

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第3区分

【発行日】平成24年10月18日(2012.10.18)

【公表番号】特表2012-511067(P2012-511067A)

【公表日】平成24年5月17日(2012.5.17)

【年通号数】公開・登録公報2012-019

【出願番号】特願2011-538923(P2011-538923)

【国際特許分類】

C 08 G 77/46 (2006.01)

C 08 G 65/336 (2006.01)

【F I】

C 08 G 77/46

C 08 G 65/336

【手続補正書】

【提出日】平成24年8月30日(2012.8.30)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

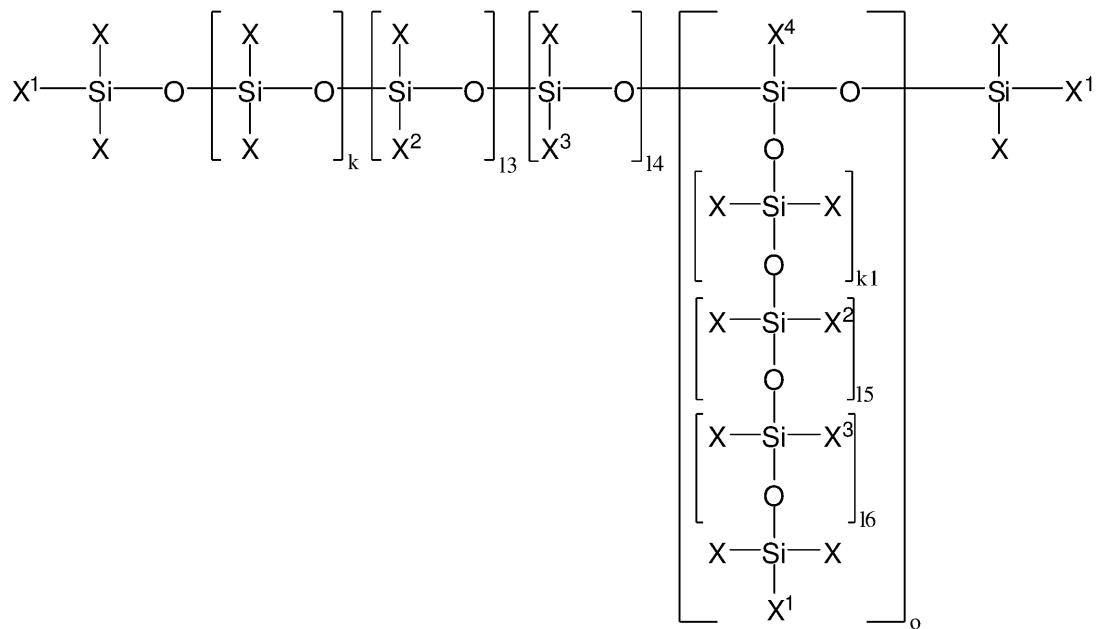
【請求項1】

アルコキシシリル官能性ポリエーテルシロキサンまたはこのようなポリエーテルシロキサンの混合物。

【請求項2】

式(I)を有する請求項1に記載のアルコキシシリル官能性ポリエーテルシロキサンまたはこのようなポリエーテルシロキサンの混合物

【化1】



(I)

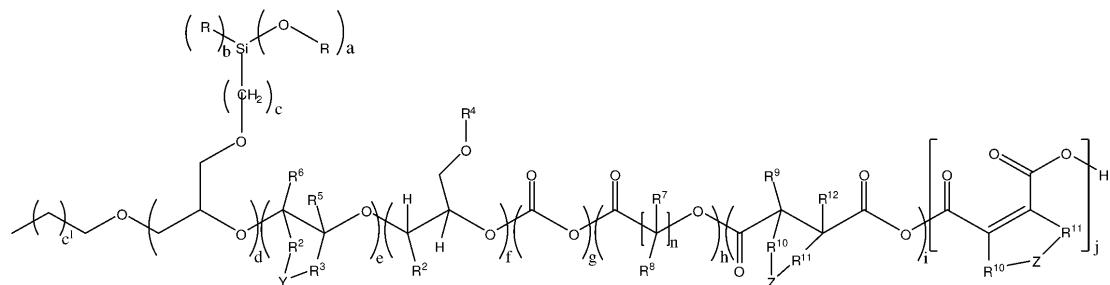
[式中、

$X$  は、場合によっては酸素、窒素、リンまたは硫黄などのヘテロ原子を含有してもよい、炭素原子数 1 ~ 20 の直鎖状、環状、または分枝状、脂肪族または芳香族、飽和または不飽和の炭化水素基であり、

