



(19)
Bundesrepublik Deutschland
Deutsches Patent- und Markenamt



(10) DE 05 764 566 T1 2008.11.06

(12)

Veröffentlichung der Patentansprüche

der europäischen Patentanmeldung mit der
(97) Veröffentlichungsnummer: **1 773 849**
in deutscher Übersetzung (Art. II § 2 Abs. 1 IntPatÜG)
(86) PCT-Aktenzeichen: **PCT/US2005/023597**
(96) Europäisches Aktenzeichen: **05 764 566.5**
(87) PCT-Veröffentlichungs-Nr.: **WO 2006/014367**
(86) PCT-Anmeldetag: **01.07.2005**
(87) Veröffentlichungstag
der PCT-Anmeldung: **09.02.2006**
(97) Veröffentlichungstag
der europäischen Anmeldung: **18.04.2007**
(46) Veröffentlichungstag der Patentansprüche
in deutscher Übersetzung: **06.11.2008**

(51) Int Cl.⁸: **C07F 7/06 (2006.01)**
C07F 7/12 (2006.01)
C07F 7/18 (2006.01)
C08G 77/06 (2006.01)
C08G 77/18 (2006.01)
C08G 77/26 (2006.01)
C08G 77/30 (2006.01)

(30) Unionspriorität:

585416 P 02.07.2004 US
645429 P 20.01.2005 US

(71) Anmelder:

Honeywell International Inc., Morristown, N.J., US

(72) Erfinder:

KNEPPER, Jeffrey A., Branchburg, NJ 08876, US;
GEENEN, Jacques, Madison, NJ 07840, US;
ASIRVATHAM, Edward, Chatham, NJ 07928-2266,
US; WASSMAN-WILKEN, Suzanne, 30173
Hannover, DE

(74) Vertreter:

derzeit kein Vertreter bestellt

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen

(54) Bezeichnung: **FUNKTIONALISIERTE SILIZIUMVERBINDUNGEN**

(57) Hauptanspruch: Verfahren zur Herstellung einer funktionalisierten Carbosiliciumverbindung, bei dem man in Gegenwart eines Hydrosilylierungskatalysators und unter hydrosilylierungsfördernden Bedingungen
a. einen Siliciumreaktanten mit mindestens einer silanfunktionellen Gruppe (Si-H-funktionellen Gruppe) und gegebenenfalls mindestens einem hydrolysierbaren Substituenten und
b. einen funktionalisierten Olefinreaktanten mit:
(i) mindestens einer endständigen oleinfunktionellen Gruppe;
(ii) einem Alkylensegment, das an die endständige oleinfunktionelle Gruppe gebunden ist und
(iii) einer tertiären Kohlenstoffgruppierung, die an das Alkylensegment gebunden ist und eine zweite funktionelle Gruppe und zwei Alkylengruppen, die die Reaktivität der zweiten funktionellen Gruppe bei der Hydrosilylierung des funktionellen Olefinreaktanten verringern, enthält; in Berührung bringt.

Patentansprüche

1. Verfahren zur Herstellung einer funktionalisierten Carbosiliciumverbindung, bei dem man in Gegenwart eines Hydrosilyierungskatalysators und unter hydrosilyierungsfördernden Bedingungen

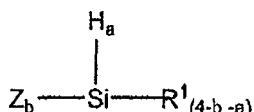
- einen Siliciumreaktanten mit mindestens einer silanfunktionellen Gruppe (Si-H-funktionellen Gruppe) und gegebenenfalls mindestens einem hydrolysierbaren Substituenten und
- einen funktionalisierten Olefinreaktanten mit:
 - mindestens einer endständigen oleinfunktionellen Gruppe;
 - einem Alkylensegment, das an die endständige oleinfunktionelle Gruppe gebunden ist und
 - einer tertiären Kohlenstoffgruppierung, die an das Alkylensegment gebunden ist und eine zweite funktionelle Gruppe und zwei Alkylengruppen, die die Reaktivität der zweiten funktionellen Gruppe bei der Hydrosilylierung des funktionellen Olefinreaktanten verringern, enthält;

in Berührung bringt.

