

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号
特表2025-513640
(P2025-513640A)

(43)公表日 令和7年4月24日(2025.4.24)

(51)国際特許分類		F I	テーマコード (参考)	
G 0 2 C	7/10 (2006.01)	G 0 2 C	7/10	2 H 0 0 6
G 0 2 C	7/04 (2006.01)	G 0 2 C	7/04	2 H 1 4 8
G 0 2 B	5/22 (2006.01)	G 0 2 B	5/22	4 J 0 0 2
C 0 8 L	101/00 (2006.01)	C 0 8 L	101/00	
C 0 8 L	101/14 (2006.01)	C 0 8 L	101/14	
		審査請求 未請求 予備審査請求 未請求	(全61頁) 最終頁に続く	

(21)出願番号	特願2024-563344(P2024-563344)	(71)出願人	510294139
(86)(22)出願日	令和5年3月4日(2023.3.4)		ジョンソン・アンド・ジョンソン・ビジョン・ケア・インコーポレイテッド
(85)翻訳文提出日	令和6年12月17日(2024.12.17)		Johnson & Johnson Vision Care, Inc.
(86)国際出願番号	PCT/IB2023/052020		アメリカ合衆国、32256 フロリダ州、ジャクソンビル、センチュリオン・パークウェイ 7500
(87)国際公開番号	WO2023/209449		7500 Centurion Parkway, Jacksonville, FL 32256, United States of America
(87)国際公開日	令和5年11月2日(2023.11.2)		
(31)優先権主張番号	17/661,110	(74)代理人	100224443
(32)優先日	令和4年4月28日(2022.4.28)		弁理士 加藤 弘行
(33)優先権主張国・地域又は機関	米国(US)	(74)代理人	100130384
(81)指定国・地域	AP(BW,CV,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV		
		最終頁に続く	

(54)【発明の名称】 生体材料の一体化のための光フィルタリング材料及びその方法

(57)【要約】

光フィルタリングのための組成物であって、組成物が、ベース材料と、ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、複数のナノ粒子が、約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、ベース材料中に分散された化学染料であって、化学染料が、ナノ粒子のスペクトル曲線のフィルタリングによって少なくとも部分的に消光されるスペクトルピークを有する、化学染料と、ベース材料中に分散された固定機構であって、固定機構が、メタクリロイル誘導モノマーを含む、固定機構と、複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

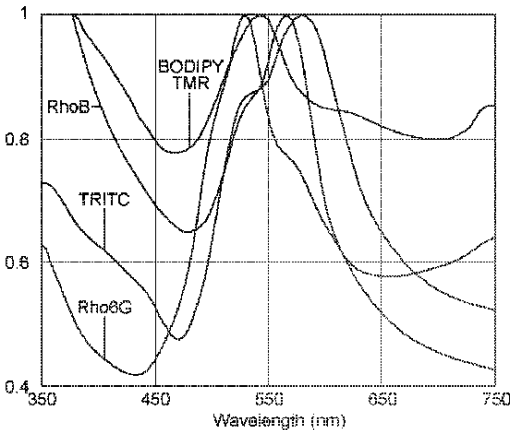


FIG. 5B

【特許請求の範囲】**【請求項 1】**

光フィルタリングのための組成物であって、前記組成物が、
ベース材料と、

前記ベース材料中に分散された複数の金ナノ粒子であって、前記複数の金ナノ粒子が、
約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収値を示す、複数の金ナノ粒子と、

前記ベース材料中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、前記複数の金ナノ
粒子の前記ピーク光吸収と少なくとも部分的に重複する放出ピークを有する、化学染料と
、

前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と 10
、を含む、組成物。

【請求項 2】

前記組成物が、約 58 nm ~ 118 nm の半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、請
求項 1 に記載の組成物。

【請求項 3】

前記ベース材料が、生体材料を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 4】

前記ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 5】

前記ベース材料が、ヒドロゲルを含む、請求項 1 に記載の組成物。 20

【請求項 6】

前記ベース材料が、シリコンベースのヒドロゲルを含む、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 7】

前記ベース材料が、HEMA ベースの材料を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 8】

前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、請求項 1 に記載の組成物
。

【請求項 9】

前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数の金ナノ粒子の前記一部が
約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、請求項 30
1 に記載の組成物。

【請求項 10】

前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 11】

前記化学染料が、ローダミン B、ローダミン 6 G、又は T R I T C のうちの 1 つ又は 2
つ以上を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 12】

前記ナノ粒子コーティング材料が、末端チオール化ポリ（エチレングリコール）を含む
、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 13】

前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ（ビニルピロリドン）を含む、請求項 1 に記載
の組成物。 40

【請求項 14】

前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整され
ている、請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 15】

請求項 1 に記載の組成物を作製する、方法。

【請求項 16】

光フィルタリングのための組成物であって、前記組成物が、
ベース材料と、

前記ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、前記複数のナノ粒子が、約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、

前記ベース材料中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、約 530 nm ~ 約 560 nm の範囲のアブソションピークを有する、化学染料と、

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

【請求項 17】

前記組成物が、約 58 nm ~ 118 nm の半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 18】

10

前記ベース材料が、生体材料を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 19】

前記ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 20】

前記ベース材料が、ヒドロゲルを含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 21】

前記ベース材料が、HEMA ベースの材料を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 22】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、請求項 16 に記載の組成物。

20

【請求項 23】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数のナノ粒子の前記一部が約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 24】

前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 25】

前記化学染料が、ローダミン B、ローダミン 6 G、又は TRITC のうちの 1 つ又は 2 つ以上を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 26】

30

前記ナノ粒子コーティング材料が、末端チオール化ポリ(エチレングリコール)を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 27】

前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルピロリドン)を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 28】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 29】

前記ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、請求項 16 に記載の組成物。

40

【請求項 30】

前記ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 31】

前記ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 32】

請求項 16 に記載の組成物を作製する、方法。

【請求項 33】

光フィルタリングのための組成物であって、前記組成物が、ベース材料と、

前記ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、前記複数のナノ粒子が、約 6

50

50 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、

前記ベース材料中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、前記ナノ粒子のスペクトル曲線のフィルタリングによって少なくとも部分的に消光されるスペクトルピークを有する、化学染料と、