$X^1$  は、 $X$ 、 $X^2$  または  $X^3$  であり、

$X^2$  は、OH 官能性の、任意選択エステルまたはカーボネートで変性されている、アルコキシリル基を有する式 (Ia) のポリオキシアルキレン基であり、

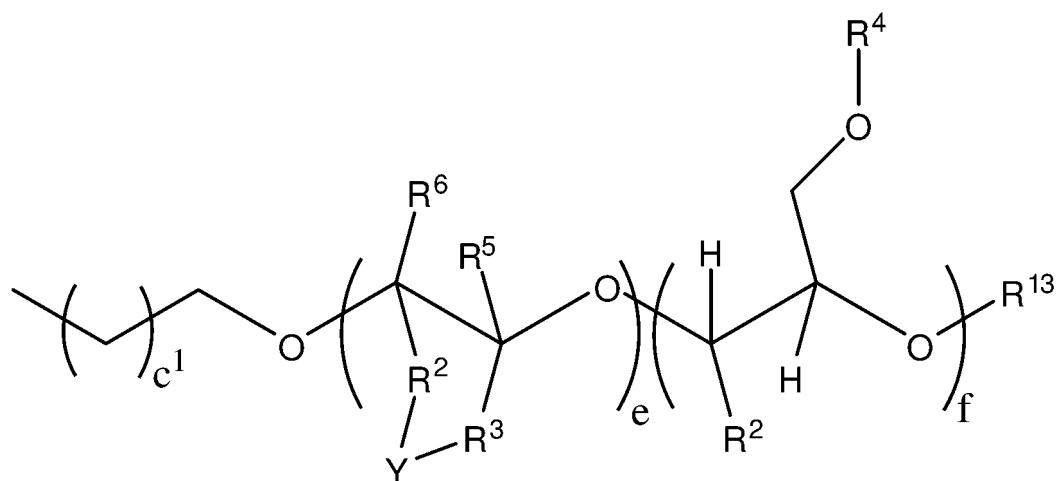
【化 2】



(Ia)

$X^3$  は、末端がエーテル化されている式 (Ib) のポリオキシアルキレン基であり、

【化 3】

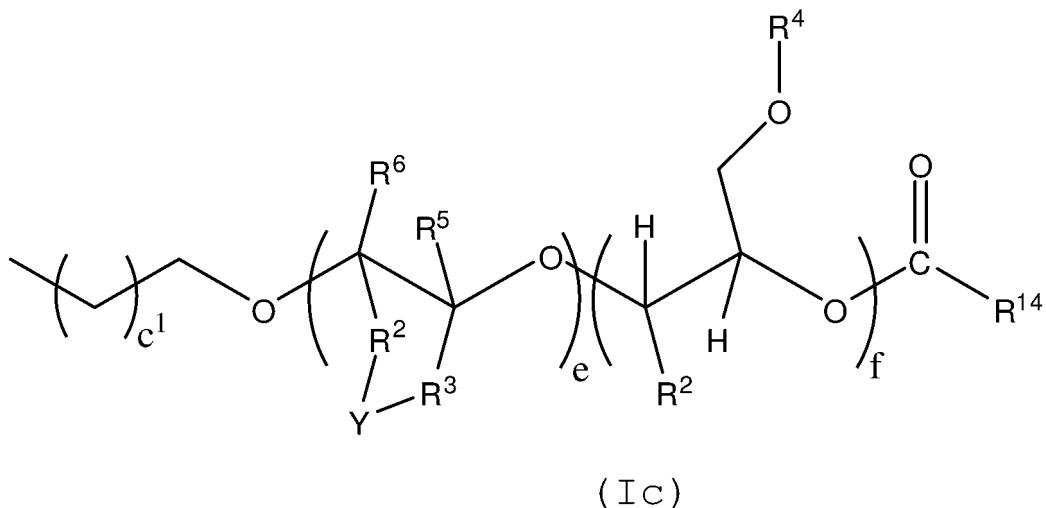


(Ib)

