



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2011-0137310  
 (43) 공개일자 2011년12월22일

- |   |  |
|---|--|
| <p>(51) Int. Cl.<br/> <i>C07C 271/16</i> (2006.01) <i>C07C 271/24</i> (2006.01)<br/> <i>C07F 7/10</i> (2006.01) <i>G02C 7/04</i> (2006.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2011-7021283</p> <p>(22) 출원일자(국제출원일자) 2010년03월04일<br/>             심사청구일자 없음</p> <p>(85) 번역문제출일자 2011년09월09일</p> <p>(86) 국제출원번호 PCT/EP2010/001336</p> <p>(87) 국제공개번호 WO 2010/102747<br/>             국제공개일자 2010년09월16일</p> <p>(30) 우선권주장<br/>             61/160,093 2009년03월13일 미국(US)</p> | <p>(71) 출원인<br/>             코그니스 아이피 매니지먼트 게엠베하<br/>             독일 40589 뒤셀도르프 헨켈슈트라체 67</p> <p>(72) 발명자<br/>             아이어 라메쉬<br/>             미국 19438 펜실베이니아주 할리스빌 크릭뷰 드라이브 511<br/>             맥켄나 피터<br/>             영국 씨오11 1피비 서퍽 브렌섬 매닝트리 입스위치 로드 더 스왈로우스<br/>             (뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인<br/>             특허법인코리아나</p> |
|---|--|

전체 청구항 수 : 총 39 항

**(54) 히드로겔을 형성하기 위한 단량체 및 마크로머**

**(57) 요약**

본 발명은 안과용 렌즈의 히드로겔로서 특히 유용한 중합체 및 중합체 물질의 형성에서 반응물 및 중간체로서의 용도를 포함한 용도에서 유용성을 갖는 신규 화합물을 제공한다.

(72) 발명자

**스몰릿지 마크**

영국 에스오45 6비디 하이드 에드워드 로드 17

**매튜스 멜리사**

영국 에스오45 3에이치알 햄프셔 사우샘프턴 하이  
드 퍼즈데일 가든스 12

**나테쉬 엔부**

미국 19454 펜실베이니아주 노스 웨일스 켄트 드라  
이브 120

**베이커 조디**

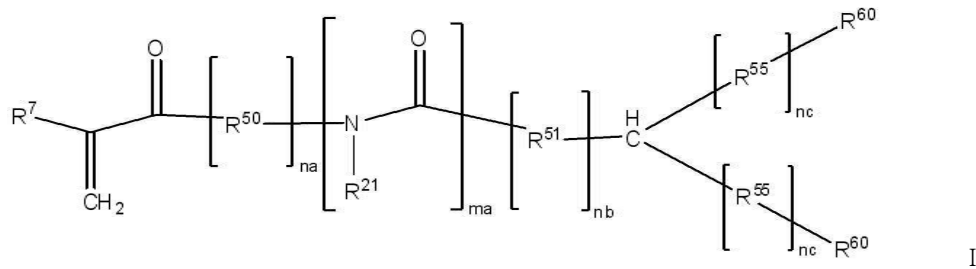
영국 햄프셔 바징스토크 알파인 코트 6

---

**특허청구의 범위**

**청구항 1**

하기 화학식 I 에 따른 화합물:



단, 상기 화합물은 2 개 이상의 말단 -OH 기 또는 하나 이상의 말단 실록산기를 가지며, 상기 화합물이 2 개의 말단 -OH 기를 갖지 않으면, ma 는 0 을 초과한다

(상기 식 중에서,

R<sup>7</sup> 은 H 또는 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기이고,

각 R<sup>21</sup> 은 독립적으로 H, C1-C4 알킬기, 또는 R<sup>23</sup> 이며,

R<sup>23</sup> 은 R<sup>25</sup>-O-(CR<sup>25A</sup>H-CR<sup>25A</sup>HO)<sub>x</sub>-CHR<sup>25A</sup>CR<sup>25A</sup>H- 이고,

각 R<sup>25</sup> 는 독립적으로 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기이며,

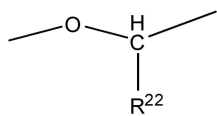
각 R<sup>25A</sup> 는 독립적으로 H, 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기이고,

x 는 약 1 내지 약 50 이며,

각 R<sup>50</sup> 은 독립적으로 R<sup>50A</sup> 및 R<sup>50B</sup> 에서 선택되는 2 가 기이고,

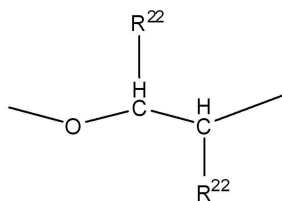
각 R<sup>51</sup> 은 독립적으로 R<sup>51A</sup> 및 R<sup>51B</sup> 에서 선택되는 2 가 기이며,

R<sup>50A</sup> 및 R<sup>51A</sup> 는 각각 독립적으로



이고,

R<sup>50B</sup> 및 R<sup>51B</sup> 는 각각 독립적으로



이며,

각 R<sup>22</sup> 는 독립적으로 H, 할로젠, 또는 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기이고, 단, 하나 이상의 R<sup>22</sup> 는 H 이며,

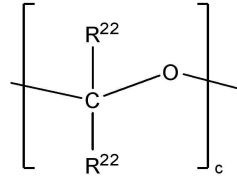
각 R<sup>55</sup> 는 독립적으로 -O-, -NH-, -[CH<sub>2</sub>]<sub>a</sub>-, -[CF<sub>2</sub>]<sub>b</sub>-, -[C(R<sup>22</sup>)<sub>2</sub>]<sub>b</sub>-, R<sup>55A</sup>, R<sup>55B</sup>, R<sup>55C</sup>, R<sup>55D</sup>, R<sup>55E</sup>, R<sup>55G</sup>, R<sup>55H</sup> 에서 선

택되는 2 가 기이고,

각 a 는 독립적으로 1 내지 10 이며,

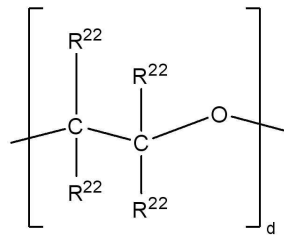
각 b 는 독립적으로 2 내지 50 이고,

R<sup>55A</sup> 는



이며,

R<sup>55B</sup> 는

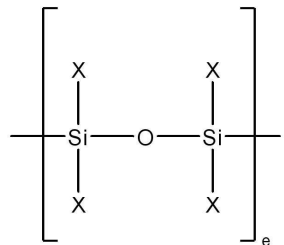


이고,

각 c 는 독립적으로 1 내지 5 이며,

각 d 는 독립적으로 8 내지 50 이고,

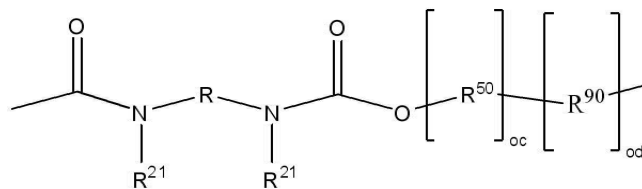
R<sup>55C</sup> 는



이며,

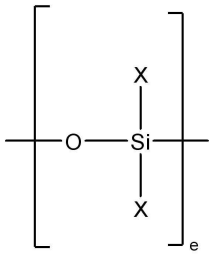
e 는 1 내지 100 이고,

R<sup>55D</sup> 는



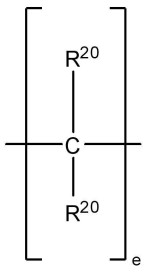
이며,

R<sup>55E</sup> 는



이고,

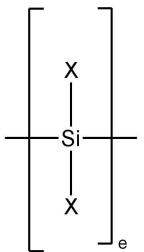
R<sup>55F</sup> 는



이며,

각 R<sup>20</sup> 은 독립적으로 H 또는 F 이고,

R<sup>55G</sup> 는



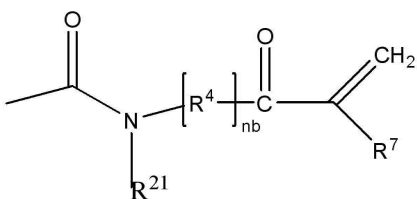
이며,

R<sup>55H</sup> 는 -CH<sub>2</sub>-R<sup>55D</sup>- 이고,

각 R<sup>60</sup> 은 독립적으로 H (단, 하나 이하의 R<sup>60</sup> 은 H 이다), OH, R<sup>26</sup>OH, R<sup>60A</sup>, R<sup>60B</sup>, R<sup>60C</sup> 및 R<sup>60D</sup> 이며,

R<sup>26</sup> 은 -[CH<sub>2</sub>]<sub>c</sub>- (c 는 상기 정의한 바와 같다) 이고,

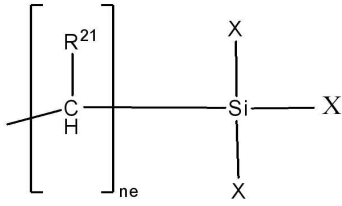
R<sup>60A</sup> 는



이며,

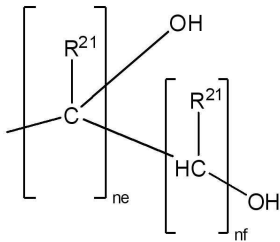
R<sup>4</sup> 는 C1-C6 알킬기이고,

R<sup>60B</sup> 는



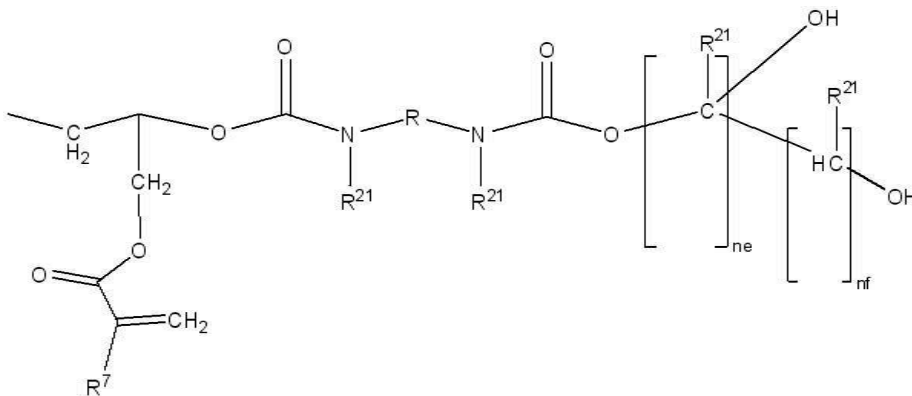
이며,

R<sup>60C</sup> 는



이고,

R<sup>60D</sup> 는



이며,

각 R 은 독립적으로 아릴, 시클로알킬 및 지방족 알킬 또는 방향족 알킬, 폴리방향족, 폴리방향족 알킬 또는 폴리시클로지방족 알킬이고,

각 R<sup>90</sup> 은 독립적으로 2 가 실록산 함유 기이며, 단, R<sup>90</sup> 이 2 가 실록산 함유 기이면, 이것에 결합되는 R<sup>60</sup> 은 H 또는 OH 가 아니고,

각 X 는 독립적으로 H, 탄소 원자 사이에 에테르 결합을 갖거나 갖지 않는 탄소수 1 내지 약 10 의 알킬 또는 할로알킬 부분, 또는 -O-Si-R<sup>9</sup> (각 R<sup>9</sup> 는 독립적으로 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기 또는 페닐기이다) 에 상응하는 실록산기이며,

각 na, ne 및 nf 는 독립적으로 1 내지 4 이고,

ma 는 0 또는 1 이며,

각 nc 는 독립적으로 0 내지 6 이고,

각 nb, ob, oc 및 od 는 독립적으로 0 내지 4 이다).

**청구항 2**

제 1 항에 있어서, 각 R<sup>7</sup> 이 H 인 화합물.

**청구항 3**

제 1 항에 있어서, 하나 이상의 R<sup>7</sup> 이 H 인 화합물.

**청구항 4**

제 1 항에 있어서, 하나 이상의 R<sup>7</sup> 이 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기인 화합물.

**청구항 5**

제 1 항에 있어서, b 가 2 내지 20 인 화합물.