前記ベース材料中に分散された固定機構であって、前記固定機構が、メタクリロイル誘導モノマーを含む、固定機構と、

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

【請求項 34】

前記組成物が、約 58 nm ~ 118 nm の半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、請求項 33 に記載の組成物。 10

【請求項 35】

前記ベース材料が、生体材料を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 36】

前記ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 37】

前記ベース材料が、ヒドロゲルを含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 38】

前記ベース材料が、HEMA ベースの材料を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 39】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、請求項 33 に記載の組成物。 20

【請求項 40】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数の前記一部が約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 41】

前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 42】

前記化学染料が、ローダミン B、ローダミン 6 G、又は TRITC のうちの 1 つ又は 2 つ以上を含む、請求項 33 に記載の組成物。 30

【請求項 43】

前記固定機構が、グリシジルメタクリレートを含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 44】

前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルアルコール)を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 45】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 46】

前記ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、請求項 33 に記載の組成物。 40

【請求項 47】

前記ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 48】

前記ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【請求項 49】

請求項 33 に記載の組成物を作製する、方法。

【請求項 50】

1 つ又は 2 つ以上のシリコーン含有構成成分と、1 つ又は 2 つ以上の親水性構成成分と、を含む反応性混合物のフリーラジカル反応生成物であるコンタクトレンズであって、前 50

記コンタクトレンズが、少なくとも約 20 重量パーセントの含水率及び少なくとも約 80 パーセントの酸素透過性を有し、前記コンタクトレンズが、光フィルタリングのための組成物を更に含み、前記組成物が、

前記コンタクトレンズ中に分散された複数のナノ粒子であって、前記複数のナノ粒子が、約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、

前記コンタクトレンズ中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、前記ナノ粒子のスペクトル曲線のフィルタリングによって少なくとも部分的に消光されるスペクトルピークを有する、化学染料と、

前記コンタクトレンズ中に分散された固定機構であって、前記固定機構が、メタクリロイル誘導モノマーを含む、固定機構と、

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含有する、コンタクトレンズ。

10

【請求項 51】

前記組成物が、約 58 nm ~ 118 nm の半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【請求項 52】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【請求項 53】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数の前記一部が約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

20

【請求項 54】

前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【請求項 55】

前記化学染料が、ローダミン B、ローダミン 6 G、又は T R I T C のうちの 1 つ又は 2 つ以上を含む、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【請求項 56】

前記固定機構が、グリシジルメタクリレートを含む、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

30

【請求項 57】

前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ（ビニルアルコール）を含む、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【請求項 58】

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【請求項 59】

前記ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【請求項 60】

前記ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

40

【請求項 61】

前記ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、請求項 50 に記載のコンタクトレンズ。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

（関連出願の相互参照）

本出願は、2022 年 4 月 28 日に提出された米国特許出願第 17 / 661 , 110 号の優先権を主張し、その全体が参照により本明細書に組み込まれる。

【0002】

50

(発明の分野)

本出願は、概して、光学フィルタに関する。より具体的には、本出願は、光をフィルタリングするために構成されたナノ粒子に関する。

【背景技術】

【0003】

選択的光遮断は、コンタクトレンズを含む多種多様な軟質生体材料にとって望ましい。安全性、治療、及び美容のために、特定の範囲の波長を遮断することができる生体材料が強く必要とされている。

【0004】

現在市販されているコンタクトレンズは、眼の曲率及び/又は屈折率を調整して、焦点合わせを改善する。しかしながら、そのような市販のコンタクトレンズは、色知覚などの視覚の他の態様を改善しない。損なわれた色知覚/識別は、ヒトの生活の質に著しく影響を与え得る。従来、コンタクトレンズゲルは、特定の光遮断のために使用されてきた。しかしながら、コンタクトレンズゲルを使用する特定の光遮断は有益な結果を有し得るが、コンタクトレンズゲルの結果として得られる色強度は、(蛍光染料の使用に起因して)明るいことが多いため、一般に美容上望ましくない。

【0005】

更に、選択的な光遮断へのアプローチが存在する一方で、生体材料内に均一に分散することができ、基本的な機構を変化させることなく目的の異なる波長に調整することができ、最小限の蛍光で光を遮断することができ、長期保存及びオートクレーブ処理に耐えることができ、かつ/又は商業的に容易に採用することができる解決策はない。

【0006】

サングラスにおける光学フィルタリングのための金属ナノ粒子の分散を記載する方法は、米国特許出願公開第2007/0298242(A1)号に記載されている。金ナノ粒子又は染料は、ポリマーマトリックス中に分散され、複合物は、レンズ自体として作用するか、又はレンズの片面若しくは両面上のコーティングとして使用されるか、のいずれかである。米国特許出願公開第2007/0298242(A1)号は、軟質材料への光遮断材料の一体化に必要なポリマーマトリックス内での光遮断材料の固定化に関する情報を開示していない。

【0007】

ナノ粒子をポリマーマトリックスに組み込む別の例は、米国特許出願公開第20080203592(A1)号に記載されており、そこでは、乾燥ヒドロゲルコンタクトレンズは、水和溶液中で水和され、水和溶液は、銀イオン、銀ナノ粒子、若しくはこれらの組み合わせ、潤滑剤若しくは湿潤剤、又はこれらの組み合わせを含む。銀ナノ粒子及び/又は潤滑剤若しくは湿潤剤は、抽出工程及び/又は水和工程中にヒドロゲルコンタクトレンズ上に吸着及び/又はヒドロゲルコンタクトレンズ内に封入される。記載されている方法は、金ナノ粒子及び/又は染料に変換可能であり得るが、この特許は、光遮断材料又はこれらの材料の最終製品への化学的埋め込みに関する情報を開示していない。ナノ粒子は、コンタクトレンズが硬化された後に添加され、これは、コンタクトレンズ内のナノ粒子分布に影響を有する。