式中、

$R^{1-3}$  は、炭素原子数 1 ~ 18 のアルキル基であるか、または、一官能性カルボン酸で末端がエーテル化されている式 (Ic) のポリオキシアルキレン基であり、

## 【化4】

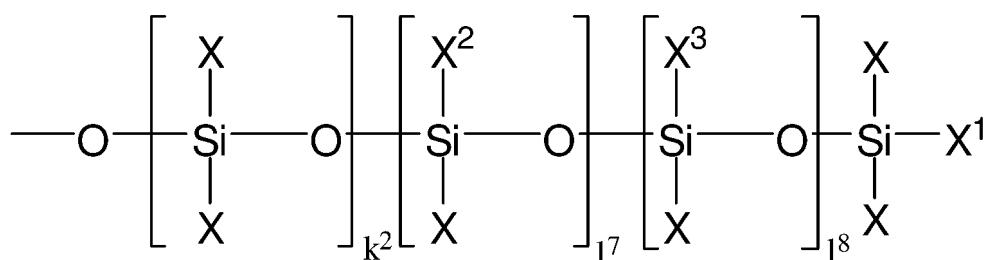


式中、

$R^{1-4}$  は、OH基を有してもよい、炭素原子数1～30の飽和または一不飽和もしくは多不飽和、直鎖状または分枝状、脂肪族または芳香族の炭化水素基であり、

$X^{1-4}$  は、 $X^1$  または式(I d)のフラグメントに対応し、

## 【化5】



(Id)

式中、

$k$ 、 $k^1$  および  $k^2$  は、各々、互いに独立して、0～500の整数であり、  
 $l^3$ 、 $l^4$ 、 $l^5$ 、 $l^6$ 、 $l^7$  および  $l^8$  は、各々、互いに独立して、0～60の整数であり、

$o$  は、0～10の整数であり、

但し、

$X^1$  は、 $l^3$ 、 $l^5$  および  $l^7$  の合計がゼロである場合、少なくとも1回は  $X^2$  と同一であり、

$X^1$  が  $X^2$  と同一でない場合、 $l^3$ 、 $l^5$  および  $l^7$  の合計は少なくとも1であり、

式中、

$a$  は、1～3の整数であり、

$b$  は、0～2の整数であり、

$a$  と  $b$  の合計は、3であり、

$c$  は、0～24の整数であり、

$c^1$  は、0～24の整数であり、

$d$  は、1～500の整数であり、

e は、 0 ~ 5 0 0 0 の整数であり、

n は、 2 ~ 8 の整数であり、

f、 g、 h、 i および j は、 各々、 0 ~ 5 0 0 の整数であり、

但し、 指数 d ~ j を有するフラグメントは、 互いに自由に並べ替えられてもよく、 即ち、 ポリエーテル鎖内の配列が互いに入れ替えられてもよく、 指数 d ~ j を有するフラグメントの様々なモノマー単位は、 ブロック状に配列されていてもよいし、 またはランダムに分布していてもよく、

但し、 指数 k、  $k^1$ 、  $k^2$ 、  $l^3$ 、  $l^4$ 、  $l^5$ 、  $l^6$ 、  $l^7$ 、  $l^8$  および o を有するフラグメントは、 互いに自由に並べ替えられてもよく、 即ち、 シロキサン鎖内で互いに入れ替えられてもよく、 場合によっては、 ランダムに分布していてもよいし、 またはブロック状に配列されていてもよく、

R は、 炭素原子数 1 ~ 2 0 の直鎖状もしくは分枝状、 飽和、 一不飽和もしくは多不飽和のアルキル基、 または炭素原子数 1 ~ 2 0 のハロアルキル基の中から選択される 1 つ以上の同一のまたは異なる基であり、

