

【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 18 年 5 月 18 日 (2006.5.18)

【公表番号】特表 2005-520895 (P2005-520895A)

【公表日】平成 17 年 7 月 14 日 (2005.7.14)

【年通号数】公開・登録公報 2005-027

【出願番号】特願 2003-578442 (P2003-578442)

【国際特許分類】

C 0 8 G 18/02 (2006.01)

C 0 8 G 18/79 (2006.01)

C 0 8 G 18/80 (2006.01)

C 0 9 D 175/04 (2006.01)

【F I】

C 0 8 G 18/02 Z

C 0 8 G 18/79 W

C 0 8 G 18/80

C 0 9 D 175/04

【手続補正書】

【提出日】平成 18 年 3 月 23 日 (2006.3.23)

【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】

ジイソシアネート又はトリイソシアネートモノマー（群）の重縮合によって得られ、高い平均官能価を有するポリイソシアネート組成物であって、下記（a）、（b）、（c）、（d）及び（e）を含む前記組成物：

（a）ウレチジンジオン官能基を 1 個有し、分子量が最も大きいイソシアネートモノマー（群）の平均分子量の 2 倍以下の分子量を有する化合物（群）：成分（a）、（b）及び（c）の合計質量に対して 0.5～30 質量％；

（b）イソシアヌレート官能基を 1 個有し、分子量が最も大きいイソシアネートモノマー（群）の平均分子量の 3 倍以下の分子量を有する化合物（群）：成分（a）、（b）及び（c）の合計質量に対して 0.5～45 質量％；

（（a）／（b）のモル比は 0.02～2 の範囲とする）；

（c）少なくとも 2 個のイソシアネート官能基を有し、分子量が最も小さいイソシアネートモノマー（群）の平均分子量の少なくとも 3 倍の分子量を有するポリイソシアネート化合物群の混合物であって、下記の（i）、（ii）及び（iii）：

（i）少なくとも 2 個のイソシアヌレート官能基を有する化合物（群）（ウレチジンジオン官能基を含むものを除く）；

（ii）少なくとも 2 個のウレチジンジオン官能基を有する化合物（群）（イソシアヌレート官能基を含み且つモノマー単位の数 5 未満であるものを除く）；

（iii）少なくとも 1 個のイソシアヌレート官能基及び少なくとも 1 個のウレチジンジオン官能基を有し、上記イソシアネートモノマー化合物（群）の最も大きい分子量の 3 倍より大きい分子量を有する化合物（群）；

を含み、ウレチジンジオン環に属するカルボニル官能基／（イソシアヌレート環に属するカルボニル官能基＋ウレチジンジオン環に属するカルボニル官能基）の比が少なくとも 4

%である前記混合物：成分（a）、（b）及び（c）の合計質量に対して少なくとも40質量%；

（d）少なくとも1個のイソシアネート官能基を有する、（a）、（b）及び（c）以外の化合物：成分（a）、（b）、（c）、（d）及び（e）の質量に対して0～25質量%；並びに

（e）不純物：成分（a）、（b）、（c）、（d）及び（e）の質量に対して0～10質量%。

【請求項2】

3より大きい官能価を有することを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項3】

成分（a）+（b）+（c）の合計質量に対して1～30質量%の成分（a）を含むことを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項4】

成分（a）+（b）+（c）の合計質量に対して5～40質量%の成分（b）を含むことを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項5】

成分（c）が成分（a）+（b）+（c）の合計質量に対して少なくとも45質量%を占めることを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項6】

$[(c)(i) + (c)(iii)] / (b)$ の質量比が2より大きいことを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項7】

$[(c)(i) + (c)(iii)] / (b)$ の質量比が3より大きいことを特徴とする、請求項6に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項8】

$[(c)(i) + (c)(iii)] / (b)$ の質量比が4より大きいことを特徴とする、請求項6に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項9】

