

【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 0 8 G 18/67 (2006.01)**

**C 0 7 C 233/38 (2006.01)**

**C 0 7 C 235/10 (2006.01)**

**C 0 7 C 237/10 (2006.01)**

**C 0 7 C 271/20 (2006.01)**

**C 0 7 C 275/14 (2006.01)**

**C 0 7 D 207/444 (2006.01)**

**C 0 7 D 207/448 (2006.01)**

**C 0 8 F 290/06 (2006.01)**

**C 0 8 F 299/06 (2006.01)**

**C 0 8 G 18/50 (2006.01)**

**C 0 8 G 18/81 (2006.01)**

**G 0 2 C 7/04 (2006.01)**

【F I】

C 0 8 G 18/67

C 0 7 C 233/38

C 0 7 C 235/10

C 0 7 C 237/10

C 0 7 C 271/20

C 0 7 C 275/14

C 0 7 D 207/444

C 0 7 D 207/448

C 0 8 F 290/06

C 0 8 F 299/06

C 0 8 G 18/50

C 0 8 G 18/81

G 0 2 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 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 ) :

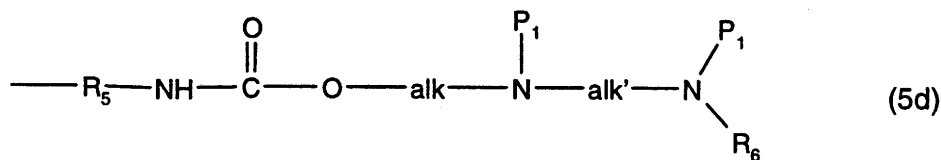
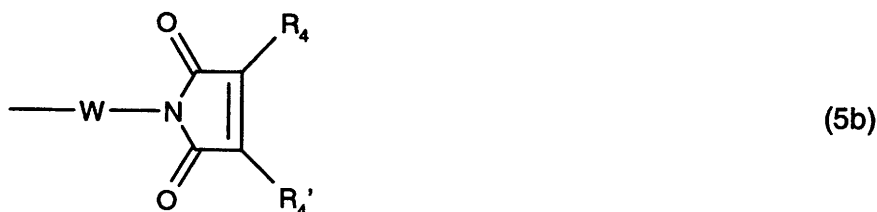
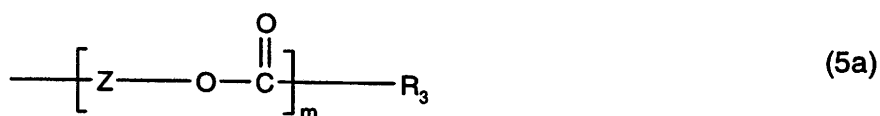
【化 7】



( 式中、

$Q_1$  は、式 ( 5 a )、( 5 b )、( 5 c )、( 5 d ) 又は ( 5 e ) :

【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、

$R_5$  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、

$a_1 k$  及び  $a_1 k'$  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、

$m$  及び  $n$  は、それぞれ他と独立に、数 0 又は 1 であり、

$Z$  は、 $C_1 - C_6$  アルキレンであり、そして

$P_1$  は、独立して、 $Q_1$  が前述の式 (5 a)、(5 b)、(5 c) 又は (5 e) 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、 $-NR$ 、 $-NR'$ 、 $-NR_1$  又は  $-NR_1'$  と一緒になって形成する、式 (5 b)：

【化 9】



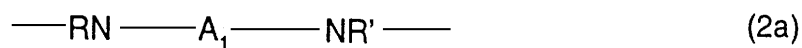
(式中、

$R_4$  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 (2 a)：

【化 2】

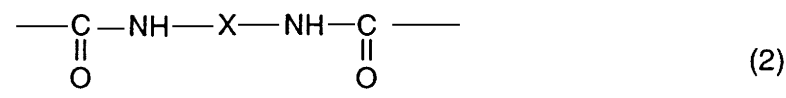


(式中、

$A_1$  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  $C_1 - C_6$  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】