R<sup>2</sup> または R<sup>3</sup> および R<sup>5</sup> または R<sup>6</sup> は同一であるか、 または、 各々、 互いに独立して、 H、 または、 飽和、 もしくは、 任意選択で一不飽和もしくは多不飽和、 さらに置換された、 1 倍もしくは多価の炭化水素基であり、 ここで、 R<sup>5</sup> 基および R<sup>6</sup> 基は、 各々、 1 倍の炭化水素基であり、 前記炭化水素基 R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、 フラグメント Y により脂環式架橋されていてもよく； Y は、 存在しなくてもよく、 または 1 個もしくは 2 個のメチレン単位を有するメチレン架橋であり； Y が 0 の場合、 R<sup>2</sup> または R<sup>3</sup> は、 各々、 互いに独立して、 炭素原子数 1 ~ 2 0 、 好ましくは 1 ~ 1 0 の直鎖状または分枝状の基であり、 さらに置換されていてもよく、 ハロゲン、 ヒドロキシル基またはグリシジルオキシプロピル基などの官能基を有してもよく、

R<sup>4</sup> は、 芳香族基または脂環式基に結合していてもよい炭素原子数 1 ~ 1 8 の直鎖状または分枝状アルキル基であり、

R<sup>7</sup> および R<sup>8</sup> は、 互いに独立して、 水素、 アルキル基、 アルコキシ基、 アリール基またはアラルキル基であり、

R<sup>9</sup>、 R<sup>10</sup>、 R<sup>11</sup> および R<sup>12</sup> は、 互いに独立して、 水素、 アルキル基、 アルケニル基、 アルコキシ基、 アリール基、 またはアラルキル基であり、 前記炭化水素基は、 フラグメント Z で脂環式架橋または芳香族架橋されていてもよく、 Z は、 2 倍のアルキレン基であってもよいし、 またはアルケニレン基であってもよい】。

### 【請求項 3】

ポリエーテル鎖が、 各々、 SiC 結合によりポリシロキサン主鎖に結合している、 式 (I) のアルコキシリル官能基を有する請求項 1 に記載のポリエーテルシロキサンの形態の櫛型に分枝した共重合体。

### 【請求項 4】

o が 0 (ゼロ) であり、  $l^3 = l^4 = 0$  (ゼロ) 、 および  $X^1 = X^2 =$  アルコキシリルポリエーテル基である、 請求項 2 に記載の Si - C 結合を有する直鎖状ポリエーテル - シロキサン - ポリエーテルトリブロック共重合体。

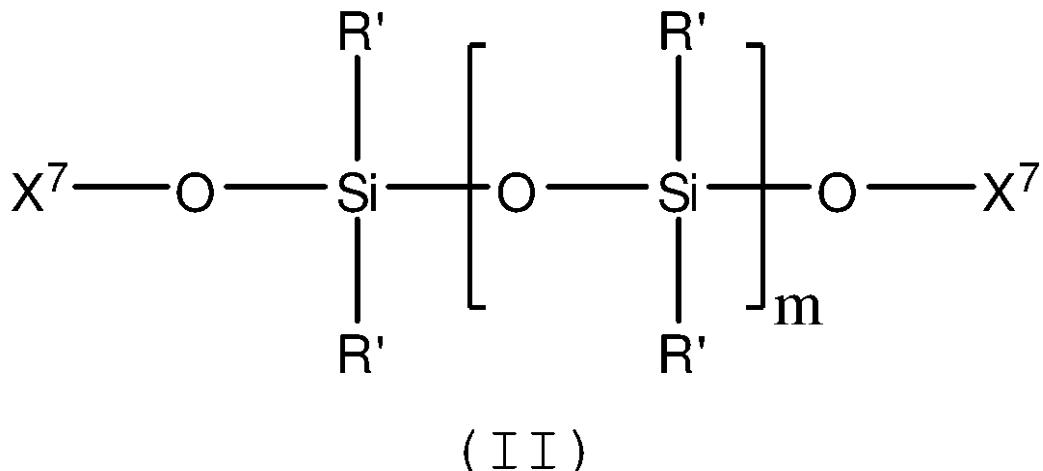
### 【請求項 5】

o が 0 (ゼロ) ではなく、  $l^3 = l^4 = 0$  (ゼロ) 、  $l^5 = l^6 = 0$  (ゼロ) 、 および  $X^1 = X^2 =$  アルコキシリルポリエーテル基である、 請求項 2 に記載の Si - C 結合を有する分枝状ポリエーテル - シロキサン - ポリエーテルブロック共重合体。

### 【請求項 6】

アルコキシリル基を有するポリエーテル鎖がシロキサン体に Si - O - C 結合により結合している、 式 (II) の直鎖状ポリエーテル - シロキサン - ポリエーテルトリブロック共重合体