**청구항 6**

제 1 항에 있어서, e 가 1 내지 50 인 화합물.

**청구항 7**

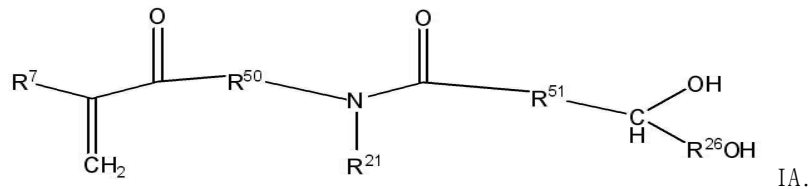
제 1 항에 있어서, e 가 1 내지 30 인 화합물.

**청구항 8**

제 1 항에 있어서, ma 가 1 이고, 각 nc 가 0 이며, 하나의 R<sup>60</sup> 이 OH 이고, 나머지 R<sup>60</sup> 이 R<sup>26</sup>OH 인 화합물.

**청구항 9**

제 1 항에 있어서, 상기 화합물 중 하나 이상이 하기 화학식 IA 에 따르는 화합물:

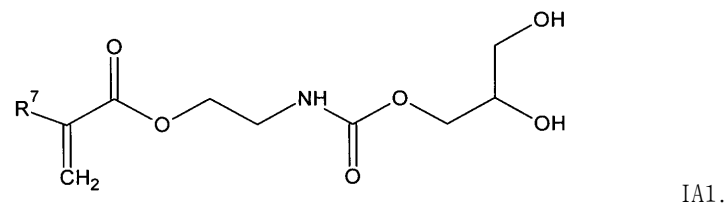


**청구항 10**

제 9 항에 있어서, 각 na 및 nb 가 1 이고, R<sup>50</sup> 이 R<sup>50B</sup> 이며, R<sup>51</sup> 이 R<sup>51A</sup> 이고, R<sup>26</sup> 이 -CH<sub>2</sub>- 인 화합물.

**청구항 11**

제 1 항에 있어서, 상기 화합물 중 하나 이상이 하기 화학식 IA1 에 따르는 화합물:

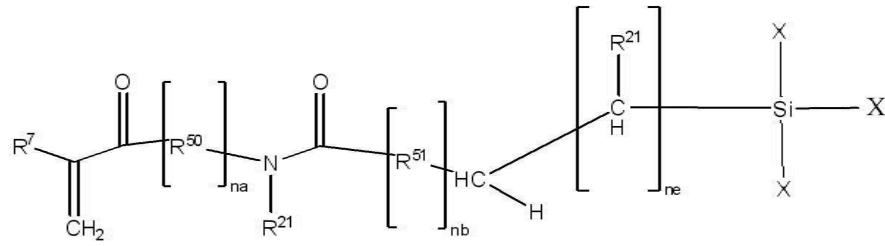


**청구항 12**

제 11 항에 있어서, ma 가 1 이고, 각 nc 가 0 이며, 하나의 R<sup>60</sup> 이 H 이고, 나머지 R<sup>60</sup> 이 1 가 실록산 함유 기인 화합물.

**청구항 13**

제 1 항에 있어서, 상기 화합물 중 하나 이상이 하기 화학식 IB 에 따르는 화합물:



IB.

**청구항 14**

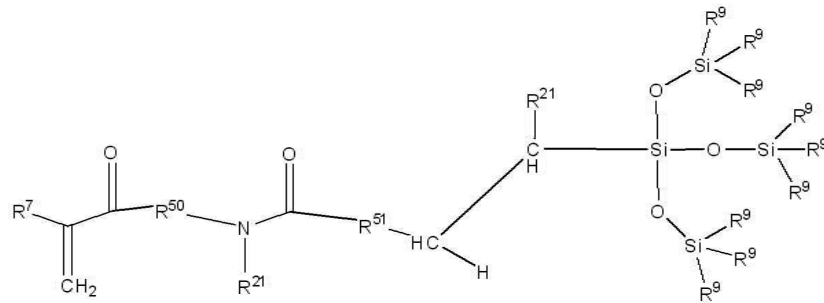
제 13 항에 있어서, 하나 이상의 X 가 -O-Si-R<sup>9</sup> 인 화합물.

**청구항 15**

제 13 항에 있어서, 각 X 가 -O-Si-R<sup>9</sup> 인 화합물.

**청구항 16**

제 14 항에 있어서, 상기 화합물 중 하나 이상이 하기 화학식 IB1 에 따르는 화합물:



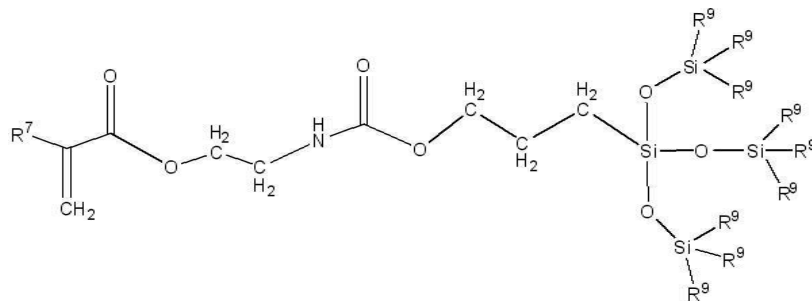
IB1.

**청구항 17**

제 16 항에 있어서, 각 na, nb, nc 및 ne 가 1 이고, R<sup>50</sup> 이 R<sup>50B</sup> 이며, R<sup>51</sup> 이 R<sup>51A</sup> 이고, 각 R<sup>21</sup> 및 R<sup>22</sup> 가 H 인 화합물.

**청구항 18**

제 16 항에 있어서, 상기 화합물 중 하나 이상이 하기 화학식 IB2 에 따르는 화합물:



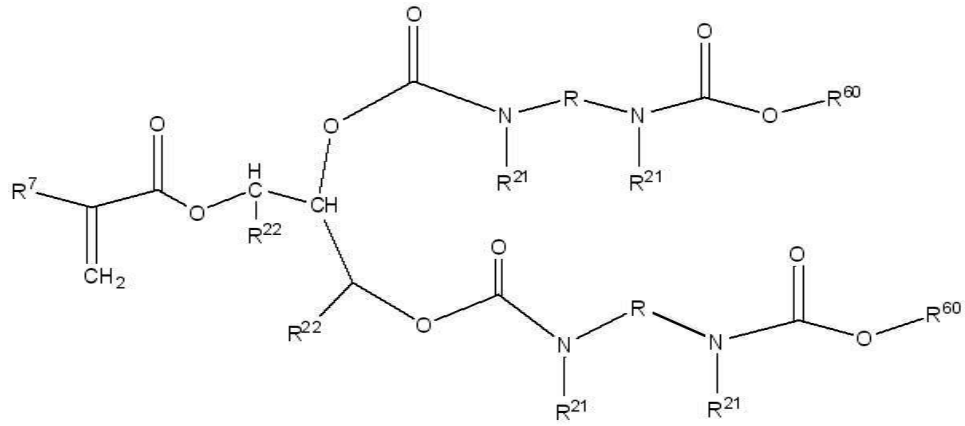
IB2.

**청구항 19**

제 1 항에 있어서, ma 가 0 이고, na 가 1 이며, R<sup>50</sup> 이 R<sup>50A</sup> 이고, nb 가 0 이며, 각 nc 가 2 이고, 하나의 [R<sup>55</sup>]<sub>2</sub> 가 -O-R<sup>55D</sup>- 이며, 다른 [R<sup>55</sup>]<sub>2</sub> 가 -R<sup>55A</sup>-R<sup>55D</sup>- 이고, 각 경우 oc 및 od 가 0 인 화합물.

**청구항 20**

제 19 항에 있어서, 상기 화합물 중 하나 이상이 하기 화학식 IC 에 따르는 화합물:

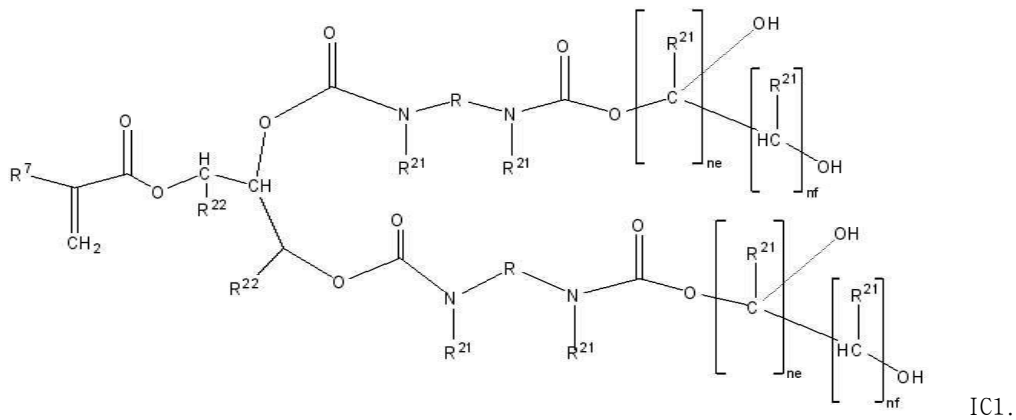


**청구항 21**

제 20 항에 있어서, 하나 이상의 R<sup>60</sup> 이 R<sup>60C</sup> 인 화합물.

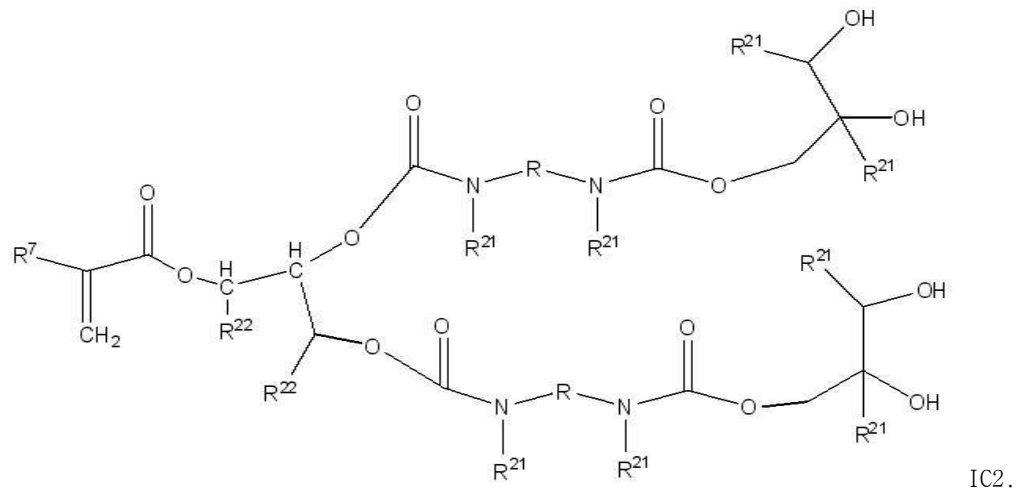
**청구항 22**

제 20 항에 있어서, 각 R<sup>60</sup> 이 하기 화학식 IC1 에 따른 R<sup>60C</sup> 인 화합물:



**청구항 23**

제 22 항에 있어서, 각 ne 및 각 nf 가 하기 화학식 IC2 에 따른 1 인 화합물:

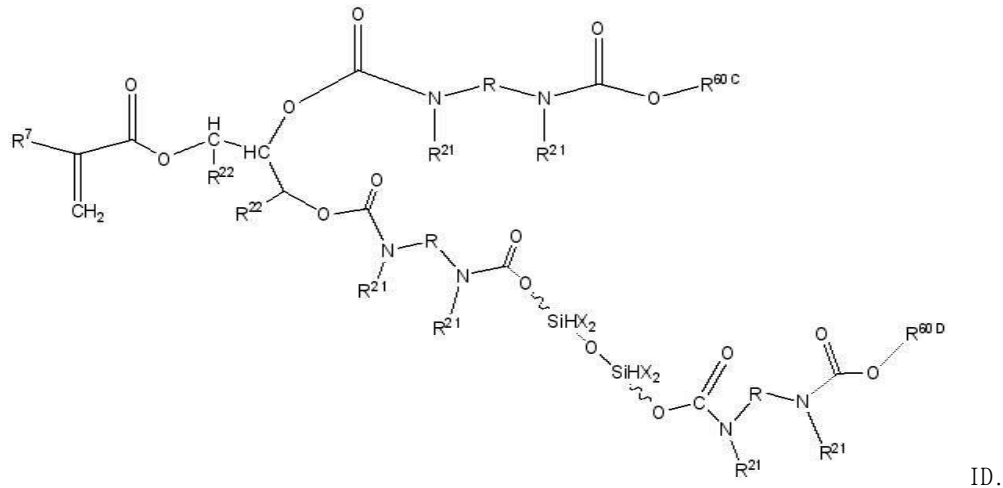


**청구항 24**

제 1 항에 있어서,  $m_a$  가 0 이고,  $n_a$  가 1 이며,  $R^{50}$  이  $R^{50A}$  이고,  $n_b$  가 0 이며, 하나의  $n_c$  가 2 이고, 하나의  $[R^{55}]_2$  가  $-O-R^{55D}-$  이며, 하나의  $n_c$  가 5 이고,  $[R^{55}]_5$  가  $-R^{55A}-R^{55D}-R^{55C}-O-R^{55D}-$  이며, 각 경우  $o_c$  및  $o_d$  가 0 이고, 하나의  $R^{60}$  이  $R^{60C}$  이며, 다른  $R^{60}$  이  $R^{60D}$  인 화합물.

