

【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 2 区分
【発行日】令和 3 年 2 月 12 日 (2021.2.12)

【公表番号】特表 2020-520972 (P2020-520972A)
【公表日】令和 2 年 7 月 16 日 (2020.7.16)
【年通号数】公開・登録公報 2020-028
【出願番号】特願 2019-564914 (P2019-564914)
【国際特許分類】

C 0 7 F 7/18 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 F 7/18 C S P W

【誤訳訂正書】
【提出日】令和 2 年 12 月 24 日 (2020.12.24)
【誤訳訂正 1】
【訂正対象書類名】明細書
【訂正対象項目名】0 1 2 1
【訂正方法】変更
【訂正の内容】
【 0 1 2 1 】

【表 1】

表1

成分	単位	C1	C2	C3	I1	I2	I3	I4
NR	phr	20	20	20	20	20	20	20
SSBR	phr	80	80	80	80	80	80	80
TDAE	phr	35	35	35	35	35	35	35
シリカ ^{a)} + TESPD ^{b)}	phr	98.4	99.4	100.5	-	-	-	-
シリカ ^{a)} + シラン(IV) ^{c)}	phr	-	-	-	102.7	105.2	107.8	-
シリカ ^{a)} + シラン(V) ^{d)}	phr	-	-	-	-	-	-	107.8
別の添加剤 ^{e)}	phr	9	9	9	9	9	9	9
促進剤 ^{f)}	phr	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
硫黄	phr	2	2	2	2	2	2	2
性質								
S50	MPa	1.1	1.2	1.2	1.4	1.5	1.9	1.8
S100	MPa	1.9	1.9	2.0	2.3	2.6	3.1	3.0
S200	MPa	3.9	4.0	4.2	4.7	5.8	6.3	6.1
S300	MPa	6.3	6.6	7.0	7.6	9.6	10.1	9.7
S400	MPa	9.0	9.2	9.9	10.8	13.4	13.8	13.3
E' (6%)	MPa	8.5	9.5	8.3	10.1	10.5	11.6	10.9
E' (0.15%)	MPa	17.0	18.7	16.0	21.5	21.6	24.9	29.8
硬度RT	Sh A	71.4	71.9	71.5	75	77.9	79	79.7
反発弾性RT	%	17.4	17.4	18	15.8	16.6	15.8	25.4

なお、本願は、特許請求の範囲に記載の発明に関するものであるが、他の態様として以下も包含し得る。

1. 式 I) :

$I) (R^1)_o Si - R^2 - HNC(=O)NH - A - HNC(=O) - A - S_k - A - C(=O)NH - A - NHC(=O) - R^2 - Si(R^1)_o$

(式中、o は、1、2 又は 3 であり得、及び k は、2 以上の整数であり、及びシリル基 (R^1)、 Si - 中及び分子の両側の基 R^1 は、同一又は異なり得、且つ 1 ~ 10 個の炭素原子を有するアルコキシ基、4 ~ 10 個の炭素原子を有するシクロアルコキシ基、6 ~ 20 個の炭素原子を有するフェノキシ基、6 ~ 20 個の炭素原子を有するアリール基、1 ~ 10 個の炭素原子を有するアルキル基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルケニル基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルキニル基、7 ~ 20 個の炭素原子を有するアラルキル基、ハライド又はアルキルポリエーテル基 - $O - (R^6 - O)_r - R^5$ から選択され、ここで、 R^6 は、同一又は異なり、且つ分岐又は非分岐、飽和又は不飽和、脂肪族、芳香族又は混合脂肪族 / 芳香族の二価の $C_{1 \sim 30}$ 炭化水素基、好ましくは $-CH_2 - CH_2 -$ であり、r は、1 ~ 30、好ましくは 3 ~ 10 の整数であり、及び R^5 は、非置換又は置換、分岐又は非分岐の一価のアルキル基、アルケニル基、アリール基又はアラルキル基、好ましくは $-C_{1 \sim 3}H_{2 \sim 7}$ アルキル基であるか、又は