## 【化6】



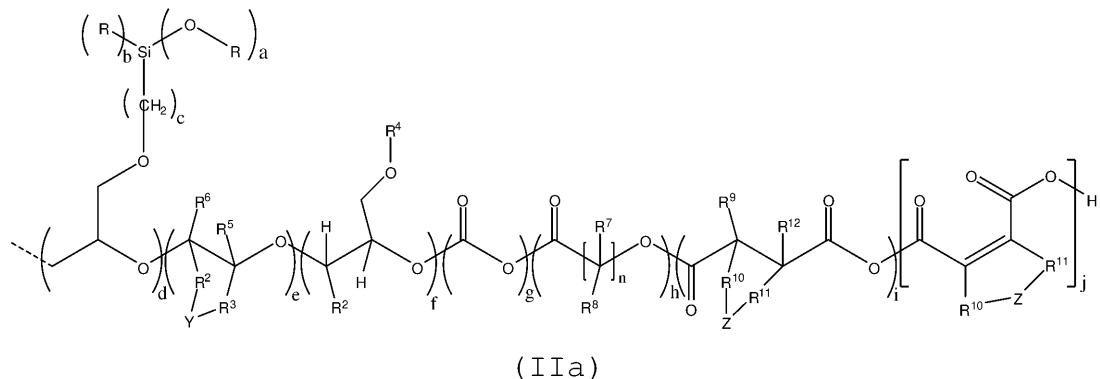
[式中、

$\text{R}'$  は、1つ以上の同一のまたは異なる、炭素原子数1~20の直鎖状または分枝状、飽和、一不飽和または多不飽和のアルキル基に対応し、

$\text{m}$  は、0~5000の整数であり、

$\text{X}^7$  は、式(IIa)のポリエーテルフラグメントに対応し、

## 【化7】



置換基  $\text{R}$ 、 $\text{R}^2$ ~ $\text{R}^{12}$ 、 $\text{Y}$  基および  $\text{Z}$  基、ならびに指数  $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $d$ 、 $e$ 、 $f$ 、 $g$ 、 $h$ 、 $i$ 、 $j$  および  $n$  は、式(Ia)の化合物について前述した定義に対応する]。

## 【請求項7】

ポリエーテルシロキサンまたはシラノールが、DMC触媒を用いてアルコキシリル基を有するエポキシドでアルコキシリル化されることを特徴とする、請求項1~6のいずれか1項に記載のアルコキシリル官能性ポリエーテルシロキサンおよびその混合物の製造方法。

## 【請求項8】

$\text{SiH}$  基を有する水素シロキサンと、アルコキシリル基を有する不飽和ポリエーテルとを遷移金属触媒を用いて  $\text{SiC}$  結合させることによる、請求項1~6のいずれか1項に記載のアルコキシリル官能性ポリエーテルシロキサンおよびその混合物の製造方法。

## 【請求項9】

前記シロキサン骨格を保持して行われる、請求項8に記載のアルコキシリル官能性ポリエーテルシロキサンの製造方法。

## 【請求項 10】

式(Ⅰ)のアルコキシシリル官能性ポリエーテルシロキサンおよびその混合物が、  
a)複合金属シアン化物触媒を用いたシリコーンポリエーテル共重合体のエポキシ官能性  
アルコキシシリランでのアルコキシリル化

および／または

b) DMC触媒を用いて対応する不飽和開始剤化合物をエポキシ官能性アルコキシシリラン  
でアルコキシリル化することによって予め得られた、アルコキシシリル基を有する不飽和ポ  
リエーテルのヒドロシリル化結合

によって得られる、請求項7に記載のアルコキシシリル官能性ポリエーテルシロキサンの  
製造方法。

## 【請求項 11】

複合金属シアン化物触媒を用いてシリコーンポリエーテル共重合体をエポキシ官能性アル  
コキシシリランでアルコキシリル化することによる、式(Ⅰ)のアルコキシシリル官能性ポ  
リエーテルシロキサンおよびその混合物を製造するための請求項10に記載の方法。

