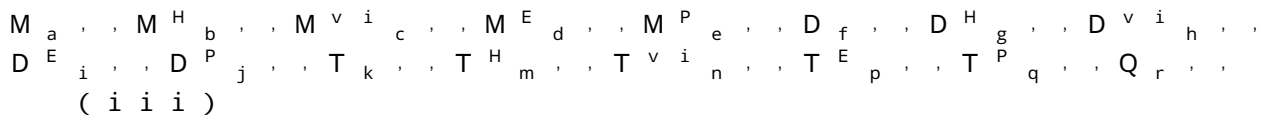
を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

b) 式 (ii)



を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

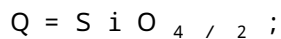
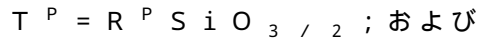
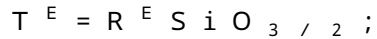
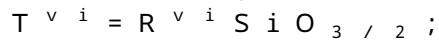
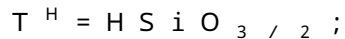
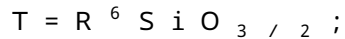
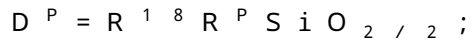
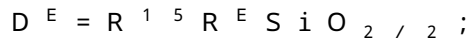
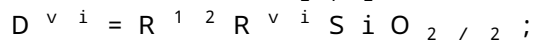
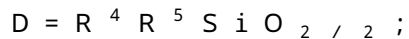
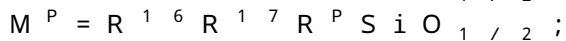
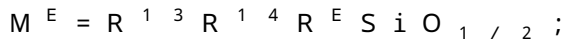
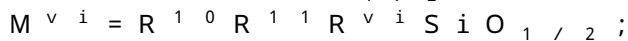
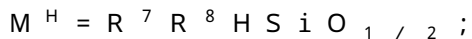
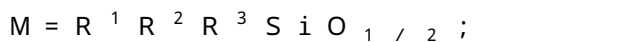
c) 式 (iii)



を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタンの官能性シリコン

の反応産物を含むシリコン組成物であって、

式中、



10

20

30

40

50

であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{vi} であり、

それぞれの R^{vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ および $(C_T H_{2T} O)_Y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 s および T が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および Y が 1 から約 30 のいずれかであり、

下付文字、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e \leq 2$ かつ $b + g + m \leq 2$ という制限に従い、

下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' \leq 2$ かつ $c' + h' + n' \leq 2$ という制限に従い、そして、

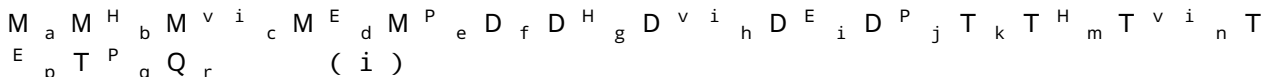
下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、 j'' 、 k'' 、 m'' 、 n'' 、 p'' 、 q'' および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' \leq 2$ かつ $d'' + i'' + p'' \leq 1$ という制限に従う、

シリコン組成物を含む少なくとも一つのシリコン層を含む、

透明パッチ組成物。

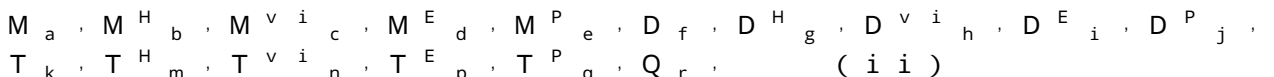
【請求項 24】

a) 式 (i)



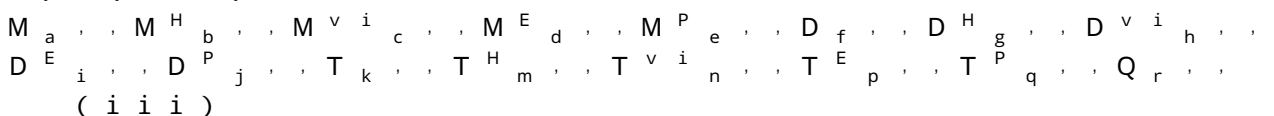
を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

b) 式 (ii)



を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

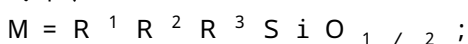
c) 式 (iii)



を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタンの官能性シリコン

の反応産物を含むシリコン組成物であって、

式中、



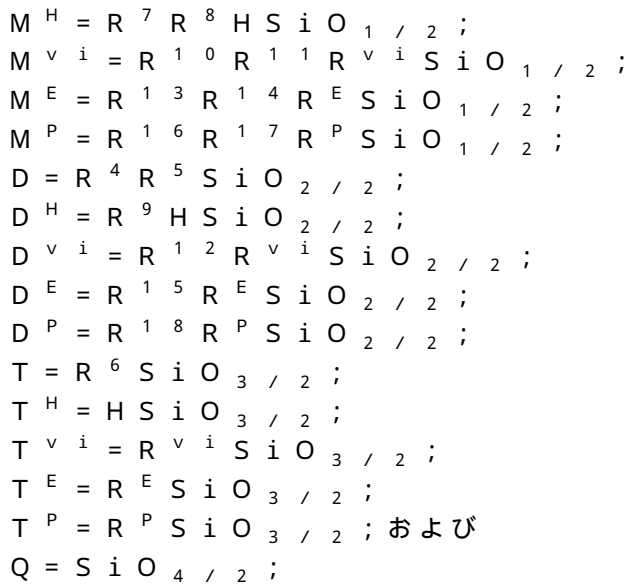
10

20

30

40

50



であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{Vi} であり、

それぞれの R^{Vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_S H_{2S} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_S H_{2S} O)_x$ および $(C_T H_{2T} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 S および T が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および y が 1 から約 30 のいずれかであり、

下付文字、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e \leq 2$ かつ $b + g + m \leq 2$ という制限に従い、

下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' \leq 2$ かつ $c' + h' + n' \leq 2$ という制限に従い、そして、

下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、 j'' 、 k'' 、 m'' 、 n'' 、 p'' 、 q'' および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' \leq 2$ かつ $d'' + i'' + p'' \leq 1$ という制限に従う、

シリコン組成物を含む、

コート剤組成物。

【請求項 25】

1)

10

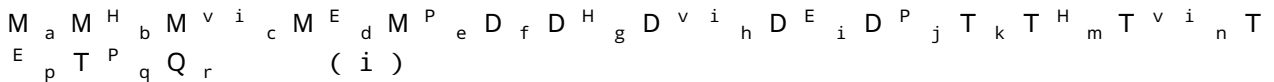
20

30

40

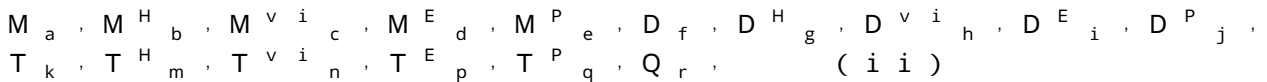
50

a) 式 (i)



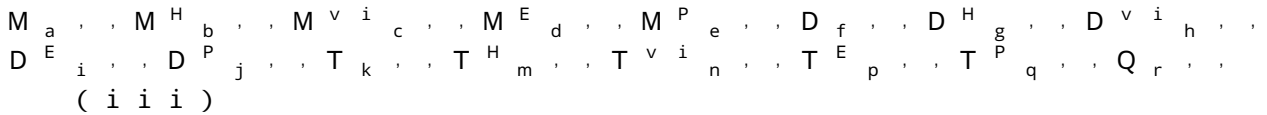
を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

b) 式 (ii)



を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

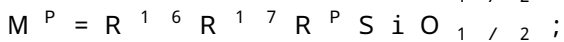
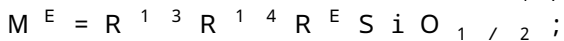
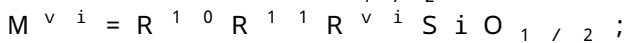
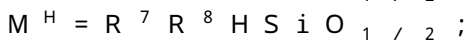
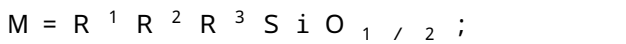
c) 式 (iii)



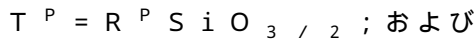
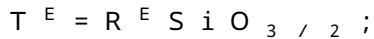
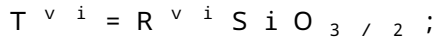
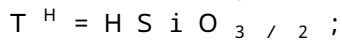
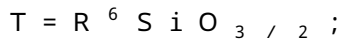
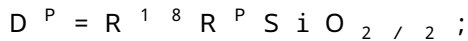
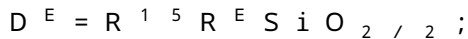
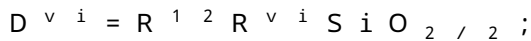
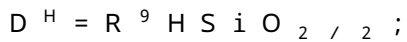
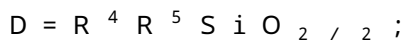
10

を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキシタンの官能性シリコンの反応産物を含むシリコン組成物であって、

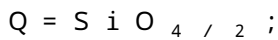
式中、



20



30



であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{v_i} であり、

それぞれの R^{v_i} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

40

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキシタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ および $(C_t H_{2t} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 s および t が 2 から約 20 のいずれかであり、

50

かつ下付文字 x および y が 1 から約 30 のいずれかであり、
 下付文字、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e \leq 2$ かつ $b + g + m \leq 2$ という制限に従い、
 下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' \leq 2$ かつ $c' + h' + n' \leq 2$ という制限に従い、そして、
 下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、 j'' 、 k'' 、 m'' 、 n'' 、 p'' 、 q'' および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' \leq 2$ かつ $d'' + i'' + p'' \leq 1$ という制限に従う、
 シリコン組成物、ならびに

2) 化粧品成分

を含む、化粧品組成物。

【請求項 26】

前記シリコン組成物が溶媒によって膨潤されていてもよい、請求項 25 に記載される化粧品組成物。

【請求項 27】

前記溶媒が水である、請求項 25 に記載の化粧品組成物。

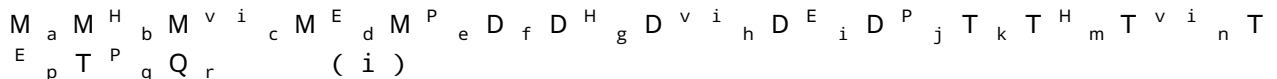
【請求項 28】

前記溶媒がシリコンもしくは油である、請求項 25 に記載の化粧品組成物。

【請求項 29】

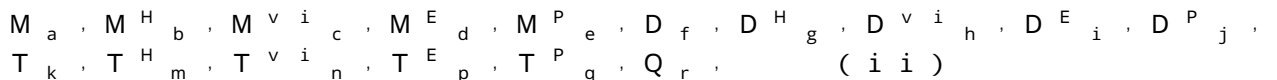
1)

a) 式 (i)



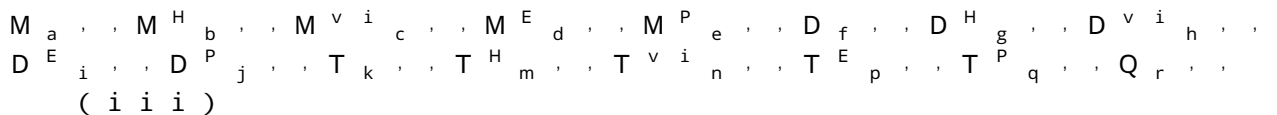
を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

b) 式 (ii)



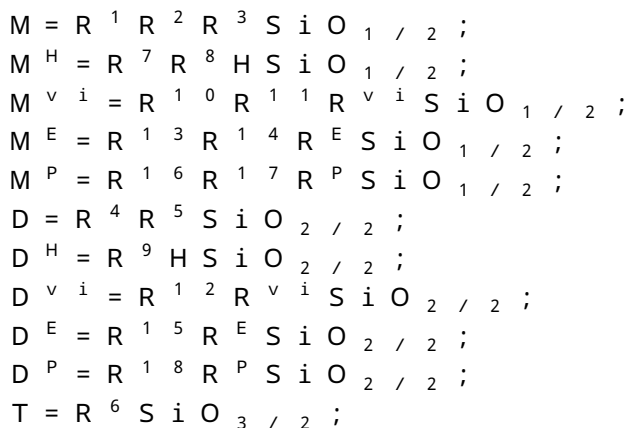
を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

c) 式 (iii)



を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタンの官能性シリコンの反応産物を含むシリコン組成物であって、

式中、



10

20

30

40

50

$T^H = HSiO_{3/2}$;
 $T^{Vi} = R^{Vi}SiO_{3/2}$;
 $T^E = R^E SiO_{3/2}$;
 $T^P = R^P SiO_{3/2}$; および
 $Q = SiO_{4/2}$;

であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{Vi} であり、

それぞれの R^{Vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ および $(C_t H_{2t} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 s および t が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および y が 1 から約 30 のいずれかであり、

下付文字、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e = 2$ かつ $b + g + m = 2$ という制限に従い、

下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' = 2$ かつ $c' + h' + n' = 2$ という制限に従い、そして、

下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、 j'' 、 k'' 、 m'' 、 n'' 、 p'' 、 q'' および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' = 2$ かつ $d'' + i'' + p'' = 1$ という制限に従う、

シリコン組成物、ならびに

2) 充填剤

を含む、ガasket組成物。

【請求項 30】

1)

a) 式 (i)

$M_a M^H_b M^{Vi}_c M^E_d M^P_e D_f D^H_g D^{Vi}_h D^E_i D^P_j T_k T^H_m T^{Vi}_n T^E_p T^P_q Q_r$ (i)

を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

b) 式 (ii)

$M_a \cdot M^H_b \cdot M^{Vi}_c \cdot M^E_d \cdot M^P_e \cdot D_f \cdot D^H_g \cdot D^{Vi}_h \cdot D^E_i \cdot D^P_j \cdot T_k \cdot T^H_m \cdot T^{Vi}_n \cdot T^E_p \cdot T^P_q \cdot Q_r$ (ii)

を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

c) 式 (iii)