2. Verfahren zur Herstellung einer funktionalisierten Carbosiliciumverbindung, bei dem man in Gegenwart eines Hydrosilyierungskatalysators unter hydrosilyierungsfördernden Bedingungen einen Siliciumreaktanten der Struktur I mit einem ungesättigten Olefinreaktanten der Struktur III in Berührung bringt, wobei

die Verbindung der Struktur I die Formel:

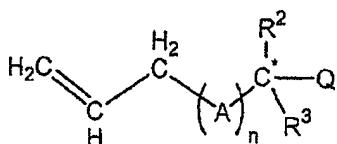
Struktur I



aufweist, worin „a“ für 1, 2 oder 3 steht und „b“ für 0, 1, 2 oder 3 steht, wobei diese Variablen so gewählt sind, daß „a“ + „b“ kleiner oder gleich 4 ist,
 „Z“ für einen hydrolysierbaren Substituenten steht;
 „R¹“ unabhängig voneinander aus der Gruppe bestehend aus (i) auf Silicium basierenden Gruppierungen aus der Gruppe bestehend aus Carbosilanen, Siloxanen, Carbosiloxanen und polymeren Vertretern davon, die gegebenenfalls an einem oder mehreren Siliciumatomen durch eine oder mehrere hydrolysierbare funktionelle Gruppen substituiert sind, und (ii) gesättigten oder ungesättigten, linearen, verzweigten oder cyclischen, aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffgruppierungen, die gegebenenfalls an einem beliebigen Kohlenstoffatom durch ein oder mehrere Glieder, die jeweils unabhängig voneinander aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Hydroxyl-, Alkoxy- und Halogengruppierungen ausgewählt sind, substituiert sind, ausgewählt ist; wobei mehrere Substituenten R¹ Teile einer Cyclosiloxanstruktur sein können;

und die Verbindung der Struktur III die Formel:

Struktur III



aufweist, worin

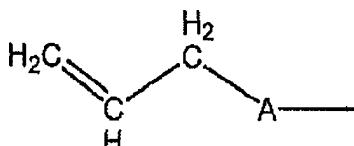
„n“ für 0 oder 1 steht,

„Q“ für eine zweite funktionelle Gruppe steht, die dadurch gekennzeichnet ist, daß sie ein wesentliches Potential zur Erschwerung einer Hydrosilylierungsreaktion hat,

„A“ unter $-\text{[CH}_2\text{]}_c\text{-S-}\text{[CH}_2\text{]}_d$, $-\text{[CH}_2\text{]}_c\text{-O-}\text{[CH}_2\text{]}_d$ oder $-\text{[CH}_2\text{]}_c\text{-N(R}^4\text{)-}\text{[CH}_2\text{]}_d$, worin „c“ für eine ganze Zahl einschließlich 0 steht, „d“ für mindestens 1 steht und R⁴ für eine Alkylgruppierung mit weniger als drei Kohlenstoffatomen steht, ausgewählt ist,

R² aus der Gruppe bestehend aus gesättigten oder ungesättigten, linearen, verzweigten oder cyclischen, aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffgruppierungen und einer Gruppierung der Struktur der Struktur IV:

Struktur IV



ausgewählt ist und

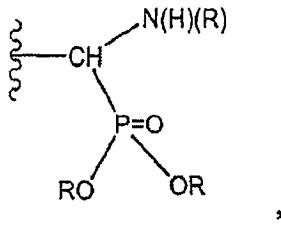
R³ aus der Gruppe bestehend aus gesättigten oder ungesättigten, linearen, verzweigten oder cyclischen, aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffgruppierungen ausgewählt ist, mit der Maßgabe, daß nur einer der Reste R³ und R⁴ für eine ungesättigte Gruppierung steht.

