

【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1月5日(2006.1.5)

【公表番号】特表2001-516778(P2001-516778A)

【公表日】平成13年10月2日(2001.10.2)

【出願番号】特願2000-511800(P2000-511800)

【国際特許分類】

C 08 G	18/67	(2006.01)
C 07 C	233/38	(2006.01)
C 07 C	235/10	(2006.01)
C 07 C	237/10	(2006.01)
C 07 C	271/20	(2006.01)
C 07 C	275/14	(2006.01)
C 07 D	207/444	(2006.01)
C 07 D	207/448	(2006.01)
C 08 F	290/06	(2006.01)
C 08 F	299/06	(2006.01)
C 08 G	18/50	(2006.01)
C 08 G	18/81	(2006.01)
G 02 C	7/04	(2006.01)

【F I】

C 08 G	18/67
C 07 C	233/38
C 07 C	235/10
C 07 C	237/10
C 07 C	271/20
C 07 C	275/14
C 07 D	207/444
C 07 D	207/448
C 08 F	290/06
C 08 F	299/06
C 08 G	18/50
C 08 G	18/81
G 02 C	7/04

【手続補正書】

【提出日】平成17年9月7日(2005.9.7)

【手続補正1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】特許請求の範囲

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】式(1)：

【化1】

Q —— CP —— Q

(1)

[式中、

Q_1 は、

(i) 更に置換されていてもよい、2 ~ 24 個の炭素原子を有するオレフィン性不飽和の共重合可能な基 R_3 ；

(ii) 式(5)：

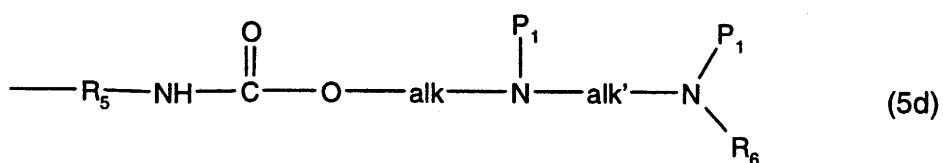
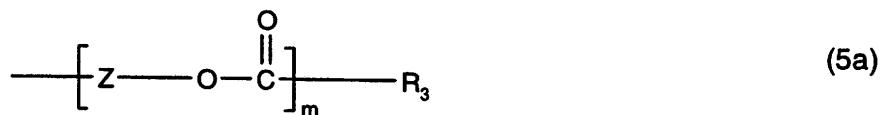
【化7】



[式中、

Q_1 は、式(5a)、(5b)、(5c)、(5d)又は(5e)：

【化8】



[式中、

Z は、直鎖又は分岐 $C_{1 - C_{12}}$ アルキレンであり、

R_3 は、更に置換されていてもよい、2 ~ 24 個の炭素原子を有するオレフィン性不飽和の共重合可能な基であり、

W は、 $C_{2 - C_{12}}$ のアルキレン基、フェニレン基又は $C_{7 - C_{12}}$ アラルキレン基であり、

R_4 及び R'_4 は、それぞれ他と独立に、水素、 $C_{1 - C_4}$ アルキル又はハロゲンであり、

R₅は、二価の、脂肪族、環式脂肪族、脂肪族-環式脂肪族、芳香族、芳香脂肪族又は脂肪族-ヘテロ環式炭化水素基であり、

R₆は、水素又はC₁-C₄アルキルであり、

a₁k及びa₁k'は、それぞれ他と独立に、直鎖又は分岐C₁-C₁₂アルキレン基であり、

m及びnは、それぞれ他と独立に、数0又は1であり、

Zは、C₁-C₆アルキレンであり、そして

P₁は、独立して、Q₁が前述の式(5a)、(5b)、(5c)又は(5e)の基である前述の式(5)の基であり、そして、

nは、独立して前記と同義である)の基である)の基;並びに

(iii) Qが、-NR、-NR'、-NR₁又は-NR₁'と一緒にになって形成する、式(5b'):