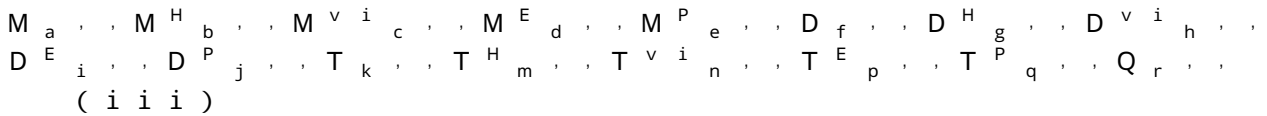
10

20

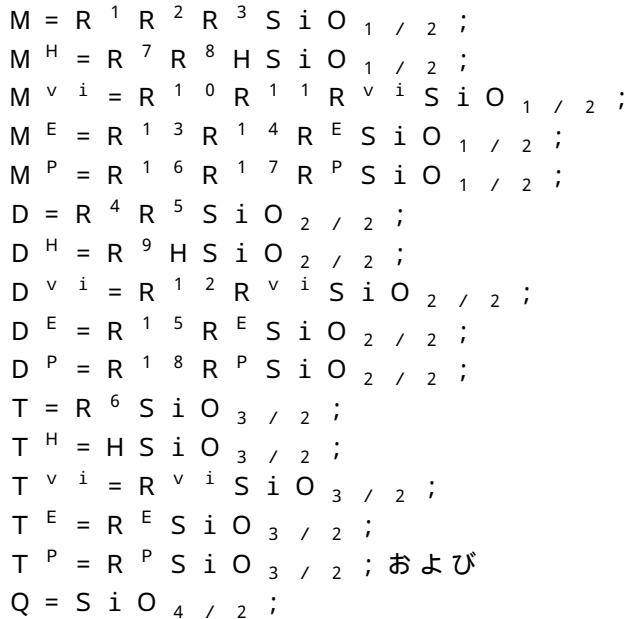
30

40

50



を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキシタンの官能性シリコンの反応産物を含むシリコン組成物であって、
式中、



であり、

式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{Vi} であり、

それぞれの R^{Vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキシタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ および $(C_t H_{2t} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 s および t が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および y が 1 から約 30 のいずれかであり、

下付文字、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e \geq 2$ かつ $b + g + m \geq 2$ という制限に従い、

下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' \geq 2$ かつ $c' + h' + n' \geq 2$ という制限に従い、そして、

下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、

10

20

30

40

50

j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' + 2$ かつ $d' + i' + p' = 1$ という制限に従う、シリコン組成物、ならびに

2) 充填剤

を含む、ラバー組成物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

発明の背景

1. 発明の技術分野

本発明はシリコン組成物、より詳細には、二つの異なる硬化様式によって硬化できるか、またはそれらの異なる硬化様式を用いて同時に硬化することのできる、シリコン組成物に関する。シリコン組成物は、ヘルスケアおよび医薬的用途、ドラッグデリバリーデバイス、コート剤、化粧品の構造材料、ガasket材料、農業用スプレー、ホームケア製品、ラバーおよび、バイオマテリアルもしくはバイオマテリアルの付加物として、組織工学のための細胞培養の足場として、もしくは活性剤成分の輸送用剤としてのインプラントのような親水性が必要とされるような他の用途、表面剤、乳化剤、共乳化剤、分散剤、共分散剤、接着剤もしくは接着剤の成分、泡制御剤、消泡剤、抗ドリフト (antidrift) および抗ドリフト (anti-drift) 剤のような界面活性剤のような用途に使用できるような向上した親水性、物理的性質および光学特性を持つ。

【背景技術】

【0002】

2. 関連発明の記載

シリコン組成物は、非常に疎水性であり、ドラッグデリバリーデバイスのような親水性が必要とされる用途における使用に困難性をもたらす。例えば経皮パッチのようなくつかの用途において、親水性かつ平滑なシリコン表面を達成するために追加の親水性コーティングが通常必要とされる。シリコン組成物の親水性を向上することは、さまざまな親水性官能基を用いることによって増加することが試みられてきた。しかしながら、その結果生じるシリコンの物理的特性は、概して、ヘルスケアおよび医薬用途のための経皮パッチ、ドラッグデリバリーデバイス、コート剤、化粧品の構造材料、ガasket材料、および親水性が必要とされる他の用途のような用途には十分であるとは実証されてこなかった。親水性はまた、他のシロキサンとの浸漬もしくは混合のような他の手段によってシリコン組成物に導入できる。しかしながら、そのようなプロセスは、さまざまな困難性を未だにもたらす。

【発明の概要】

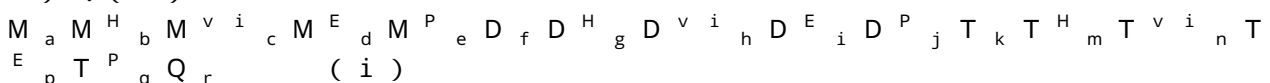
【課題を解決するための手段】

【0003】

発明の概要

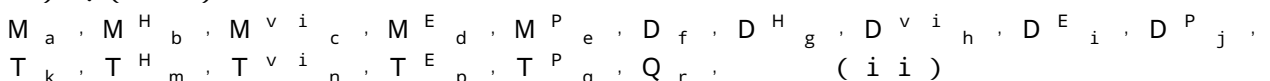
ここでの一つの非限定的な実施態様において、

a) 式 (i)



を持つ少なくとも一つのヒドリド官能性シリコン、

b) 式 (ii)



を持つ少なくとも一つの不飽和官能性シリコン、および

c) 式 (iii)



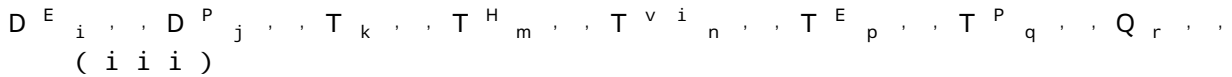
50

10

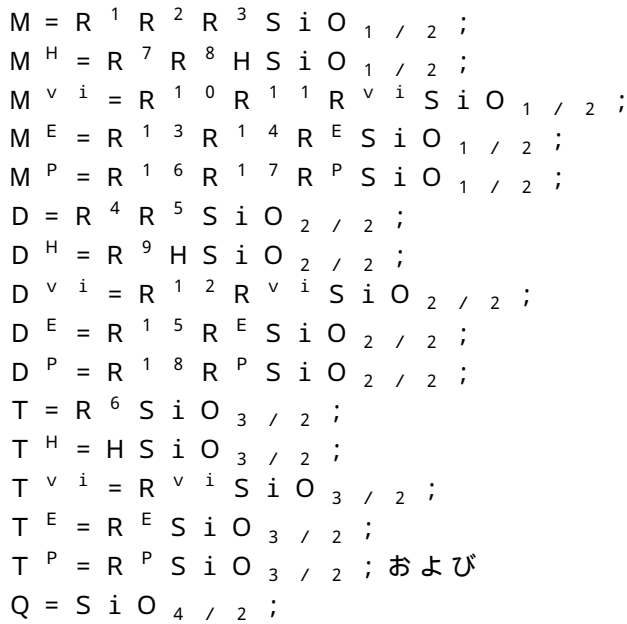
20

30

40



を持つ少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタンの官能性シリコーンの反応産物を含むシリコーン組成物が提供され、
式中、



10

20

であり、
式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^7 、 R^8 および R^9 は、それぞれ独立して水素もしくは 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、

R^{10} 、 R^{11} および R^{12} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^{Vi} であり、

それぞれの R^{Vi} は、独立して 2 から約 10 個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、

30

R^{13} 、 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^E であり、

それぞれの R^E は、独立して 2 から約 60 個の炭素原子を持つかまたは一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンのラジカルであり、

R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は、それぞれ独立して 1 から約 60 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルまたは R^P であり、

それぞれの R^P は、独立して一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ および $(C_t H_{2t} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであって、ここで下付文字 s および t が 2 から約 20 のいずれかであり、かつ下付文字 x および y が 1 から約 30 のいずれかであり、

40

下付文字、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、そして、 $a + b + c + d + e - 2$ かつ $b + g + m - 2$ という制限に従い、

下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ 0 もしくは 1 から約 1000 の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e' - 2$ かつ $c' + h' + n' - 2$ という制限に従い、そして、

下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、 j'' 、 k'' 、 m'' 、 n'' 、 p'' 、 q'' および r'' はそれぞれ 0 もしくは 1

50

から約1000の正の整数のいずれかであり、 $a' + b' + c' + d' + e'$ 、 2 かつ $d' + i' + p' = 1$ という制限に従う。

【図面の簡単な説明】

【0004】

【図1】図1は硬化した三元混合物の水吸収を示す。

【発明を実施するための形態】

【0005】

好ましい実施態様の詳細な記載

ここでの明細書および特許請求の範囲において、以下の用語および表現は以下に示されるように理解されるべきである。

【0006】

添付の請求項を含む本明細書で使用されるとき、単数形である「a」、「an」および「the」は複数形をも含み、特定の数値範囲への言及は、文脈が明確に他を示さない限り、少なくともその特定の値を含む。

【0007】

実施例以外において、もしくは他に示されない限り、ここに記載される数値および数値の範囲は、「約」および「およそ」という用語によって修飾されていようがされていまいが示された値およびそれに近似の値を含むと理解されるべきである。そのような範囲が表示されるとき、他の実施態様は一つの特定の値から、および/もしくは他の特定の値までを含む。同様に、例えば、「約」という修飾を用いることによって値が近似として表示されるとき、特定の値は他の実施態様を形成すると理解されるべきであろう。

【0008】

本明細書において述べられる任意の数値範囲は、範囲中のすべてのサブ範囲(sub-ranges)および、そのような範囲もしくはサブ範囲のさまざまな端点の任意の組み合わせを含むことは理解されよう。

【0009】

ここに使用されるすべての方法は、ここにおいて明確に指示されるか、または文脈から明らかに否定されない限り、任意の好適な順番で実施できる。任意の例およびすべての例、または例示的な言葉(たとえば「~のような」)によってここに与えられるものの使用は、単純に発明をよりよく例示することのみを意図しており、他に請求されない限り、本発明の範囲に限定を与えることはない。明細書中のどの言語も、本発明の実施のために重要であるとして請求されない要素のいずれかを指していると解釈されるべきではない。

【0010】

「含む(comprising)」、「含む(including)」、「含む(containing)」、「特徴付けられる(characterized by)」および、それらの文法的に等価なものは包括的もしくはオープンエンドであり、追加的な、言及されていない要素、もしくは方法のステップを排除するものではなく、そして、より限定的な用語「~からなる(consisting of)」および「本質的に~からなる(consisting essentially of)」をもまた含むと理解されるべきである。

【0011】

構造的、組成的および/もしくは機能的に関連する化合物、物質もしくは基質の群に属すると、明細書中の明示的もしくは暗示的に開示される、および/もしくは請求項にて言及される、すべての化合物、物質もしくは基質は、その群の個々の代表物およびそれらのすべての組み合わせを含むとさらに理解されよう。

【0012】

ここで使用されるとき、用語「ネットワーク」は、相互貫入しているシロキサンポリマー鎖を含む三次元に伸長した構造体を意味する。

【0013】

ここで使用されるとき、用語「ポリマー」は、ホモポリマー、コポリマー、ターポリマ

10

20

30

40

50

一、およびより高次のポリマーを含む。

【0014】

ここで使用されるとき、炭化水素ラジカルに関連した用語「一価の」は、ラジカルがラジカルを介して一つの共有結合を形成できることを意味する。

【0015】

ここで使用されるとき、用語「炭化水素ラジカル」は、直鎖炭化水素ラジカル、分岐炭化水素ラジカル、非環式炭化水素ラジカル、脂環式炭化水素ラジカルおよび芳香族炭化水素ラジカルを含む。

【0016】

ここで使用されるとき、用語「非環式炭化水素ラジカル」は、好ましくはラジカル当たり1から60個の炭素原子を含む任意の直鎖もしくは分岐の炭化水素ラジカルを意味し、それは飽和でも不飽和でもよく、そして任意に、一つもしくはそれ以上の原子、または例えばカルボキシル、シアノ、ヒドロキシ、ハロおよびオキシのような官能基によって置換されるかまたは中断されていてもよい。それらの官能基がエポキシドもしくはオキシラン部分のカチオン性硬化機序と干渉しない限り、好適な一価の非環式炭化水素ラジカルは、例えばメチル、エチル、sec-ブチル、tert-ブチル、オクチル、デシル、ドデシル、セチル、ステアリル、エテニル、プロペニル、ブチニル、ヒドロキシプロピル、シアノエチル、ブトキシ、2, 5, 8-トリオキサデカニル、カルボキシメチル、クロロメチルおよび3, 3, 3-フルオロプロピルのような、例えば、アルキル、アルケニル、アルキニル、ヒドロキシルアルキル、シアノアルキル、カルボキシルアルキル、アルキルオキシ、オキサアルキル、アルキルカルボニルオキサアルキレン、カルボキサミドおよびハロアルキルを含み得る。好適な二価の非環式炭化水素ラジカルは、例えばメチレン、ジメチレン、トリメチレン、デカメチレン、エチルエチレン、2-メチルトリメチレン、2, 2-ジメチルトリメチレンのような直鎖もしくは分岐のアルキレンラジカル、ならびに例えばメチレンオキシプロピレンのような直鎖もしくは分岐のオキシアルキレンラジカルを含む。好適な三価の非環式炭化水素ラジカルは、例えば1, 2, 6-トリイル-4-オキサヘキサンのような例えば1, 1, 2-エタントリイル、1, 2, 4-ブタントリイル、1, 2, 8-オクタントリイル、1, 2, 4-シクロヘキサントリイルおよびオキサアルカントリイルのラジカルのようなアルカントリイルラジカルを含む。

10

20

【0017】

ここで使用されるとき、用語「アルキル」は、任意の飽和の、直鎖もしくは分岐の、一価の炭化水素ラジカルを意味する。好ましい実施態様において、一価のアルキル基は、例えばメチル、エチル、プロピル、イソ-プロピル、n-ブチル、イソ-ブチル、sec-ブチル、tert-ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、デシル、ドデシルのような基当たり1から60個の炭素を含む直鎖もしくは分岐のアルキル基より選択される。