（c）（ii）の化合物の量が（c）に分類される化合物の総量に対して30重量%未満、好ましくは20重量%未満、より一層好ましくは15重量%未満であることを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項10】

成分（d）が成分（a）+（b）+（c）+（d）+（e）の合計質量に対して10質量%以下を占めることを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項11】

成分（e）が成分（a）+（b）+（c）+（d）+（e）の合計質量に対して0.05～10質量%を占めることを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項12】

成分（e）が重縮合触媒から形成される残渣及び／又は出発イソシアネートモノマーの重縮合からの副生成物及び／又は溶剤から成ることを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項13】

成分（d）が前記の残留イソシアネートモノマーを含むことを特徴とする、請求項1に記載のポリイソシアネート組成物。

【請求項14】

前記イソシアネートモノマーが成分（a）+（b）+（c）+（d）+（e）の質量の0.05～20質量%を占めることを特徴とする、請求項13に記載のポリイソシアネート組成物。

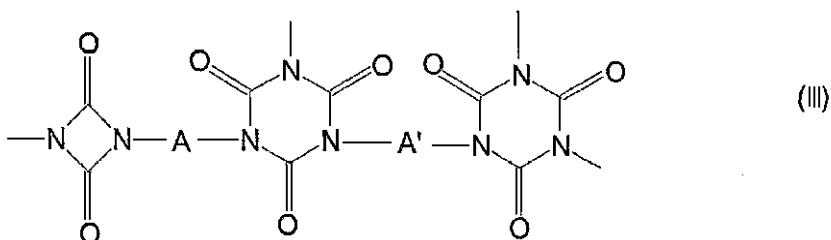
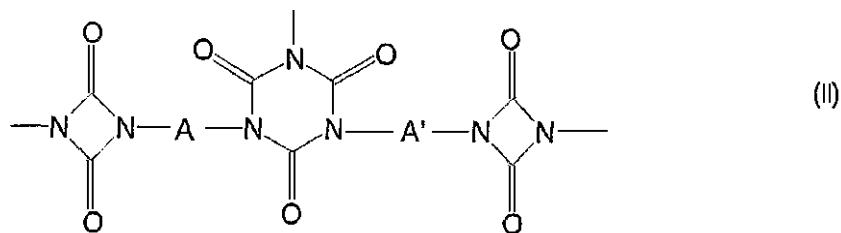
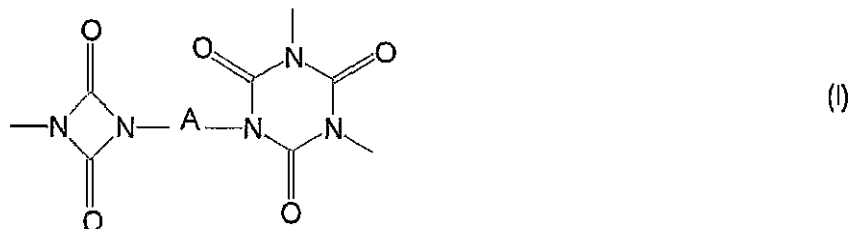
【請求項 15】

周囲温度において液状であり、イソシアネート官能基を含まず、イソシアネート官能基と反応し得る官能基を含まず、200 以下の沸点を有し、そして成分 (a)、(b)、(c) 及び (d) と混和性である有機溶剤又は有機溶剤の混合物を、(a) + (b) + (c) + (d) + (e) の 200 質量% 以下の量で含むことを特徴とする、請求項 1 ~ 14 のいずれかに記載の組成物。