【化9】

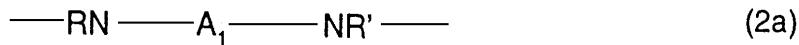


(式中、

R₄及びR_{4'}は、それぞれ他と独立に、前記と同義である)の環式環から選択される、少なくとも1個の架橋結合可能基を含む有機基であり、そしてCPは、セグメントA、B及びTからなる二価コポリマーフラグメントであり、ここにおいて:

Aは、式(2a):

【化2】

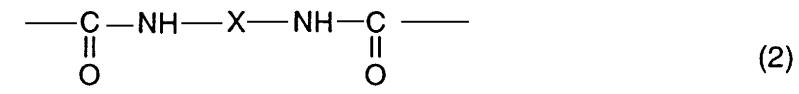


(式中、

A₁は、ポリアルキレングリコールの二価基であるか、又は2~24個の炭素原子を有する直鎖又は分岐アルキレン基であり、R及びR'は、それぞれ他と独立に、水素又は非置換若しくは置換したC₁-C₆アルキルであるか、あるいはコポリマーフラグメントを末端化しているのがアミノ基の場合には、直接の、環形成結合であってもよい)の二価基であり;

Tは、式(2):

【化3】

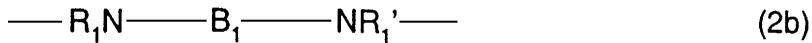


(式中、

Xは、二価の、脂肪族、環式脂肪族、脂肪族-環式脂肪族、芳香族、芳香脂肪族又は脂肪族-ヘテロ環式基である)の二価基であり;そして

Bは、式(2b):

【化4】



(式中、

R_1 及び R_1' は、他と独立して、上記の R と同義であり、

B_1 は、二価の脂肪族、環状脂肪族、脂肪族 - 環状脂肪族、芳香族又は芳香脂肪族炭化水素基（これは、少なくとも 1 個の式（3）：

【化 5】



(式中、

R_2 は、水素であるか、上記の基 Q であるか、又は式（4）：

【化 6】



(式中、

Q は、上記と同義であり、そして CP' は、独立して、上述のセグメント A 、 B 及び T の少なくとも二つからなる二価コポリマーフラグメントである）の基である）のアミンにより中断されている）の基である）であるが、但し

コポリマーフラグメント CP 及び CP' において、セグメント A 又は B は、いずれの場合にもセグメント T に続き；

コポリマーフラグメント CP 及び CP' において、セグメント T は、いずれの場合にもセグメント A 又は B に続き；

式（1）と（4）における基 Q は、いずれの場合にもセグメント A 又は B に結合し；かつ

式（3）における N 原子は、 R_2 が式（4）の基である場合には、セグメント T に結合する）である]のプレポリマー。

【請求項 2】 Q が、式（5）（ここで、 n は数 0 であり、そして Q_1 は式（5a）（ここで、 m は 0 であり、 R_3 は、式（6）：

【化 10】



(式中、

p は、数 0 又は 1 であり、

R_7 は、水素、 C_1 - C_4 アルキル又はハロゲンであり、

R_8 及び R_9 は、それぞれ他と独立に、水素、 C_1 - C_4 アルキル、フェニル、カルボキシ又はハロゲンであり、そして

Z' は、直鎖又は分岐 C_1 - C_{12} アルキレン、あるいは非置換又は C_1 - C_4 アルキル若しくは C_1 - C_4 アルコキシで置換された、フェニレン又は C_7 - C_{12} アラルキレンである）の基である）の基である）の基である、請求項 1 記載のプレポリマー。

【請求項3】 Qが、式(5) (ここで、nは数1であり、そしてQ₁は式(5a) (ここで、mは1であり、R₃は式(6)):