【0008】

ローダミン染料を使用してコンタクトレンズに特定の光遮断能力を付与するための方法は、Badawy et al, 2018による論文に記載されている。この研究は、色覚異常を治療するための着色コンタクトレンズを製造するために、水中に溶解したローダミンB染料の溶液中でコンタクトレンズをインキュベートすることを伴う。米国特許出願公開第20080203592(A1)号と同様に、光遮断材料の取り込みは、コンタクトレンズへの受動拡散に依存しており、この刊行物は、他のプロセスを介して染料をコンタクトレンズに埋め込むことを試みていない。コンタクトレンズへの光遮断材料の一体化の欠如は、リン酸緩衝生理食塩水(phosphate-buffered saline、PBS)中でのインキュベーション後のコンタクトレンズ中の染料の枯渇をもたらす。この刊行物はまた、

10

20

30

40

50

異なる波長が同じ方法を使用して標的化され得ることを実証していない。異なる波長で光遮断材料を生成するために必要とされる染料のバリエーションは、生体材料への受動的取り込みに影響を及ぼし得る。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0009】

しかしながら、先行技術の方法及び材料に対する改善が必要とされている。

【課題を解決するための手段】

【0010】

本明細書では、光フィルタリングのためのシステム、組成物、及び方法が開示される。

10

【0011】

1つの一般的な態様は、光フィルタリングのための組成物を含む。組成物はまた、ベース材料と、ベース材料中に分散された複数の金ナノ粒子であって、複数の金ナノ粒子が、約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収値を示す、複数の金ナノ粒子と、ベース材料中に分散された化学染料であって、化学染料が、複数の金ナノ粒子のピーク光吸収と少なくとも部分的に重複する放出ピークを有する、化学染料と、複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む。

【0012】

1つの一般的な態様は、光フィルタリングのための組成物を含む。組成物はまた、ベース材料と、ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、複数のナノ粒子が、約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、ベース材料中に分散された化学染料であって、化学染料が、約530nm～約560nmの範囲の吸収ピークを有する、化学染料と、複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む。

20

【0013】

1つの一般的な態様は、本明細書に記載の光フィルタリングのための組成物を含むコンタクトレンズを含み、コンタクトレンズは、1つ又は2つ以上のシリコーン含有構成成分と、1つ又は2つ以上の親水性構成成分と、を含む反応性混合物のフリーラジカル反応生成物であり、コンタクトレンズは、少なくとも約20重量パーセント、好ましくは少なくとも約30重量パーセントの含水率、及び少なくとも約80パーセント、好ましくは少なくとも約100パーセントの酸素透過性を有する。

30

【図面の簡単な説明】

【0014】

以下の図面は、例として、ただし限定としてではなく、本開示で検討される様々な例を一般的に示したものである。図面においては、以下のとおりである。

【図1A】本開示の実施形態による表面修飾戦略を示す。

【図1B】本開示の実施形態による表面修飾戦略を示す。

【図1C】本開示の実施形態による表面修飾戦略を示す。

【図2A】本開示の実施形態による光遮断材料のためのプラットフォームとしての金ナノスターの選択を示す。

40

【図2B】本開示の実施形態による光遮断材料のためのプラットフォームとしての金ナノスターの選択を示す。

【図3】様々な量のシードを用いて合成されたナノ粒子の紫外線 - 可視 (Ultraviolet-Visible、UV - Vis) スペクトルを示す。

【図4A】ナノ粒子形態に対するシード添加の効果を示す。

【図4B】ナノ粒子形態に対するシード添加の効果を示す。

【図4C】ナノ粒子形態に対するシード添加の効果を示す。

【図4D】ナノ粒子形態に対するシード添加の効果を示す。

【図5A】本開示の実施形態による溶液中の染料 - ナノ粒子 (染料-nanoparticle、染料 - NP) 光遮断剤のスペクトルを示す。

50

【図 5 B】本開示の実施形態による溶液中の染料 - ナノ粒子 (染料-nanoparticle、染料 - NP) 光遮断剤のスペクトルを示す。

【図 6】本開示の実施形態による既存の方法と比較した染料 - NP 光遮断剤の色プロファイルを示す。

【図 7】ローダミン 6 G ナノ粒子光フィルタの紫外線 - 可視 (UV - Vis) スペクトルを示す。

【図 8】ローダミン B ナノ粒子光フィルタの紫外線 - 可視 (UV - Vis) スペクトルを示す。

【図 9】テトラメチルローダミン (tetramethylrhodamine、TRITC) ナノ粒子光フィルタの紫外線 - 可視 (UV - Vis) スペクトルを示す。

10

【図 10】5 - カルボキシ - テトラメチルローダミンナノ粒子光フィルタの紫外線 - 可視 (UV - Vis) スペクトルを示す。

【発明を実施するための形態】

【0015】

光の特定の範囲をフィルタリングする (例えば、遮断する) ことは、色知覚を改善するのに役立ち得る。非限定的な例として、赤色錐体と緑色錐体との間の領域における光をフィルタリングすることは、図 1 A に示されるように、赤色 - 緑色色覚異常を有する人々のコントラスト及び色知覚を改善するのに役立ち得る。有機染料は、非常に狭い範囲の可視光スペクトルを遮断するようにうまく適応される。しかしながら、それらは、経時的な漏出 (それらがコンタクトレンズマトリックス内に捕捉されないため)、及び乏しい患者対応性 (蛍光性であり、非常に明るく着色されているため) を被る。個々の必要性は劇的に変化し得るため、特定の光フィルタリングが達成される機構は、モジュール式であり、異なる波長に対して調整可能であるべきである。

20

【0016】

本開示は、ナノ粒子に関する。そのようなナノ粒子は、調整可能な光物理的特性を示し得る。調整可能な光物理的特性を示すことによって、ナノ粒子は、特定の波長の光を吸収し、散乱させ、かつ / 又は消滅させ得る。そのような波長は、可視スペクトルのどこにでもあり得る。ナノ粒子は、デバイスを生成するために、光学的に透明な基板内に調整可能な光学フィルタとして一体化され得る。そのようなデバイスは、眼科用デバイスを含み得るが、他のデバイスも可能である。非限定的な例として、眼科用デバイスは、コンタクト