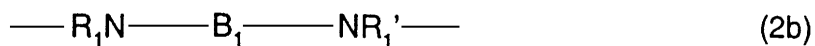


(式中、

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 (2 b)：

【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；

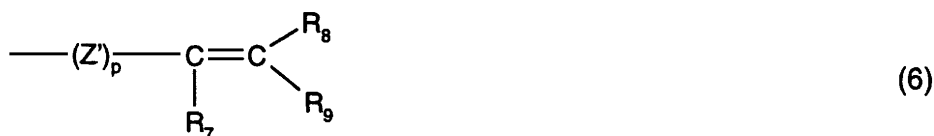
コポリマーフラグメント  $CP$  及び  $CP$  において、セグメント  $T$  は、いずれの場合にもセグメント  $A$  又は  $B$  に続き；

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Q<sub>1</sub>は式(5a)(ここで、mは1であり、R<sub>3</sub>は式(6) :

【化11】



(式中、

pは、数0であり、

R<sub>7</sub>は、水素又はC<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>アルキルであり、

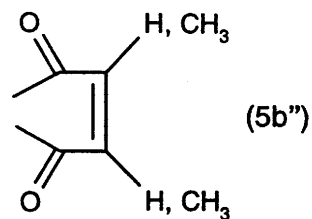
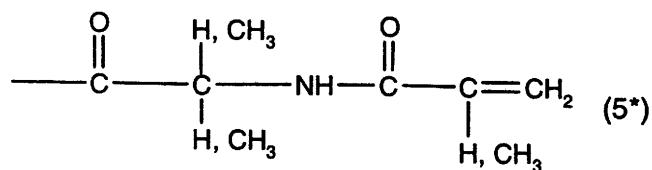
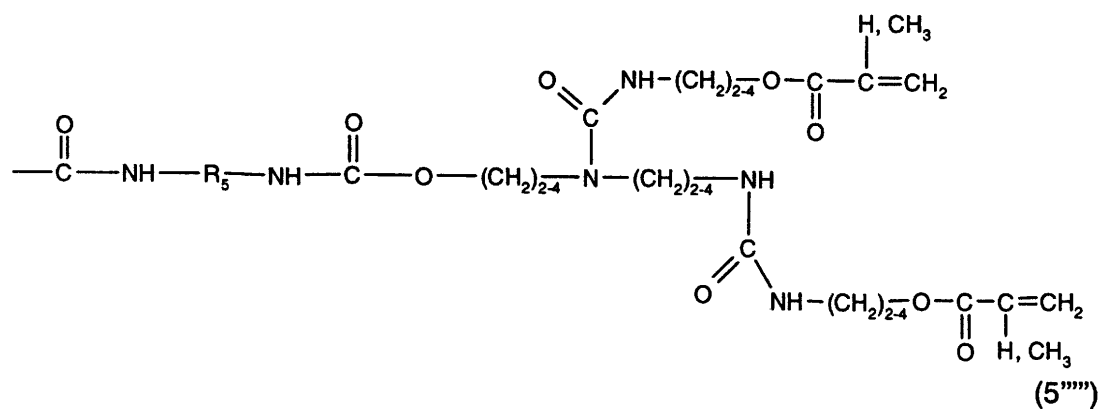
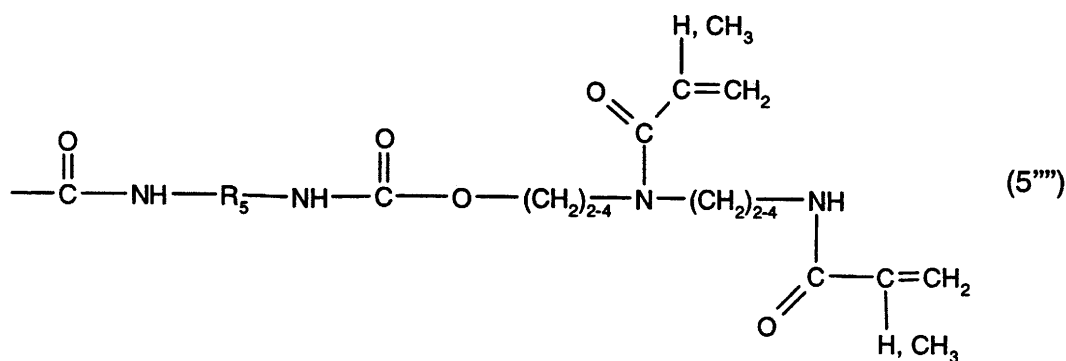
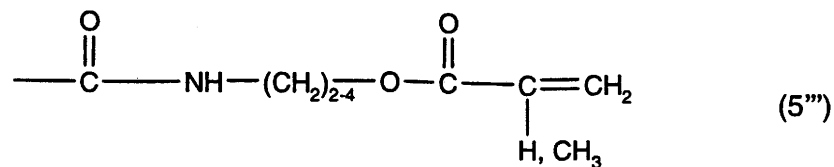
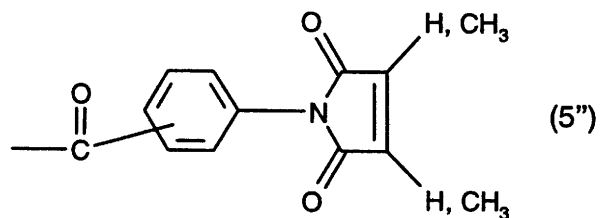
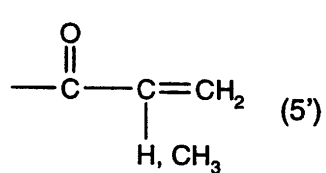
R<sub>8</sub>は、水素、メチル、塩素又はフェニルであり、