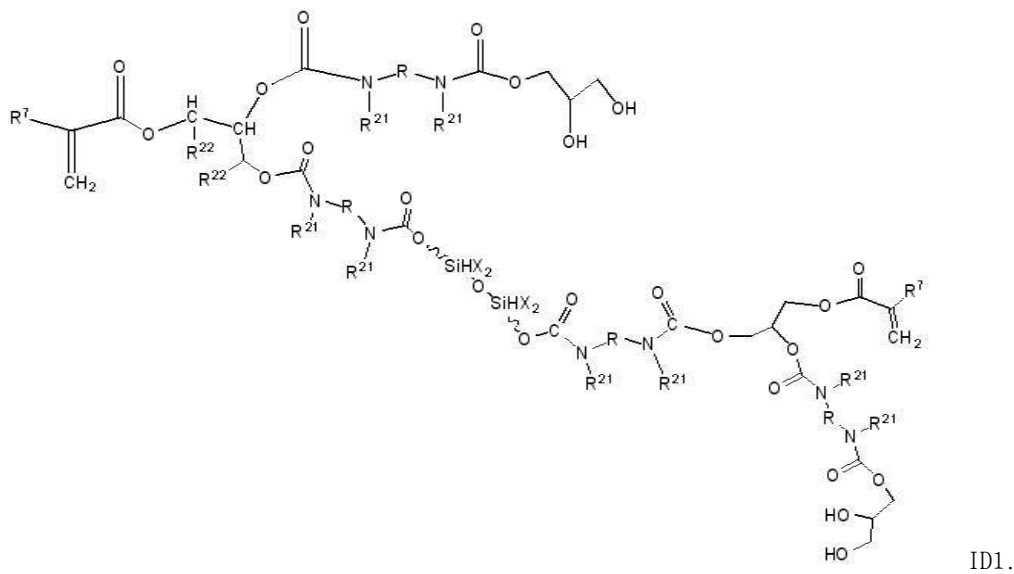
**청구항 25**

제 1 항에 있어서, 상기 화합물 중 하나 이상이 하기 화학식 ID 에 따르는 화합물:



**청구항 26**

제 25 항에 있어서, 하기 화학식 ID1 에 따르는 화합물:



**청구항 27**

제 1 항에 있어서, 하나 이상의  $R^{55}$  가 할로젠 치환 알킬인 화합물.

**청구항 28**

제 1 항에 있어서, 하나 이상의  $R^{55}$  가 불소 치환 알킬인 화합물.

**청구항 29**

제 1 항에 있어서, 하나 이상의  $n_c$  가 1 이고, 하나 이상의  $R^{55}$  가  $-[CF_2]_b-$ ,  $R^{22}$  가 H 및 할로젠에서 선택되는

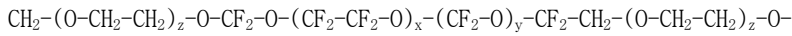
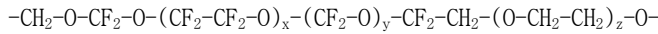
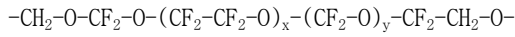
$R^{55A}$ ,  $R^{22}$  가 H 및 할로젠에서 선택되는  $R^{55B}$  및 이들의 임의의 2 이상의 조합인 화합물.

**청구항 30**

제 29 항에 있어서, 각  $R^{22}$  가 H 및 F 에서 선택되는 화합물.

**청구항 31**

제 1 항에 있어서,  $ma$  가 0 이고,  $na$  가 1 이며,  $R^{50}$  이  $R^{50A}$  이고,  $nb$  가 0 이며,  $R^{55}$  가 하기 기들 중 하나 이상을 생성하는 조합을 포함하는 화합물:



(식 중, 각  $x$ ,  $y$  및  $z$  는 평균 분자량이 약 1500 내지 약 4500 의 범위인 기를 수득하도록 선택된다).

**청구항 32**

제 31 항에 있어서, 각  $x$ ,  $y$  및  $z$  가 평균 분자량이 약 2000 내지 약 4000 의 범위인 기를 수득하도록 선택되는 화합물.

**청구항 33**

제 1 항 내지 제 32 항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 반응성 조성물.

**청구항 34**

제 1 항 내지 제 32 항 중 어느 한 항에 따른 단량체.

**청구항 35**

제 1 항 내지 제 32 항 중 어느 한 항에 따른 마크로머.

**청구항 36**

제 1 항 내지 제 32 항 중 어느 한 항에 따른 올리고머.

**청구항 37**

제 1 항 내지 제 32 항 중 어느 한 항에 따른 화합물로부터 형성되는 히드로겔.

**청구항 38**

제 37 항에 따른 히드로겔로부터 형성되는 콘택트 렌즈.

**청구항 39**

제 1 항에 있어서, 하나 이상의  $R^7$  이 메틸인 화합물.

**명세서**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 중합체 물질의 형성, 특히 히드로겔의 형성에서 유용성을 갖는 신규 화합물에 관한 것이다. 본 발명은 또한 히드로겔 콘택트 렌즈, 상처 치유, 조절된 약물 전달, 의료 기기, 카테터, 스텐트 및 조직 공학 분야에서의 상기 물질의 용도에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 히드로겔은 수화 가능한 가교결합 중합체 계이다. 다수의 용도에서 유용한 히드로겔은 또한 산소 투과성 및 생체 적합성이어서, 생체-의료 기기, 특히 콘택트 렌즈 또는 안내 렌즈의 제조에 바람직한 물질이다. 종래의 히드로겔은 요구되는 수화능 및 산소 투과성을 갖는 중합체를 수득하기 위해서, 2-히드록시에틸 메타크릴레이트 (HEMA) 또는 N-비닐 피롤리돈 (NVP) 과 같은 친수성 단량체와 소수성 단량체 또는 마크로머를 주로 함유하는 단량체 혼합물로부터 제조된다. 산소 투과성은 통상적으로 소수성 단량체 함유 실록산 또는 플루오로 중합체 부분에서 발견되는 중합체와 관련이 있다. 미국 특허 제 4,495,313 호, 제 4,889,664 호 및 제 5,039,459 호에는 종래의 히드로겔의 형성이 기재되어 있다. 종래의 히드로겔 물질의 산소 투과성은 상기 물질의 수분 함량과 관련이 있으며, 일반적으로 20-30 barrer 미만이다. 종래의 히드로겔 물질로 제조된 콘택트 렌즈는 산소 투과성 수준이 콘택트 렌즈의 단기 착용에 적합하다; 그러나, 이러한 산소 투과성 수준은 콘택트 렌즈의 장기 착용 (예, 제거하지 않고 30 일) 동안에 건강한 각막을 유지하기에는 충분하지 않을 수 있다. 히드로겔 중합체의 물성에 악영향을 주지 않으면서, 종래의 히드로겔의 산소 투과성 및 수분 함량 또는 수화를 향상시키기 위한 노력이 있었으며, 계속되고 있다.

[0003] 히드로겔의 산소 투과성을 향상시키기 위한 한가지 공지의 방법은 실리콘 함유 단량체 또는 마크로머를 히드로겔 제형 및/또는 상기 제형 중의 불소 함유 단량체 또는 마크로머에 첨가하여 히드로겔을 제조하는 것이다. 실리콘 함유 히드로겔은 일반적으로 종래의 히드로겔보다 높은 산소 투과성을 가진다. 실리콘 함유 히드로겔은 일반적으로 하나 이상의 유기 실리콘 함유 단량체 및 하나 이상의 친수성 단량체를 함유하는 혼합물을 중합시킴으로써 제조된다. 상기 실리콘 함유 단량체 또는 친수성 단량체는 가교결합제 (가교결합제는 다수의 중합성 관능기를 갖는 단량체이다) 로서 기능할 수 있거나, 별도의 가교결합제를 사용할 수 있다.

[0004] 실리콘 히드로겔의 형성은 미국 특허 제 4,711,943 호, 제 4,954,587 호, 제 5,010,141 호, 제 5,079,319 호, 제 5,115,056 호, 제 5,260,000 호, 제 5,336,797 호, 제 5,358,995 호, 제 5,387,632 호, 제 5,451,617 호, 제 5,486,579 호, 제 5,789,461 호, 제 5,776,999 호, 제 5,760,100 호, 제 5,849,811 호 및 WO 96/31792 에 기재되어 있으며, 이들 문헌의 내용은 본원에서 참고로 인용된다.

[0005] 미국 특허 제 3,808,178 호에는 저분자량 실리콘 함유 단량체 및 여러가지 친수성 단량체를 갖는 공-중합체의 형성이 기재되어 있다. 미국 특허 제 5,034,461 호에는 실리콘-폴리우레탄 마크로머와, HEMA, 비닐 피롤리돈 (NVP) 및/또는 디메틸아크릴아미드 (DMA) 와 같은 친수성 단량체의 여러가지 조합으로부터 제조된 실리콘 함유 히드로겔이 기재되어 있다. 메타크릴옥시프로필트리스(트리메틸실록시)실란 (TRIS) 의 첨가는 상기 히드로겔의 모듈러스를 감소시키지만, 많은 예에서 모듈러스는 필요할 수 있는 것보다 여전히 높았다.

[0006] 미국 특허 제 5,358,995 호 및 제 5,387,632 호에는 실리콘 마크로머, TRIS, NVP 및 DMA 의 여러가지 조합으로부터 제조된 히드로겔이 기재되어 있다. 상당 부분의 실리콘 마크로머를 TRIS 로 대체하면, 수득되는 히드로겔의 모듈러스가 감소한다. 또한, 동일 저자의 2 가지 문헌 "The Role of Bulky Polysiloxane Alkylmethacrylates in Polyurethane-Polysiloxane Hydrogels", J. Appl. Poly. Sci., Vol. 60, 1193-1198 (1996) 및 "The Role of Bulky Polysiloxanyl Alkylmethacrylates in Oxygen Permeable Hydrogel Materials", J. Appl. Poly. Sci., Vol. 56, 317-324 (1995) 에는 실리콘-마크로머와 DMA 같은 친수성 단량체의 반응 혼합물로부터 제조된 히드로겔의 모듈러스가, 첨가되는 TRIS 에 의해 감소하는 것을 나타내는 실험 결과가 기재되어 있다.