【化11】



(式中、

pは、数0であり、

R₇は、水素又はC₁-C₄アルキルであり、

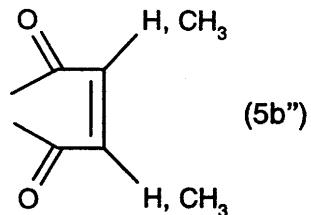
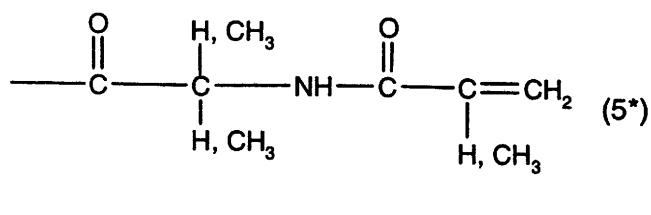
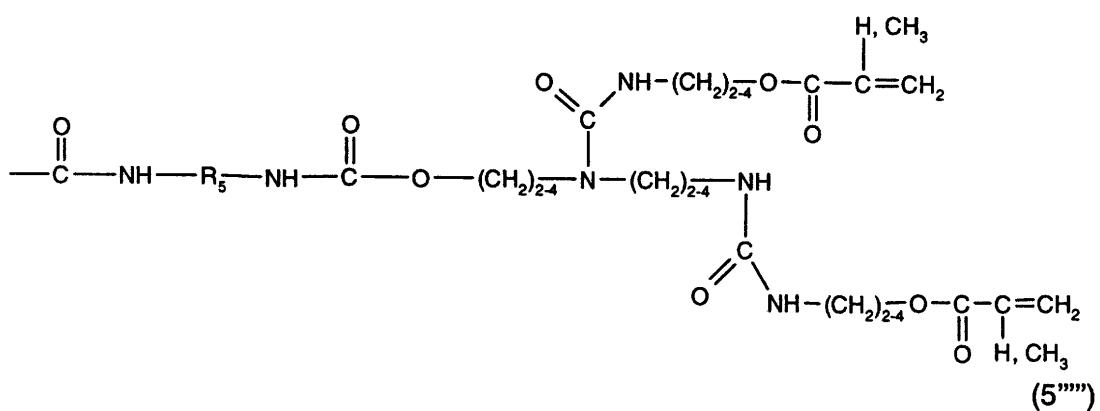
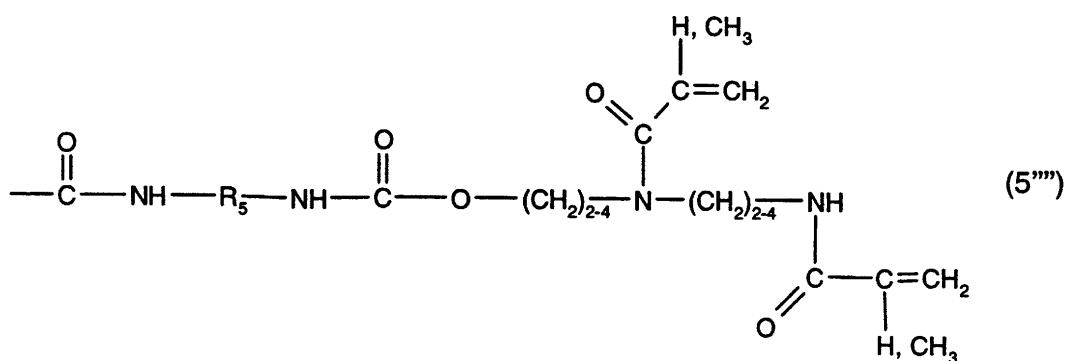
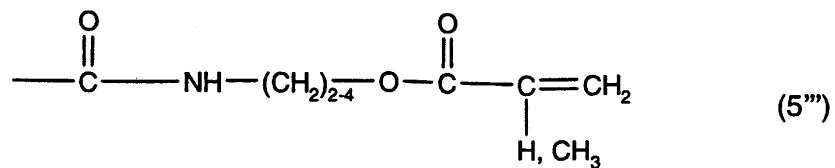
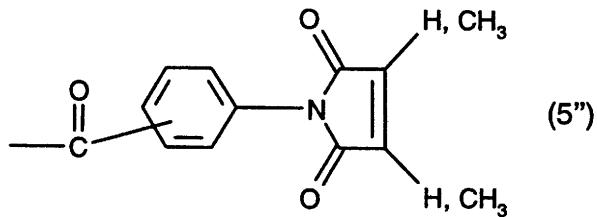
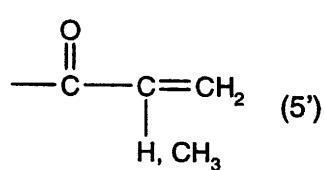
R₈は、水素、メチル、塩素又はフェニルであり、