30

【0018】

ここで使用されるとき、「アルケニル」は、例えばエテニル、2-プロペニル、3-ブテニル、5-ヘキセニル、7-オクテニルおよびエテニルフェニルのような好ましくはラジカル当たり2から10個の炭素原子を含む任意の直鎖もしくは分岐の、一価の末端不飽和の炭化水素ラジカルを意味する。

40

【0019】

ここで使用されるとき、「脂環式炭化水素ラジカル」は、アルキルラジカル当たり2から6個の炭素原子を好ましくはそれぞれ含むアルキルラジカル、ハロラジカルもしくは他の官能基の一つもしくはそれ以上によって環の一つもしくはそれ以上が任意選択で置換されていてもよく、そして二つもしくはそれ以上の環を含む一価の脂環式炭化水素ラジカルの場合、縮合環であってもよい、好ましくは環当たり4から12個の炭素原子を含む一つもしくはそれ以上の飽和を持つ炭化水素環を含むラジカルを意味する。好適な一価の脂環式炭化水素ラジカルは、例えば、シクロヘキシルおよびシクロオクチルを含む。好適な二価の脂環式炭化水素ラジカルは、例えば1, 4-シクロヘキシレンのような飽和もしくは不飽和の、二価の単環式炭化水素ラジカルを含む。好適な三価の脂環式炭化水素ラジカル

50

は、例えば 1 - ジメチレン - 2 , 4 - シクロヘキシレン、1 - メチルエチレン - 3 - メチル - 3 , 4 - シクロヘキシレンのようなシクロアルカントリイルラジカルを含む。

【 0 0 2 0 】

ここで使用されるとき、「芳香族炭化水素ラジカル」は、任意選択でアルキルラジカル当たり 2 から 6 個の炭素原子を好ましくはそれぞれ含むアルキルラジカル、ハロラジカルもしくは他の官能基の一つもしくはそれ以上によって環上で置換されていてもよく、そして、二つもしくはそれ以上の環を含む一価の芳香族炭化水素ラジカルの場合、縮合環であってもよい、ラジカル当たり一つもしくはそれ以上の芳香族環を含む炭化水素ラジカルを意味する。好適な一価の芳香族炭化水素ラジカルは、例えばフェニル、トリル、2 , 4 , 6 - トリメチルフェニル、1 , 2 - イソプロピルメチルフェニル、1 - ペンタエニル、ナフチル、アントリル、オイゲノール、およびアリルフェノール、ならびに例えば 2 - フェニルエチルのようなアルキルラジカルを含む。好適な二価の芳香族炭化水素ラジカルは、例えば 1 , 2 - フェニレン、1 , 4 - フェニレン、4 - メチル - 1 , 2 - フェニレン、フェニルメチレンのような、例えば二価の単環式アレーンを含む。好適な三価の芳香族炭化水素ラジカルは、例えば 1 - トリメチレン - 3 , 5 - フェニレンのような、例えば三価の単環式アレーンを含む。

10

【 0 0 2 1 】

本願発明者らが、ここでの一つの具体的な実施態様において、それぞれ、ヒドリド、不飽和結合、およびエポキシ（もしくはオキセタン）の反応性部分を、それぞれ少なくとも一つもしくは二つ持つような少なくとも三つの官能性の異なるシリコンの反応産物を含む、二つの異なる硬化様式によって硬化することができるか、またはそれらの様式を用いる同時に硬化することのできるシリコン組成物を予期せず発見したことは特筆すべきである。ここに記載されるシリコン組成物は、ここに記載される反応生産物以外のこれまで知られていたシリコンと比べて向上した親水性、物理的特性、および光学的特性を持つ。

20

【 0 0 2 2 】

ここでの一実施態様において、上述のヒドリド官能性シリコンの少なくとも一つ (i)、上述の不飽和官能性シリコンの少なくとも一つ (i i) および上述のエポキシもしくはオキセタン官能性シリコンの少なくとも一つ (i i i) の反応産物を含むシリコン組成物が提供され、ここでシリコン (i)、(i i) および (i i i) は、任意選択で例えば白金触媒のような触媒の存在下で反応してシリコン組成物を産生する。

30

【 0 0 2 3 】

任意の公知のもしくは市販で使用される分子当たり少なくとも二つのヒドリド部分を持つヒドリド官能性シリコンがここでのシリコン (i) として使用できることはここでは理解されるであろう。式 (i) に記載されるように、ヒドリド官能性シリコンは、任意の量の不飽和官能性部分、エポキシ（もしくはオキセタン）官能性部分、およびポリエーテル部分を持ち得る。ヒドリド官能性シリコンはまた、任意の量の上に特定される官能性部分以外の他の官能性部分を持ち得る。

【 0 0 2 4 】

一実施態様において、式 (i) における R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 は、それぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子、より具体的には 1 から約 30 個の炭素原子、そしてもっとも具体的には 1 から約 20 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、 R^7 、 R^8 および R^9 はそれぞれ独立して、水素、または 1 から約 60 個の炭素原子、より具体的には 1 から約 30 個の炭素原子、そしてもっとも具体的には 1 から約 20 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、 R^{10} 、 R^{11} および R^{12} はそれぞれ独立して、1 から約 60 個の炭素原子、より具体的には 1 から約 30 個の炭素原子、そしてもっとも具体的には 1 から約 20 個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^v であり、それぞれの R^v は独立して 2 から約 10 個の炭素原子、より具体的には 2 から約 8 個の炭素原子、そしてもっとも具体的には 2 から約 5 個の炭素原子を持つ一価の不飽和の炭化水素ラジカルであり、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} はそれぞれ独立

40

50

して1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^E であり、それぞれの R^E は独立して2から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子、または一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンラジカルであり、 R^{16} 、 R^{17} および R^{18} はそれぞれ独立して1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^P であり、それぞれの R^P は独立して、一価のポリエーテル部分 $(C_s C_{2s} O)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_s H_{2s} O)_x$ および $(C_t H_{2t} O)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであり、ここで下付文字 s および t は、それぞれ2から約20、より具体的には2から約15の炭素原子、そしてもっとも具体的には2から約10の炭素原子のいずれかであり、そして下付文字 x および y は、1から約30、より具体的には約5から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には約5から約20個の炭素原子のいずれかである。

【0025】

一実施態様において、式(i)における下付文字 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 、 h 、 i 、 j 、 k 、 m 、 n 、 p 、 q および r はそれぞれ0もしくは1から約1000の正の整数であり、 $a + b + c + d + e \leq 2$ および $b + g + m \leq 2$ という制限に従う。

【0026】

一実施態様において、ヒドリド官能性シリコーン(i)は、グラム当たり約0.3マイクロモル($mmol/g$)から約15 $mmol/g$ 、より具体的には2 $mmol/g$ から約15 $mmol/g$ 、そしてもっとも具体的には4 $mmol/g$ から約15 $mmol/g$ の範囲のヒドリド含量を持つ。

【0027】

一実施態様において、ヒドリド官能性シリコーン(i)は、式 $M_a M^H_b D_f D^H_g T_k T^H_m Q_r$ を持ち得、式中、 M 、 M^H 、 D 、 D^H 、 T 、 T^H および Q は、上に定義される通りであり、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 および R^9 はそれぞれ独立して、メチル、エチル、イソプロピル、sec-ブチルおよびtert-ブチルからなる群より選択され、下付文字 a 、 b 、 f 、 g 、 k 、 m および r はそれぞれ、1から約100、より具体的には約5から約50、そしてもっとも具体的には約10から約30の範囲の正の整数である。

【0028】

分子当たり少なくとも二つの不飽和炭化水素部分を持つ任意の公知のもしくは市販で使用される不飽和官能性シリコーンを、ここでのシリコーン(ii)として使用できることは理解されよう。式(ii)において示されるように、不飽和官能性シリコーンは、ヒドリド官能性部分、エポキシ(もしくはオキセタン)官能性部分およびポリエーテル部分の任意の量を持ち得る。不飽和官能性シリコーンはまた、上に特定されるもの以外の他の官能性部分を任意の量で持ち得る。

【0029】

一実施態様において、式(ii)における R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 はそれぞれ独立して、1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、 R^7 、 R^8 および R^9 はそれぞれ独立して水素、または1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、 R^{10} 、 R^{11} および R^{12} はそれぞれ独立して、1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^{vi} であり、それぞれの R^{vi} は独立して、2から10個の炭素原子、より具体的には2から約8個の炭素原子、そしてもっとも具体的には2から約5個の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} はそれぞれ独立して1

10

20

30

40

50

から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^E であり、それぞれの R^E は独立して、2から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子、または一つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンラジカルであり、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} はそれぞれ独立して1から約60個、より具体的には1から約30個、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^P であり、それぞれの R^P は独立して、一価のポリエーテル部分 $(C_5C_2SO)_x$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_5H_2SO)_x$ および $(C_7H_2TO)_y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであり、ここで下付文字 s および t は、それぞれ2から約20、より具体的には2から約15の炭素原子、そしてもっとも具体的には2から約10の炭素原子のいずれかであり、そして下付文字 x および y は、1から約30、より具体的には約5から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には約5から約20個の炭素原子のいずれかである。

10

【0030】

一実施態様において、式(i i)における下付文字 a' 、 b' 、 c' 、 d' 、 e' 、 f' 、 g' 、 h' 、 i' 、 j' 、 k' 、 m' 、 n' 、 p' 、 q' および r' はそれぞれ0もしくは1から約1000の正の整数であり、 $a' + b' + c' + d' + e' + 2$ および $c' + h' + n' + 2$ という制限に従う。

20

【0031】

一実施態様において、不飽和官能性シリコーンは、約0.01 mmol/gから約2 mmol/g、より具体的には0.01 mmol/gから約1 mmol/g、そしてもっとも具体的には0.02 mmol/gから約0.4 mmol/gの範囲の不飽和部分含量を持つ。

【0032】

一実施態様において、不飽和官能性シリコーン(i i)は、式 $M_a \cdot M^{v i} c \cdot D_f \cdot Q_r$ を持ち得、式中、 M 、 $M^{v i}$ 、 D および Q は上に定義される通りであり、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 および R^5 はそれぞれ独立してメチル、エチル、イソプロピル、sec-ブチルおよびtert-ブチルからなる群より選択され、 R^{10} および R^{11} はそれぞれ独立して、メチル、エチル、イソプロピル、sec-ブチルおよびtert-ブチルからなる群より選択されるかまたは $R^{v i}$ であり、それぞれの $R^{v i}$ は独立して、エテニル、2-プロペニル、3-ブテニル、5-ヘキセニル、7-オクテニルおよびエテニルフェニルからなる群より選択され、下付文字 a' 、 c' 、 f' および r' はそれぞれ、約1から約2000、より具体的には約50から約1500、そしてもっとも具体的には約100から約1000の範囲の正の整数である。

30

【0033】

ここでのシリコーン(i i i)として任意の公知のもしくは市販で使用できるエポキシもしくはオキセタン官能性シロキサンが利用できることはここでは理解されるであろう。式(i i i)において示されるように、エポキシもしくはオキセタン官能性シリコーンは、ヒドリド官能性部分、不飽和官能性部分およびポリエーテル部分の任意の量を持ち得る。エポキシもしくはオキセタン官能性シリコーンはまた、上に特定されるものと異なる他の官能性部分を任意の量で持ち得る。

40

【0034】

一実施態様において、式(i i i)における R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 はそれぞれ独立して、1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、 R^7 、 R^8 および R^9 はそれぞれ独立して水素、または1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカルであり、 R^{10} 、 R^{11} および R^{12} はそれぞれ独立して、1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子

50

、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^{V1} であり、それぞれの R^{V1} は独立して、2から10個の炭素原子、より具体的には2から約8個の炭素原子、そしてもっとも具体的には2から約5の炭素原子を持つ一価の不飽和炭化水素ラジカルであり、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} はそれぞれ独立して1から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^E であり、それぞれの R^E は独立して、2から約60個の炭素原子、より具体的には1から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子、または1つもしくはそれ以上のヘテロ原子を持つ、エポキシもしくはオキセタンラジカルであり、 R^{16} 、 R^{17} 、 R^{18} はそれぞれ独立して1から約60個、より具体的には1から約30個、そしてもっとも具体的には1から約20個の炭素原子を持つ一価の炭化水素ラジカル、または R^P であり、それぞれの R^P は独立して、一価のポリエーテル部分 $(C_S C_{2S} O)_X$ 、または一価のポリエーテル部分 $(C_S H_{2S} O)_X$ および $(C_T H_{2T} O)_Y$ またはより高次のポリマーのコポリマーであり、ここで下付文字 S および T は、それぞれ2から約20、より具体的には2から約15の炭素原子、そしてもっとも具体的には2から約10の炭素原子のいずれかであり、そして下付文字 X および Y は、1から約30、より具体的には約5から約30個の炭素原子、そしてもっとも具体的には約5から約20個の炭素原子のいずれかである。

10

【0035】

一実施態様において、式 (iii) における下付文字 a'' 、 b'' 、 c'' 、 d'' 、 e'' 、 f'' 、 g'' 、 h'' 、 i'' 、 j'' 、 k'' 、 m'' 、 n'' 、 p'' 、 q'' および r'' はそれぞれ0もしくは1から約1000の正の整数であり、 $a'' + b'' + c'' + d'' + e'' + 2$ および $d'' + i'' + p'' + 1$ という制限に従う。

20

【0036】

一実施態様において、エポキシもしくはオキセタン官能性シリコーンは、約0.1 mmol/gから約1.5 mmol/g、より具体的には0.1 mmol/gから約1 mmol/g、そしてもっとも具体的には0.2 mmol/gから約0.7 mmol/gの範囲のエポキシもしくはオキセタン含量を持つ。

【0037】

一実施態様において、エポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (iii) は式 $M_a \cdot M^E_d \cdot D_f \cdot D^E_i \cdot T_k \cdot Q_r$ を持ち得、式中 M 、 M^E 、 D 、 D^E 、 T および Q は上に定義される通りであり、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 および R^6 はそれぞれ独立してメチル、エチル、イソプロピル、*sec*-ブチルおよび*tert*-ブチルからなる群より選択され、 R^{13} 、 R^{14} および R^{15} はそれぞれ独立して、メチル、エチル、イソプロピル、*sec*-ブチルおよび*tert*-ブチルからなる群より選択されるかまたは R^E であり、それぞれの R^E は独立して、2-(3,4-エポキシシクロヘキシル)エチル、2-(3,4-エポキシシクロペンチル)エチル、2-(3,4-エポキシシクロヘキシル)プロピルおよび2-(3,4-エポキシシクロペンチル)プロピルからなる群より選択され、下付文字 a'' 、 d'' 、 f'' 、 i'' 、 k'' および r'' はそれぞれ、約1から約2000、より具体的には約50から約1500、そしてもっとも具体的には約10から約600の範囲の正の整数である。