R<sub>9</sub>は、水素又はカルボキシであり、そして

Zは、直鎖又は分岐C<sub>1</sub>-C<sub>12</sub>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(5)~(5b) :

【化12】



(式中、

$\text{R}_5$ 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Rは、それぞれ、水素又はC<sub>1</sub> - C<sub>4</sub>アルキルであり、そしてA<sub>1</sub>は、式(7a)：

【化13】



(式中、

(Alk)及び(Alk')は、同一であり、そしてそれぞれは、直鎖又は分岐C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>アルキレンであり、基R<sub>10</sub>及びR<sub>11</sub>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Rは、それぞれ水素であり、そしてA<sub>1</sub>は、式(7b)：

【化14】



(式中、

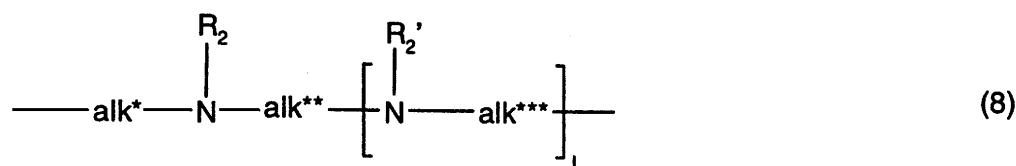
(Alk)及び(Alk')は、同一であり、それぞれは、直鎖又は分岐C<sub>2</sub> - C<sub>4</sub>アルキレンであり、そしてrは、4 ~ 50の数である)の二価ポリアルキレングリコールである)の二価基である、請求項1 ~ 6のいずれか1項記載のプレポリマー。

【請求項8】 Aが、式(2a)(ここで、R及びRは、それぞれヒドロキシ - 置換C<sub>1</sub> - C<sub>4</sub>アルキルであり、そしてA<sub>1</sub>は、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>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C<sub>6</sub> - C<sub>10</sub>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、R<sub>1</sub>及びR<sub>1</sub>は、他と独立に、水素又はC<sub>1</sub> - C<sub>4</sub>アルキルであり、そしてB<sub>1</sub>は、式(8)：