R₉は、水素又はカルボキシであり、そして

Zは、直鎖又は分岐C₁-C₁₂アルキレンである)の基である)の基である)の基である、請求項1記載のプレポリマー。

【請求項4】 Qが、下記式(5a)~(5b) :

【化12】



(式中、

R_5 は、直鎖又は分岐 $\text{C}_6\text{-C}_{10}$ アルキレン；それぞれ非置換か、又はシクロヘキシリル部分において1~3個のメチル基で置換された、シクロヘキシレン-メチレン若しくはシクロヘキシレン-メチレン-シクロヘキシレン；あるいはそれぞれ非置換か、又はフェニル

部分においてメチルで置換された、フェニレン若しくはフェニレン - メチレン - フェニレンである)のいずれかの基である、請求項1記載のプレポリマー。

【請求項5】 Qが、式(5)又は(5)の基である、請求項4記載のプレポリマー。

【請求項6】 Aが、式(2a)(ここで、R及びR₁は、それぞれ、水素又はC₁-C₄アルキルであり、そしてA₁は、式(7a):

【化13】



(式中、

(Alk)及び(Alk')は、同一であり、そしてそれは、直鎖又は分岐C₂-C₆アルキレンであり、基R₁₀及びR₁₁の一方は、水素であり、他方は、メチルであり、そしてr及びsは、それぞれ他と独立に、0~80までの数であり、(r+s)の合計は、2~80である)の二価のポリアルキレングリコール基である)の二価基である、請求項1~5のいずれか1項記載のプレポリマー。

【請求項7】 Aが、式(2a)(ここで、R及びR₁は、それぞれ水素であり、そしてA₁は、式(7b):

【化14】



(式中、

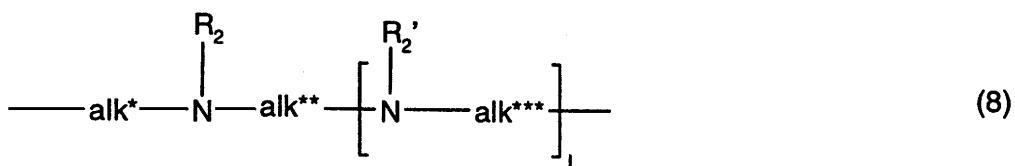
(Alk)及び(Alk')は、同一であり、それは、直鎖又は分岐C₂-C₄アルキレンであり、そしてrは、4~50の数である)の二価ポリアルキレングリコールである)の二価基である、請求項1~6のいずれか1項記載のプレポリマー。

【請求項8】 Aが、式(2a)(ここで、R及びR₁は、それぞれヒドロキシ-置換C₁-C₄アルキルであり、そしてA₁は、C₂-C₆アルキレン基である)の二価基である、請求項1~5のいずれか1項記載のプレポリマー。