30

40

【0038】

任意の公知もしくは市販で使用される触媒、より具体的には光活性化白金触媒はここで利用できることは、ここでは理解されるであろう。一実施態様において、光活性化白金触媒は、 δ -シクロペンタジエニル白金(IV)錯体、ビス(ジケトナート)白金(II)錯体、ビス(ホスフィン)白金(II)錯体、シクロオクタジエン白金(II)錯体、およびそれらの混合物からなる群より選択され、より具体的にはトリメチル(メチルシクロペンタジエニル)白金(IV)($CpPt$)もしくは白金(II)アセチルアセトナート($Pt(acac)_2$)である。

【0039】

50

一実施態様において、光活性化触媒はまた、熱によって活性化できる。任意の公知もしくは市販で使用される熱活性化白金触媒がここで利用できることは、ここで理解されるであろう。熱活性化白金触媒は、塩化白金酸のような白金化合物、もしくは白金/ビニルシロキサン錯体のような白金錯体、またはそれらの混合物からなる群より選択される。

【0040】

任意の公知のもしくは市販で使用される光開始剤がここで組成物中に利用できることは、ここで理解されるであろう。一実施態様において、光開始剤は、ベンゼンシクロペンタジエニル鉄(II)ヘキサフルオロホスファートおよびシクロペンタジエニル鉄(II)ジカルボニル二量体を含む鉄(II)サンドイッチ錯体、またはPF₆⁻もしくはSbF₆⁻のビス(4-アルキルフェニル)イオドニウム塩、またはそれらの混合物からなる群より選択される。光開始剤は、UV照射への曝露に際してエポキシド開環反応を引き起こし得る。

10

【0041】

ここで組成物は、充填剤、光増感剤、安定剤、阻害剤もしくは接着促進剤、可塑剤、難燃剤、煙抑制剤、酸化防止剤、潤滑剤、顔料、開始剤、潤滑剤および流動制御剤、帯電防止剤、発泡剤/起発剤、防汚剤、および生じる組成物の物理的特性を向上するための当技術分野において公知である任意の他の添加剤、ならびにそれらと他の追加の添加剤との任意の組み合わせのような追加の成分をさらに含み得る。

【0042】

任意の公知もしくは市販で使用される充填剤をここで利用できることは、ここでは理解されるであろう。充填剤は、シリカエーロゲル、ヒュームドシリカ、フラックス焼成珪藻土シリカ、焼成珪藻土シリカ、焼成カオリン、沈降炭酸カルシウム、粉碎シリカ、アセチレンブラック、アルミナ、カーボンブラック、カーボンモレキュラーシープ、二酸化銀、二酸化チタン、酸化ジルコニウム、酸化鉄からなる群より選択される。一実施態様において、シリカ充填剤は、ヒュームドシリカ、沈降シリカおよびそれらの混合物からなる群より選択される。一実施態様において、シリカ充填剤は、表面処理されていてもいいし、未処理のままでもよい。シリカ充填剤の処理をするために使用される処理のいくつかの非限定的例はオルガノアルコキシシランであり、そのようにさらに処理されたシリカ充填剤もまたさらに、ヘキサメチルジシラザン、ジビニルテトラメチルジシラザン、オクタメチルシクロテトラシロキサンおよびそれらの組み合わせのような不動態化剤によって処理され得る。

20

30

【0043】

任意の公知もしくは市販で使用される光増感剤がここで利用できることは、ここで理解されるであろう。一実施態様において、光増感剤は、アントラセンおよびその誘導体のような多環式芳香族化合物、またはチオキサントンおよびその誘導体のようなケトンクロモフォア、またはそれらの混合物からなる群より選択される。

【0044】

任意の公知もしくは市販で使用される阻害剤がここで利用できることは、ここでは理解されるであろう。一実施態様において、阻害剤は、 α -アルキノール、もしくはマレアート、もしくはフマレート、もしくはビニル含有オルガノシロキサン、もしくはホスファイト、もしくはシアヌラート、またはそれらの混合物からなる群より選択される。

40

【0045】

接着促進剤は、シリコーン組成物と共有結合するために使用できる。任意の公知もしくは市販で使用される接着促進剤がここで利用できることは、ここで理解されるであろう。一実施態様において、接着促進剤は、ケイ素ヒドリドもしくはビニル、もしくはエポキシ(もしくはオキセタン)官能基を含むマルチアルコキシシランからなる群より選択される。

【0046】

本発明の実施態様のための用途

A. 農業用途

50

農薬 農業、園芸、芝地、観賞植物および林業

多くの農薬用途は、葉面表面に湿潤性および拡散性を提供するためのスプレー混合物へのアジュバント (a d j u v a n t) の添加を必要とする。しばしばそのようなアジュバントは、葉表面を湿潤させるのが困難なものへのスプレー滴残留を増大させること、スプレーの被覆を向上するために拡散性を増大すること、または、植物のクチクラへの除草剤の浸透を提供することのようさまざまな機能をなし得る界面活性剤である。これらのアジュバントは、タンク横での添加物として提供されるか、または農薬配合物における成分として使用されるかのいずれかである。

【 0 0 4 7 】

農薬の典型的な用途は、農業、園芸、芝生、観賞植物、家庭および庭、畜産、そして林業への用途を含む。

10

【 0 0 4 8 】

本発明の農薬組成物はまた、少なくとも一つの農薬を含み、ここで、本発明の組成物は、濃縮物として、またはタンク混合物に希釈されて、最終の使用濃度が 0 . 0 0 5 % と 2 % との間に達するのに十分な量で存在する。農薬組成物は、任意選択で、賦形剤、共界面活性剤、溶媒、泡制御剤、付着助剤、漂流飛散抑制剤、生物製剤、微量栄養素、肥料などを含んでもよい。農薬という用語は、有害生物を駆除するのに使用される任意の化合物を意味し、例えば殺鼠剤、殺虫剤、殺ダニ剤、防かび剤、および除草剤である。利用することのできる農薬の説明的な例は、成長調整剤、光合成阻害剤、色素阻害剤、有糸分裂かく乱物質、脂質生合成阻害剤、細胞壁阻害剤、および細胞膜かく乱物質を含むが、これらに限定されない。本発明の組成物に採用される農薬の量は、採用される農薬の種類によって変化する。本発明の組成物と共に使用されてよい農薬成分のより具体的な例は、フェノキシ酢酸、フェノキシプロピオン酸、フェノキシ酪酸、安息香酸、トリアジンおよび s - トリアジン、置換尿素、ウラシル、ペンタゾン、デスメジファミン、メタゾール、フェンメジファミン、ピリダート、アミトロール、クロマゾン、フルリドン、ノルフルラゾン、ジニトロアニリン、イソプロパリン、オリザリン、ペンジメタリン、プロジアミン、トリフルラリン、グリホサート、スルホニル尿素、イミダゾリノン、クレトジム、ジクロホップ - メチル、フェノキサプロップ - エチル、フルアジホップ - p - ブチル、ハロキシホップ - メチル、キザロホップ、セトキシジム、ジクロベニル、イソキサベン、およびビピリジリウムの化合物のような除草剤および成長調整剤であるが、これらに限定されない。

20

30

【 0 0 4 9 】

本発明と共に使用され得る防かび剤組成物は、アリジモルフ、トリデモルフ、ドデモルフ、ジメトモルフ；フルシラゾール、アザコナゾール、シプロコナゾール、エポキシコナゾール、フルコナゾール、プロピコナゾール、テブコナゾールなど；イマザリル、チオファネート、ベノミルカルベンダジム、クロロチアロニル、ジクロラン、トリフロキシストロピン、フロキシストロピン、ジモキシストロピン、アゾキシストロピン、フルカラニル、プロクロラズ、フルスルファミド、ファモキサドン、カブタン、マンネブ、マンコゼブ、ドジシン、ドジンおよびメタラキシルを含むが、それらに限定されない。

【 0 0 5 0 】

本発明の組成物と共に使用されてよい殺虫剤、殺幼虫剤、殺ダニ剤、および殺卵剤の化合物は、パチルスチューリングエンシス、スピノサド、アバメクチン、ドラメクチン、レピメクチン、ピレスリン、カルパリル、プリミカルブ、アルジカルブ、メトミル、アミトラズ、ホウ酸、クロルジメホルム、ノバルロン、ピストリフルロン、トリフルムロン、ジフルベンズロン、イミダクロプリド、ダイアジノン、アセフェート、エンドスルファン、ケレパン、ジメトエート、アジンホスエチル、アジンホスメチル、イゾキサチオン、クロルピリホス、クロフェンテジン、ラムダシハロトリン、ペルメトリン、ピフェントリン、シペルメトリンなどであるが、これらに限定されない。

40

【 0 0 5 1 】

肥料および微量栄養素

肥料および微量栄養素は硫酸亜鉛、硫酸鉄、硫酸アンモニウム、尿素、尿素アンモニア

50

性窒素、チオ硫酸アンモニウム、硫酸カリウム、第一リン酸アンモニウム、リン酸尿素、硝酸カルシウム、ホウ酸、ホウ酸のカリウムおよびナトリウム塩、リン酸、水酸化マグネシウム、炭酸マンガ、多硫化カルシウム、硫酸銅、硫酸マンガ、硫酸鉄、硫酸カルシウム、モリブデン酸ナトリウム、塩化カルシウムを含むがそれらには限定されない。

【0052】

農薬もしくは肥料は液体もしくは固体であって良い。固体であるなら、適用前に、溶媒、もしくは本発明の有機修飾ジシロキサンに可溶性である事が好ましく、そしてシリコンが溶媒として作用しても良いし、またはそのような可溶性のための界面活性剤、または追加の界面活性剤がこの作用を実施しても良い。

【0053】

農業用賦形剤

当技術分野で公知である緩衝剤、防腐剤、および他の標準的な賦形剤はまた、組成物に含まれてよい。

【0054】

溶媒はまた、本発明の組成物に含まれてよい。これらの溶媒は、室温で液体状態である。例は、水、アルコール、芳香族溶媒、油（すなわち、鉱油、植物油、シリコン油、など）、植物油の低級アルキルエステル、脂肪酸、ケトン、グリコール、ポリエチレングリコール、ジオール、パラフィンなどを含む。特定の溶媒は、参照によりここに組み込まれる米国特許第5,674,832号に例示されるように、2,2,4-トリメチル、1,3-ペンタジオールおよびそれらのアルコキシ化された誘導体（特にエトキシ化された誘導体）であるか、またはn-メチルピロリドンである。

【0055】

共界面活性剤

ここで有用な共界面活性剤は、非イオン性、カチオン性、アニオン性、両性、両性イオン性、重合体の界面活性剤もしくはそれらの任意の混合物を含む。界面活性剤は典型的には、炭化水素系、シリコン系もしくはフッ化炭素系である。

【0056】

さらに、参照によりここに組み入れる米国特許第5,558,806号に記載されるような超拡散と緩衝しないような短鎖疎水性を持つような他の共界面活性剤もまた有用である。また、上述の組成物は、塩化アルキル、ヨウ化アルキルおよび臭化アルキル類似体、ならびにHCl、酢酸、プロピオン酸、グリコール酸、ジベレリン酸などとの酸対としても有用である。当業者なら、溶解性を向上させ、そして非イオン性およびアニオン性共界面活性剤との潜在的な相互作用の可能性をもたらす四級化の利点を理解する。

【0057】

有用な界面活性剤は、アルコキシラート、特にエトキシラートであって、エチレンオキシド、プロピレンオキシド、ブチレンオキシドおよびそれらの混合物のコポリマーを含むブロックコポリマーを含むもの；アルキルアリーラルコキシラート、特にエトキシラートもしくはプロポキシラートならびにそれらの誘導体であって、アルキルフェノールエトキシラートを含むもの；アリーラルアリーラルコキシラート、特にエトキシラートもしくはプロポキシラートならびにそれらの誘導体；アミンアルコキシラート、特にアミンエトキシラート；脂肪酸アルコキシラート；脂肪アルコールアルコキシラート；アルキルスルホナート；アルキルベンゼンおよびアルキルナフタレンスルホナート；硫酸化脂肪アルコール、アミンもしくは酸アミド；イセチオン酸ナトリウムの酸エステル；スルホコハク酸ナトリウムのエステル；硫酸化もしくはスルホン酸化脂肪酸エステル；石油スルホナート；N-アシルサルコシン；アルキルポリグリコシド；アルキルエトキシ化アミンなどを含む。

【0058】

具体例は、アルキルアセチレンジオール（SURFONYL - Air Products）、ピロリドン系界面活性剤（例えばSURFADONE - LP100 - ISP）、2-エチルヘキシルサルファート、イソデシルアルコールエトキシラート（例えばRHOD

10

20

30

40

50

ASURF DA 530 - Rhodia)、エチレンジアミンアルコキシラート (TE TRONICS - BASF)、エチレンオキシド/プロピレンオキシドコポリマー (PL URONICS - BASF)、ジェミニ型界面活性剤 (Rhodia) およびジフェニル エーテルジェミニ型界面活性剤 (例えば DOWFAX - Dow Chemical) を含 む。

【0059】

好ましい界面活性剤は、エチレンオキシド/プロピレンオキシドコポリマー (EO/P O); アミンエトキシラート; アルキルポリグリコシド; オキソトリデシルアルコール エトキシラートなどを含む。