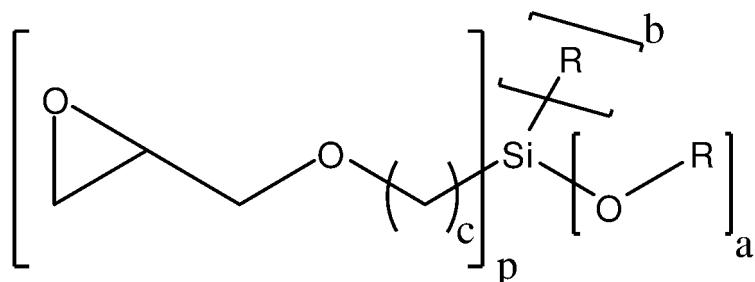
## 【請求項 12】

DMC触媒を用いて対応する不飽和開始剤化合物をエポキシ官能性アルコキシシリランで  
アルコキシリル化することによって製造されるアルコキシシリル基を有する不飽和ポリエ  
ーテルをヒドロシリル化結合することによる、式(Ⅰ)のアルコキシシリル官能性ポリエ  
ーテルシロキサンおよびその混合物を製造するための請求項10に記載の方法。

## 【請求項 13】

少なくとも1種類のアルキレンオキサイド、グリシジル化合物、ラクトンおよび／または  
環状無水物または式(ⅡⅡ)のエポキシ官能性アルコキシシリラン

## 【化8】



(ⅡⅡ)

(式中、指数a、bおよびc、ならびにR基は、式(Ⅰa)について定義された意味を有し、pは、差4-a-bに相当する整数である)

を、開始剤化合物として機能する前記ポリエーテルシロキサン系のOHを有し、シロキサン結合を有するまたは遊離したポリエーテルに開環付加することを特徴とする、式(Ⅰ)のアルコキシシリル官能性ポリエーテルシロキサンおよびその混合物を製造するための請求項10に記載の方法。

## 【請求項 14】

3-グリシジルオキシプロピルトリメトキシシリラン、3-グリシジルオキシプロピルト  
リエトキシシリラン、3-グリシジルオキシプロピルトリプロポキシシリラン、3-グリシジ  
ルオキシプロピルトリイソプロポキシシリラン、ビス(3-グリシジルオキシプロピル)ジ  
メトキシシリラン、ビス(3-グリシジルオキシプロピル)ジエトキシシリラン、3-グリシ  
ジルオキシヘキシルトリメトキシシリラン、3-グリシジルオキシヘキシルトリエトキシ  
シリラン、3-グリシジルオキシプロピルメチルジメトキシシリラン、3-グリシジルオキシプロ  
ピルエチルジエトキシシリランが、式(ⅡⅡ)のエポキシド官能性アルコキシシリランと