【請求項9】 Tが、請求項1で与えられた式(2)(ここで、Xは、直鎖又は分岐C₆-C₁₀アルキレン; それぞれ非置換、又は1~3個のメチル基でシクロヘキシルの部分が置換された、シクロヘキシレン-メチレン若しくはシクロヘキシレン-メチレン-シクロヘキシレン; あるいはそれぞれ非置換、又はメチルでフェニルの部分が置換された、フェニレン若しくはフェニレン-メチレン-フェニレンである)の二価基である、請求項1~8のいずれか1項記載のプレポリマー。

【請求項10】 Bが、式(2b)(ここで、R₁及びR₂は、他と独立に、水素又はC₁-C₄アルキルであり、そしてB₁は、式(8):

【化15】



(式中、

a₁k^{*}、a₁k^{**}及びa₁k^{***}は、それぞれ他と独立に、C₂-C₁₂アルキレン基であり;

1は、1又は0の数であり、そして

R_2 及び $R_{2'}$ は、それぞれ他と独立に、請求項1で R_2 に与えられた意味を有する)の基である)の基である、請求項1~9のいずれか1項記載のプレポリマー。

【請求項11】 請求項1記載の式(1)〔ここで、Qは、請求項4と同義であり、そしてCPは、セグメントA、B及びT(ここで、Aは、式(2a)(ここで、R及びRは、それぞれ他と独立に、水素又はC₁-C₄アルキルであり、そしてA₁は、式(7a)):

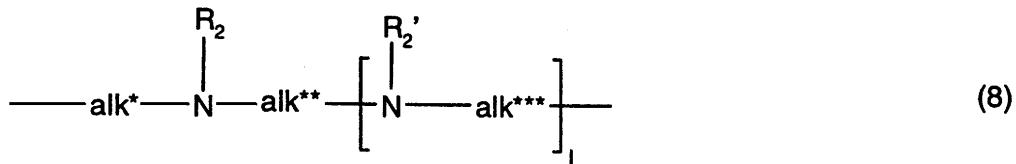
【化16】



(式中、

(Alk)及び(Alk')は、同一であり、そしてそれは、直鎖又は分岐C₂-C₆アルキレンであり、基R₁₀及びR₁₁の一方は、水素であり、他方は、メチルであり、そしてrとsは、それぞれ他と独立に、0~80までの数であり、(r+s)の合計は、2~80である)の基である)の二価基であり; Tは、請求項1で与えられた式(2)(ここで、Xは、直鎖又は分岐C₆-C₁₀アルキレン; それぞれ非置換、又は1~3個のメチル基でシクロヘキシリルの部分が置換された、シクロヘキシレン-メチレン若しくはシクロヘキシレン-メチレン-シクロヘキシレン; あるいはそれぞれ非置換、又はメチルでフェニルの部分が置換された、フェニレン若しくはフェニレン-メチレン-フェニレンである)の二価基であり; そしてBは、式(2b)(ここで、R₁及びR_{1'}は、それぞれ他と独立に、水素、C₁-C₂アルキル又はヒドロキシ-C₁-C₂アルキルであり、そしてB₁は、式(8):

【化17】



(式中、

alk*、alk**及びalk***は、それぞれ他と独立に、C₂-C₁₂アルキレン基であり;

1は、数1又は好ましくは0であり、そして

R_2 及び $R_{2'}$ は、それぞれ他と独立に、水素; Qが上記と同義である基Q、又は式(4):

【化18】



(式中、

Qは、上記と同義であり、そして

CP'は、独立して上述のセグメントA、B及びTの少なくとも2個からなる二価のコポリマーフラグメントである)の基である)の基である)の基である)からなる二価コポリマーフラグメントである)のプレポリマー。

【請求項12】 請求項1に記載の式(1)〔ここで、Qは、請求項5で定義されたものであり、そしてCP'は、セグメントA、B及びT(ここにおいて、Aは、式(2a)