[0007] WO 91/10155 및 JP 61123609 에는 하드 콘택트 렌즈를 제조하기 위해 메타크릴옥시프로필트리스(트리메틸실록시)실란 (TRIS) 을 사용하는 것이 기재되어 있다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

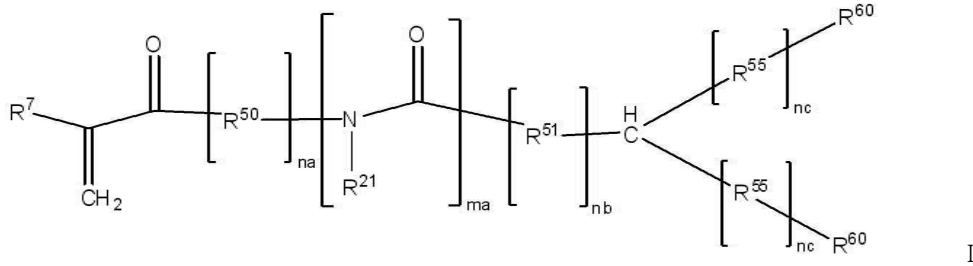
[0008] 중합체 물질, 특히 히드로겔을 형성하는데 사용된 종래의 물질에 관한 어느 정도의 성공에도 불구하고, 본 출원인은 잇점을 갖는 신규 화합물, 조성물, 물질, 제품 및 방법에 대한 지속적인 요구를 인지하였지만, 특성들의 조합을 수득하는 것은 곤란하였다. 히드로겔에 관해서, 본 출원인은 부드럽고, 높은 산소 투과성, 적합한 수분 함량 및 충분한 탄성을 갖는 히드로겔에 대한 요구를 인식하였다.

**과제의 해결 수단**

[0009] 발명의 개시

[0010] 본 출원인은 중합체 및 중합체 물질의 형성에서 반응물 및 중간체로서의 유용성을 비롯한, 다수의 용도에서 유용성을 갖는 신규 화합물 및 신규 조성물을 개발하였다. 또한, 본 출원인은 본원에 기재된 화합물 및/또는 조성물 중 하나 이상, 바람직하게는 본원에 기재된 신규 화합물 중 하나 이상에 기초하는 (즉, 일부 이상이 이것으로부터 형성되는) 신규 중합체를 개발하였다.

[0011] 본 발명의 한가지 양태는 하기 화학식 I 에 따른 화합물을 제공한다:



[0012] 단, 상기 화합물은 2 개 이상의 말단 -OH 기 또는 하나 이상의 말단 실록산기를 가지며, 상기 화합물이 2 개 이상의 말단 -OH 기를 갖지 않으면, ma 는 0 을 초과한다

[0014] (상기 식 중에서,

[0015]  $R^7$  은 H 또는 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기이고, 특정의 바람직한 구현예에서는 메틸이며,

[0016] 각  $R^{21}$  은 독립적으로 H, C1-C4 알킬기 또는  $R^{23}$  이고,

[0017]  $R^{23}$  은  $R^{25}-O-(CR^{25A}H-CR^{25A}HO)_x-CHR^{25A}CR^{25A}H-$  이며,

[0018] 각  $R^{25}$  는 독립적으로 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기이고,

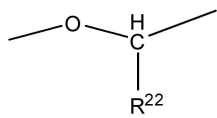
[0019] 각  $R^{25A}$  는 독립적으로 H, 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기이며,

[0020] x 는 약 1 내지 약 50 이고,

[0021] 각  $R^{50}$  은 독립적으로  $R^{50A}$  및  $R^{50B}$  에서 선택되는 2 가 기이며,

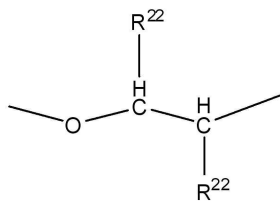
[0022] 각  $R^{51}$  은 독립적으로  $R^{51A}$  및  $R^{51B}$  에서 선택되는 2 가 기이고,

[0023]  $R^{50A}$  및  $R^{51A}$  는 각각 독립적으로



[0024] 이며,

[0026]  $R^{50B}$  및  $R^{51B}$  는 각각 독립적으로



[0027] 이고,

[0029] 각  $R^{22}$  는 독립적으로 H, 할로젠, 또는 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬이며, 단, 바람직하게는 하나 이상의  $R^{22}$  는 H 이고,

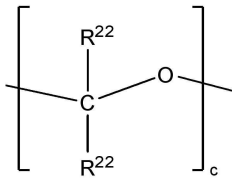
[0030] 각 R<sup>55</sup> 는 독립적으로 -O-, -NH-, -[CH<sub>2</sub>]<sub>a</sub>-, -[CF<sub>2</sub>]<sub>b</sub>-, -[C(R<sup>22</sup>)<sub>2</sub>]<sub>b</sub>-, R<sup>55A</sup>, R<sup>55B</sup>, R<sup>55C</sup>, R<sup>55D</sup>, R<sup>55E</sup>, R<sup>55G</sup>, R<sup>55H</sup> 에서 선택되는 2 가 기이며,

[0031] 각 a 는 독립적으로 1 내지 10 이고,

[0032] 각 b 는 독립적으로 2 내지 50 이며, 바람직하게는 특정의 구현예에서는 2 내지 20 이고,

[0033] 각 R<sup>22</sup> 는 상기 정의한 바와 같으며,

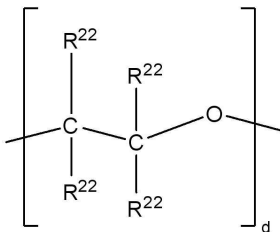
[0034] R<sup>55A</sup> 는



[0035]

[0036] 이고,

[0037] R<sup>55B</sup> 는



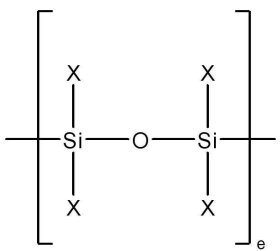
[0038]

[0039] 이며,

[0040] 각 c 는 독립적으로 1 내지 5 이고,

[0041] 각 d 는 독립적으로 8 내지 50 이며,

[0042] R<sup>55C</sup> 는

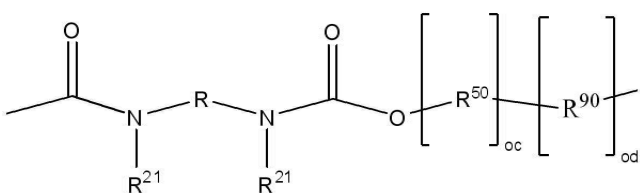


[0043]

[0044] 이고,

[0045] e 는 1 내지 100 이며, 더욱 바람직하게는 특정의 구현예에서는 1 내지 50 이고, 특정의 바람직한 구현예에서는 1 내지 약 30 이며,

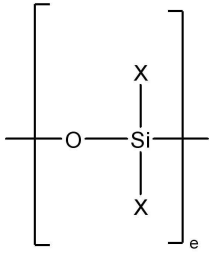
[0046] R<sup>55D</sup> 는



[0047]

[0048] 이고,

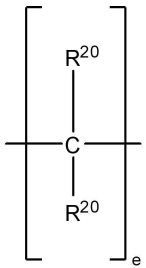
[0049] R<sup>55E</sup> 는



[0050]

[0051] 이며,

[0052] R<sup>55F</sup> 는

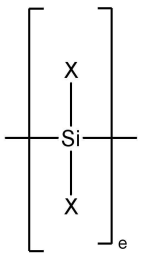


[0053]

[0054] 이고,

[0055] 각 R<sup>20</sup> 은 독립적으로 H 또는 F 이며,

[0056] R<sup>55G</sup> 는



[0057]

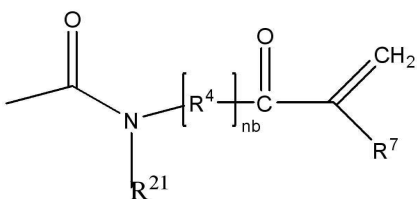
[0058] 이고,

[0059] R<sup>55H</sup> 는 -CH<sub>2</sub>-R<sup>55D</sup> - 이며,

[0060] 각 R<sup>60</sup> 은 독립적으로 H (바람직하게는 하나 이하의 R<sup>60</sup> 은 H 이다), OH, R<sup>26</sup>OH, R<sup>60A</sup>, R<sup>60B</sup>, R<sup>60C</sup> 및 R<sup>60D</sup> 이고,

[0061] R<sup>26</sup> 은 -[CH<sub>2</sub>]<sub>c</sub>- (c 는 상기 정의한 바와 같다) 이며,

[0062] R<sup>60A</sup> 는

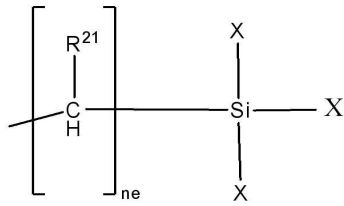


[0063]

[0064] 이고,

[0065] R<sup>4</sup> 는 C1-C6 알킬기이며,

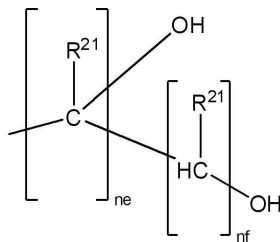
[0066] R<sup>60B</sup> 는



[0067]

[0068] 이고,

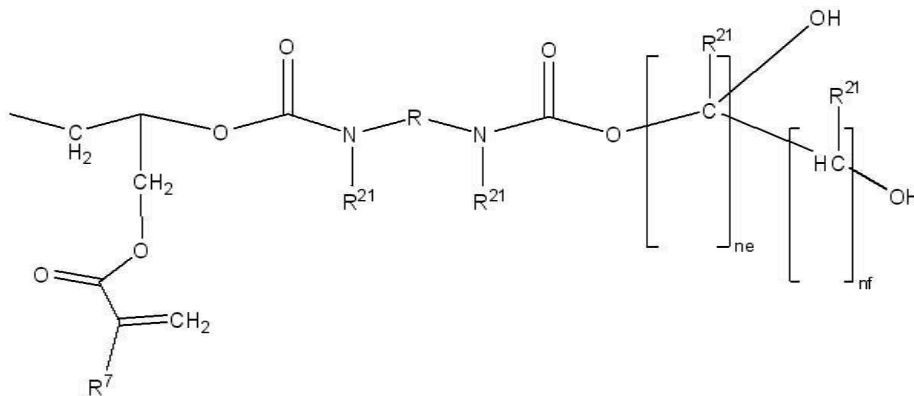
[0069] R<sup>60C</sup> 는



[0070]

[0071] 이며,

[0072] R<sup>60D</sup> 는



[0073]

[0074] 이고,

[0075] 각 R 은 독립적으로 아릴, 시클로알킬 및 지방족 알킬 또는 방향족 알킬, 폴리방향족, 폴리방향족 알킬 또는 폴리시클로지방족 알킬이며,

[0076] 각 X 는 독립적으로 H, 탄소 원자 사이에 에테르 결합을 갖거나 갖지 않는 탄소수 1 내지 약 10 의 알킬 또는 할로알킬 부분, 또는 -O-Si-R<sup>9</sup> (각 R<sup>9</sup> 는 독립적으로 직쇄 또는 분지형, 치환 또는 비치환 C1-C4 알킬기 또는 페닐기이다) 에 상응하는 실록산기이고,

[0077] 각 na, ne 및 nf 는 독립적으로 1 내지 4 이며,

[0078] ma 는 0 또는 1 이고,

[0079] 각 nc 는 독립적으로 0 내지 6 이며,

[0080] 각 nb, ob, oc 및 od 는 독립적으로 0 내지 4 이다).

[0081] 본 발명의 또다른 양태는 화학식 I 에 따른 본 발명의 화합물 중 하나 이상을 포함하는 조성물을 포함한다.  
본 발명의 또다른 양태는 본 발명의 화합물 및 조성물의 형성 방법에 관한 것이다. 본 발명의 또다른 양태는 본 발명의 화합물 및 조성물의 가공 방법에 관한 것이며, 이로부터 형성되는 중합체 및 중합체 물질을 포함

한다.

[0082] 바람직한 구현예의 상세한 설명

[0083] 정의

[0084] 편의를 위해서, 본원에서는 특정한 사용 문맥에서 특별히 지시하거나 변경하지 않는 한, 하기의 정의를 적용한다.