【0060】

好ましい実施態様において、本発明の農薬組成物はさらに一つもしくはそれ以上の農薬 成分を含む。好適な農薬成分は、除草剤、殺虫剤、成長調整剤、防カビ剤、殺ダニ剤、ダ ニ駆除剤、肥料、生物製剤、植物栄養剤、微量栄養素、殺生物剤、パラフィンミネラルオ イル、メチル化種油 (すなわち、大豆メチルもしくはキャノーラメチル)、(大豆油およ びキャノーラ油のような) 植物油、Choice (登録商標) (Loveland In dustries、Grealey、CO) および Quest (Helena Chem ical、Collierville、TN) のような水質調製剤、Surround (登録商標) (Englehard Corp) のような改質粘度、泡制御剤、界面活性剤 、湿潤剤、分散剤、乳化剤、付着助剤、漂流飛散抑制剤および水を含むがそれらには限定 されない。

【0061】

好適な農薬組成物は、一つもしくはそれ以上の上述の成分を本発明の有機修飾ジシロキ サンと、タンク混合もしくは缶中配合のいずれかによる混合のような当分野に公知の方法 による混合によって作製される。用語「タンク混合」は、少なくとも一つの農薬を水もし くは油のようなスプレー媒体へと使用時に添加することを意味する。「缶中」配合は、少 なくとも一つの農薬成分を含む配合物もしくは濃縮物を指す。「缶中」配合は使用時に典 型的にはタンク混合で使用濃度へと希釈されても良いし、または希釈せずに用いられても 良い。

【0062】

B. コート剤

典型的なコート配合物は、乳化、成分の相溶化、平滑化、流動および表面欠陥の減少の 目的のために湿潤剤もしくは界面活性剤を必要とする。さらに、それらの添加剤は、硬化 したもしくは乾燥したフィルムに、耐摩耗性、ブロッキング防止、親水性および疎水性の 性質のような改善をもたらす。コート剤配合物は溶剤型コート剤、水溶型コート剤および 粉状コート剤として存在し得る。

【0063】

コート剤成分は、建築コート、自動車コートおよびコイルコートのようなOEM産物コ ート; 工場整備コートおよび船舶コートのような特別な目的のコートとして利用され得る 。

【0064】

典型的な樹脂の型は、ポリエステル、アルキド、アクリルおよびエポキシを含む。

【0065】

C. パーソナルケア

好ましい実施態様において、本発明のシリコン組成物は、パーソナルケア組成物の1 00重量部(「pbw」)あたり、0.1から99pbwまで、より好ましくは0.5pb wから30pbwまで、そしてさらに好ましくは1から15pbwまでの本発明の組成 物と、1pbwから99.9pbwまで、より好ましくは70pbwから99.5pbw まで、そしてさらにより好ましくは85pbwから99pbwまでのパーソナルケア組成 物とを含む。

【0066】

10

20

30

40

50

本発明の組成物は、ローションおよびクリームのようなパーソナルケアエマルジョン中で使用してよい。一般的に知られているように、エマルジョンは、少なくとも二つの混ざらない相を含み、一方は連続で、他方は不連続である。さらにエマルジョンは、さまざまな粘度の流体または固体であってよい。そのうえ、エマルジョンの粒径は、マイクロエマルジョン状態であってもよく、十分に小さなマイクロエマルジョンであるときは、透明であってよい。さらに、エマルジョンのエマルジョンを調製することもまた可能であり、そしてこれらは多重エマルジョンとして一般的に知られている。

【0067】

これらのエマルジョンは：

- 1) 不連続相が水を含み、連続相が本発明のシリコーン組成物を含む、水性エマルジョン；
- 2) 不連続相が本発明のシリコーン組成物を含み、連続相が水を含む、水性エマルジョン；
- 3) 不連続相が非水性の水酸基含有溶媒を含み、連続相が本発明のシリコーン組成物を含む、非水性のエマルジョン；そして、
- 4) 連続相が非水性の水酸基含有有機溶媒を含み、不連続相が本発明のシリコーン組成物を含む、非水性のエマルジョンであってよい。

10

【0068】

シリコーン相を含む非水性エマルジョンは、米国特許第6,060,546号および第6,271,295号に記載されており、これらの開示は参照によりこれに添えて明確にここに組み入れられる。

20

【0069】

ここで用いられるとき、用語「非水性ヒドロキシル有機化合物」という用語は、室温、例えば約25℃で約1気圧において液体である、アルコール、グリコール、多価アルコール、および高分子グリコール、ならびにそれらの混合物で例示されるヒドロキシル含有有機化合物を意味する。この非水性有機ヒドロキシル溶媒は、室温、例えば約25℃で約1気圧において液体であるアルコール、グリコール、多価アルコール、および高分子グリコール、そしてそれらの混合物を含むヒドロキシル含有有機化合物からなる群より選択される。非水性ヒドロキシル有機溶媒は、好ましくはエチレングリコール、エタノール、プロピルアルコール、イソプロピルアルコール、プロピレングリコール、ジプロピレングリコール、トリプロピレングリコール、ブチレングリコール、イソブチレングリコール、メチルプロパンジオール、グリセリン、ソルビトール、ポリエチレングリコール、ポリプロピレングリコールモノアルキルエーテル、ポリオキシアルキレンコポリマー、およびそれらの混合物からなる群より選択される。

30

【0070】

シリコーンのみの相、シリコーン相を含む無水混合物、シリコーン相を含む含水混合物、油中水型エマルジョン、水中油型エマルジョン、または二つの非水性エマルジョンのどちらかとしてか、またはそれらについての変形であっても、いったん望ましい形態が達成されると、生じる物質は、通常、改良された付着性と良好な触感特性とを有するクリームかローションである。それを、ヘアケア、スキンケア、制汗剤、日焼け止め剤、化粧品、カラー化粧品、防虫剤、ビタミン担体、ホルモン担体、芳香剤担体などのための配合物に混合できる。

40

【0071】

本発明のシリコーン組成物が使用され得るパーソナルケアの用途は、脱臭剤、制汗剤、制汗/脱臭剤、髭剃り製品、スキンローション、保湿剤、トナー、入浴製品、クレンジング製品、シャンプー、コンディショナー、ムース、整髪用ジェル、ヘアスプレー、毛髪染料、ヘアカラー製品、毛髪脱色剤、ウェーブ製品、毛髪ストレイトナーなどのヘアケア製品、マニキュア液、マニキュア除光液、爪用クリーム、爪用ローション、あま皮軟化剤などのマニキュア製品、日焼け止め剤、防虫剤、および老化防止製品などの保護クリーム

50

、口紅、ファンデーション、おしろい、アイライナー、アイシャドウ、ほお紅、メーキャップ、マスカラなどのカラー化粧品、そしてシリコン成分が汎用的に添加された別のパーソナルケア配合物、ならびに皮膚に塗布される医薬組成物の局所投与のためのドラッグデリバリーシステムを含むが、これらに限定されない。

【0072】

好ましい実施態様において、本発明のパーソナルケア組成物は、一つもしくはそれ以上のパーソナルケア成分をさらに含む。適切なパーソナルケア成分は、例えば、皮膚軟化剤、保湿剤、湿潤剤、例えばオキシ塩化ビスマスおよび二酸化チタンでコーティングされた雲母などの真珠光沢のある顔料を含む顔料、着色剤、芳香剤、殺生物剤、防腐剤、酸化防止剤、抗菌剤、抗真菌剤、制汗剤、皮膚の老廃細胞剝用化粧品、ホルモン、酵素、医薬化合物、ビタミン、塩、電解質、アルコール、ポリオール、紫外線吸収剤、植物抽出物、界面活性剤、シリコン油、有機油、ワックス、塗膜形成要素、例えばヒュームドシリカまたは含水ケイ酸などの増粘剤、例えばタルク、カオリン、デンプン、加工デンプン、雲母、ナイロンなどの微粒子充填剤、例えばベントナイトおよび有機修飾された粘土などの粘土を含む。

10

【0073】

好適なパーソナルケア組成物は、例えば一つもしくはそれ以上の上述の成分を本発明の組成物と混合するような当分野に公知の方法で混合することによって作製される。好適なパーソナルケア組成物は、単一の相の形態であるか、またはエマルションの形態であってよく、シリコン相が不連続相または連続相である、水中油型エマルション、油中水型エマルション、および無水エマルション、ならびに、例えば水中油滴の油中型エマルションおよび油中水滴の水中型エマルションのような多重エマルションの形態をも含む。

20

【0074】

一つの有用な実施態様において、制汗剤組成物は、本発明のシリコン組成物ならびに一つもしくはそれ以上の活性制汗剤を含む。好適な制汗剤は、例えば米国食品医薬品局による1993年10月10日付の市販のヒト用制汗薬製品に関する一般薬基準に列挙されているカテゴリーIの活性制汗成分を含み、これは、例えばハロゲン化アルミニウム、ヒドロキシハロゲン化アルミニウムであり、例えば塩化アルミニウム水和物、およびそれらのオキシハロゲン化ジルコニウムおよびヒドロキシハロゲン化ジルコニウムとの錯体または混合物であり、これらは、例えば塩化アルミニウムジルコニウム水和物や、例えばアルミニウムジルコニウムテトラクロロヒドレックスグリシンのようなアルミニウムジルコニウムグリシン錯体などである。

30

【0075】

他の有用な実施態様において、スキンケア組成物は、本発明の組成物と、例えばシリコン油または有機油のようなビヒクルとを含む。スキンケア組成物は、任意選択で、例えばトリグリセリドエステル、ワックスエステル、脂肪酸のアルキルエステル、脂肪酸のアルケニルエステル、または多価アルコールエステルのような皮膚軟化剤と、顔料、例えばビタミンA、ビタミンC、およびビタミンEのようなビタミン、例えば二酸化チタン、酸化亜鉛、オキシベンゾン、オクチルメトキシシンナマート、ブチルメトキシジベンゾイルムエタン、パラアミノ安息香酸、およびオクチルジメチルパラアミノ安息香酸のような日焼け止め(sunscreen)または日焼け防止(sunblock)の化合物などのスキンケア組成物において汎用的に使用される一つもしくはそれ以上の公知の成分とをさらに含んでよい。

40

【0076】

他の有用な実施態様において、例えば口紅、メーキャップ、またはマスカラ組成物のようなカラー化粧品組成物は、本発明の組成物、ならびに顔料、水溶性染料または脂溶性染料のような着色剤を含む。

【0077】

他の有用な実施態様において、本発明の組成物は、芳香性物質と併せて利用される。これらの芳香性物質は、芳香性化合物、カプセル化された芳香性化合物、またはニート化合

50

物が、カプセル化された芳香放散化合物であってよい。特に、本発明の組成物と適合するものは、米国特許第6,046,156号；第6,054,547号；第6,075,111号；第6,077,923号；第6,083,901号；および第6,153,578号に開示されるような芳香放散ケイ素含有化合物であり；これらのすべてを参照によりこれに添えてここに具体的に組み入れる。

【0078】

本発明の組成物の使用は、パーソナルケア組成物に限定されず、本発明の組成物で処理されたワックス、光沢剤、および繊維のような他の産物もまた意図される。

【0079】

D．ホームケア

ホームケアの用途は、洗濯洗剤および繊維柔軟剤、食器用洗剤、木材用および家具用光沢剤、床磨き剤、浴槽およびタイルの洗浄剤、便器洗浄剤、硬表面洗浄剤、窓用洗浄剤、曇り止め剤、配水管洗浄剤、自動食器洗浄機用洗剤および水切り剤、カーペット用洗浄剤、予洗染み抜き剤、さび洗浄剤および湯あか除去剤を含む。

【0080】

E．オイルおよびガス

本発明の組成物は、解乳化を含むオイルおよびガスの用途に有用である。

【0081】

F．水処理

本発明を含む組成物は、商業用および工業用の開放再循環冷却水塔、閉鎖冷却水装置、冷却水導管、熱交換器、凝縮器、非循環型冷却装置、殺菌機、空気清浄機、熱交換装置、空調設備／加湿機／除湿機、静水調理器具、安全水および／または防火水の貯蔵装置、水を使った有害ガスの浄化装置、廃水圧入井、ろ過および清澄器を含む流入水浄化装置、排水処理、排水処理タンク、導管、ろ過池、蒸解がま、清澄器、溜池、沈砂池、用水路、悪臭防止、イオン交換樹脂床、膜ろ過、逆浸透、精密ろ過および限外ろ過、冷却塔用途における生物膜の除去促進、熱交換器およびプロセス水装置などを含む用途に有用である。

【0082】

G．パルプおよび紙

本発明の組成物は、板紙用消泡剤、インク除去剤、およびパルプ化工程用の湿潤剤のようなパルプおよび紙の用途において有用である。

【0083】

H．ラバー

本発明の組成物は、タイヤ、ホース、転送ベルト、コンベヤベルト、コンベヤベルトカバー、ワイパーブレード、靴、靴底、ゴム引布、パッキング、裏地、保護コート、一般用シート、電気ケーブル絶縁、屋根材、床材、航空宇宙、コンピュータ、高度な採掘作業、および自動車部品のようなラバーの用途に有用である。

【0084】

I．ドラッグデリバリーシステム

経皮ドラッグデリバリーシステムは、適用の地点において局所的に作用させるようにか、または生体の血液循環へと入ることによって全身で作用させるように設計され得る。これらのシステムにおいて、デリバリーは、軟膏などの形態の物質もしくは薬剤の直接的な局所適用によって、または、薬剤を保持し、それを時間制御された様式において皮膚へと放出するような貯蔵器を持つパッチの接着によって、達成され得る。

【0085】

デリバリーされるべき薬剤は、抗増殖剤、抗炎症剤、抗悪性腫瘍剤、抗有糸分裂剤、抗血小板物質、抗凝固剤、抗フィブリン剤、抗トロンピン剤、細胞増殖抑制剤、抗生剤、抗アレルギー剤、抗酵素剤、抗血管新生剤、細胞保護剤、心臓保護剤、増殖剤、ABC A1アゴニスト、抗酸化剤、もしくはそれらの組み合わせを含み得るがそれらに限定されない。