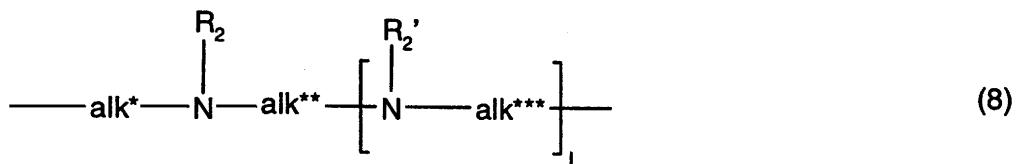
(ここで、R及びR'は、それぞれ水素であり、そしてA₁は、式(7b)：
【化19】



(式中、

(Alk)及び(Alk')は、同一であり、そしてそれは、直鎖又は分岐C₂-C₄アルキレンであり、そしてrは、4~50までの数である)の基である)の二価基であり；Tは、請求項1で与えられた式(2)(ここで、Xは、イソホロンジイソシアネート(IPDI)、トルイレン-2,4-ジイソシアネート(TDI)、メチレンビス(シクロヘキシリソシアネート)、1,6-ジイソシアナト-2,2,4-トリメチル-n-ヘキサン(TMDI)、メチレンビス(フェニルイソシアネート)、メチレンビス(シクロヘキシリソシアネート)及びヘキサメチレンジイソシアネート(HMDI)の群から選択されるジイソシアネートから、その二個のイソシアナト基を除いた基である)の二価の基であり；そしてBは、式(2b)(ここで、R₁及びR'₁は、それぞれ水素であり、そしてB₁は、式(8)：

【化20】



(式中、

lは、数0であり；

a₁k^{*}及びa₁k^{**}は、それぞれ他と独立に、C₂-C₆アルキレン基であり；そしてR₂及びR₂'は、他と独立に水素；Qが前に定義されたものである基Q、又は式(4)：
【化21】



(式中、

Qは、上記と同義であり、そしてCP'は、独立して上述のセグメントA、B及びTの少なくとも2個からなる二価のコポリマーフラグメントである)の基である)の基である)からなる二価コポリマーフラグメントである]のプレポリマー。

【請求項13】 請求項1記載の式(1)のプレポリマーを製造するための方法であつて、式(10)：

【化22】



の化合物、式(11)：

【化23】



の化合物及び式(12)：

【化24】



(式中、

A_1 、 R 、 R' 、 R_1 、 R'_1 及び X は、それぞれ請求項1と同義であり、そして B_1' は、独立して、 B_1 に対して上記に与えられた意味を有するが、但し、式(3)のアミン基における R_2 は、いずれの場合にも水素であることを除く)の化合物と一緒に反応させること；及び

式(1a)：

【化25】



(式中、

CP^* は、独立して CP に対して請求項1で与えられた意味を有するが、但しセグメント B における R_2 は、水素又は基- CP - NR_2 H (ここで R_2 は、独立して、 R に対して請求項1で与えられた意味を有し、そして CP は、請求項1と同義である)であることを除く)の、そのように得られるコポリマーを、式(13)

【化26】



(式中、

Q_1 は、請求項2と同義であり、そして Y は、ハロゲン、カルボキシル基- COOH ；カルボキシル基誘導体又は- $\text{N}=\text{C}=\text{O}$ 基であるか、又は Q_1 は、 Y と一緒にあって、ヘテロ環式化合物を形成する)の化合物と反応させることを特徴とする方法。

【請求項14】 請求項13記載の方法で得ることができるプレポリマー。

【請求項15】 式(1a)：

【化27】

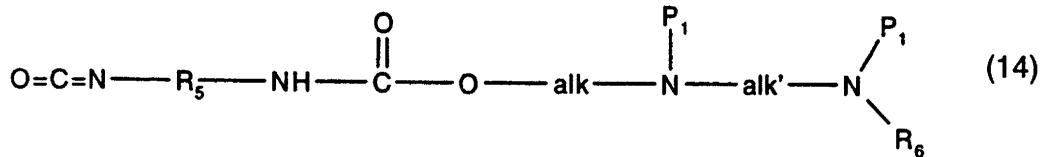


(式中、

CP^* は、独立して、 CP に対して請求項1で与えられた意味を有するが、但しセグメント B における R_2 は、水素又は基- CP - NR_2 H (ここで、 R_2 は、独立して、 R に対して請求項1で与えられた意味を有し、そして CP は、請求項1と同義である)であることを除く)のコポリマー。