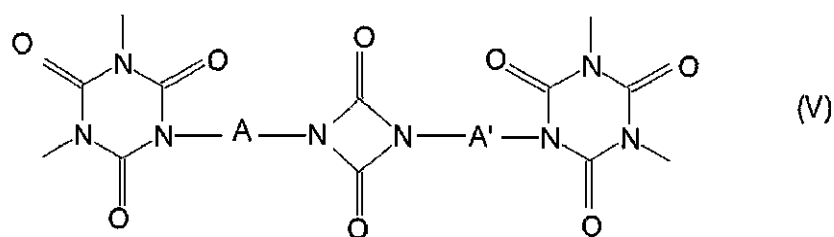
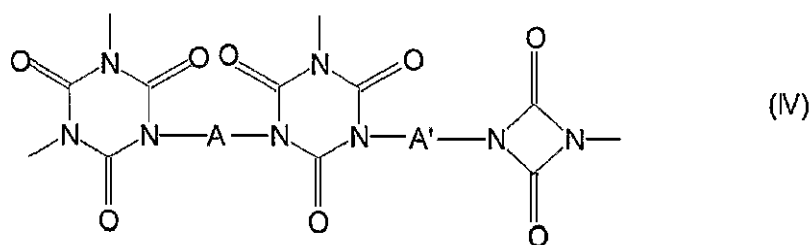
【請求項 16】

前記の少なくとも 1 個のウレチンジオン環及び少なくとも 1 個のイソシアヌレート環を含む化合物が下記の式 (I) ~ (V) 及びそれらの混合物から選択される基を含むことを特徴とする、請求項 1 ~ 15 のいずれかに記載の組成物。

【化 1】



【化 2】



(ここで、A 及び A' は同一であっても異なってもよく、2 個のイソシアネート官能基を除去した後のイソシアネートモノマー化合物の残基を表わす。)

【請求項 17】

組成物中に存在する N C O 基の 1 % ~ 1 0 0 % をマスキング剤を用いてマスクされたものとして含むことを特徴とする、請求項 1 ~ 1 6 のいずれかに記載の組成物。

【請求項 18】

前記マスキング剤がヒドロキシルアミン誘導体類、オキシム類、フェノール誘導体類、アミド誘導体類、マロネート類、ケトエステル類、ヒドロキサメート類及び窒素系ヘテロ環式化合物類から選択される一官能価マスキング剤であることを特徴とする、請求項 17 に記載の組成物。

【請求項 19】

前記マスキング剤がメチルエチルケトキシム又はピルビン酸メチルオキシムであることを特徴とする、請求項 18 に記載の組成物。

【請求項 20】

前記マスキング剤がピロリル、2 H - ピロリル、イミダゾリル、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、インドリジニル、イソインドリル、インドリル、インドゾリル、プリニル、キノリジニル、イソキノリル、ピラゾリジニル、イミダゾリジニル及びトリアゾリル基から選択されることを特徴とする、請求項 17 に記載の組成物。

【請求項 21】

次の工程 (i) ~ (v) :

- (i) 出発イソシアネートモノマー（群）と、随意としてのイソシアネート官能基と反応するその他のモノマーとを含む出発反応媒体を調製する；
- (ii) 前記出発反応媒体を二量体化触媒の存在下で随意にこの反応媒体を少なくとも 4 0 の温度に加熱することによって反応させる；
- (iii) 工程 (ii) からの未反応モノマーを含む反応生成物を、（環状）三量体化条件下で（環状）三量体化触媒と反応させる；
- (iv) 工程 (iii) からの反応生成物から未反応出発モノマーを除去する；
- (v) 工程 (i) ~ (iv) の前、間又は後に反応媒体を随意にマスキング剤と反応させる：を含み、プロセス工程 (iii) を、出発反応媒体中に存在するイソシアネートモノマーの転化度少なくとも 3 5 % が達成されるまで実施する、請求項 1 ~ 2 0 のいずれかに記載のポリイソシアネート組成物の製造方法。

【請求項 22】

次の工程 (i) ~ (v) :