30

【0017】

本開示は、生体材料の一体化のための光遮断材料及びその方法を提供する。本開示は、コンタクトレンズのための現在の光遮断技術及び材料における重要なギャップに対処する。生体材料の一体化のための光遮断材料を提供する方法は、ナノ粒子を選択することを含む。そのようなナノ粒子は、金ナノ粒子を含み得る。そのような金ナノ粒子は、特定の形状を更に含み得る。本開示は、化学染料 (例えば、食品調製又は着色において使用される染料) に更に関する。本開示は、安定化機構に更に関する。そのような安定化機構は、選択されたナノ粒子を安定化するように構成されたナノ粒子コーティング材料を含み得る。本開示は、ナノ粒子と化学染料との結合に関する。そのような結合は、化学結合を含み得る。ナノ粒子と化学染料との組み合わせによって、より強度の低い色を有する特定の光フィルタリングが可能になる。材料の色強度の減少は、化学染料の蛍光がナノ粒子によって消光されることに起因し得る。化学染料は、蛍光消光を達成するようにナノ粒子に近接し得る。蛍光消光は当技術分野で知られており、染料によって放出される初期光よりも十分に長い波長における光を金ナノ粒子が吸収することによって起こり得る。したがって、方法は、ナノ粒子を化学染料に化学的に結合させるために架橋剤を使用することを含み得る

40

50

。架橋剤の非限定的な例は、短鎖チオールを含み得る。本開示は、安定化機構に更に関する。安定化機構は、化学染料に関連する安定化品質を向上し得る。安定化機構は、ナノ粒子にコンジュゲートされた化学染料を部分的に置換し得る。安定化機構は、長鎖ポリマーを含み得る。長鎖ポリマーは、立体障害の増加を介してナノ粒子を安定化し得る。安定化機構はまた、生体適合性であり得、ゲル材料と相溶性であり得る。そのような相溶性は、生体材料中のナノ粒子の均質な分散を可能にし得る。安定化機構はまた、鎖の絡み合いを介して生体材料の鎖に介入し、ナノ粒子をゲル中に長期間固定し得る。目的の異なる波長を標的とする異なる染料（又はこれらの組み合わせ）などの追加の能力を使用することができる。様々な染料の蛍光を消光する金ナノ粒子の追加の形状を使用してもよい。

【 0 0 1 8 】

10

本開示は、金属ナノ粒子などのナノ粒子、より具体的には、例えば、金ナノ粒子に関する。金ナノ粒子への言及は、金属ナノ粒子を含む他のナノ粒子に適用されてもよい。ナノ粒子は、金ナノ粒子であり得る。金ナノ粒子は、約 6 5 0 n m ~ 最大約 8 0 0 n m の範囲の光を遮断する星形状金ナノ粒子であり得る。そのような吸光度プロファイルは、星形状金ナノ粒子の溶液を青色に見えるようにし得る。金ナノ粒子の吸光度プロファイルは、形態に依存する。形態は、サイズ及び形状を含み得る。したがって、ナノ粒子は、蛍光消光を最適化するように、又は最終製品の光フィルタリングスペクトルを調整するように修飾され得る。そのような修飾は、形態の変化を含み得る。本明細書に記載の方法及び材料において使用するためのナノ粒子の選択は、ナノ粒子の光フィルタリング特徴に対する制御を可能にする。

20

【 0 0 1 9 】

本開示は、化学染料に関する。化学染料は、5 5 4 n m にピーク吸光度を有するローダミンベースの染料を含み得る。非限定的な例として、染料は、ローダミン B を含み得る。ローダミン B は、非毒性であり、水溶性が高くかつ熱及び光に安定的であり、生体材料における長期特異的光フィルタリングを可能にする。染料は、蛍光性であり得る。染料の蛍光は、金ナノ粒子の吸光度ピークと実質的に重複し得る放出ピークを含み得、蛍光消光をもたらす。本明細書に記載されるような金ナノ粒子と染料との組み合わせを提供することは、ローダミン B 単独、明るい蛍光色を有する任意のそのような他の染料、又はコンタクトレンズのための任意のそのような他の市販の光フィルタリング材料と比較した場合に、弱められた色を有する材料をもたらし得る。いくつかの実施形態において、最終色は、紫色を含み得る。染料の同一性は、光フィルタリング特徴を調整するために、任意の他の染料（例えば、ローダミン 6 G ）に合理的に変更され得るか、又はそれらと組み合わせられ得る。

30

【 0 0 2 0 】

本開示は、安定化機構に更に関する。安定化機構は、ナノ粒子コーティングを含み得る。ナノ粒子コーティング材料は、ポリマーを含み得る。そのようなポリマーは、末端チオール化ポリ（エチレングリコール）（poly(ethylene glycol)、P E G ）ポリマーを含み得るが、当技術分野で既知の他のそのようなポリマーが使用され得る。P E G ポリマーは、立体障害を介して金ナノ粒子を安定化させ得る。P E G は、水性媒体及びコンタクトレンズ前駆体材料の両方に良好に分散することができる高度に安定した生体適合性ポリマーである。非限定的な例として、コンタクトレンズ前駆体は、H E M A ベースの E t a f i l c o n A を含み得る。

40

【 0 0 2 1 】

したがって、本開示の方法及び材料は、特定の光フィルタリング材料を生成するための化学染料と金ナノ粒子との組み合わせの使用に関する。蛍光消光は、ナノ粒子表面への化学染料の近接の結果であり得る。本開示は、提供される金ナノ粒子の表面に染料をコンジュゲートする方法に関する。そのようなコンジュゲーションは、光フィルタリング材料の蛍光（したがって色強度）の低減をもたらし得る。そのようにコンジュゲートされた光フィルタリング材料は、光フィルタリング能力を維持することができる。特定の金ナノ粒子形状の使用は、そのような蛍光消光を更に可能にする。