[0085] 용어 "C1-C4 알킬기" 는 하나 이상의 탄소 원자 그러나 약 4 개 이하의 탄소 원자를 갖는 모든 알킬기를 의미하며, 이의 범위내에 포함한다. 본원에서 다르게 특별히 지시하지 않는 한, 용어 "C1-C4 알킬기" 는 이의 범위내에 이의 모든 직쇄, 분지쇄, 치환 및 비치환된 형태를 포함한다. 유사한 용어가 사용되는 수에 따라 동일한 의미를 가진다. 예를 들어, 용어 "C1-C6 알킬기" 는 하나 이상의 탄소 원자 그러나 약 6 개 이하의 탄소 원자를 갖는 모든 알킬기를 의미하며, 이의 범위내에 포함한다.

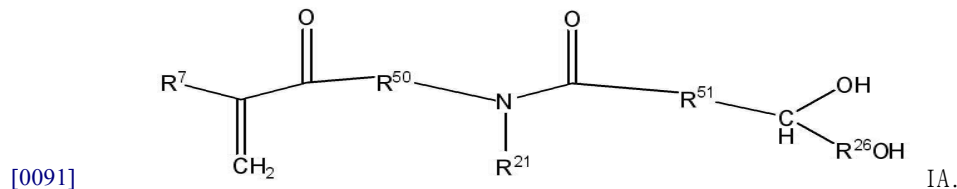
[0086] 용어 "말단 -OH 기" 및 "말단 실록산 함유 기" 는 1 차, 2 차 또는 3 차 탄소 원자에 결합된 히드록실기 또는 실록산 함유 기를 의미한다.

[0087] 본원에서 다르게 특별히 지시하지 않거나 문맥에 의해 다르게 명확하게 지시하지 않는 한, R 치환기의 모든 의미 및 아래에 기입한 값은 본 명세서 전체에서 본원에서 한번 정의한 것과 동일한 의미를 가진다.

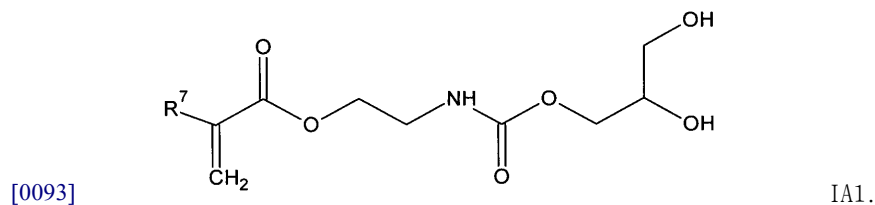
[0088] 화합물

[0089] 본 발명의 신규 화합물, 및 단독 또는 추가의 단량체 및 가교결합체 중 하나 이상과의 조합인, 본 발명의 화합물로부터 형성되는, 가교결합 중합체를 비롯한 신규 중합체 및 공중합체는 카테터 및 스텐트를 비롯한 생체의료 재료 및 제품의 형성과 관련해서 특히 유용하며, 콘택트 렌즈 응용 분야에서 특히 유리하다. 본 발명에 따른 신규 중합체, 올리고머, 마크로머 및 단량체는 이로부터 제조되는 중합체 물질의 구조내에 산소 및 특히 히드록실기를 도입할 기회를 제공하여, 중합체 및 특히 이의 히드로겔 형태의 수화능을 향상시키며, 소프트 콘택트 렌즈 재료와 관련해서 특히 유리하다. 본 발명의 바람직한 중합체는 비교적 높은 극성을 가짐과 동시에, 이로부터 제조되는 콘택트 렌즈 재료에 우수한 기계적 및 물리적 성질을 제공하는 잇점을 가진다.

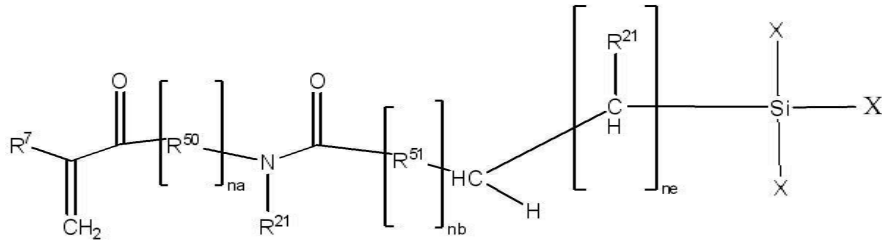
[0090] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 I 의 화합물은 하기 화학식 IA 에 따른 화합물로서 예시하는,  $m_a$  가 1 이고, 각  $n_c$  가 0 이며, 하나의  $R^{60}$  이 OH 이고, 나머지  $R^{60}$  이  $R^{26}OH$  인 화합물을 포함한다:



[0092] 상기 구현예에 따른 한가지 바람직한 화합물은 하기 화학식 IA1 로서 예시하는, 각  $n_a$  및  $n_b$  가 1 이고,  $R^{50}$  이  $R^{50B}$  이며,  $R^{51}$  이  $R^{51A}$  이고,  $R^{26}$  이  $-CH_2-$  인 화합물을 포함한다:

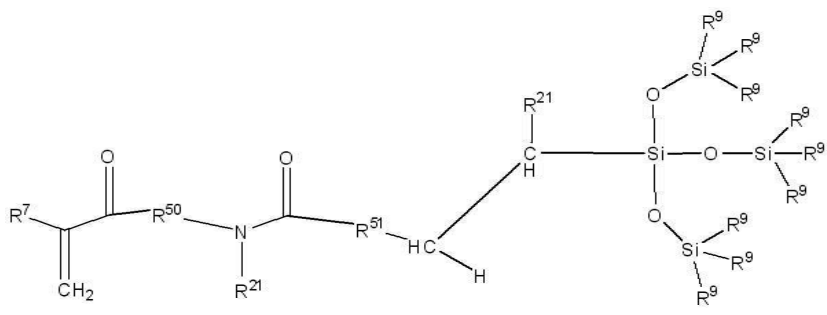


[0094] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 I 의 화합물은  $m_a$  가 1 이고, 각  $n_c$  가 0 이며, 하나의  $R^{60}$  이 H 이고, 나머지  $R^{60}$  이 1 가 실록산 함유 기인 화합물을 포함한다. 상기 구현예에 따른 한가지 바람직한 화합물은 하기 화학식 IB 로서 예시된다:



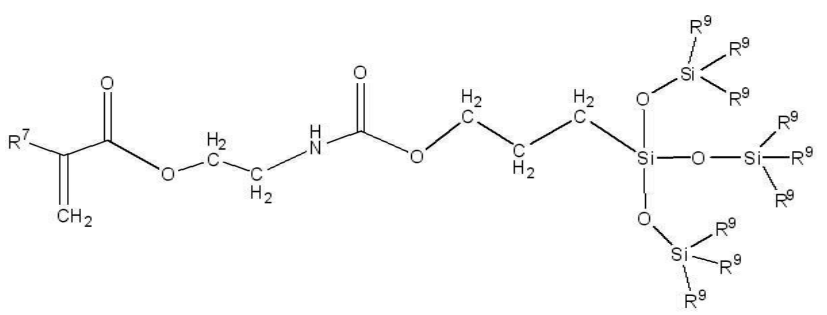
[0095] IB.

[0096] 화학식 IB의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 각 X는 -O-Si-R<sup>9</sup>이며, 이는 하기 화학식 IB1로 표시된다:



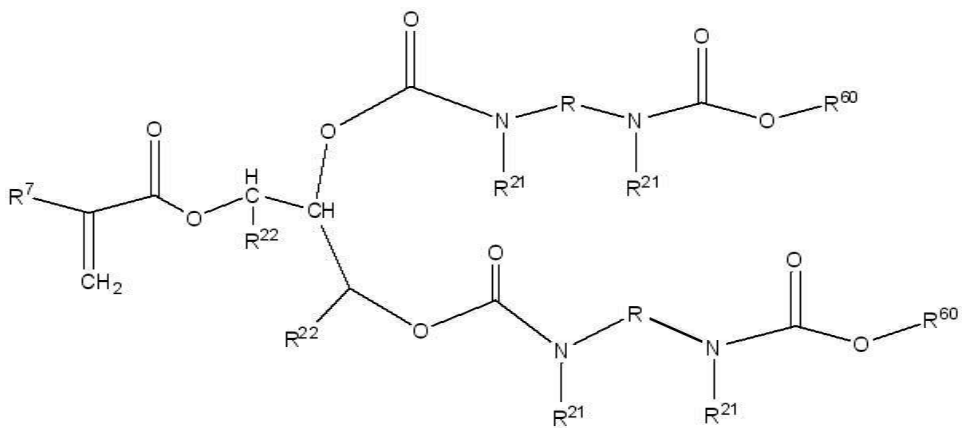
[0097] IB1.

[0098] 화학식 IB1의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 각 na, nb, nc 및 ne는 1이고, R<sup>50</sup>은 R<sup>50B</sup>이며, R<sup>51</sup>은 R<sup>51A</sup>이고, 각 R<sup>21</sup> 및 R<sup>22</sup>는 H이며, 이는 하기 화학식 IB2로 예시된다:



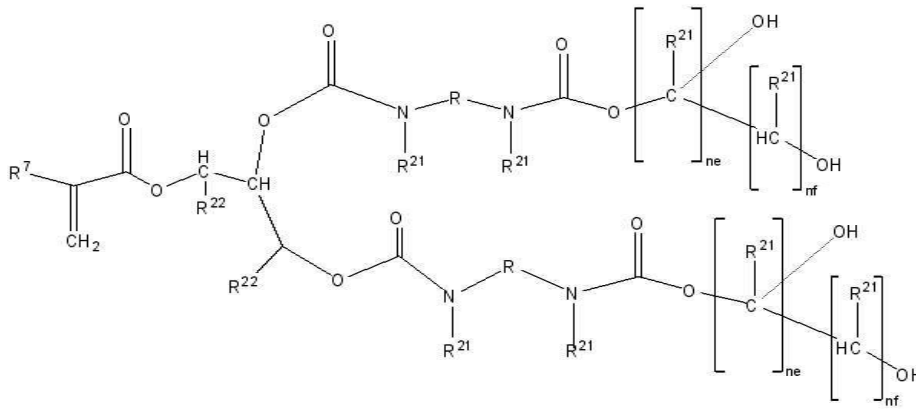
[0099] IB2.

[0100] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 I의 화합물은 ma가 0이고, na가 1이며, R<sup>50</sup>이 R<sup>50A</sup>이고, nb가 0이며, 각 nc가 2이고, 하나의 [R<sup>55</sup>]<sub>2</sub>가 -O-R<sup>55D</sup>-이며, 다른 [R<sup>55</sup>]<sub>2</sub>가 -R<sup>55A</sup>-R<sup>55D</sup>-이고, 각 경우 oc 및 od가 0인 하기 화학식 IC에 따른 화합물을 포함한다:



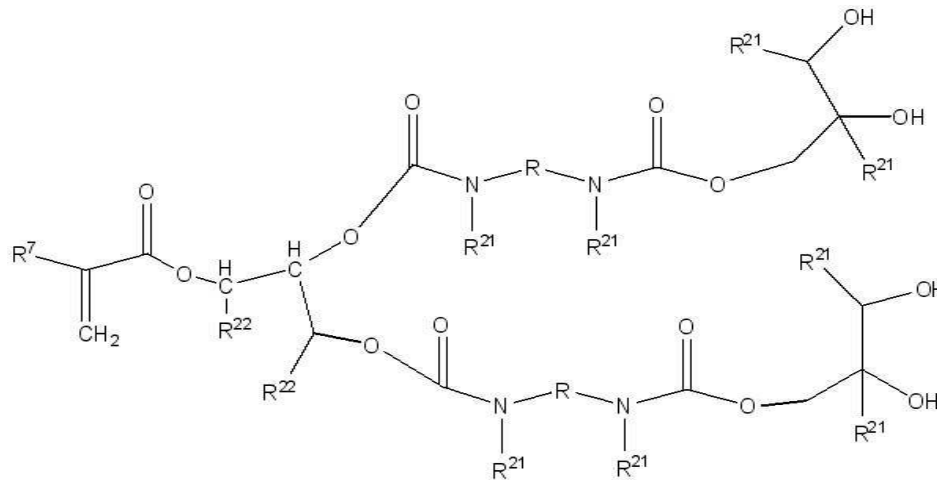
[0101] IC.

[0102] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 IC의 화합물은 각 R<sup>60</sup>이 R<sup>60C</sup>인 하기 화학식 IC1에 따른 화합물을 포함한다:



[0103] IC1.