3. Verfahren nach Anspruch 2, bei dem Z aus der Gruppe bestehend aus Alkoxy, Halogen, Hydrid, Ketoximino, Dialkylamino, Acetamid, Alkylthio, N,N-Dialkylaminoxy, Benzamid, Acyloxy und Enoxy ausgewählt ist.

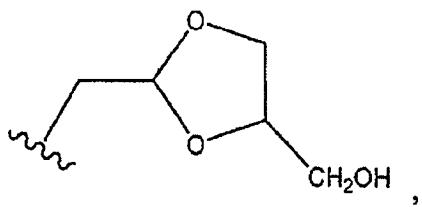
4. Verfahren nach Anspruch 3, bei dem Z aus der Gruppe bestehend aus Chlorid, Methoxy und Ethoxy ausgewählt ist.

5. Verfahren nach Anspruch 2, bei dem Q aus der Gruppe bestehend aus Aldehyd, Ester, Amido, Epoxid, Amino, Aminomethylbenzylamin, Säurehalogenid, linearen und cyclischen Säureanhydriden, Mercapto, Acrylaten, Methylacrylaten, Carbamido, Hydroxyl, alpha- und beta-Hydroxsäuren, fluorsubstituiertem Arylketon, Nitril, Imino, Isocyanat, Carbonsäure, Ureido, Fluorphenoxy, Aminophenoxyphenyl,

Schiff-Base, Maleinimid und funktionellen Gruppen der folgenden Strukturen:

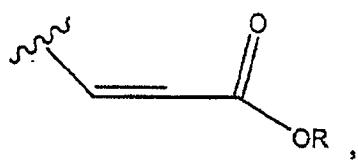


10. Verfahren nach Anspruch 1, bei dem man als funktionalisierten Olefinreaktanten 2,2-Dimethyl-4-pentenal verwendet.

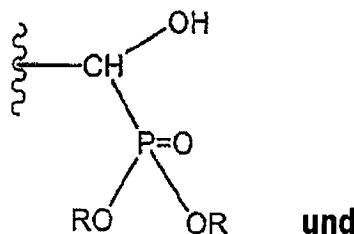


11. Verfahren nach Anspruch 1, bei dem man als Siliciumreaktanten ein Siloxan mit einer durchschnittlichen Struktur mit einem linearen Teil mit acht Dimethylsiloxan-Strukturwiederholungseinheiten, zwei Methylsiloxan-Strukturwiederholungseinheiten und zwei Trimethylsilan-Endverkappungseinheiten verwendet.

12. Verfahren nach Anspruch 1, bei dem man als Siliciumreaktanten Tetramethyldisiloxan und als funktionalisierten Olefinreaktanten 2,2-Dimethyl-4-penten-1-nitril verwendet.



13. Verfahren nach Anspruch 1, bei dem man als Siliciumreaktanten Tetramethyldisiloxan und als funktionalisierten Olefinreaktanten 2,2-Dimethyl-4-penten-1-nitril verwendet.



14. Verfahren nach Anspruch 1, bei dem man den Siliciumreaktanten aus der Gruppe bestehend aus Trimethoxsilan und Triethoxsilan auswählt.

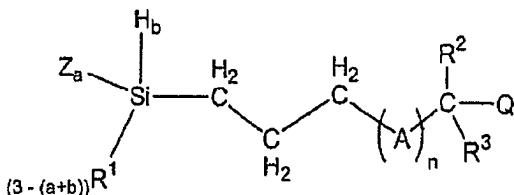
15. Carbosiliciumverbindung, hergestellt nach dem Verfahren gemäß Anspruch 1.