【0086】

10

20

30

40

50

抗増殖剤の例は、例えばアクチノマイシン I_1 、アクチノマイシン X_1 、およびアクチノマイシン C_1 のようなアクチノマイシン D またはそれらの誘導体もしくは類似体を含むがそれらに限定されない。抗増殖剤は、サイトトキシンのような天然のタンパク質性薬剤であってもよく、また、それらは、タキソール、ドセタキセル、パクリタキセルおよびパクリタキセル誘導体のようなタキソイド、エベロリムス、バイオリムスおよびタクロリムスのようなラパマイシンおよびそれらの誘導体および類似体を含むがそれらに限定されないマクロリド化合物、ならびに、それらの前述のビルフェニドンの任意のものの誘導体、およびそれらの前述の任意のもののプロドラッグおよびコドラッグ、ならびにそれらの任意のものの組み合わせのようであるが、それらに限定しない天然もしくは合成の小分子であってよい。さらなるラパマイシンの誘導体は、40-0-(3-ヒドロキシ)プロピル-ラパマイシン、40-0-[2-(2-ヒドロキシ)エトキシ]エチル-ラパマイシン、もしくは40-0-テトラゾール-ラパマイシン、40-エピ-(N1-テトラゾリル)-ラパマイシン、それらのプロドラッグ、それらのコドラッグ、およびそれらの組み合わせを含む。

10

【0087】

抗炎症剤の例は、クロベタゾール、アルクロフェナク、ジプロピオン酸アルクロメタゾン、アルゲストンアセトニド、アルファアミラーゼ、アムシナファル、アムシナフィド、アンフェナクナトリウム、アミプリロズ塩酸塩、アナキンラ、アニノラック、アニトラザフェン、アパゾン、バルサラジドニナトリウム、ベンダザック、ベノキサプロフェン、ベンジダミン塩酸塩、プロメライン、プロペラモル、ブデソニド、カルプロフェン、シクロプロフェン、シントゾン、クリプロフェン、プロピオン酸クロベタゾール、酪酸クロベタゾン、クロピラック、プロピオン酸クロチカゾン、酢酸コルメサゾン、コルトドキソン、デフラザコルト、デソニド、デスオキシメタゾン、二プロピオン酸デキサメタゾン、ジクロフェナクカリウム、ジクロフェナクナトリウム、二酢酸ジフロラゾン、ジフラミドンナトリウム、ジフルニサル、ジフルプレドネート、ジフタロン、ジメチルスルホキシド、ドロシノニド、エンドライゾン、エンリモマブ、エノリカムナトリウム、エビリゾル、エトドラック、エトフェナメート、フェルピナック、フェナモル、フェンブフェン、フェンクロフェナク、フェンクロラック、フェンドザル、フェンピパロン、フェンチアザック、フラザロン、フルアザコート、フルフェナミン酸、フルミゾール、酢酸フルニソリド、フルニキシン、フルニキシメグルミン、フルオコルチンブチル、酢酸フルオロメトロン、フルクアゾン、フルルビプロフェン、フルルエトフェン、プロピオン酸フルチカゾン、フラプロフェン、フロブフェン、ハルシノニド、プロピオン酸ハロベタゾール、酢酸ハロプレドン、イブフェナック、イブプロフェン、イブプロフェンアルミニウム、イブプロフェンピコノル、アイロニダップ、インドメタシン、インドメタシンナトリウム、インドプロフェン、インドキソール、イントラゾル、酢酸イソフルプレドン、イソキセバック、イソキシカム、ケトプロフェン、塩酸ロフェミゾール、ロルノキシカム、ロタブレドノルエタボネート、メクロフェナム酸ナトリウム、メクロフェナム酸、二酪酸メクロリゾーネ、メフェナム酸、メサラミン、メサクラゾン、メチルプレドニゾロンスレブタネイト、モルニフラメート、ナブメトン、ナブロキセン、ナブロキセンナトリウム、ナブロキソル、ニマゾン、オルサラジンナトリウム、オルゴテイン、オーバノキシン、オクサブロジン、オキシフェンブタゾン、塩酸パラニリン、ポリ硫酸ペントサンナトリウム、グリセリン酸フェンブタゾンナトリウム、ビルフェニドン、ピロキシカム、桂皮酸ピロキシカム、ピロキシカムオラミン、ピルプロフェン、プレドナゼート、プリフェロン、プロドリン酸、プロクアゾン、プロキサゾル、クエン酸プロキサゾル、リメクソロン、ロマザリト、サルコレックス、サルナセジン、サルサラート、サンギナリウム塩化物、セクラゾン、セルメタシン、スドキシカム、スリンダク、スプロフェン、タルメタシン、タルニフルメート、タロサレート、テブフェロン、テニダップ、テニダップナトリウム、テノキシカム、テシカム、テシマイド、テトラドメイン、チオピナック、ティクソコルトルピバレート、トルメチン、トルメチンナトリウム、トリクロニド、トリフルミデート、ジドメタシン、ゾメピラックナトリウム、アスピリン、サリチル酸、コルチコステロイド、グルココルチコイド、タク

20

30

40

50

ロリムス、ピメクロリムス、ならびにそれらのプロドラッグ、コドラッグおよび組み合わせのようであるがそれらに限定されないステロイドおよび非ステロイドの化合物を含むがそれらに限定されない。抗炎症剤はまた、シグナル伝達分子に結合するような抗体のような、炎症誘発性シグナル伝達分子の生物学的阻害剤であってよい。

【0088】

抗悪性腫瘍剤および抗有糸分裂剤の例は、パクリタキセル、ドセタキセル、メトトレキサート、アザチオプリン、ビンクリスチン、ビンブラスチン、フルオロウラシル、塩酸ドキソルピシン、およびマイトマイシンを含むがそれらに限定されない。

【0089】

抗血小板物質剤、抗凝固剤、抗フィブリン剤、および抗トロンビン剤の薬剤の例は、ナトリウムヘパリン、低分子量ヘパリン、ヘパリノイド、ヒルジン、アルガトロバン、フォルスコリン、バギプロスト、プロスタサイクリン、プロスタサイクリンデキストラン、D - p h e - p r o - a r g - クロロメチルケトン、ジピリダモール、組換えヒルジンおよびトロンビン、トロンビン阻害剤、(ニフェジピンのような)カルシウムチャネル遮断薬、コルヒチン、魚油(オメガ3脂肪酸)、ヒスタミンアンタゴニスト、ロバスタチン、モノクローナル抗体、ニトロプルシド、ホスホジエステラーゼ阻害剤、プロスタグランジン阻害剤、スラミン、セロトニン遮断薬、ステロイド、チオプロテアーゼ阻害剤、トリアゾロピリミジン、一酸化窒素もしくは一酸化窒素供与体、スーパーオキシドジスムターゼ、スーパーオキシドジスムターゼ模倣体、4 - アミノ - 2 , 2 , 6 , 6 - テトラメチルピペリジン - 1 - オキシル(4 - アミノ - T E M P O)、エストラジオール、抗がん剤、ビタミンのような栄養補助食品、ならびにそれらの組み合わせを含むがそれらには限定されない。

10

20

【0090】

抗アレルギー剤の例はベミロラストカリウムである。

【0091】

細胞増殖抑制剤もしくは抗増殖剤の例は、アンジオペプチン、カプトプリル、シラザプリルもしくはリシノプリルのようなアンギオテンシン転換酵素阻害剤、ニフェジピンのようなカルシウムチャネル遮断薬、コルヒチン、魚油(オメガ3脂肪酸)、ヒスタミンアンタゴニスト、ロバスタチン、モノクローナル抗体、ニトロプルシド、ホスホジエステラーゼ阻害剤、プロスタグランジン阻害剤、スラミン、セロトニン遮断薬、ステロイドおよびチオプロテアーゼ阻害剤を含むがそれらに限定されない。

30

40

【0092】

いくらかの追加の潜在的に有用な薬剤は、任意の生物活性の合成の、無機および有機の化合物、タンパク質およびペプチド、多糖類および他の糖類、脂質、ならびに治療、予防および診断の活性を持つDNAおよびRNA核酸配列、遺伝子を含む核酸配列、転写を阻害するために相補的DNAへと結合するアンチセンス分子、リボザイム、抗体、受容体リガンド、酵素、接着ペプチド、血液凝固因子、阻害剤もしくは血餅溶解剤、免疫化のための抗原、遺伝子治療における使用のためのアンチセンスオリゴヌクレオチドおよびリボザイムおよびレトロウイルスベクターのようなオリゴヌクレオチド、抗ウイルス剤、鎮痛剤および鎮痛剤の組み合わせ、食欲抑制剤、駆虫薬、抗関節炎薬、抗喘息薬、抗痙攣薬、抗うつ薬、抗利尿剤、止瀉薬、抗ヒスタミン薬、抗片頭痛製剤、抗嘔吐薬、鎮痒剤、抗精神病薬、解熱剤、鎮痙薬、抗コリン薬、交感神経作用薬、キサンチン誘導体、カルシウムチャネル遮断薬、ピンドロールのような遮断薬および抗不整脈剤を含む循環器用薬、抗高血圧薬、利尿薬、一般的な冠状動脈を含む血管拡張薬、末梢および脳、中枢神経系刺激薬、うっ血除去薬を含む、咳や風邪の製剤、催眠薬、免疫抑制剤、筋弛緩剤、副交感神経遮断薬、精神刺激薬、鎮静剤、精神安定剤、天然由来もしくは遺伝子操作されたリボタンパク質、再狭窄低減剤を含むがそれらに限定されない。

【0093】

一実施態様において、ここに記載されるシリコーン組成物の作製方法は、少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン(i)、少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン(ii)

50

) および少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を接触させてシリコーン組成物を作製することを含む。

【 0 0 9 4 】

一実施態様において、ここに記載されるシリコーン組成物の作製方法は、(a) 少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン (i) と少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン (i i) を接触させること、および (b) 少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を添加してシリコーン組成物を作製することを含む。

【 0 0 9 5 】

一実施態様において、ここに記載されるシリコーン組成物の作製方法は、(a) 少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン (i) と少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を接触させること、および (b) 少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン (i i) を添加してシリコーン組成物を作製することを含む。

【 0 0 9 6 】

一実施態様において、ここに記載されるシリコーン組成物の作製方法は、(a) 少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン (i i) と少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を接触させること、および (b) 少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン (i) を添加してシリコーン組成物を作製することを含む。

【 0 0 9 7 】

一実施態様において、ここに記載されるシリコーン組成物の作製方法は、(a) 少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン (i) と少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン (i i) を接触させてシリコーン (i) / (i i) のストックを作製すること、(b) 少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン (i) と少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を接触させてシリコーン (i) / (i i i) のストックを作製すること、(c) シリコーン (i) / (i i) のストックとシリコーン (i) / (i i i) のストックを接触させてシリコーン組成物を作製することを含む。

【 0 0 9 8 】

一実施態様において、ここに記載されるシリコーン組成物の作製方法は、(a) 少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン (i) と少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン (i i) を接触させてシリコーン (i) / (i i) のストックを作製すること、(b) 少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン (i i) と少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を接触させてシリコーン (i i) / (i i i) のストックを作製すること、(c) シリコーン (i) / (i i) のストックとシリコーン (i i) / (i i i) のストックを接触させてシリコーン組成物を作製することを含む。

【 0 0 9 9 】

一実施態様において、ここに記載されるシリコーン組成物の作製方法は、(a) 少なくとも一つのヒドリド官能性シリコーン (i) と少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を接触させてシリコーン (i) / (i i i) のストックを作製すること、(b) 少なくとも一つの不飽和官能性シリコーン (i i) と少なくとも一つのエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン (i i i) を接触させてシリコーン (i i) / (i i i) のストックを作製すること、(c) シリコーン (i) / (i i i) のストックとシリコーン (i i) / (i i i) のストックを接触させてシリコーン組成物を作製することを含む。

【 0 1 0 0 】

一実施態様において、シリコーン (i) のようなヒドリド官能性ポリシロキサンは、シリコーン (i i) のような不飽和官能性ポリシロキサンとシリコーン (i i i) のようなエポキシもしくはオキセタン官能性ポリシロキサンの両方を架橋して同時に反応産物とすることに利用される。不飽和官能性ポリシロキサン (i i) はヒドロシリル化反応、すなわち、不飽和結合にわたって S i - H 結合を付加することを実行し、これは、例えば、例えば修飾 Chalk - Harrod サイクルによると信じられている。

【 0 1 0 1 】

10

20

30

40

50

そのようなChalk-Harrodサイクルにおいて、ビニルシリコーンの金属錯体への酸化的付加に続いて、ヒドリドシリコーンの転移挿入が起こり、そして生じる錯体は、金属錯体の還元的脱離と再生とを実行する。

【0102】

エポキシもしくはオキセタン官能性ポリシロキサンは、エポキシ（もしくはオキセタン）基のカチオン性開環重合化が起こるような、エポキシド開環反応を起こす。エポキシもしくはオキセタン官能性ポリシロキサンはまた、開環反応を通じて任意選択でそれ自身と架橋できる。同時に起こるこれら二つの硬化反応は硬化システムの二つの様式を提供し、二様式硬化システムは、すなわち示されるヒドリド不飽和反応と示されるヒドリド-エポキシ（もしくはオキセタン）反応の両方の硬化であり、一実施態様において、紫外線もしくは熱のいずれか、またはその両方によって、白金触媒のような触媒の存在下で活性化される。