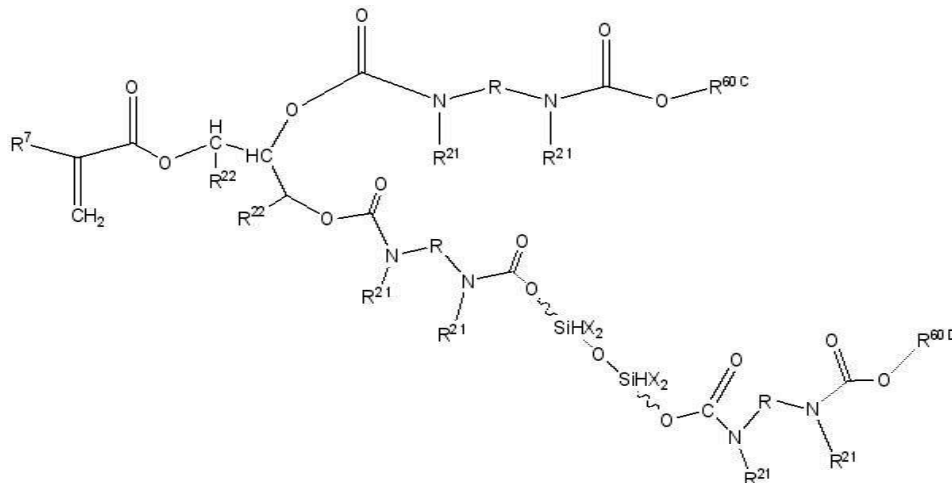
[0104] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 IC1의 화합물은 각 ne 및 각 nf가 1인 하기 화학식 IC2에 따른 화합물을 포함한다:



[0105] IC2.

[0106] 화학식 IC, 더욱 바람직하게는 화학식 IC1, 더욱더 바람직하게는 화학식 IC2에 따른 화합물의 특징의 매우 바람직한 구현예에 있어서, 각 R<sup>21</sup> 및 각 R<sup>22</sup>는 H이다.

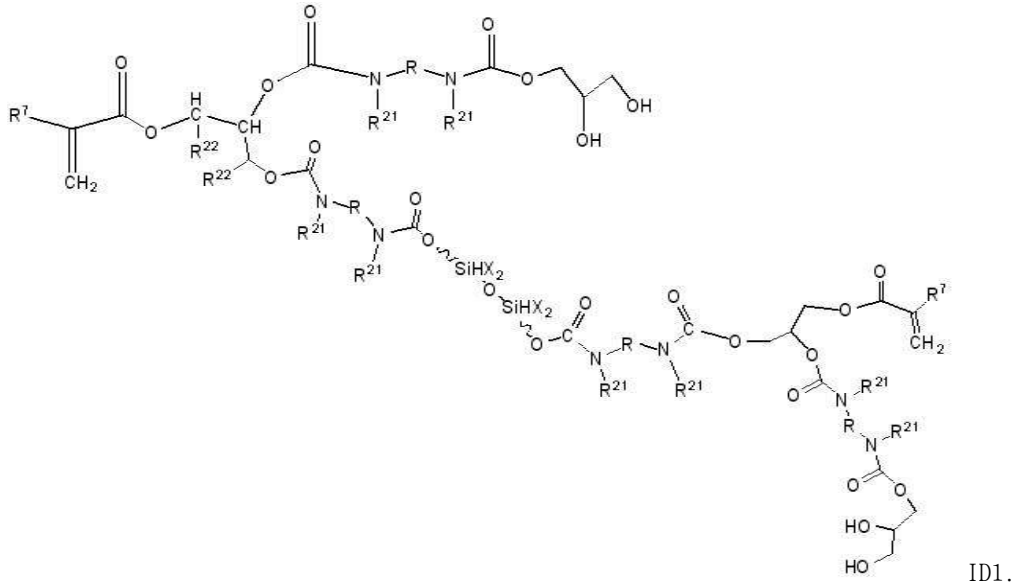
[0107] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 I의 화합물은 ma가 0이고, na가 1이며, R<sup>50</sup>이 R<sup>50A</sup>이고, nb가 0이며, 하나의 nc가 2이고, 하나의 [R<sup>55</sup>]<sub>2</sub>가 -O-R<sup>55D</sup>-이며, 하나의 nc가 5이고, [R<sup>55</sup>]<sub>5</sub>가 -R<sup>55A</sup>-R<sup>55D</sup>-R<sup>55C</sup>-O-R<sup>55D</sup>-이며, 각 경우 oc 및 od가 0이고, 하나의 R<sup>60</sup>이 R<sup>60C</sup>이며, 다른 R<sup>60</sup>이 R<sup>60D</sup>인 하기 화학식 ID에 따른 화합물을 포함한다:



[0108] ID.

[0109] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 ID의 화합물은 하나의 R<sup>60</sup>이 R<sup>60C</sup>이고, 다른 R<sup>60</sup>이 R<sup>60D</sup>

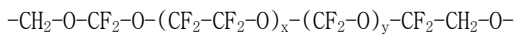
인 하기 화학식 ID1 에 따른 화합물을 포함한다:



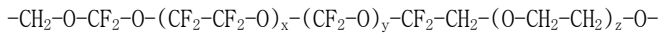
[0110]

[0111] 본 발명의 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 I 의 화합물은 하나 이상의 R<sup>55</sup> 가 할로젠 치환 알킬, 더욱 바람직하게는 불소 치환 알킬인 화합물을 포함한다. 상기 구현예의 특징의 경우에 있어서, R<sup>55</sup> 는 -[CF<sub>2</sub>]<sub>b</sub>-, R<sup>22</sup> 가 H 및 할로젠, 바람직하게는 F 에서 선택되는 R<sup>55A</sup>, R<sup>22</sup> 가 H 및 할로젠, 바람직하게는 F 에서 선택되는 R<sup>55B</sup> 의 조합이다. 상기 구현예의 특징의 경우, 특히 ma 가 0 이고, na 가 1 이며, R<sup>50</sup> 이 R<sup>50A</sup> 이고, nb 가 0 인 구현예에 있어서, R<sup>55</sup> 는 하기 기들 중 하나 이상을 생성하는 상기 조합을 포함한다:

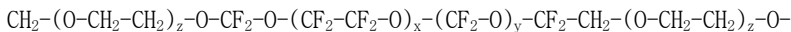
[0112]



[0113]

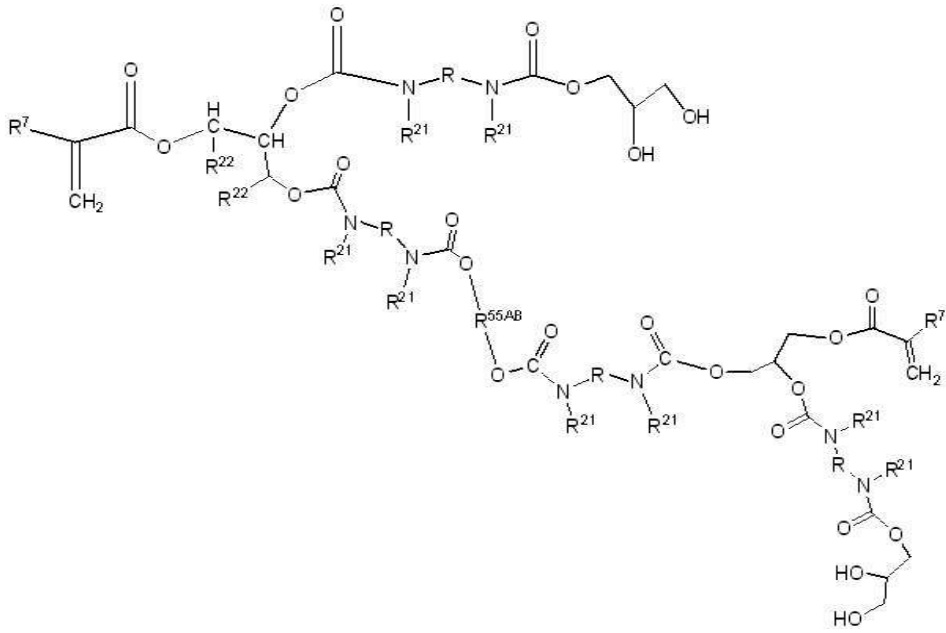


[0114]



[0115]

(식 중, 각 x, y 및 z 는 평균 분자량이 약 1500 내지 약 4500, 더욱 바람직하게는 약 2000 내지 약 4000 의 범위인 기를 수득하도록 당업자에 의해 선택된다). 특징의 바람직한 구현예에 있어서, 상기 기의 평균 분자량은 약 2000 이고, 다른 구현예에서는 약 2500 이며, 또다른 구현예에서는 약 4000 이다. 상기 바람직한 구현예의 특징의 경우에 있어서, 화학식 I 의 화합물은 ma 가 0 이고, na 가 1 이며, R<sup>50</sup> 이 R<sup>50A</sup> 이고, nb 가 0 이며, 하나의 nc 가 2 이고, [R<sup>55</sup>]<sub>2</sub> 가 -O-R<sup>55D</sup>- 이며, 하나의 nc 가 5 이고, [R<sup>55</sup>]<sub>5</sub> 가 -R<sup>55A</sup>-R<sup>55D</sup>-R<sup>55AB</sup>-O-R<sup>55D</sup>- 이며, 각 경우 oc 및 od 가 0 이고, R<sup>55AB</sup> 가 R<sup>55A</sup> 와 R<sup>55B</sup> 의 임의의 조합이며, 하나의 R<sup>60</sup> 이 R<sup>60C</sup> 이고, 다른 R<sup>60</sup> 이 R<sup>60D</sup> 인 하기 화학식 ID2 에 따른 화합물을 포함한다:



ID2.

[0116]

[0117] (식 중,  $R^{55AB}$  는 바람직하게는

[0118]  $-CH_2-O-CF_2-O-(CF_2-CF_2-O)_x-(CF_2-O)_y-CF_2-CH_2-O-$

[0119]  $-CH_2-O-CF_2-O-(CF_2-CF_2-O)_x-(CF_2-O)_y-CF_2-CH_2-(O-CH_2-CH_2)_z-O-$

[0120]  $CH_2-(O-CH_2-CH_2)_z-O-CF_2-O-(CF_2-CF_2-O)_x-(CF_2-O)_y-CF_2-CH_2-(O-CH_2-CH_2)_z-O-$

[0121] 로 이루어진 군에서 선택되고,

[0122] 아래첨자  $x$ ,  $y$  및  $z$  는 상기 정의한 바와 같다).

[0123] 화학식 I 에 따른 화합물의 유용성의 한가지 비제한적인 예는 매우 다양한 유용한 중합체 물질 및 생성물을 형성하는 반응에 관여하는 단량체, 올리고머 및 마크로머로서의 것이다.

[0124] 화학식 II 에 따른 화합물의 유용성의 한가지 비제한적인 예는 특히 안과용 렌즈 재료를 비롯한, 매우 다양한 유용한 중합체 물질 및 생성물을 형성하는 반응에 관여하는 단량체, 올리고머 및 마크로머로서의 것이다.

[0125] 본 발명의 또다른 양태는 화학식 I 에 따른 하나 이상의 화합물을 포함하는 반응성 조성물, 및 화학식 I 에 따른 하나 이상의 제 1 화합물 및 상기 제 1 화합물과 상이한, 화학식 I 에 따른 하나 이상의 제 2 화합물의 조합을 포함하는 조성물에 관한 것이다.

[0126] 본 발명의 또다른 양태는 중합체 물질, 바람직하게는 히드로겔 중합체, 더욱더 바람직하게는 콘택트 렌즈 재료 및 콘택트 렌즈를 제조하기 위한 조성물 및 방법에 관한 것으로서, 상기 조성물은 화학식 I 에 따른 화합물 중 하나 이상에 기초하거나 이로부터 유도되는 화합물, 바람직하게는 중합체 물질을 포함한다.