【化15】



(式中、

alk<sup>\*</sup>、alk<sup>\*\*</sup>及びalk<sup>\*\*\*</sup>は、それぞれ他と独立に、C<sub>2</sub> - C<sub>12</sub>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 1 1】 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 (2 a) (ここで、R 及び R は、それぞれ他と独立に、水素又は  $C_1 - C_4$  アルキルであり、そして  $A_1$  は、式 (7 a) ) :

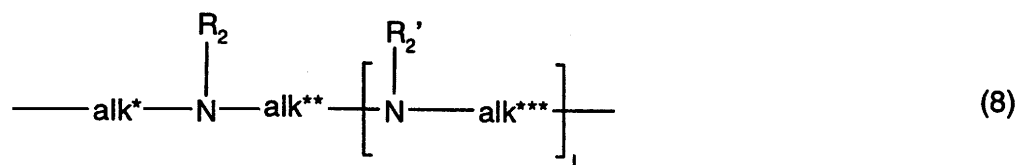
【化 1 6】



(式中、

(Alk) 及び (Alk') は、同一であり、そしてそれぞれは、直鎖又は分岐  $C_2 - C_6$  アルキレンであり、基  $R_{10}$  及び  $R_{11}$  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  $C_6 - C_{10}$  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) の二価基であり ; そして B は、式 (2 b) (ここで、 $R_1$  及び  $R_1$  は、それぞれ他と独立に、水素、 $C_1 - C_2$  アルキル又はヒドロキシ -  $C_1 - C_2$  アルキルであり、そして  $B_1$  は、式 (8) :

【化 1 7】



(式中、

alk<sup>\*</sup>、alk<sup>\*\*</sup> 及び alk<sup>\*\*\*</sup> は、それぞれ他と独立に、 $C_2 - C_{12}$  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 1 8】



(式中、

Q は、上記と同義であり、そして

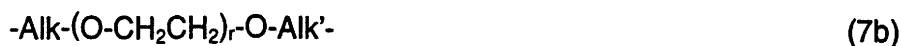
CP は、独立して上述のセグメント A、B 及び T の少なくとも 2 個からなる二価のコポリマーフラグメントである) の基である) の基である) の基である) からなる二価コポリマーフラグメントである) のプレポリマー。

【請求項 1 2】 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 (2 a)



(ここで、R 及び R' は、それぞれ水素であり、そして A<sub>1</sub> は、式 (7b) :

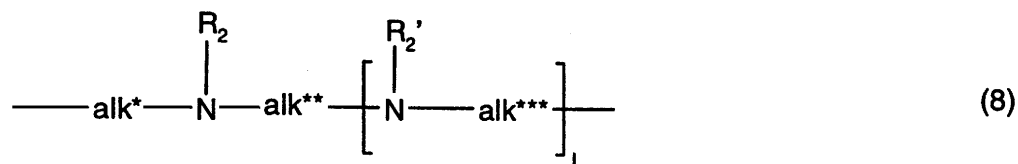
【化 19】



(式中、

(Alk) 及び (Alk') は、同一であり、そしてそれぞれは、直鎖又は分岐 C<sub>2</sub> - C<sub>4</sub> 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 (シクロヘキシルイソシアネート)、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 (シクロヘキシルイソシアネート) 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、R<sub>1</sub> 及び R<sub>1</sub>' は、それぞれ水素であり、そして B<sub>1</sub> は、式 (8) :

【化 20】



(式中、

1 は、数 0 であり;

alk\* 及び alk\*\* は、それぞれ他と独立に、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub> アルキレン基であり; そして R<sub>2</sub> 及び R<sub>2</sub>' 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。

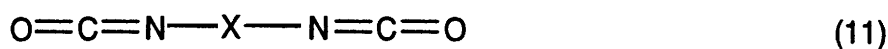
【請求項 13】 請求項 1 記載の式 (1) のプレポリマーを製造するための方法であって、式 (10) :

【化 22】



の化合物、式 (11) :