50

【 0 0 2 2 】

本開示の方法及び材料は、化粧品及び／又は治療用コンタクトレンズ用にカスタマイズされ得る。生体材料への化学的一体化は、光フィルタリング材料の固定化及び選択的パターン化を可能にし得る。本開示の方法及び材料は、様々な生体材料への光フィルタリング材料の一体化に関する。本開示の方法及び材料は、様々な染料及び／又は様々な金ナノ粒子の組み合わせに更に関する。そのような組み合わせは、調整可能な非常に複雑な光フィルタリングスペクトルを可能にし得る。様々な金ナノ粒子は、様々な形状の様々な金ナノ粒子を含み得る。本開示の方法及び材料は、長期安定性及び材料の一体化に関する。長期安定性及び材料の一体化は、他の使用も存在するが、受動感知用途及び／又は市販製品の標識化を可能にする。

10

【 0 0 2 3 】

本開示は、固定機構に関する。そのような機構は、（鎖の絡み合いを介する物理的一体化とは対照的に）ナノ粒子が生体材料に化学的に一体化されることを可能にし得る。そのような機構は、ポリマーを含み得る。非限定的な例として、メタクリロイル誘導モノマー（グリシジルメタクリレート）は、本明細書に記載の材料を生体材料に組み込むための固定機構として選択され得る。そのような生体材料は、HEMAベースのコンタクトレンズを含み得る。メタクリレート化学基は、コンタクトレンズのUV誘発重合に関与し得るC=C二重結合を含む。更に、メタクリレートは、HEMAベースのコンタクトレンズの典型的な構成成分であるため、メタクリレートを使用するこれらの光フィルタリング材料の一体化は、最終製品に著しい影響を及ぼさない。方法は、そのような固定機構を使用することによって、最終材料の清澄性及び透明性を維持することを含み得る。更なる非限定的な例として、ポリ（ビニルアルコール）（poly(vinyl alcohol)、PVA）を利用して、化学的一体化を達成し得る。PVAは更に、ナノ粒子を安定化させ得る。PVAはまた、生体材料への化学的一体化のために遊離ヒドロキシル（-OH）基に結合され得る固定機構を提供し得る。当技術分野で既知の他のポリマーも使用され得る。

20

【 0 0 2 4 】

方法は、ナノ粒子コーティング材料を提供することを更に含み得る。例えば、ナノ粒子コーティング材料は、ポリ（ビニルアルコール）（PVA）であってもよい。PVAは、安定しており、HEMAベースのコンタクトレンズ材料と高度に相溶性であることが知られている。PVAは、金ナノ粒子を安定化させ、カルボニルジイミダゾール媒介エステル化を介して化学染料をコンジュゲートし、エステル交換を介してモノマーをコンジュゲートすることができる。

30

【 0 0 2 5 】

本開示は、ベース材料に関する。そのようなベース材料は、生体材料、生体材料マトリックス、ヒドロゲル、及び当技術分野で既知の他のそのような材料を含み得る。ベース材料の非限定的な例が以下に記載される。本開示は、ナノ粒子に更に関する。そのようなナノ粒子は、金を含み得る。金ナノ粒子は、金シードから成長されたものであり得るが、他の合成方法も当技術分野で知られている。そのようなナノ粒子は、形状を含み得る。そのような形状は、異方性であり得る。そのような形状は、星形状を含み得る。代替的な形状は、当技術分野において知られており、立方体形状、ナノロッド形状、八面体形状、十面体形状、立方八面体形状、四面体形状、菱形十二面体形状、切頭複正方柱形状、又は切頭二重四面体形状を含み得るが、これらに限定されない。そのような金ナノ粒子は、様々な範囲の光を遮断することができる。非限定的な例として、金ナノ粒子は、約650nm～最大約800nmの範囲の光を遮断し得る。代替の範囲が存在し、約675nm～最大約800nm、約700nm～最大約800nm、約725nm～最大約800nm、約750nm～最大約800nm、約775nm～最大約800nm、約650nm～最大約775nm、約650nm～最大約750nm、約650nm～最大約725nm、約650nm～最大約700nm、又は約650nm～最大約675nmを含み得るが、これらに限定されない。本開示は、化学染料に更に関する。化学染料は、約530nm～最大約560nmの範囲の光を遮断し得る。代替の範囲が存在し、約540nm～最大約56