[0127] 본 발명의 조성물 및 방법의 한가지 잇점은 신규 화합물이 비교적 저렴한 원료로부터의 합성 및 비교적 간단하고 비용 효율적인 과정의 사용으로부터의 합성에 적합하다는 것이다. 예를 들어, 특정의 바람직한 구현예에 있어서, 화학식 I 에 따른 신규 화합물은 디옥솔란 화합물, 더욱더 바람직하게는 메틸화 및 히드록실화 디옥솔란, 예를 들어 이소프로필리덴 글리세롤; 및/또는 이소시아네이트 화합물(들); 및/또는 알릴옥시 알칸디올(들); 및/또는 글리세롤 에테르, 및 이들의 임의의 2 종 이상의 조합을 포함하는 반응물을 사용하여 형성된다.

[0128] 바람직한 구현예에 있어서, 본 발명의 조성물 및 화합물은 중합체 물질, 특히 히드로겔 조성물을 형성하는데 사용하는 경우, 수화성, 산소 투과성 및 기계적 성질의 매우 유리한 조합을 갖는 물질을 제공하는 친수성 기와 소수성 기의 조합을 제공한다.

[0129] 본원에 포함된 교시 및 기재로부터 당업자가 용이하게 인식하는 바와 같이, 화학식 I 에 따른 본 발명의 신규 화합물은 특히 중합체 물질의 형성을 비롯한 다수의 용도에서 상당한 그리고 매우 바람직한 유용성을 갖는 비교적 반응성 화합물이다. 따라서, 본 발명의 반응성 화합물로부터 제조되는 반응 생성물은 여러가지 구현예에

서, 본 발명의 신규 반응성 화합물이 공지의 화합물과 반응하는 상황에서도, 신규 중합체 물질을 생성할 것으로 생각된다. 따라서, 본 발명의 한가지 양태는 본 발명의 신규 반응성 화합물 중 하나 이상으로부터 형성되는 신규 중합체에 관한 것이다. 본원에서 사용되는 용어 "으로부터 형성되는" 은 임의의 실질적인 부분에서, 본 발명의 화합물 중 임의의 하나 이상을 포함하는 반응에 의해 형성되는 임의의 분자, 마크로머, 올리고머 또는 중합체를 그 의미내에 포함한다.

[0130] 특정의 바람직한 구현예에 따르면, 본 발명은 본 발명에 따른 하나 이상의 신규 화합물로부터 형성되는 하나 이상의 중합체를 포함한다.

[0131] **조성물**

[0132] 본 발명의 한가지 양태는 본 발명의 화합물 중 하나 이상, 바람직하게는 화학식 I 에 따른 하나 이상의 화합물 (상기 화학식 내의 모든 화합물 및 또한 화학식 IA, IB, IC, ID 및 IE 내의 모든 화합물 포함) 및 이들의 임의의 2 종의 조합을 포함하는 조성물에 관한 것이다. 특정의 바람직한 구현예에 있어서, 본 발명의 조성물은 본 발명에 따른 화합물 약 2 중량% 이상, 더욱더 바람직하게는 약 10 중량% 이상을 포함하는 반응성 조성물이다. 특정의 바람직한 구현예에 있어서, 본 발명의 조성물은 본 발명에 따른 화합물 약 50 중량% 이상, 더욱더 바람직하게는 특정의 구현예에서는 화학식 IC 에 따른 화합물 약 40 중량% 이상을 포함한다.

[0133] 특정의 바람직한 구현예에 있어서, 본 발명의 조성물은 바람직하게는 화학식 ID, 더욱 바람직하게는 화학식 ID1 또는 ID2 에 따른 하나 이상의 화합물을 조성물의 약 1 중량% 이상, 더욱 바람직하게는 약 1 내지 약 90 중량%, 더욱 바람직하게는 약 1 내지 약 60 중량%, 더욱더 바람직하게는 약 3 내지 약 55 중량% 의 양으로 포함한다.

[0134] 당업자가 인지하는 바와 같이, 본 발명의 조성물에는, 이의 반응성을 향상시키고 및/또는 조성물이 목적의 반응 생성물의 형성 또는 기타 용도, 특히 목적의 마크로머, 올리고머 및/또는 중합체 물질, 더욱더 바람직하게는 히드로겔의 형성에 적합한 목적의 중합체 물질에 특히 적합하도록, 일반적으로 부가의 화합물 및 작용제가 포함될 것이다. 당업자는 본원에 포함된 교시 및 기재를 고려하여 과도한 실험없이, 공지의 공단량체 및 가교결합체와 같은 기타 작용제를 본 발명의 조성물에 용이하게 채용할 수 있을 것으로 생각되며, 모든 이러한 조성물은 본 발명의 범위내에 포함된다.

[0135] 특히 바람직한 구현예에 있어서, 본 발명의 조성물은 하나 이상의 공-단량체 및/또는 공-마크로머를 바람직하게는 조성물의 약 1 중량% 이상, 더욱 바람직하게는 약 1 내지 약 80 중량%, 더욱더 바람직하게는 약 40 내지 약 70 중량% 의 양으로 포함한다. 본원에서 사용되는 용어 공-단량체 및 공-마크로머는 본 발명에 따른 신규 화합물은 아니지만 조성물에서 단량체 또는 마크로머로서 작용하는 임의의 화합물을 의미한다. 예를 들면, 비제한적으로, 상기 단량체 및/또는 마크로머는 히드록시에틸메타크릴레이트, 디메틸아크릴아미드, N-비닐피롤리돈, 메타크릴산, 글리세롤 모노메타크릴레이트, 및 이들의 조합 중 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0136] **가교결합제**

[0137] 본 발명의 조성물은 하나 이상의 가교결합성 화합물을 바람직하게는 조성물의 약 0.5 중량% 이상, 더욱 바람직하게는 약 0.5 내지 약 10 중량%, 더욱더 바람직하게는 약 0.5 내지 약 5 중량% 의 양으로 포함할 수 있다. 예를 들면, 비제한적으로, 상기 가교결합제는 화학식 IE 에 따른 화합물 및 (메트)아크릴레이트 가교결합제, 예컨대 비제한적으로, 에틸렌글리콜 디메타크릴레이트 (EGDMA), 트리- 및/또는 테트라에틸렌글리콜 디메타크릴레이트 (이들 2 종의 모든 조합 포함) (TEGDMA), 부탄디올 디메타크릴레이트 (BDDMA), (폴리)에틸렌글리콜 디메타크릴레이트 (PEGDMA), 및 이들의 임의의 2 종 이상의 조합 중 하나 이상을 포함할 수 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0138] **실시예**

[0139] 하기의 실시예는 본 발명의 화합물의 구조 및 제조 방법, 및 상기 화합물 및 조성물로부터 본 발명의 중합체 및 유용한 물품의 형성 방법을 설명한다. 하기의 실시예는 단지 설명 목적일 뿐이며, 본 발명의 전체 범위를 제한하는 것은 아니다. 하기의 실시예를 비롯해 본원에 포함된 교시 및 기재를 고려하여, 당업자는 본 발명의 화합물 및 조성물을 용이하게 형성할 수 있으며, 상기 화합물 및 조성물을 이용하여 특히 히드로겔 및 안과용 렌즈와 같은 물품을 비롯한 중합체 물질을 용이하게 형성할 수 있을 것으로 생각된다.

[0140] **실시예 1 - 화학식 IA 에 상응하는 화합물의 합성**

[0141] 오일 버블러에 연결된 가스 배출관, 테프론 교반기 및 에어 분사관이 설치된 200 mL 3목 둥근 바닥 플라스크를

위치시켰다. 이소시아네이트에틸 메타크릴레이트 약 15.5 g, 디부틸 주석 디라우레이트 0.025 g, 2,6-Ditert-부틸-4 메틸 페놀 100 ppm 및 건성 메틸 에틸 케톤 100 g 을 첨가하였다. 플라스크를 건성 질소 분사하에서 약 55 °C 로 가열하였다. 이어서, 건성 에어 분사된 첨가로를 이용하여, 이소프로필리덴 글리세롤 약 15.84 g 을 온도가 약 65 °C 를 초과하지 않도록 하는 속도로 첨가하였다. FTIR 스캔의 2270 cm<sup>-1</sup> 에서 NCO 피크가 존재하지 않으며 디부틸아민 적정을 이용한 NCO 의 말단기 분석이 잔여 NCO 가 < 0.1 % 임을 나타낼 때 반응을 완료하였다. 수득된 혼합물을 MeOH/물 혼합물과 반응시켜 이소프로필리덴기를 가수분해시켰다. 유기층으로부터 용매를 제거하여, R<sup>7</sup> 이 메틸인 화학식 IA1 에 상응하는 단량체 생성물을 수득하였다.

[0142] 실시예 2 - 화학식 IC2 에 상응하는 화합물의 합성

[0143] 오일 버블러에 연결된 가스 배출관, 테프론 교반기 및 에어 분사관이 설치된 250 mL 3목 둥근 바닥 플라스크를 위치시켰다. 이소포론 디이소시아네이트 약 45.6 g, 디부틸 주석 디라우레이트 0.05 g 및 2,6-ditert-부틸-4 메틸 페놀 100 ppm 을 첨가하고, 플라스크를 건성 에어 분사하에서 약 55 °C 로 가열하였다. 이어서, 건성 에어 분사된 첨가로를 이용하여, 글리세롤 모노메타크릴레이트 약 16 g 을 온도가 약 65 °C 를 초과하지 않도록 하는 속도로 첨가하였다. 디부틸아민 적정에 의해 측정된 부가생성물의 % NCO 가 13.8-14.8 % 가 될 때까지 반응을 계속하였다. 이어서, 상기 부가생성물에 이소프로필리덴 글리세롤 약 29.04 g 을 첨가하고, FTIR 스캔이 2270 cm<sup>-1</sup> 에서 NCO 피크의 완전한 부재를 나타내며 디부틸아민 적정을 이용한 NCO 의 말단기 분석이 잔여 NCO 가 < 0.1 % 임을 나타낼 때까지 약 65 °C 에서 반응을 계속하였다. 이 혼합물에 메틸 에틸 케톤 약 100 g, amberlyst 15 수지 9 g 및 물 5 mL 를 첨가하고, FTIR 스캔이 1371 cm<sup>-1</sup> 에서 이소프로필기의 완전한 소멸을 나타낼 때까지 혼합물을 실온 (약 25 °C) 에서 교반하였다. 수득된 혼합물을 MeOH/물 혼합물로 추출하고, 유기층으로부터 용매를 제거하여, 각 ne 및 nf 가 1 이고 R<sup>7</sup> 이 메틸이며 각 R<sup>22</sup> 및 각 R<sup>21</sup> 이 H 인 화학식 IC2 에 따른 화합물을 수득하였다.

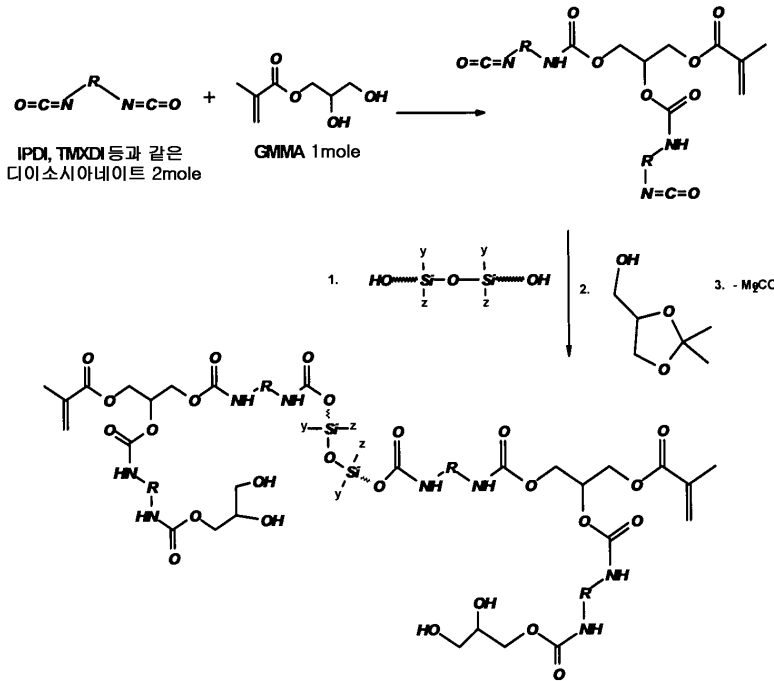
[0144] 실시예 3 - 화학식 IB2 에 상응하는 화합물의 합성

[0145] 건성 톨루엔 약 50 g 및 이소시아네이트에틸 메타크릴레이트 약 31 g, 디부틸 주석 디라우레이트 0.025 g, 2,6-ditert-부틸-4 메틸 페놀 100 ppm 을 CaCl<sub>2</sub> 건조관, 응축기 및 자석 교반기가 설치된 250 mL 3목 RB-플라스크에 장입하였다. 이어서, 알릴 알코올 약 5.8 g 을 임의의 발열 온도가 약 75 °C 를 초과하지 않도록 하는 속도로 적하하였다. FTIR 스캔이 2270 cm<sup>-1</sup> 에서 NCO 피크를 나타내지 않을 때까지 약 60 °C 에서 반응을 계속하였다. 이어서, FTIR 스캔이 2130 cm<sup>-1</sup> 에서 SiH 피크를 나타내지 않을 때까지, 건성 액체를 Karstedt 촉매 (크실렌 중 0.1 molar, 300 μL) 존재하에 65 °C 에서 트리스(트리메틸실록시)실란 29.6 g 과 반응시켰다. 수득된 혼합물을 MeOH/물 혼합물로 추출하고, 유기층으로부터 용매를 제거하여, 화학식 IB2 에 따른 실록산 함유 단량체를 수득하였다.