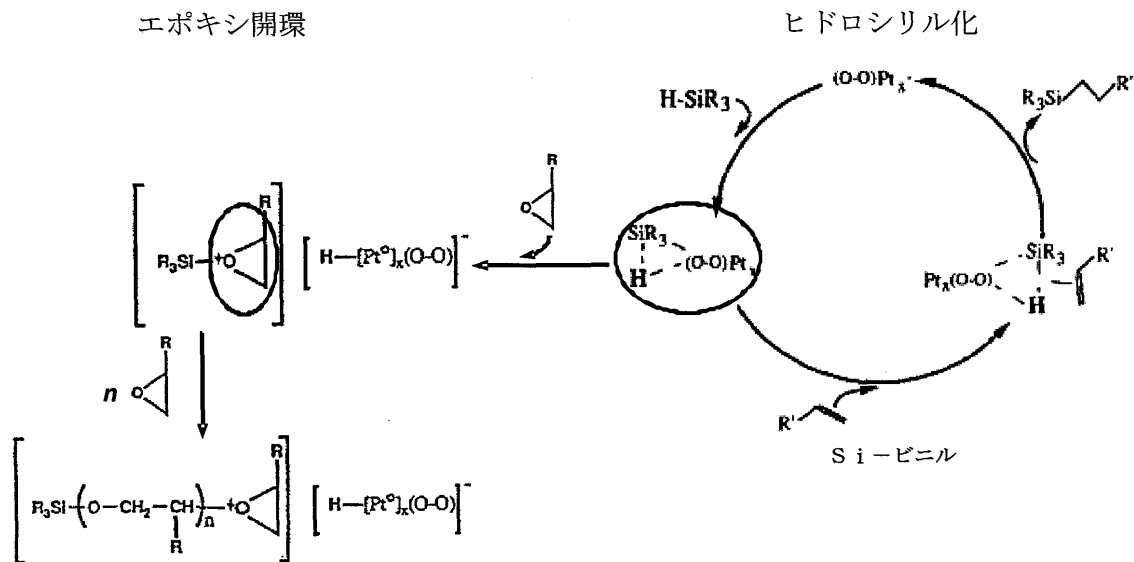
10

【0103】

任意の特定の理論に縛られることなく、シリコーン(i)のような不飽和官能性ポリシロキサン、シリコーン(ii)のようなヒドリド官能性ポリシロキサン、およびシリコーン(iii)のようなエポキシもしくはオキセタン官能性ポリシロキサンと一緒に混合され、白金触媒の存在下で硫化されるとき、ヒドロシリル化反応およびエポキシ（もしくはオキセタン）開環反応の両方が同時に起こると信じられている。白金触媒の一部は、エポキシドと反応することでChalk-Harrodサイクルから放出され、これはエーテルもしくはポリエーテル鎖の伸長のための新しい活性部位を形成し、一方で白金触媒の残余の部分はChalk-Harrodサイクル中に残留してヒドロシリル化反応を続ける。この二重硬化システムの単純なメカニズムは以下の図に図示される。一実施態様において、生じる反応産物は、開環エポキシ（もしくはオキセタン）基の挿入により向上した親水性を持つ。

20

【化1】



30

40

【0104】

ここでの一実施態様において、不飽和官能性シリコーンは、組成物の全重量の約0.1重量(wt%)から約99wt%、より具体的には、約50wt%から約95wt%、そしてもっとも具体的には約60wt%から約85wt%の量で使用される。ヒドリド官能性シリコーンは、組成物の全重量の約1wt%から約50wt%、より具体的には約3wt%から約15wt%、そしてもっとも具体的には約5wt%から約10wt%の量で使用される。エポキシもしくはオキセタン官能性シリコーンは、組成物の全重量の約0.1wt%から約98wt%、より具体的には約3wt%から約40wt%、そしてもっとも具体的には約10wt%から約30wt%の量で使用される。

50

【0105】

他の実施態様において、光開始剤は、組成物の全重量の約0から約2wt%の量で使用される。シリカ充填剤は、組成物の全重量の約0から約50wt%、より具体的には約0wt%から約40wt%、そしてもっとも具体的には約0から約30wt%の量で使用される。

【0106】

さらなる実施態様において、白金触媒は、元素白金の100万当たり約0.1部(ppm)から約500ppm、より具体的には約1ppmから約60ppm、そしてもっとも具体的には約2ppmから約30ppmの量で使用できる。

【0107】

一実施態様において、混合物は、UVA範囲内、すなわち320~400nmに割り当てられる200~400nmの範囲で>25%のUVパワーで、より具体的にはUVA範囲内に割り当てられる>65%のUVパワーで、そしてもっとも具体的にはUVA範囲内に割り当てられる>99%のUVパワーで、UVランプの下で硬化された。一つの具体的な実施態様において、混合物は、 0.5 J/cm^2 >のUVA放射線量、より具体的には $>2\text{ J/cm}^2$ のUVA放射線量で、そしてもっとも具体的には $>5\text{ J/cm}^2$ のUVA放射線量で硬化された。

【0108】

最終的な架橋されたコポリマーネットワーク組成物におけるD、D^PおよびD^E基の相対量に応じて、架橋組成物は、1)水、アルコールもしくはカルボン酸のようなヒドロキシル溶媒もしくは水性ヒドロキシル溶媒と非水性ヒドロキシル溶媒が成分である溶媒混合物か、2)ここで下に定義されるようなシリコンもしくは有機溶媒、またはそのような溶媒を含む混合物であり得る非水性非親水性溶媒のいずれかによって膨潤性となるであろう。この説明の目的は、この2つの型の架橋された膨潤性ネットワークコポリマーが「水膨潤性」もしくは「油膨潤性」として呼ばれるということである(用語油膨潤性は、用語「水膨潤性」に包含されないすべての膨潤性溶媒を包含する)。一般的に、水膨潤性は、以下の関係:(1)D基の存在する数:約5<D基の数 約90、(2)D^P基の存在する数:D^P>約5、(3)アクリラート架橋が、非膨潤性架橋ポリマーネットワークの少なくとも5重量パーセントもしくはそれ以上を構成する、を得るような架橋されたネットワークコポリマーによって起こる傾向にある。

【0109】

対照的に、油膨潤性は、以下の関係:(1)D基の存在する数:約90 D基の数、(2)D^P基の存在する数:約1<D^P基の数 約7、(3)アクリラート架橋が、非膨潤性架橋ポリマーネットワークの少なくとも10重量パーセントもしくはそれ未満以下を構成する、を得るような架橋されたネットワークコポリマーによって起こる傾向にある。

【0110】

上述の水もしくは油の膨潤性について例示された構造パラメータおよび化学量論の下付文字の上述の範囲は変化し得、かつ相互依存であり得、そしてパラメーターの変化は、示された数字よりも大きく、または示された数字よりも小さくなり得、特定のポリマーと関連した他の構造的もしくは化学量論的パラメーターにおける恒常性の変化の理由によってさらに特定の型の膨潤性を観察することは強調されるべきである。

【0111】

ポリマーもしくはコポリマーのポリエーテル置換基は、水および他のヒドロキシル溶媒と水素結合できるので、そのようなポリエーテル置換基の含量を増加させ、すべての多の組成物の変数を一定に保つことは、生じる架橋されたネットワークポリマーの水膨潤性を増加させる傾向にある。ほとんど制限なく本発明の架橋されたネットワークコポリマーの組成パラメーターを変化させることができるため、いくつかの組成物は水膨潤性と油膨潤性の両方となる一方で、他は水膨潤性もしくは油膨潤性のいずれかのみであり、そしていくつかの組成物は、ここで説明される溶媒のいずれによっても膨潤性とならない。架橋されたネットワークに存在する架橋の数は、流体中のネットワークに示される膨潤の程度に

10

20

30

40

50

関連して特徴付けされ得る。他の実施態様において、ネットワークの架橋構造は、ネットワークをその元の容積から膨潤した容積へと、その元の容積の1.01から5000、より好ましくは2から1000、そしてさらにより好ましくは5から5000倍の倍率で膨潤させるのに有効である。ネットワークの元の容積は、例えば、本発明のシリコン組成物から内部流体成分のすべてを抽出もしくは蒸発させ、元の溶液、すなわち流体の存在しないコポリマーネットワークの容積を残すことによって測定できる。

【実施例】

【0112】

実施例

中間体サンプル1~4は、式 $MD^E_{10}D_{490}M$ を持つエポキシ官能性ポリシロキサンと、表1に示されるさまざまなヒドリド官能性ポリシロキサンとの中間体の二元混合物として調製された。トリメチル(メチルシクロペンタジエニル)白金(IV)(CpPt)は、式 $M^E D^E_4 D_{95} M^E$ を持つエポキシ官能性ポリシロキサンと混合された。CpPtは、UV照射への曝露における、エポキシシリコンとヒドリドシリコンの間のエポキシド開環反応を光触媒するのに使用された。ヒドリド/エポキシモル比が2:1に維持される一方で、白金レベルは6ppmに維持された。

【0113】

中間体サンプル1~4は、ベンチトップSpeed Mixerを用いて完全に混合された。およそ11~12グラムのそれぞれのサンプルは、アルミニウムの秤量皿へと注がれ、Fusion UV Curing Conveyor System (Model DRR-120)中で硬化された。サンプルが受けたUVA(320~400nm)線量は、UV Power Puck IIを用いて測定された。表1の例えばサンプル1および2対サンプル3に見られるように、有意に少ないUVA線量がより高いヒドリド官能性を持つサンプルの硬化に必要とされた。ポリシロキサン鎖当たり二つのみのヒドリド官能基があったとき(すなわちサンプル4)、サンプルは硬化出来なかった。

【表1】

表1 エポキシおよびヒドリドシリコンの中間体二元混合物

サンプル番号	1	2	3	4
配合				
$MD^E_{10}D_{490}M$ (0.26 mmol/g エポキシ) (g)	95.5	92.3	80.9	71.5
CpPt in $M^E D^E_4 D_{95} M^E$ (600 ppm Pt) (g)	1	1	1	1
$MD^H_{20}M$ (14.7 mmol/g H) (g)	3.5			
$MD_{20}D^H_{20}M$ (7.4 mmol/g H) (g)		6.7		
$MD_{17}D^H_4M$ (2.4 mmol/g H) (g)			18.1	
$M^H D_{17}M^H$ (1.4 mmol/g H) (g)				27.5
硬化特性				
硬化へのUVA線量 (J/cm ²)	7	7	>16	硬化せず

ここでMは $(CH_3)_3SiO_{1/2}$ であり、M^Eは $(CH_3)_2R^E SiO_{1/2}$ であり、M^Hは $(CH_3)_2HSiO_{1/2}$ であり、Dは $(CH_3)_2SiO_{2/2}$ であり、D^Eは $CH_3R^E SiO_{2/2}$ であり、D^Hは $CH_3HSiO_{2/2}$ であり、そしてR^Eは2-(3,4-エポキシシクロヘキシル)エチルである。

【0114】

例5~11は、ビニル、エポキシおよびヒドリドシリコンの三元混合物として調製された。ビニルシリコン/ヒドリドシリコン(V/H)ストックは、 $M^V i D_{540}M^V i$ 、 $M^V i D_{900}M^V i$ および $MD_{20}D^H_{20}M$ を54:44:2の重量比で混合することによって調製され、ここでM^{V i}は $(CH_3)_2(CH=CH_2)SiO_{1/2}$ であり、Dは $(CH_3)_2SiO_{2/2}$ であり、そしてD^Hは $CH_3HSiO_{2/2}$ であった。エポキシシリコン/ヒドリドシリコン(E/H)ストックは、 $M^E D^E_4 D_{95} M^E$ および $MD_{20}D^H_{20}M$ を75:25の重量比で混合することによって調製され、ここでM^Eは $(CH_3)_2R^E SiO_{1/2}$ であり、D^Eは $CH_3R^E SiO_{2/2}$ で

あり、Dは $(CH_3)_2SiO_2/2$ であり、そしてR^Eは2-(3,4-エポキシシクロヘキシル)エチルであった。白金/ビニルシリコン(Pt/SiVi)ストックIは、25ミリグラム(mg)のCpPtを50グラム(g)のM^{Vi}D₅₄₀M^{Vi}中に溶解することによって調製され、一方で白金/エポキシシリコン(Pt/SiE)ストックは49mgのCpPtを50gのM^ED^E₄₉₅M^Eで溶解することによって調製された。

【0115】

例5~10は、ベンチトップのSpeed Mixerを用いて完全に混合された。サンプルは、Plexiglasアクリルシートの頂部に配置された3ミリメートル(mm)の厚さの6インチ×6インチのスチールフレーム中に注がれ、その後、裸鋼のロッドを用いて平坦化され、そしてFusion UV Curing Conveyor System中で硬化された。完全に硬化したサンプルスラブは、別の物理的、機械的および光学的測定へと供され、結果が表2に示される。

10

【表2】

表2 ビニル、エポキシおよびヒドリドシリコンの三元混合物

例番号	5	6	7	8	9	10	
配合							
SiVi/SiH ストック	90	85.5	67.5	45	22.5		
SiE/SiH ストック		4.5	22.5	42.3	64.8	87.3	
Pt/SiVi ストック I	1.8	1.8	1.8				
Pt/SiE ストック				2.7	2.7	2.7	
特性							
SiE/SiH (wt %)	0	5%	25%	50%	75%	100%	
ショア A 硬度 (ASTM D2240)	20	20	25	43	F*	F*	
引張強度(ASTM D638) (psi)	60	60	250	100	40	F*	
破断時伸び(ASTM D638) (%)	130	150	200	50	10	F*	
500時間での水吸収(wt%)	0.03%	0.07%	0.29%	0.37%	0.53%	0.70%	
3mmでのヘイズ(%)	開始	2.1	2.1	2.2	3.9	6.7	0.8
	水中500時間	32	33	27	8.8	9.6	2.4
	変化	30	31	25	4.9	2.9	1.6
3mmでの透過率(%)	開始	95.1	95.3	94.5	94.2	94.2	94.1
	水中500時間	93.1	93.8	93.5	93.7	93.8	93.9
	変化	-2.0	-1.5	-1.0	-0.5	-0.4	-0.2
*F: 測定中にサンプルが破断したため信頼できる数字を得るのに失敗した。							

20

30

40

【0116】

表2に示されるように、引張強度および伸びは、エポキシシリコン含量が30wt%未満であるときに維持されるかまたは向上し、一方で水の吸収は有意に増加し(図1も参照)、組成物中の親水性エーテル部分の導入による親水性の向上を示す。水の吸収は、エポキシシリコン含量の増加と共に増加し続けたが、硬化した組成物サンプルは、よりもろくなる傾向にあり、そして引張強度は低下し始める。

【0117】

向上した親水性に加えて、硬化したシリコン組成物の光学的特性もまた、エーテル部分の導入によって向上する。表2に示されるように、サンプルが脱イオン水により浸され

50

たとき、エポキシシリコン含量の増加に伴ってヘイズおよび透過率の変化が下降し続けた。充填剤を含まない付加硬化型シリコン組成物の典型的な%ヘイズは、3 mmにおいて約2である。例5は、サンプルが曇り始める時点である500時間の間、水に浸されたとき、2.1から劇的に増加した32の%ヘイズを持つ。一方で、例10のような76 wt %のエポキシポリシロキサンを含む組成物において、%ヘイズは0.8から2.4までわずかに増加したのみであった。サンプルは水の浸漬の間透明のままであった。