40

50

0 nm、約 550 nm ~ 最大約 560 nm、約 530 nm ~ 最大約 550 nm、約 530 nm ~ 最大約 550 nm、又は約 530 nm ~ 最大約 540 nm を含み得るが、これらに限定されない。化学染料は、光を更に放出し得る。光放出は、蛍光、リン光、及び他の既知の現象を介して起こり得る。化学染料の放出は、金ナノ粒子の光フィルタリング範囲と十分に重複するように起こり得る。そのような化学染料は、有機化学染料を含み得る。非限定的な例として、有機化学染料は、ローダミン 6 G、ローダミン B、テトラメチルローダミン (T R I T C)、及び 5 - カルボキシ - テトラメチルローダミンを含むが、これらに限定されないローダミンベースの染料を含み得る。化学染料はまた、N - ヒドロキシスクシンイミド (N-hydroxysuccinimide、N H S) によって官能化され得る任意の染料を含み得る。本開示は、ナノ粒子コーティング材料 (すなわち、安定化機構) に更に関する。そのような安定化機構は、ポリマーを含み得る。そのようなポリマーは、様々な分子量を含み得る。そのようなポリマーは、末端チオール化ポリ (エチレングリコール) (terminally thiolated poly(ethyleneglycol)、P E G - S H) を含み得る。代替的なポリマーは、当技術分野において知られており、ポリ (エチレングリコール) (P E G)、ポリカーボネート、ポリ (ビニルアルコール) (P V A)、ポリビニルピロリドン (polyvinylpyrrolidone、P V P)、ポリスチレン (polystyrene、P S)、ポリカプロラクトン (polycaprolactone、P C L)、エチレンオリゴマー又はポリエチレン (polyethylene、P E)、ポリプロピレン (polypropylene、P P)、及びポリ (メチルメタクリレート) (poly(methyl methacrylate)、P M M A)、並びにこれらのコポリマー又はブレンドを含み得るが、これらに限定されない。そのようなポリマーは、約 55 k D a ~ 最大約 1300 k D a の分子量を有する P V P を含み得る。本開示は、金ナノ粒子を安定化機構に結合する方法に関する。結合は、化学的コンジュゲーションを介して起こり得る。そのような結合は、選択的であり得る。そのような結合は、ナノ粒子のコロイド安定性及び / 又は熱安定性、並びに生体適合性を向上させ得る。本開示は、固定機構に関する。そのような固定機構は、メタクリレートを含み得る。そのような固定機構は、メタクリロイル誘導モノマーを含み得る。非限定的な例として、固定機構は、ポリビニルアルコール (P V A) 又はグリシジルメタクリレートを含み得る。そのようなメタクリレートは、チオール化メタクリレート二量体を更に含み得る。そのようなチオール化メタクリレート二量体は、ビス (2 - メタクリロイル) オキシエチルジスルフィド (すなわち、D S D M A) を含み得るが、他の例も存在する。他のそのような例としては、エチレングリコールジメタクリレート (ethylene glycol dimethacrylate、E G D M A)、テトラエチレングリコールジメタクリレート (tetraethylene glycol dimethacrylate、T E G D M A)、トリメチロールプロパントリメタクリレート (trimethylolpropane trimethacrylate、T M P T M A)、トリアリルシアヌレート (triallyl cyanurate、T A C)、グリセロールトリメタクリレート、メタクリルオキシエチルビニルカーボネート (methacryloxyethyl vinylcarbonate、H E M A V c)、アリルメタクリレート、メチレンビスアクリルアミド (methylene bisacrylamide、M B A)、ポリエチレングリコールジメタクリレート、1, 4 - フェニレンジアクリレート、1, 4 - フェニレンジメタクリレート、2, 2 - ビス (4 - メタクリルオキシフェニル) - プロパン、2, 2 - ビス [4 - (2 - アクリルオキシエトキシ) フェニル] プロパン、2, 2 - ビス [4 - (2 - ヒドロキシ - 3 - メタクリルオキシプロポキシ) - フェニル] プロパン、及び 4 - ビニルベンジルメタクリレートが挙げられ得るが、これらに限定されない。固定機構はまた、ポリマーを含み得る。本開示は、金ナノ粒子を固定機構に結合する方法に関する。本開示は、有機染料への固定機構の結合に更に関する。そのような結合において、有機染料に結合した固定機構は、金ナノ粒子に更に結合し得る。結合は、化学的コンジュゲーションを介して起こり得る。そのような結合は、選択的であり得る。そのような結合は、ナノ粒子のコロイド安定性及び / 又は熱安定性、並びに生体適合性を向上させ得る。本開示は、固定機構をベース材料に結合する方法に更に関する。ベース材料は、上記のような生体材料を含み得る。金ナノ粒子及びベース材料への固定機構のコンジュゲーションは、架橋を含み得る。そのような架橋は、ベース材料へのナノ粒子の一体化を容易にし得

る。

【0026】

本開示は組成物に関し、組成物は、ベース材料、ナノ粒子、化学染料、ナノ粒子コーティング材料（すなわち、安定化機構）、固定機構、又はこれらの任意の組み合わせを含み得る。そのような組成物は、それがコンジュゲートされる金ナノ粒子と十分に重複する放出スペクトルを有する光を放出する化学染料を含み得る。これは、消光をもたらし得る。ナノ粒子光吸収は、ナノ粒子形態を調整することを介して調整され得る。形態は、長軸及び短軸の長さの商によって定義されるアスペクト比、体積、鋭さ、並びに／又は他の関連する特徴を構成することによって調整され得る。アスペクト比は、約1.9～最大約2.9に調整され得るが、他のそのようなアスペクト比も可能であり得る。非限定的な例として、アスペクト比は、約1.9～最大約2.8、約1.9～最大約2.7、約1.9～最大約2.6、約1.9～最大約2.5、約1.9～最大約2.4、約1.9～最大約2.3、約1.9～最大約2.2、約1.9～最大約2.1、約1.9～最大約2.0、約2.0～最大約2.8、約2.0～最大約2.7、約2.0～最大約2.6、約2.0～最大約2.5、約2.0～最大約2.4、約2.0～最大約2.3、約2.0～最大約2.2、又は約2.0～最大約2.1の範囲であり得る。体積は、約250nm³～最大約30,000nm³に調整され得るが、他のそのような体積も可能であり得る。非限定的な例として、体積は、約1,250nm³～最大約30,000nm³、約2,250nm³～最大約30,000nm³、約3,250nm³～最大約30,000nm³、約4,250nm³～最大約30,000nm³、約5,250nm³～最大約30,000nm³、約6,250nm³～最大約30,000nm³、約7,250nm³～最大約30,000nm³、約8,250nm³～最大約30,000nm³、約9,250nm³～最大約30,000nm³、約10,250nm³～最大約30,000nm³、約11,250nm³～最大約30,000nm³、約12,250nm³～最大約30,000nm³、約13,250nm³～最大約30,000nm³、約14,250nm³～最大約30,000nm³、約15,250nm³～最大約30,000nm³、約16,250nm³～最大約30,000nm³、約17,250nm³～最大約30,000nm³、約18,250nm³～最大約30,000nm³、約19,250nm³～最大約30,000nm³、約20,250nm³～最大約30,000nm³、約21,250nm³～最大約30,000nm³、約22,250nm³～最大約30,000nm³、約23,250nm³～最大約30,000nm³、約24,250nm³～最大約30,000nm³、約25,250nm³～最大約30,000nm³、約26,250nm³～最大約30,000nm³、約27,250nm³～最大約30,000nm³、約28,250nm³～最大約30,000nm³、又は約29,250nm³～最大約30,000nm³に調整され得る。

【0027】

最終的な光遮断プロファイルは、様々なナノ粒子、化学染料、ナノ粒子コーティング材料（すなわち、安定化機構）、固定機構、及びこれらの組み合わせの使用を介して調整することができる。そのような調整は、約58nm～最大約118nmの半値全幅（Full-Width at Half Maximum、FWHM）値をもたらし得る。非限定的な例として、FWHM値は、約58nm～最大約108nm、約58nm～最大約98nm、約58nm～最大約88nm、約58nm～最大約78nm、又は約58nm～最大約68nmの範囲であり得る。