- (i) 出発イソシアネートモノマー（群）と、随意としてのイソシアネート官能基と反応するその他のモノマーとを含む出発反応媒体を調製する；
- (ii) 前記出発モノマー群を（環状）三量体化条件下で（環状）三量体化触媒と反応させる；
- (iii) 工程 (ii) の反応媒体を二量体化触媒の存在下で随意にこの反応媒体を少なくとも 4 0 の温度に加熱することによって反応させる；
- (iv) 工程 (iii) からの反応生成物から未反応出発モノマーを除去する；
- (v) 工程 (i) ~ (iv) の前、間又は後に反応媒体を随意にマスキング剤と反応させる：を含み、プロセス工程 (iii) を、出発反応媒体中に存在するイソシアネートモノマーの転化度少なくとも 3 5 % が達成されるまで実施する、請求項 1 ~ 2 0 のいずれかに記載のポリイソシアネート組成物の製造方法。

【請求項 23】

前記二量体化触媒がトリス（N，N - ジアルキル）ホスホトリアミド、N，N - ジアルキルアミノピリジン又はトリアルキルホスフィンのような化合物から選択されることを特徴とする、請求項 2 1 又は 2 2 に記載の方法。

【請求項 24】

前記二量体化触媒がトリアルキルホスフィンタイプの化合物から選択されることを特徴とする、請求項 2 1 ~ 2 3 のいずれかに記載の方法。

【請求項 25】

前記三量体化触媒がトリアルキルホスフィンタイプの化合物から選択されることを特徴とする、請求項 2 1 ~ 2 4 のいずれかに記載の方法。

【請求項 2 6】

連続的に又は同時に添加するための、反応性水素を含む共反応成分をもまた含むことを特徴とする、コーティングを製造するための請求項 1 ~ 2 0 のいずれかに記載の組成物。

【請求項 2 7】

コーティング、特に塗料を製造するための、請求項 1 ~ 2 0 のいずれかに記載の組成物の使用。

【請求項 2 8】

・請求項 1 ~ 2 0 のいずれかに記載のポリイソシアネート組成物を、反応性水素を含有する誘導体を含む共反応成分と接触させる工程、及び
・こうして形成された反応媒体を、成分の架橋を可能にする温度に加熱する工程を含むことを特徴とする、ポリマーの製造方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 8

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 2 8】

本発明の 1 つの有利な具体例に従えば、成分 (d) は成分 (a) + (b) + (c) + (d) + (e) の合計質量の 1 0 質量 % 以下を占め、好ましくは成分 (a) + (b) + (c) + (d) + (e) の質量の 5 質量 % 以下を占める。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 4 9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 4 9】

また、2 ~ 9 個の炭素原子を有する窒素系ヘテロ環式基であってこの窒素原子に加えて窒素、酸素及び硫黄から選択される 1 ~ 3 個のその他のヘテロ原子をも含むものを挙げることもできる。これらの基は、例えばピロリル、2 H - ピロリル、イミダゾリル、ピリミジニル、ピリダジニル、ピラジニル、インドリジニル、イソインドリル、インドリル、インドゾリル、プリニル、キノリジニル、イソキノリル、ピラゾリジニル、イミダゾリジニル及びトリアゾリル基から選択される。特に 2 ~ 4 個の炭素原子及び 1 ~ 3 個の窒素原子を有するヘテロ環、例えばピラゾリル、イミダゾリル及びトリアゾリル基が好ましく、これらの基は以下のものから選択される 1 ~ 3 個の置換基で随意に置換されていてもよい： NH_2 、 $\text{NH}(\text{C}_1 \sim \text{C}_6 \text{アルキル})$ 、 $\text{N} - (\text{ジ}(\text{C}_1 \sim \text{C}_6 \text{アルキル}))$ 、 OH 、 SH 、 CF_3 、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_6 \text{アルキル}$ 、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_6 \text{シクロアルキル}$ 、 $\text{C}_5 \sim \text{C}_{12} \text{アリール}$ (特にフェニル)、アリール基中に 5 ~ 12 個の炭素原子を有する $\text{C}_6 \sim \text{C}_{18} \text{アルアルキル}$ (特にベンジル)、及びアリール基中に 5 ~ 12 個の炭素原子を有する $\text{C}_6 \sim \text{C}_{18} \text{アルカリール}$ 。