【請求項16】 式(14)：

【化28】



(式中、

R_5 は、二価の、脂肪族、環式脂肪族、脂肪族 - 環式脂肪族、芳香族、芳香脂肪族又は脂肪族 - ヘテロ環式炭化水素基であり、

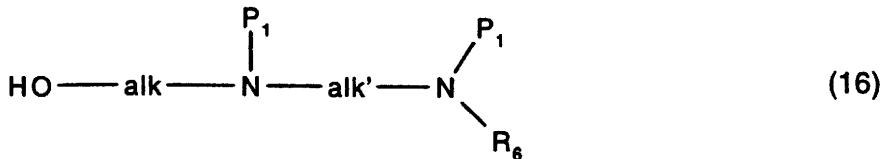
R_6 は、水素又は C_1 - C_4 アルキルであり、

alk 及び alk' は、それぞれ他と独立して、直鎖又は分岐 C_1 - C_{12} アルキレン基であり、そして P_1 は、 Q_1 が請求項1で与えられた式(5a)、(5b)又は(5c)の基である請求項1で与えられた式(5)の基であり、そして

n は、請求項1と同義である)の化合物。

【請求項17】 式(16) :

【化29】



(式中、

R_6 は、水素又は C_1 - C_4 アルキルであり、 alk と alk' は、それぞれ他と独立に直鎖又は分岐 C_1 - C_{12} アルキレン基であり、そして

P_1 は、 Q_1 が請求項1で与えられた式(5a)、(5b)又は(5c)の基である請求項1で与えられた式(5)の基であり、そして

n は、請求項1と同義である)の化合物。

【請求項18】 請求項1 ~ 12のいずれか1項記載のプレポリマーを、更なるビニルコモノマーの不在又は存在下に架橋結合することにより得ることができるポリマー。

【請求項19】 請求項1 ~ 12のいずれか1項記載のプレポリマーを、更なるビニルコモノマーの不存在下で光架橋結合することにより得ることができる請求項18記載のポリマー。

【請求項20】 請求項18記載のポリマーを製造するための方法であって、請求項1 ~ 12のいずれか1項記載のプレポリマーを、更なるビニルコモノマーの不存在又は存在下で光架橋結合することを特徴とする方法。

【請求項21】 プレポリマーが、使用する前に限外ろ過によって精製される、請求項20記載の方法。

【請求項22】 成形品を製造するための方法であって、

a) 室温で液状であるか、又は溶融し、かつ実質的に溶剤を含まない式(1)のプレポリマーを、付加的ビニルコモノマー及び/又は光開始剤の不在又は存在下で成形用型に導入する工程、

b) 60分の間光架橋結合をさせる工程、

c) 成形用型を開き、それにより成形用型から成形品を取り出すことができる工程を含むことを特徴とする方法。

【請求項23】 成形品を製造するための方法であって、

a) 式(1)の水 - 可溶性プレポリマーの水性溶液を、付加的ビニルコモノマー及び/又

は光開始剤の不在又は存在下で、調製する工程、

b) 得られた溶液を成形用型に導入する工程、

c) 60分の間光架橋結合をさせる工程、

d) 成形用型を開き、それにより成形用型から成形品を取り出すことができる工程を含むことを特徴とする方法。

【請求項24】 成形品が、コンタクトレンズである請求項22又は23記載の方法

。

【請求項25】 請求項22又は23記載の方法で得ることができる成形品。

【請求項26】 コンタクトレンズである、請求項25記載の成形品。