2 つの R^1 は、2 ~ 10 個の炭素原子を有する環状ジアルコキシ基を形成し、ここで、o

は、 < 3 であるか、又は

前記式 I) の 2 つ以上のシランは、基 R^1 を介してカップリングされることが可能であり

基 R^2 は、1 ~ 20 個の炭素原子を有する直鎖若しくは分岐アルキル基、又は 4 ~ 12 個の炭素原子を有するシクロアルキル基、又は 6 ~ 20 個の炭素原子を有するアリール基、又は 2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルケニル基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルキニル基、又は 7 ~ 20 個の炭素原子を有するアラルキル基であり、分子中の基 A は、同一又は異なり得、且つ芳香族基であり、前記シランは、前記式 I) のシランの加水分解及び縮合を通して形成されるオリゴマーの形態で存在することもできる)

のシランを調製する方法であって、少なくとも以下の方法ステップ：

a) 物質 (R^1)、 $Si - R^2 - HNC(=O)NH - A - NH_2$ を提供するステップ

b) 物質 $HOC(=O) - A - S_2 - A - C(=O)OH$ を提供するステップ、

c) ステップ b) からの前記物質を活性化させるステップであって、前記物質を、有機溶媒中に懸濁し、そして触媒の存在下で活性化剤を用いて反応させて $ClC(=O) - A - S_2 - A - C(=O)Cl$ を形成する、ステップ、

d) 少なくとも 2 当量の、ステップ a) から前記物質を、1 当量の、ステップ a) からの前記物質と有機溶媒中で反応させることは、ステップ c) からの物質の溶液と室温で接触され、且つ次に攪拌され、それによって前記式 I) のシランを得るステップ、

e) 任意選択的に、ステップ d) で得られた前記式 I) の前記シランを精製するステップを含む方法。

2. ステップ a) の前記物質は、有機溶媒中のジアミノ置換芳香族 $H_2N - A - NH_2$ をイソシアナト官能性シラン (R^1)、 $Si - R^2 - NCO$ と反応させることによって提供される、上記 1 に記載の方法。

3. ステップ b) の前記物質は、芳香族チオール $HOC(=O) - A - SH$ の有機溶媒中におけるヨウ素の存在下での酸化によって提供される、上記 1 又は 2 に記載の方法。

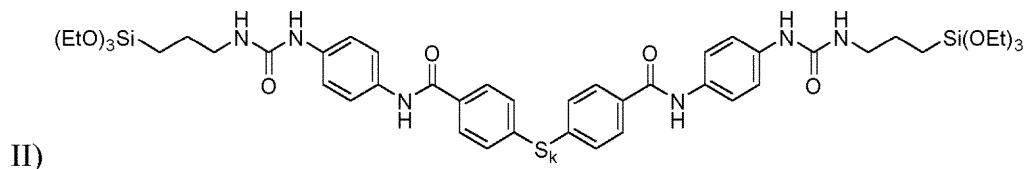
4. 前記芳香族基 A は、フェニル基、ナフチル基、ピリジル基、ピリダジル基、ピリミジル基、ピラジル基、トリアジル基、キノリル基、ピロール基、フラン基、チオフェン基、ピラゾール基、イミダゾール基、チアゾール基及びオキサゾール基からなる群から選択される、上記 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の方法。

5. 前記基 R^1 は、1 ~ 6 個の炭素原子を有するアルキル基、又は 1 ~ 6 個の炭素原子を有するアルコキシ基、又はハライドである、上記 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の方法。

6. 前記基 R^2 は、2 ~ 8 個の炭素原子を有する直鎖若しくは分岐アルキル基又は 4 ~ 8 個の炭素原子を有するシクロアルキル基である、上記 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の方法。