【化 23】



の化合物及び式 ( 1 2 ) :

【化 2 4】



( 式中、

$\text{A}_1$ 、 $\text{R}$ 、 $\text{R}_1$ 、 $\text{R}_1'$  及び  $\text{X}$  は、それぞれ請求項 1 と同義であり、そして  $\text{B}_1$  は、独立して、 $\text{B}_1$  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  $\text{R}_2$  は、いずれの場合にも水素であることを除く) の化合物を一緒に反応させること；及び

式 ( 1 a ) :

【化 2 5】



( 式中、

$\text{CP}^*$  は、独立して  $\text{CP}$  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  $\text{R}_2$  は、水素又は基 -  $\text{CP} \text{---} \text{NR} \text{H}$  (ここで  $\text{R}$  は、独立して、 $\text{R}$  に対して請求項 1 で与えられた意味を有し、そして  $\text{CP}$  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 ( 1 3 )

【化 2 6】



( 式中、

$\text{Q}_1$  は、請求項 2 と同義であり、そして  $\text{Y}$  は、ハロゲン、カルボキシル基 -  $\text{COOH}$ ；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  $\text{Q}_1$  は、 $\text{Y}$  と一緒になって、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 1 4】 請求項 1 3 記載の方法で得ることができるプレポリマー。

【請求項 1 5】 式 ( 1 a ) :

【化 2 7】

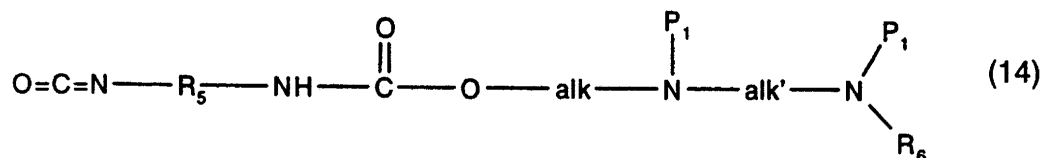


( 式中、

$\text{CP}^*$  は、独立して、 $\text{CP}$  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  $\text{R}_2$  は、水素又は基 -  $\text{CP} \text{---} \text{NR} \text{H}$  (ここで、 $\text{R}$  は、独立して、 $\text{R}$  に対して請求項 1 で与えられた意味を有し、そして  $\text{CP}$  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 1 6】 式 ( 1 4 ) :

## 【化 2 8】



(式中、

$\text{R}_5$ 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、

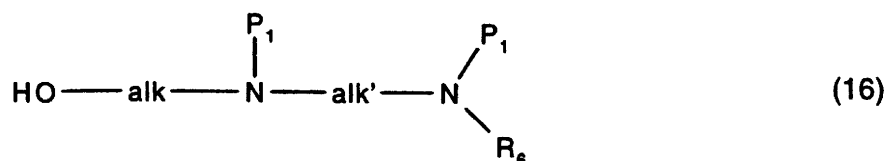
$\text{R}_6$ は、水素又は  $\text{C}_1 - \text{C}_4$  アルキルであり、

$\text{alk}$  及び  $\text{alk}'$  は、それぞれ他と独立して、直鎖又は分岐  $\text{C}_1 - \text{C}_{12}$  アルキレン基であり、そして  $\text{P}_1$  は、 $\text{Q}_1$  が請求項 1 で与えられた式 (5 a)、(5 b) 又は (5 c) 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 2 9】



(式中、

$\text{R}_6$ は、水素又は  $\text{C}_1 - \text{C}_4$  アルキルであり、 $\text{alk}$  と  $\text{alk}'$  は、それぞれ他と独立に、直鎖又は分岐  $\text{C}_1 - \text{C}_{12}$  アルキレン基であり、そして

$\text{P}_1$  は、 $\text{Q}_1$  が請求項 1 で与えられた式 (5 a)、(5 b) 又は (5 c) 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、更なるビニルモノマーの不存在又は存在下で光架橋結合することの特徴とする方法。

【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。