して使用されることを特徴とする、請求項 1 3 に記載の方法。

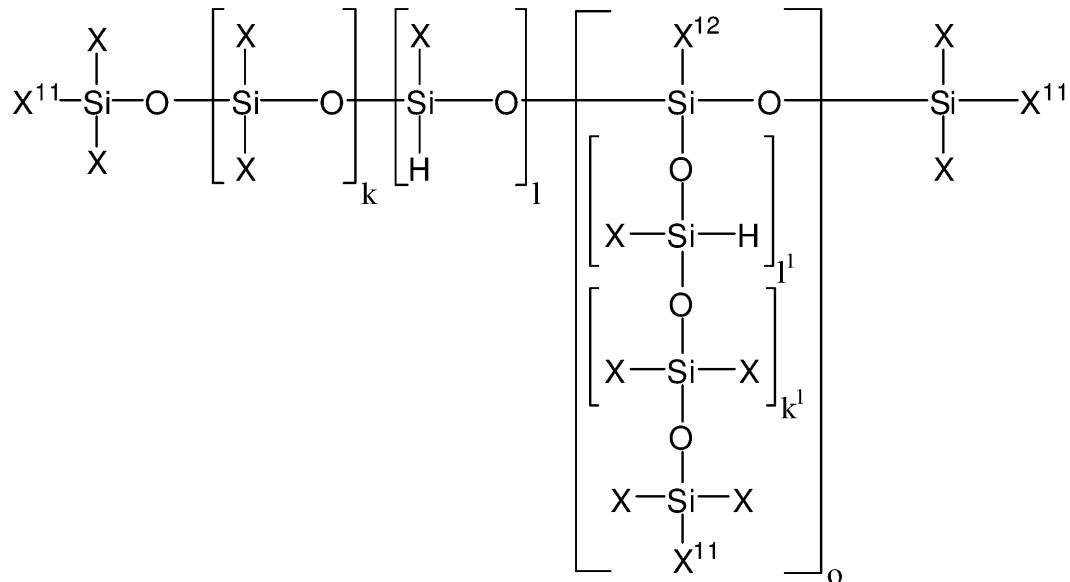
【請求項 1 5】

アルコキシシリル基を有する不飽和ポリエーテルを水素シロキサンとヒドロシリル化結合させることを特徴とする、式 (I) のアルコキシシリル官能性ポリエーテルシロキサンおよびその混合物を製造するための請求項 1 0 に記載の方法。

【請求項 1 6】

式 (XI) の水素シロキサンおよびその混合物

【化 9】



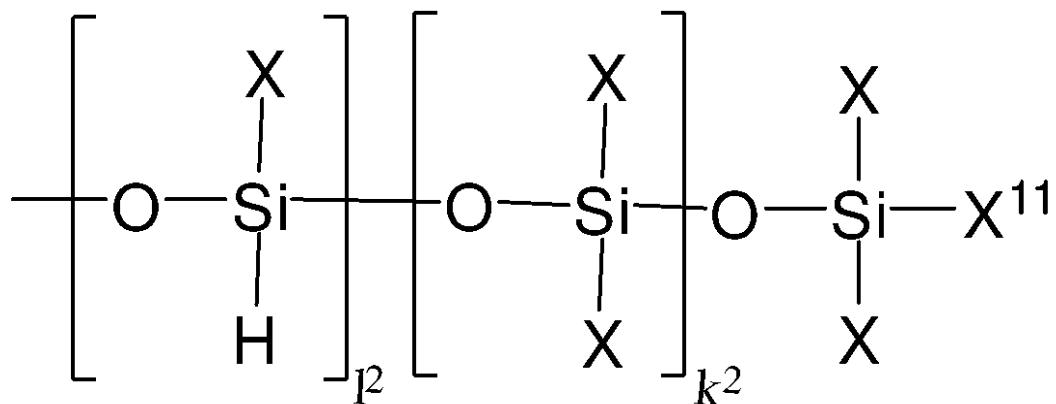
(XI)

〔式中、

$X^{11}$  は、 $X$  または  $H$  であり、

$X^{12}$  は、 $X^{11}$  または式 (XIa) のフラグメントに対応し、

【化 1 0】



(XIa)

式中、

$k$ 、 $k^1$ 、 $k^2$ 、および $\circ$ は、式(I)について前述した意味を有し、  
 $l$ 、 $l^1$ 、 $l^2$ は、各々、互いに独立して、0～120、好ましくは0～60、特に0～50の整数であり、

但し、 $l$ 、 $l^1$ および $l^2$ の合計が0の場合、 $X^{11}$ は少なくとも1回は水素であり、  
但し、 $X^{11}$ がXの場合、 $l$ 、 $l^1$ および $l^2$ の合計は少なくとも1である]  
を特徴とする、請求項15に記載の方法。

【請求項17】

請求項1～6のいずれか1項に記載のアルコキシリル官能性ポリエーテルシロキサンを使用して製造されるポリマー物品。

【請求項18】

請求項1～6のいずれか1項に記載のアルコキシリル官能性ポリエーテルシロキサンを使用して製造される硬化性組成物。

【請求項19】

界面活性剤、接着剤、シーラントおよび結合剤、充填剤、助剤および添加剤、乳化剤、湿潤剤および分散剤、ポリマー添加剤、表面コーティング用のレベリング剤、潤滑剤として、三次石油回収用の助剤として、繊維、ヤーンまたはシート状のテキスタイル製品を柔軟化するためのテキスタイル助剤として、消泡剤として、化粧品添加剤として、および泡安定剤、特にポリウレタンフォームの安定剤として使用される、請求項1～6のいずれか1項に記載のアルコキシリル官能性ポリエーテルシロキサンを含有する組成物。

【請求項20】

コーティング、プラスチックの押出、接着、ポリマーの安定化、湿潤、消泡、乳化、分散および/または表面改質に適した方法での使用のための、溶媒中に溶解される、請求項1～6のいずれか1項に記載のアルコキシリル官能性ポリエーテルシロキサンを含有する組成物。