7. 前記式 I) の前記調製されるシランは、以下の式 II)：

【化 10】

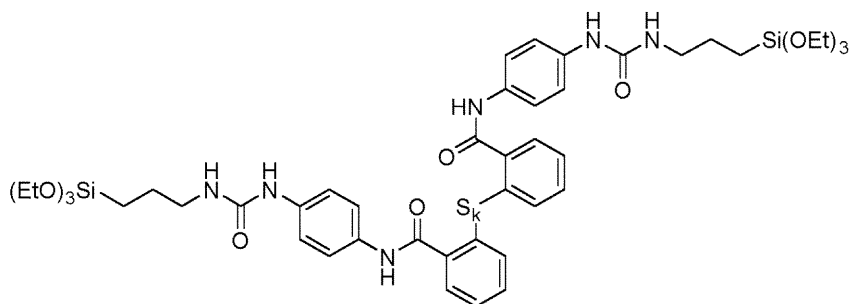


II)

を有する、上記 1 ~ 6 のいずれか一項に記載の方法。

8. 前記式 I) の前記調製されるシランは、以下の式 III)：

【化 1 1】



III)

を有する、上記 1 ～ 7 のいずれか一項に記載の方法。

9. k は、2 ～ 8 の整数であり、硫化は、さらなる方法ステップ s) における元素硫黄の添加を通して行われ、それにより、3 以上の k が得られる、上記 1 ～ 8 のいずれか一項に記載の方法。

10. 上記 1 ～ 9 のいずれか一項に記載の方法によって調製されるシラン。

11. 上記 1 ～ 9 のいずれか一項に記載のように調製された少なくとも 1 つのシランで改質されるシリカを調製する方法であって、少なくとも以下の方法ステップ：

f) 方法ステップ d) 又は e) で得られた前記精製シランを有機溶媒中に溶解させるステップ、

g) 少なくとも 1 つのシリカをステップ f) からの溶液と接触させ、且つその後、得られた懸濁液を好ましくは 30 分 ～ 18 時間にわたって攪拌するステップ、

h) 得られた前記変性シリカを乾燥させるステップを含む方法。

12. 上記 11 に記載の方法によって調製される変性シリカ。

【誤訳訂正 2】

【訂正対象書類名】特許請求の範囲

【訂正対象項目名】全文

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式 I)：

I) (R¹)_o Si - R² - HNC (= O) NH - A - HNC (= O) - A - S_k - A - C (= O) NH - A - NHC (= O) NH - R² - Si (R¹)_o。

(式中、o は、1、2 又は 3 であり得、及び k は、2 ～ 10 の整数であり、及びシリル基 (R¹)_o Si - 中及び分子の両側の基 R¹ は、同一又は異なり得、且つ 1 ～ 10 個の炭素原子を有するアルコキシ基、4 ～ 10 個の炭素原子を有するシクロアルコキシ基、6 ～ 20 個の炭素原子を有するフェノキシ基、6 ～ 20 個の炭素原子を有するアリール基、1 ～ 10 個の炭素原子を有するアルキル基、2 ～ 20 個の炭素原子を有するアルケニル基、2 ～ 20 個の炭素原子を有するアルキニル基、7 ～ 20 個の炭素原子を有するアラルキル基、ハライド又はアルキルポリエーテル基 - O - (R⁶ - O)_r - R⁵ から選択され、ここで、R⁶ は、同一又は異なり、且つ分岐又は非分岐、飽和又は不飽和、脂肪族、芳香族又は混合脂肪族 / 芳香族の二価の C₁ ～ C₃₀ 炭化水素基、好ましくは - CH₂ - CH₂ - であり、r は、1 ～ 30、好ましくは 3 ～ 10 の整数であり、及び R⁵ は、非置換又は置換、分岐又は非分岐の一価のアルキル基、アルケニル基、アリール基又はアラルキル基、好ましくは - C₁₃H₂₇ アルキル基であるか、又は

2 つの R¹ は、2 ～ 10 個の炭素原子を有する環状ジアルコキシ基を形成し、ここで、o は、< 3 であるか、又は

前記式 I) の 2 つ以上のシランは、基 R¹ を介してカップリングされることが可能であり、

基 R^2 は、1～20個の炭素原子を有する直鎖若しくは分岐アルキル基、又は4～12個の炭素原子を有するシクロアルキル基、又は6～20個の炭素原子を有するアリール基、又は2～20個の炭素原子を有するアルケニル基、2～20個の炭素原子を有するアルキニル基、又は7～20個の炭素原子を有するアラルキル基であり、分子中の基 A は、同一又は異なり得、且つフェニル基、ナフチル基、ピリジル基、ピリダジル基、ピリミジル基、ピラジル基、トリアジル基、キノリル基、ピロール基、フラン基、チオフェン基、ピラゾール基、イミダゾール基、チアゾール基及びオキサゾール基からなる群から選択される芳香族基であり、前記シランは、前記式 I) のシランの加水分解及び縮合を通して形成されるオリゴマーの形態で存在することもできる)