【0028】

本開示に関連する追加の能力が存在する。本開示は、ナノ粒子の表面にグラフト化され得る様々なポリマーに更に関する。様々なポリマーの使用は、様々な生体材料へのナノ粒子の一体化を可能にし得る。そのようなナノ粒子は、様々な形状を含み得る。したがって、本開示は、特定の生体材料とは無関係である。更に、本開示は、実質的に任意の目的の生体材料への、様々な安定化機構を更に含む様々な形状のナノ粒子の組み込みに関する。生体材料の非限定的な例は、ソフトコンタクトレンズの形成に使用するのに好適なヒドロ

ゲル又はシリコーンヒドロゲル材料を含み得る。そのような材料は当技術分野において知られており、グループ 1 - 低水分 ($< 50\% \text{H}_2\text{O}$) 非イオン性ヒドロゲルポリマー (例えば、テフィルコン、テトラフィルコン A、クロフィルコン、ヘルフィルコン A、ヘルフィルコン B、マフィルコン、ポリマコン、ヒオキシフィルコン B) ; グループ 2 - 高水分 ($> 50\% \text{H}_2\text{O}$) 非イオン性ヒドロゲルポリマー (例えば、サーフィルコン A、リドフィルコン A、リドフィルコン B、ネトラフィルコン A、ヘフィルコン B、アルファフィルコン A、オマフィルコン A、オマフィルコン B、バサーフィルコン A、ヒオキシフィルコン A、ヒオキシフィルコン D、ネルフィルコン A、ヒラフィルコン A、ヒラフィルコン B、アコフィルコン A、ネソフィルコン A) ; グループ 3 - 低水分 ($< 50\% \text{H}_2\text{O}$) イオン性ヒドロゲルポリマー (例えば、ブフィルコン A、デルタフィルコン A、フェムフィルコン) ; グループ 4 - 高水分 ($> 50\% \text{H}_2\text{O}$) イオン性ヒドロゲルポリマー (例えば、ブフィルコン A、ペルフィルコン A、エタフィルコン A、フォコフィルコン A、オクフィルコン A、オクフィルコン B、オクフィルコン C、オクフィルコン D、オクフィルコン E、オクフィルコン F、フェムフィルコン A、メタフィルコン A、メタフィルコン B、ピフィルコン A) ; 及びシリコーンヒドロゲルポリマー (例えば、ロトラフィルコン A、ロトラフィルコン B、ガリーフィルコン A、セノフィルコン A、セノフィルコン C、シフィルコン A、コムフィルコン A、エンフィルコン A、バラフィルコン A、デレフィルコン A、ナラフィルコン B、ナラフィルコン A、ステンフィルコン A、ソモフィルコン A、ファンフィルコン A、サムフィルコン A、エラストフィルコン) を含む。

10

20

【0029】

定義

本発明は、以下の説明に記載されている構造又はプロセス工程の詳細に限定されるものではないことを理解されたい。本発明は他の実施形態が可能であり、本明細書に記載の教示を用いた様々な方法によって実行又は実施することが可能である。

【0030】

本開示において使用される用語に関しては、以下の定義が提供される。

【0031】

別段の定めがある場合を除き、本明細書で用いられる全ての科学技術用語は、本発明が属する技術分野における当業者が一般に理解するものと同じ意味を有する。ポリマーの定義は、Compendium of Polymer Terminology and Nomenclature, IUPAC Recommendations 2008, edited by: Richard G. Jones, Jaroslav Kahovec, Robert Stepto, Edward S. Wilks, Michael Hess, Tatsuki Kitayama, and W. Val Metanovskii に開示される定義に一致する。本明細書において言及される刊行物、特許出願、特許、及び他の参考文献は全て、参照により本明細書に組み込まれる。

30

【0032】

本明細書で使用される場合、「(メタ)」という用語は、任意選択的なメチル置換を意味する。したがって、「(メタ)アクリレート」等の用語は、メタクリレート及びアクリレートの両方を意味する。

40

【0033】

「個体」という用語は、ヒト及び脊椎動物を含む。

【0034】

「眼科用デバイス」という用語は、眼又は眼の表面を含む眼の任意の一部の中又は上に存在する任意のデバイスを指す。これらのデバイスは、光学補正、外見向上、視界向上、治療効果 (例えば、包帯として)、若しくは医薬構成成分及び栄養補助構成成分などの活性構成成分の供給、又は前述の任意の組み合わせを提供することができる。眼科用デバイスの例としては、限定されるものではないが、レンズ、光学及び眼挿入物 (限定されるものではないが、涙点プラグを含む) などが挙げられる。「レンズ」としては、ソフトコンタクトレンズ、ハードコンタクトレンズ、ハイブリッドコンタクトレンズ、眼内レンズ、

50

及びオーバーレイレンズが挙げられる。眼科用デバイスは、コンタクトレンズを含み得る。

【 0 0 3 5 】

「コンタクトレンズ」という用語は、個体の眼の角膜上に置くことができる眼科用デバイスを指す。コンタクトレンズは、創傷治癒、薬剤若しくは栄養補助剤の送達、診断的評価若しくはモニタリング、紫外線光フィルタリング、可視光若しくはグレアの低減、又はこれらの任意の組み合わせを含む、矯正的、美容的、又は治療的な利益を提供し得る。コンタクトレンズは、技術分野で既知の任意の適切な材料であり得、ソフトレンズ、ハードレンズ、又は弾性率、含水率、光透過、若しくはこれらの組み合わせなどの、異なる物理的特性、機械的特性、若しくは光学的特性を有する少なくとも2つの別個の部分を含むハイブリッドレンズであり得る。

10

【 0 0 3 6 】

本発明の眼科用デバイス及びレンズは、シリコーンヒドロゲル又は従来のヒドロゲルで構成され得る。シリコーンヒドロゲルは、典型的には、硬化されたデバイス内で互いに共有結合した、少なくとも1つの親水性モノマー及び少なくとも1つのシリコーン含有構成成分を含む。