16. Carbosiliciumverbindung nach Anspruch 2, bei der es sich um ein Carbosilan handelt.

17. Carbosiliciumverbindung nach Anspruch 2, bei der es sich um ein Carbosiloxan handelt.

18. Verbindung mit der Struktur der Struktur V:

Struktur V



worin

„a“ und „b“ für ganze Zahlen einschließlich null stehen, die unabhängig voneinander so gewählt sind, daß „a“ + „b“ kleiner oder gleich 3 ist;

„Z“ für einen hydrolysbaren Substituenten steht;

„Q“ für eine funktionelle Gruppe steht, die dadurch gekennzeichnet ist, daß sie ein wesentliches Potential zur Erschwerung einer Hydrosilylierungsreaktion hat;

„A“ unter $-[CH_2]_c-S-[CH_2]_d$, $-[CH_2]_c-O-[CH_2]_d$ oder $-[CH_2]_c-N(R^4)-[CH_2]_d$, worin „c“ für eine ganze Zahl einschließlich 0 steht, „d“ für mindestens 1 steht und R^4 für eine Alkylgruppierung mit weniger als drei Kohlenstoffatomen steht, ausgewählt ist; „n“ für 0 oder 1

worin R für verzweigtes, geradkettiges oder cyclisches C₁- bis C₆-Alkyl oder Aryl steht, ausgewählt ist.

6. Verfahren nach Anspruch 5, bei dem Q aus der Gruppe bestehend aus Aldehyd, Nitril, Amino und Imino ausgewählt ist.

7. Verfahren nach Anspruch 1, bei dem R³ für Phenyl steht.

8. Verfahren nach Anspruch 1, bei dem man als Siliciumreaktanten ein chlorfunktionalisiertes Monosilan verwendet.

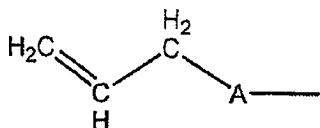
9. Verfahren nach Anspruch 8, bei dem man die Siliciumreaktantverbindung aus der Gruppe bestehend aus Trichlorsilan, Methyldichlorsilan und Dimethylchlorsilan auswählt.

steht,

„R¹“ unabhängig voneinander aus der Gruppe bestehend aus (i) auf Silicium basierenden Gruppierungen aus der Gruppe bestehend aus Carbosilanen, Siloxanen, Carbosiloxanen und polymeren Vertretern davon, die gegebenenfalls an einem oder mehreren Siliciumatomen durch eine oder mehrere hydrolysierbare funktionelle Gruppen substituiert sind, und (ii) gesättigten oder ungesättigten, linearen, verzweigten oder cyclischen, aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffgruppierungen, die gegebenenfalls an einem beliebigen Kohlenstoffatom durch ein oder mehrere Glieder, die jeweils unabhängig voneinander aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Hydroxyl-, Alkoxy- und Halogengruppierungen ausgewählt sind, substituiert sind, ausgewählt ist; wobei mehrere Substituenten R¹ Teile einer Cyclosiloxanstruktur sein können;

„R²“ aus der Gruppe bestehend aus gesättigten oder ungesättigten, linearen, verzweigten oder cyclischen, aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffgruppierungen und einer Gruppierung der Struktur der Struktur IV:

Struktur IV



ausgewählt ist und

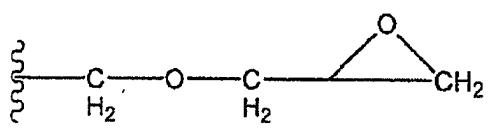
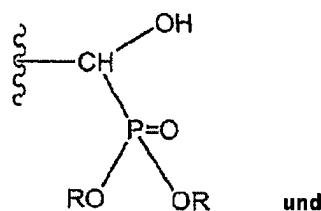
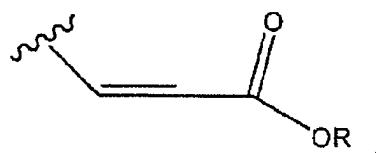
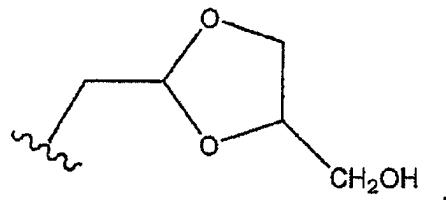
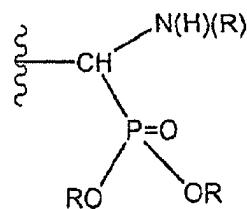
R³ aus der Gruppe bestehend aus gesättigten oder ungesättigten, linearen, verzweigten oder cyclischen, aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffgruppierungen ausgewählt ist,

mit der Maßgabe, daß nur einer der Reste R³ und R⁴ für eine ungesättigte Gruppierung steht.