のシランを調製する方法であって、少なくとも以下の方法ステップ：

a) 有機溶媒中のジアミノ置換芳香族 $H_2N-A-NH_2$ をイソシアナト官能性シラン $(R^1)_3Si-R^2-NCO$ と反応させることによって、物質 $(R^1)_3Si-R^2-NHC(=O)NH-A-NH_2$ を提供するステップ、

b) 芳香族チオール $HO-C(=O)-A-SH$ の有機溶媒中におけるヨウ素の存在下での酸化によって、物質 $HO-C(=O)-A-S_2-A-C(=O)OH$ を提供するステップ、

c) ステップ b) からの前記物質を活性化させるステップであって、前記物質を、有機溶媒中に懸濁し、そして触媒の存在下で活性化剤を用いて反応させて $Cl-C(=O)-A-S_2-A-C(=O)Cl$ を形成し、ここで前記活性化剤は塩化オキサリル及び塩化チオニルから選択されるステップ、

d) 少なくとも2当量の、ステップ a) からの前記物質を、1当量の、ステップ c) からの前記物質と反応させ、この場合、有機溶媒中のステップ a) からの物質の溶液をステップ c) からの物質の溶液に室温で接触させ、そして次に攪拌し、それによって前記式 I) のシランを得るステップ、

e) 任意選択的に、ステップ d) で得られた前記式 I) の前記シランを精製するステップ

を含む方法。

【請求項 2】

前記基 R^1 は、1～6個の炭素原子を有するアルキル基、又は1～6個の炭素原子を有するアルコキシ基、又はハライドである、請求項 1 に記載の方法。

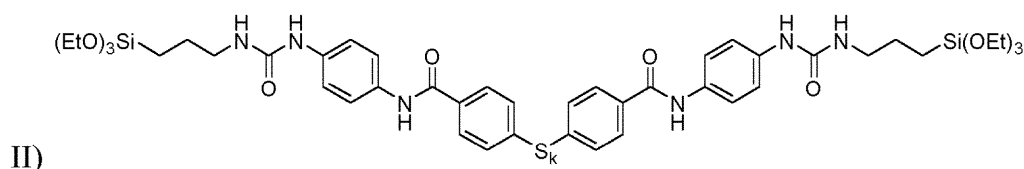
【請求項 3】

前記基 R^2 は、2～8個の炭素原子を有する直鎖若しくは分岐アルキル基又は4～8個の炭素原子を有するシクロアルキル基である、請求項 1 または 2 に記載の方法。

【請求項 4】

前記式 I) の前記調製されるシランは、以下の式 II)：

【化 1】

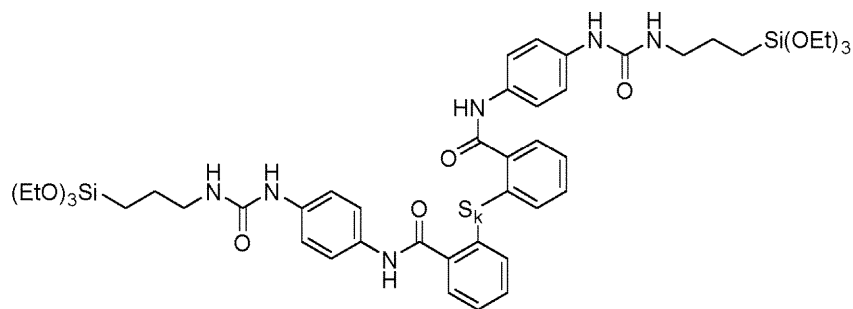


を有する、請求項 1～3 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 5】

前記式 I) の前記調製されるシランは、以下の式 III)：

【化 2】



III)