【0118】

中間体サンプル11~18は、表3に示されるように、エポキシ官能性ポリシロキサンもしくはビニル官能性ポリシロキサンのいずれかとヒドリド官能性ポリシロキサンとの二元混合物として調製された。

【表3】

表3 エポキシ/ヒドリドシリコンもしくはビニル/ヒドリドシリコンの中間体二元混合物

配合	サンプル番号							
	#11	#12	#13	#14	#15	#16	#17	#18
60% $M^E_3M_{12}T_{10}Q_{10}$ + 40% $M^E D_{25}M^E$ (0.67mmol/g エポキシ) (g)	72.4	76.1						
$M^E D_{3.8}^E D_{94}M^E$ (0.69mmol/g エポキシ) (g)			71.9	75.7				
60wt% $M^{Vi}_{0.15}M_{0.87}Q$ + 40wt% $M^{Vi}D_{140}M^{Vi}$ (0.56mmol/g Vi) (g)					76.2	79.5		
55% $M^{Vi}D_{540}M^{Vi}$ + 45% $M^{Vi}D_{900}M^{Vi}$ (0.04mmol/g Vi) (g)							95.08	95.44
$MD_{20}D^H_{20}M$ (7.4mmol/g H) (g)	24.6		25.1		20.8		1.92	
$M^H_{1.7x}Q_x$ (9.15mmol/g H) (g)		20.9		21.3		17.5		1.56
Pt/SiE ストック (g)	3.0	3.0	3.0	3.0				
Pt/SiV ストック II (g)					3.0	3.0	3.00	3.00
硬化特性								
金属ハライドUVランプ下で硬化するのに必要なUVA放射線量 (J/cm^2)	18	硬化せず	7	>112*	1.6	2.2	0.6	1.2

*ゲル形成は32 J/cm²のUVA放射線量で開始する；しかしながら、完全な硫化は112 J/cm²のUVA放射線量において未だ達成されなかった、ここで、Mは(CH₃)₃SiO_{1/2}であり、M^Eは(CH₃)₂R^ESiO_{1/2}であり、M^{Vi}は(CH₃)₂(CH=CH₂)SiO_{1/2}であり、M^Hは(CH₃)₂HSiO_{1/2}であり、Dは(CH₃)₂SiO_{2/2}であり、D^EはCH₃R^ESiO_{2/2}であり、D^HはCH₃HSiO_{2/2}であり、TはCH₃SiO_{3/2}であり、QはSiO_{4/2}であり、そしてR^Eは2-(3,4-エポキシシクロヘキシル)エチルである。

【0119】

Pt/SiV ストック II は、49 mg の CpPt を 50 g の $M^{Vi}D_{540}M^{Vi}$ によって溶解することによって調製された。CpPt は、UV 照射において、エポキシおよびヒドリドシリコンの間のエポキシ開環反応と、ビニルおよびヒドリドシリコンの間のヒドロシリル化反応の両方を光触媒するのに使用された。ヒドリド/エポキシモル比もしくはヒドリド/ビニルモル比は、3.6 : 1 に維持され、一方で、白金レベルは 18 ppm に維持された。

【0120】

中間体サンプル11~18は、ベンチトップ Speed Mixer で完全に混合された。およそ12 g のそれぞれのサンプルはアルミニウム秤量皿へと注がれ、金属ハライドランプがUV源として使用される Dymax 5000 Flood UV Curing Unit 中で硬化された。サンプルが受けるUVA (320~400 nm) 放射線量は UV Power Puck II を用いて測定された。

【0121】

中間体サンプル11~18は、ベンチトップ Speed Mixer で完全に混合された。およそ12 g のそれぞれのサンプルはアルミニウム秤量皿へと注がれ、金属ハライドランプがUV源として使用される Dymax 5000 Flood UV Curing Unit 中で硬化された。サンプルが受けるUVA (320~400 nm) 放射線量は UV Power Puck II を用いて測定された。

10

20

30

40

50

表3に見られるように、TもしくはQ単位の存在しないシリコーンポリマーは、エポキシ、ビニルもしくはヒドリドシリコーンが使用されたにも関わらず、エポキシド開環およびヒドロシリル化反応において速い動態を示した。結果として、エポキシド開環におけるサンプル11対サンプル13、サンプル14対サンプル13、ヒドロシリル化におけるサンプル15対サンプル17、サンプル18対サンプル17、サンプル16対サンプル18およびサンプル16対サンプル15に見られるように、比較的高いUVA放射線量がTもしくはQ単位を持つシリコーンポリマーを硬化するのに必要とされた。

【0122】

例19～24は、表4に見られるようにエポキシ、ビニルおよびヒドリドシリコーンの三元混合物として調製された。それらは、二つの異なる二元混合物の50：50の重量比の混合物として調製された。

【表4】

表4 エポキシ、ビニルおよびヒドリドシリコーンの三元混合物

配合	例番号					
	#19	#20	#21	#22	#23	#24
サンプル#11 (g)		50	50			
サンプル#12 (g)	50					
サンプル#13 (g)				50		50
サンプル#14 (g)					50	
サンプル#15 (g)		50		50		
サンプル#16 (g)	50					
サンプル#17 (g)			50			50
サンプル#18 (g)					50	
硬化特性						
金属ハライドUVランプ 下で硬化するのに必要な UVA放射線量(J/cm ²)	5.5*	3	3	4	64*	4
*硬化の際、粘着性ゲルが形成した。						

【0123】

例19～24は、ベンチトップのSpeed Mixer上で完全に混合された。サンプルはアルミニウム秤量皿へと注がれ、Dymax 5000 Flood UV Curving Unit中で硬化された。例19～24はUV照射で硬化された。硬化に必要なUVA放射線量は、それぞれの二元混合物を硬化するのに必要なものの範囲内であることが見出された。

【0124】

例19および23において、硬化したエラストマースラブよりもむしろ粘着性ゲルが形成され、これは不完全なネットワークの形成を示す。例19および23の両方が、112 J/cm²の高さのUV照射において完全な硬化に到達できなかったような二元混合物(それぞれサンプル12および14)を含むことからこの結果は予想された。

【産業上の利用可能性】

【0125】

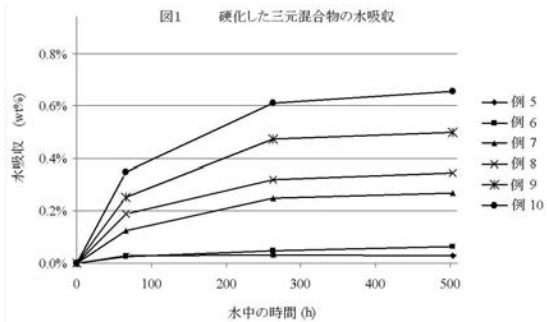
ここでの一実施態様において、対象のシリコーン組成物は上述のヒドリド官能性シリコーン(i)の少なくとも一つ、上述の不飽和官能性シリコーン(ii)の少なくとも一つ、および上述のエポキシもしくはオキセタン官能性シリコーン(iii)の少なくとも一つを含み、ここでシリコーン(i)、(ii)および(iii)が任意選択で触媒の存在下で反応しシリコーン組成物を産生し、そしてシリコーン組成物は、ヘルスケアおよび医薬用途のための透明パッチ、ドラッグデリバリーデバイス、コート剤、化粧品構造材料、ガ

スケッチ材料および親水性が必要な他の用途における使用のための劇的に向上した親水性、物理的特性および光学的特性を持つ。

【 0 1 2 6 】

これらの例は本質的に例示としてのみ解釈されるべきであり、添付の請求項を限定することは決して意図されない。当業者なら、当業者の能力によって添付の請求項の逐語的な範囲もしくは均等の範囲内に入るであろうここに含まれる課題および開示の明らかな変更をすることができることが意図されている。

【 図 1 】



【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/US2014/046090

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. A61K8/89 A61K9/70 C08L83/04 ADD.		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) A61K C08G C08L		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) EPO-Internal, WPI Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2012/205580 A1 (MORITA YOSHITSUGU [JP] ET AL) 16 August 2012 (2012-08-16)	1-4, 6-12, 14-16, 18-21,30
Y	practical example 1; paragraphs [0042], [0047], [0038] paragraphs [0014], [0028], [0030], [0035], [0037]	5,13,17, 27
X	US 5 166 293 A (OKINOSHIMA HIROSHIGE [JP] ET AL) 24 November 1992 (1992-11-24)	1-4, 6-12, 14-16, 18-21, 24,29,30
Y	columns 3-6; example 2	5,13,17, 27
	----- -/--	
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C.		<input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.
* Special categories of cited documents : "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "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) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		"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 "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 "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 "&" document member of the same patent family
Date of the actual completion of the international search 4 September 2014		Date of mailing of the international search report 10/09/2014
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Authorized officer Dalet, Pierre

1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/US2014/046090

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 6 444 745 B1 (KILGOUR JOHN A [US] ET AL) 3 September 2002 (2002-09-03)	1-4, 6-12, 14-16, 18-26, 28-30
Y	column 11; example 1	5,13,17, 27
X	EP 0 556 023 A1 (GEN ELECTRIC [US]) 18 August 1993 (1993-08-18)	1-4, 6-12, 14-16, 18-21,24
Y	example 1	5,13,17, 27
Y	US 2010/092690 A1 (ALVAREZ KHRISTOPHER [US] ET AL) 15 April 2010 (2010-04-15) paragraphs [0003], [0050] - [0057]	16,17
Y	US 2004/161397 A1 (SAKUTA KOJI [JP]) 19 August 2004 (2004-08-19) paragraph [0011]	5,27
Y	"Silicones", 15 April 2003 (2003-04-15), ENCYCLOPEDIA OF POLYMER SCIENCE AND TECHNOLOGY, WILEY, US, PAGE(S) 765 - 841, XP007918236, pages 808-809	5,13,16

1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No

PCT/US2014/046090

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date	
US 2012205580	A1	16-08-2012	CN 102482430 A	30-05-2012
			EP 2478038 A1	25-07-2012
			JP 5539688 B2	02-07-2014
			JP 2011057950 A	24-03-2011
			KR 20120081147 A	18-07-2012
			US 2012205580 A1	16-08-2012
			WO 2011030932 A1	17-03-2011
US 5166293	A	24-11-1992	DE 4117471 A1	05-12-1991
			JP 2508891 B2	19-06-1996
			JP H0433962 A	05-02-1992
			US 5166293 A	24-11-1992
US 6444745	B1	03-09-2002	DE 60100687 D1	09-10-2003
			DE 60100687 T2	29-07-2004
			EP 1164172 A1	19-12-2001
			JP 5424288 B2	26-02-2014
			JP 2002138200 A	14-05-2002
			US 6444745 B1	03-09-2002
EP 0556023	A1	18-08-1993	CA 2087766 A1	11-08-1993
			EP 0556023 A1	18-08-1993
			FI 930554 A	11-08-1993
			JP H061918 A	11-01-1994
			TW 198054 B	11-01-1993
US 2010092690	A1	15-04-2010	CN 101578324 A	11-11-2009
			EP 2094766 A1	02-09-2009
			JP 5350267 B2	27-11-2013
			JP 2010513661 A	30-04-2010
			KR 20090093999 A	02-09-2009
			TW 200837145 A	16-09-2008
			US 2010092690 A1	15-04-2010
			WO 2008076184 A1	26-06-2008
US 2004161397	A1	19-08-2004	DE 60037701 T2	22-01-2009
			EP 1757263 A2	28-02-2007
			KR 20010007492 A	26-01-2001
			US 2004161397 A1	19-08-2004

フロントページの続き

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード(参考)
A 6 1 K 8/89 (2006.01)	A 6 1 K 8/89	4 J 0 3 8
C 0 9 D 183/04 (2006.01)	C 0 9 D 183/04	
C 0 9 D 7/12 (2006.01)	C 0 9 D 7/12	
C 0 9 K 3/10 (2006.01)	C 0 9 K 3/10	G
C 0 8 G 59/32 (2006.01)	C 0 9 K 3/10	L
C 0 8 L 63/00 (2006.01)	C 0 9 K 3/10	Q
	C 0 9 K 3/10	Z
	C 0 8 G 59/32	
	C 0 8 L 63/00	A

(81) 指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, T M), EP(AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, R S, SE, SI, SK, SM, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, H R, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, 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, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US

- (72) 発明者 ツァン, ヒュイピン
アメリカ合衆国ニューヨーク州 1 2 0 6 5 , クリフトンパーク, スターリング・ハイツ・ドライブ
・ 5 4
- (72) 発明者 ボスハマー, ステファン
ドイツ連邦共和国 5 0 6 7 9 ・ケルン, アルミニウスシュトラッセ・ 1 9
- (72) 発明者 ローベル, ディーター
ドイツ連邦共和国 5 1 3 7 5 ・ノルトライン・ヴェストファーレン, レパークーゼン・, ザールラ
ウトナーシュトラッセ・ 6
- (72) 発明者 エックバーク, リチャード
アメリカ合衆国ニューヨーク州 1 2 8 3 1 , ガンズポート, マウント・マクレガー・ 6
- (72) 発明者 グリスウォルド, ロイ
アメリカ合衆国ニューヨーク州 1 2 0 2 0 , ボールストーンSPA, ヴィクトリー・サークル・ 5 2 8
- (72) 発明者 ガンター, ベアテ
ドイツ連邦共和国ノルトライン・ヴェストファーレン, 4 0 7 8 9 ・モンハイム, ショッペンハウ
アーシュトラッセ・ 2 1

Fターム(参考) 4C083 AB051 AD151 BB11 CC01
4C084 AA17 NA13
4H017 AA04 AA24 AA25 AA27 AA29 AA31 AB08 AB15 AC07 AC08
AC14 AC16 AC17 AC19 AD01 AE05
4J002 CP04Y CP05X CP12W CP13W CP14W DJ016 FD016 FD180 FD200 FD310
FD330 GA00 GB00 GB01 GB04 GC00 GD00 GE00 GH00 GJ02
GK03 GK04 GL00 GM00
4J036 AJ21 AK17 DD08 FA02 FA03 FA05 GA28 JA01 JA06 JA07
JA15 KA03
4J038 DL041 DL051 DL101 GA01 GA07 HA446 JA57 JC32 KA03 KA04
KA06 KA08 KA12 NA06 PB01 PB02