19. Verbindung nach Anspruch 18, bei der Z aus der Gruppe bestehend aus Alkoxy, Halogen, Hydrid, Ketoximino, Dialkylamino, Acetamid, Alkylthio, N,N-Dialkylaminoxy, Benzamid, Acyloxy und Enoxy ausgewählt ist.

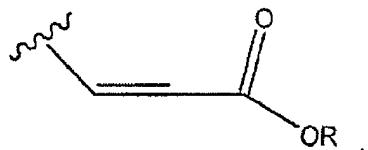
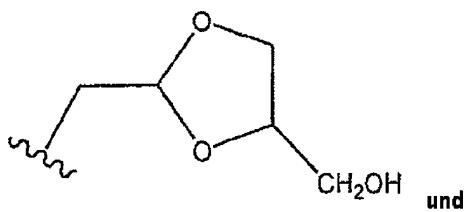
20. Verbindung nach Anspruch 19, bei der Z aus der Gruppe bestehend aus Chlorid, Methoxy und Ethoxy ausgewählt ist.

21. Verbindung nach Anspruch 18, bei der Q aus der Gruppe bestehend aus Aldehyd, Ester, Amido, Epoxid, Amino, Aminomethylbenzylamin, Säurehalogenid, linearen und cyclischen Säureanhydriden, Mercapto, Acrylaten, Methylacrylaten, Carbamido, Hydroxyl, alpha- und beta-Hydroxysäuren, fluorsubstituiertem Arylketon, Nitril, Imino, Isocyanat, Carbonsäure, Ureido, Fluorphenoxy, Aminophenoxyphenyl, Schiff-Base, Maleinimid und funktionellen Gruppen der folgenden Strukturen:



worin R für verzweigtes, geradkettiges oder cyclisches C₁- bis C₆-Alkyl oder Aryl steht, ausgewählt ist.

22. Verbindung nach Anspruch 19, bei der Q aus der Gruppe bestehend aus Aldehyd, Carbonsäure, Ureido, Fluorphenoxy, Aminophenoxyphenyl, Schiff-Base, Maleinimid und funktionellen Gruppen der folgenden Strukturen:



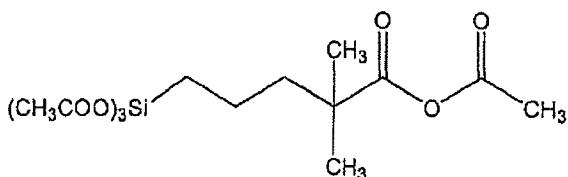
ausgewählt ist.

23. Verbindung nach Anspruch 19, bei der Q aus der Gruppe bestehend aus Aldehyd, Nitril, Amino und Imino ausgewählt ist.

24. Verbindung nach Anspruch 18, bei der R³ für Phenyl steht.

25. Verbindung nach Anspruch 18, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus
1,2-Bis(2,2-dimethyl-4-pentenal)tetramethyldisilo-
xan,
1-(2,2-Dimethyl-4-pentenal)tetramethyldisiloxan,
1,2-Bis(2,2-dimethyl-4-pentenitril)tetramethyldisilo-
xan und
1-(2,2-Dimethyl-4-pentenitril)tetramethyldisiloxan.

26. Verbindung nach Anspruch 18 mit der Struktur:



27. Verfahren zur Herstellung einer funktionalisierten Carbosiliciumverbindung, bei dem man:
(a) einen funktionalisierten Olefinreaktanten mit einer Aldehydgruppierung herstellt und
(b) den Olefinreaktanten durch eine Hydrosilylierungsreaktion mit der Carbosiliciumverbindung verknüpft.

Es folgt kein Blatt Zeichnungen