を有する、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 6】

k は、2 ~ 8 の整数であり、硫化は、さらなる方法ステップ s) における元素硫黄の添加を通して行われ、それにより、3 以上の k が得られる、請求項 1 ~ 5 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 7】

式 I) で表されるシラン：

$\text{I) } (\text{R}^1)_o \text{Si} - \text{R}^2 - \text{HNC}(=\text{O})\text{NH} - \text{A} - \text{HNC}(=\text{O}) - \text{A} - \text{S}_k - \text{A} - \text{C}(=\text{O})\text{NH} - \text{A} - \text{NH} - \text{C}(=\text{O})\text{NH} - \text{R}^2 - \text{Si}(\text{R}^1)_o$

(式中、o は、1、2 又は 3 であり得、及び k は、2 ~ 10 の整数であり、及びシリル基 $(\text{R}^1)_o \text{Si}$ - 中及び分子の両側の基 R^1 は、同一又は異なり得、且つ 1 ~ 10 個の炭素原子を有するアルコキシ基、4 ~ 10 個の炭素原子を有するシクロアルコキシ基、6 ~ 20 個の炭素原子を有するフェノキシ基、6 ~ 20 個の炭素原子を有するアリール基、1 ~ 10 個の炭素原子を有するアルキル基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルケニル基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルキニル基、7 ~ 20 個の炭素原子を有するアラルキル基、ハライド又はアルキルポリエーテル基 - $\text{O} - (\text{R}^6 - \text{O})_r - \text{R}^5$ から選択され、ここで、 R^6 は、同一又は異なり、且つ分岐又は非分岐、飽和又は不飽和、脂肪族、芳香族又は混合脂肪族 / 芳香族の二価の C_{1-30} 炭化水素基、好ましくは $-\text{CH}_2 - \text{CH}_2 -$ であり、r は、1 ~ 30、好ましくは 3 ~ 10 の整数であり、及び R^5 は、非置換又は置換、分岐又は非分岐の一価のアルキル基、アルケニル基、アリール基又はアラルキル基、好ましくは $-\text{C}_{1-3}\text{H}_{2-7}$ アルキル基であるか、又は 2 つの R^1 は、2 ~ 10 個の炭素原子を有する環状ジアルコキシ基を形成し、ここで、o は、< 3 であるか、又は 前記式 I) の 2 つ以上のシランは、基 R^1 を介してカップリングされることが可能であり、

基 R^2 は、1 ~ 20 個の炭素原子を有する直鎖若しくは分岐アルキル基、又は 4 ~ 12 個の炭素原子を有するシクロアルキル基、又は 6 ~ 20 個の炭素原子を有するアリール基、又は 2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルケニル基、2 ~ 20 個の炭素原子を有するアルキニル基、又は 7 ~ 20 個の炭素原子を有するアラルキル基であり、分子中の基 A は、同一又は異なり得、且つフェニル基、ナフチル基、ピリジル基、ピリダジル基、ピリミジル基、ピラジル基、トリアジル基、キノリル基、ピロール基、フラン基、チオフェン基、ピラゾール基、イミダゾール基、チアゾール基及びオキサゾール基からなる群から選択される芳香族基であり、前記シランは、前記式 I) のシランの加水分解及び縮合を通して形成されるオリゴマーの形態で存在することもできる)。

【請求項 8】

請求項 1 ~ 6 のいずれか一項に記載のように調製された少なくとも 1 つのシランで改質されるシリカを調製する方法であって、少なくとも以下の方法ステップ：

f) 方法ステップ d) 又は e) で得られた前記精製シランを有機溶媒中に溶解させるステップ、

g) 少なくとも 1 つのシリカをステップ f) からの溶液と接触させ、且つその後、得ら

れた懸濁液を好ましくは30分～18時間にわたって攪拌するステップ、
h) 得られた前記変性シリカを乾燥させるステップ
を含む方法。

【請求項9】

請求項8に記載の方法によって調製される変性シリカ。