[0146] 실시예 4 - 화학식 ID1 에 상응하는 화합물의 합성

[0147] 오일 버블러에 연결된 가스 배출관, 테프론 교반기 및 에어 분사관이 설치된 250 mL 3목 둥근 바닥 플라스크에 이소포론 디이소시아네이트 45.6 g, 디부틸 주석 디라우레이트 0.05 g 및 2,6-Ditert-부틸-4 메틸 페놀 100 ppm 을 넣었다. 플라스크를 건성 에어 분사하에서 55 °C 로 가열하였다. 이어서, 건성 에어 분사된 첨가로를 이용하여, 글리세롤 모노메타크릴레이트 16 g 을 온도가 65 °C 를 초과하지 않도록 하는 속도로 첨가하였다. 디부틸아민 적정에 의해 측정된 부가생성물의 % NCO 가 13.8-14.8 % 가 될 때까지 반응을 계속하였다. 이어서, 상기 부가생성물에 Shin-Etsu 사의 α, ω-히드록시프로필-말단화 폴리디메틸실록산 KF-6001 (평균 몰 중량 2000 g/mol) 100 g (0.05 mole) 및 건성 톨루엔 100 g 을 첨가하고, 반응 혼합물에 대해 FTIR 스캔이 3400 cm<sup>-1</sup> 에서 히드록실 피크의 부재를 나타내며 디부틸아민 적정을 이용한 NCO 의 말단기 분석이 % NCO 가 2.5 내지 3.0 임을 나타낼 때까지 65 °C 에서 반응을 계속하였다. 이어서, 반응 혼합물에 이소프로필리덴 글리세롤 13.2 g 을 첨가하고, FTIR 스캔이 2270 cm<sup>-1</sup> 에서 NCO 피크의 완전한 부재를 나타내며 디부틸아민 적정을 이용한 NCO 의 말단기 분석이 잔여 NCO 함량이 < 0.1 % 임을 나타낼 때까지 65 °C 에서 반응을 계속하였다. 이 혼합물에 Amberlyst 15 수지 9 g 및 물 5 mL 를 첨가하고, FTIR 스캔이 1371 cm<sup>-1</sup> 에서 이소프로필기의 완전한 소멸을 나타낼 때까지 혼합물을 실온 (25 °C) 에서 교반하였다. 수득된 혼합물을 MeOH/물 혼합물로 추출하고, 유기층으로부터 용매를 제거하여, 화학식 ID 에 따른 하기 구조를 갖는 화합물을 수득하였다. 임의

의 특정한 이론에 구애됨이 없이, 하기 반응식 (하기 반응식에서 각 Y 및 Z 는 독립적으로 화학식 I 과 관련해 상기에서 X 로 정의한 치환기에 해당한다) 에 따라서 화학식 ID1 에 따른 화합물이 형성되는 것으로 생각된다:



[0148]

[0149] 실시예 5 - 화학식 ID2 에 상응하는 화합물의 합성

[0150] 오일 버블리에 연결된 가스 배출관, 교반기 및 에어 분사관이 설치된 3목 둥근 바닥 플라스크에 이소포론 다이 소시아네이트 45.6 g (0.205 mol), 디부틸 주석 디라우레이트 0.1 g 및 2,6-Ditert-부틸-4 메틸 페놀 100 ppm 을 넣었다. 플라스크를 건성 에어 분사하에서 55 °C 로 가열하였다. 이어서, 건성 에어 분사된 첨가료를 이용하여, 실시예 1 로부터의 글리세롤 모노메타크릴레이트 16 g (0.10 mol) 을 온도가 65 °C 를 초과하지 않도록 하는 속도로 첨가하였다. 디부틸아민 적정에 의해 측정된 부가생성물의 % NCO 가 13.8-14.8 % 가 될 때까지 반응을 계속하였다. 이어서, 상기 부가생성물에 Solvay Solexis Inc. 사의 디히드록실 관능성 퍼플루오로폴리에테르 Fomblin. RTM. ZDOL 2000 (평균 몰 중량 약 2000 g/mol) 100 g 및 건성 톨루엔 100 g 을 첨가하고, 반응 혼합물에 대해 FTIR 스캔이 3400 cm<sup>-1</sup> 에서 히드록실 피크의 부재를 나타내며 디부틸아민 적정을 이용한 NCO 의 말단기 분석이 잔여 % NCO 가 2.5 내지 3.0 임을 나타낼 때까지 65 °C 에서 반응을 계속하였다.

이어서, 반응 혼합물에 이소프로필리텐 글리세롤 13.2 g 을 첨가하고, FTIR 스캔이 2270 cm<sup>-1</sup> 에서 NCO 피크의 완전한 부재를 나타내며 디부틸아민 적정을 이용한 NCO 의 말단기 분석이 잔여 NCO 가 < 0.1 % 임을 나타낼 때까지 65 °C 에서 반응을 계속하였다. 이 혼합물에 Amberlyst 15 수지 9 g 및 물 5 mL 를 첨가하고, FTIR 스캔이 1371 cm<sup>-1</sup> 에서 이소프로필기의 소멸을 나타낼 때까지 반응 혼합물을 실온 (25 °C) 에서 교반하였다.

수득된 혼합물을 MeOH/물 혼합물로 추출하고, 유기층으로부터 용매를 제거하여, 화학식 ID2 에 따른 불소화 실리콘 히드록겔 마크로머를 수득하였다.

[0151] 실시예 6 - 화학식 I 의 실록산 가교결합체의 합성

[0152] 건성 톨루엔 50 g 및 이소시아네이트에틸 메타크릴레이트 31 g, 디부틸 주석 디라우레이트 0.025 g, 2,6-Ditert-부틸-4 메틸 페놀 100 ppm 을 CaCl<sub>2</sub> 건조관, 응축기 및 자석 교반기가 설치된 250 mL 3목 RB-플라스크에 장입하였다. 이어서, 1-알릴옥시-2,3-프로판디올 13.6 g 을 임의의 발열 온도가 75 °C 를 초과하지 않도록 하는 속도로 적하하였다. FTIR 스캔이 2270 cm<sup>-1</sup> 에서 NCO 피크를 나타내지 않을 때까지 60 °C 에서 반응을 계속하였다.

이어서, FTIR 스캔이 2130 cm<sup>-1</sup> 에서 SiH 피크를 나타내지 않을 때까지, 건성 액체를 Karstedt 촉매 (크실렌 중 0.1 molar, 300 μL) 존재하에 65 °C 에서 트리스(트리메틸실록시)실란 29.6 g 과 반응시켰다.

수득된 혼합물을 MeOH/물 혼합물로 추출하고, 유기층으로부터 용매를 제거하여, ma 가 1 이고, na 가 1 이며 R<sup>50</sup> 이 R<sup>50B</sup> 이고, nb 가 1 이며 R<sup>51</sup> 이 R<sup>51A</sup> 이고, 각 nc 가 1 이며, 하나의 R<sup>55</sup> 가 -O- 이고 다른 R<sup>55</sup> 가 R<sup>55A</sup> 이

며 c 가 1 이고, 하나의 R<sup>60</sup> 이 R<sup>60B</sup> 이며 ne 가 3 이고 각 X 가 -O-Si-R<sup>7</sup> 이며, 다른 R<sup>60</sup> 이 R<sup>60A</sup> 이고 nb 가 1 이며 R<sup>4</sup> 가 C2 알킬이고, R<sup>7</sup> 및 R<sup>21</sup> 이 H 인 화학식 I 에 따른 실록산 가교결합제 (하기 표 1 에서 화학식 IE1 로서 확인됨) 를 획득하였다.

[0153] 본 발명의 조성물 및 화합물은 히드로겔, 특히 콘택트 렌즈에 사용하기 위한 히드로겔의 제조에 유용하며, 더욱 더 바람직하게는 의료 기기의 친수성이 요구되는 히드로겔을 제조하기 위한 단량체로서 유용하다.

[0154] 본 발명의 단량체 및 마크로머는 히드로겔을 형성하기 위한 공지의 단량체와 중합하여 진기한 성질을 갖는 히드로겔을 제공할 수 있다. 하기 표는 본 발명에 따른 조성물의 몇가지 예를 제공한다. 상기 조성물은, 비제한적으로 아조비스이소부티로니트릴과 같은 열 중합 개시제 또는 비제한적으로 2-히드록시-2-메틸-1-페닐-프로판-1-온 (Ciba Specialty Chemicals 사의 상품명 Darocur 1173) 과 같은 광 개시제를 이용하여, 가열 또는 UV 및/또는 가시광 또는 이의 조합을 이용해 중합된다.

표 1

[0155]

히드로겔 중합체 제형									
생성물	1	2	3	4	5	6	7	8	9
IA1	30								8
IB2		55				55	55	55	35
IC2			20						10
ID1				50			20		15
ID2					50			20	15
IE1						3	3	3	3
TEGDMA	2	2	2						
HEMA	3.4	4.4	4.4						
TRIS	50	10	56	30	30	25			4
DMA	14	28	17	19.4	19.4	16.4	21.4	21.4	9.4
Darocur 1173	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
합계	100	100	100	100	100	100	100	100	100
IA1 (실시예 1) 히드로겔 형성 디히드록시 우레탄 모노메타크릴레이트 IB2 (실시예 3) 실록산 관능성 우레탄 모노메타크릴레이트 IC2 (실시예 2) 히드로겔 형성 테트라히드록시 우레탄 모노메타크릴레이트 ID1 (실시예 4) 히드로겔 형성 테트라히드록시 실리콘 우레탄 디메타크릴레이트 마크로머 ID2 (실시예 5) 히드로겔 형성 테트라히드록시 불소화 우레탄 디메타크릴레이트 마크로머 IE1 (실시예 6) 실록산 관능성 우레탄 디메타크릴레이트 가교결합제 Darocur 1173 2-히드록시-2-메틸-1-페닐-프로판-1-온, Ciba Specialty Chemicals 사의 광개시제 TEGDMA 트리에틸렌글리콜 디메타크릴레이트 HEMA 2-히드록시에틸 메타크릴레이트 DMA N,N-디메틸아크릴아미드									

[0156] 히드로겔의 수분 함량, 산소 투과성, 및 탄성 계수, 신율 및 인장 강도와 같은 기계적 성질은 공지의 히드로겔 단량체 및 마크로머의 비율을 변화시킴으로써 광범위하게 변화될 수 있다. 상기 히드로겔 중합체의 제형에는 요구되는 수분 함량, 산소 투과성 및 물성을 갖는 히드로겔 중합체를 제공할 수 있다. 상기 특성들의 조합은 본 발명의 단량체 또는 마크로머로부터 형성되는 히드로겔을 많은 히드로겔 실용 분야에서 유용하게 한다.