【 0 0 3 7 】

本明細書で使用される場合、「物理吸収」又は「化学吸収」という用語は、原子、分子、又は粒子が気体、液体、又は固体材料のバルク相に入り、体積内に取り込まれるプロセスを指す。この様式での吸収は、可溶性、濃度勾配、温度、圧力、及び当技術分野で既知の他の駆動力によって駆動され得る。

20

【 0 0 3 8 】

本明細書で使用される場合、「吸着」は、表面上への種の堆積として定義される。表面に吸着される種は吸着質として知られており、吸着が起こる表面は吸着剤として知られている。吸着剤の例は、粘土、シリカゲル、コロイド、金属、ナノ粒子などを含み得る。吸着は、化学的又は物理的吸着を介して起こり得る。化学吸着は、吸着質が化学結合を介して吸着剤に保持される場合に起こり得るが、物理吸着は、吸着質が弱いファンデルワールス力を介して吸着剤に結合される場合に起こり得る。

【 0 0 3 9 】

本明細書で使用される場合、「抗菌」は、細菌の有害な効果を死滅又は低減させることが意図されることを意味する。

30

【 0 0 4 0 】

本明細書で使用される場合、「コロイド」は、1つの物質が別の物質中に懸濁されている分散液を指す。当技術分野におけるコロイドの多くの例は、ポリマーを含む。この態様において、ポリマーは、コロイド中に懸濁された粒子の表面に吸着され得るか若しくは化学的に結合され得るか、又はポリマーは、コロイド懸濁液中で自由に移動し得る。懸濁液中の粒子上のポリマーの存在は、「コロイド安定性」に直接関連する可能性があり、「コロイド安定性」は、コロイド懸濁液が沈降を受ける傾向を指す。セデメンテーション (Sedimentation) は、コロイドからの粒子の落下をもたらす。粒子に吸着又は化学的に結合したポリマーは、そのコロイド安定性に影響を及ぼし得る。

40

【 0 0 4 1 】

本明細書で使用される場合、「拡散」という用語は、1つの領域から別の領域への物質の正味の流れが存在するプロセスを指す。そのようなプロセスの例は、「表面拡散」であり、粒子は、対象の表面の1つのエリアから同じ表面の別のエリアに移動する。これは、熱応力又は適用された圧力によって引き起こされ得る。

【 0 0 4 2 】

本明細書で使用される場合、「界面活性剤」は、液体に添加された場合に、その表面張力を低減させ、それによって、その広がり特性及び湿潤特性を増加させる物質を指す。典型的な界面活性剤は、部分的に親水性であり、部分的に親油性であり得る。

【 0 0 4 3 】

50

本明細書で使用される場合、「湿潤剤」という用語は、水の表面張力を低減し、したがって液体が表面上により容易に広がるか、又は表面を「濡らす」ことを可能にする材料を指す。水の高い表面張力は、水ベースの溶液が使用される多くの工業プロセスにおいて問題を引き起こすが、それは、溶液が適用される表面を溶液が濡らすことができないためである。湿潤剤は、水の表面張力を低減させ、したがって水ベースの溶液が広がるのを助けるために一般に使用される。

【 0 0 4 4 】

「標的高分子」は、モノマー、マクロマー、プレポリマー、架橋剤、開始剤、添加剤、希釈剤などを含む反応性モノマー混合物から合成されている高分子を意味する。

【 0 0 4 5 】

「重合性化合物」という用語は、1つ又は2つ以上の重合性基を含有する化合物を意味する。この用語は、例えば、モノマー、マクロマー、オリゴマー、プレポリマー、架橋剤などを包含する。

【 0 0 4 6 】

「重合性基」は、フリーラジカル及び/又はカチオン重合、例えばラジカル重合開始条件に供されたときに重合することができる炭素-炭素二重結合などの、連鎖成長重合を受けることができる基である。フリーラジカル重合性基の非限定的な例としては、(メタ)アクリレート、スチレン、ビニルエーテル、(メタ)アクリルアミド、N-ビニルラクタム、N-ビニルアミド、O-ビニルカルバメート、O-ビニルカーボネート、及び他のビニル基が挙げられる。好ましくは、フリーラジカル重合性基は、(メタ)アクリレート、(メタ)アクリルアミド、N-ビニルラクタム、N-ビニルアミド、及びスチリル官能基、並びに前述のうちの任意の混合物を含む。より好ましくは、フリーラジカル重合性基は、(メタ)アクリレート、(メタ)アクリルアミド、及びこれらの混合物を含む。重合性基は、非置換であってもよく、又は置換されていてもよい。例えば、(メタ)アクリルアミド中の窒素原子は、水素に結合されてもよいが、又は、水素は、アルキル若しくはシクロアルキル(それ自体が更に置換されてもよい)によって置換されてもよい。

【 0 0 4 7 】

限定されるものではないが、バルク、溶液、懸濁液、及びエマルジョンを含む、任意の種類のフリーラジカル重合、並びに、安定性フリーラジカル重合、窒素酸化物媒介リビング重合、原子移動ラジカル重合、可逆的付加開裂連鎖移動重合、有機テルル媒介リビングラジカル重合などの、制御ラジカル重合法のいずれかを使用することができる。

【 0 0 4 8 】

「モノマー」は、連鎖成長重合、特にフリーラジカル重合を受け、それによって標的高分子の化学構造内に繰り返し単位を作り出すことができる単官能性分子である。いくつかのモノマーは、架橋剤として作用することができる二官能性不純物を有する。「親水性モノマー」はまた、5重量パーセントの濃度にて25で、脱イオン水と混合したときに、透明な単相溶液が得られるモノマーである。「親水性構成成分」は、5重量パーセントの濃度にて25で、脱イオン水と混合したときに、透明な単相溶液が得られる、モノマー、マクロマー、プレポリマー、開始剤、架橋剤、添加剤、又はポリマーである。「疎水性構成成分」は、25の脱イオン水中でわずかに可溶性又は不溶性であるモノマー、マクロマー、プレポリマー、開始剤、架橋剤、添加剤、又はポリマーである。

【 0 0 4 9 】

「高分子」は、1500を超える数平均分子量を有する有機化合物であり、反応性であっても、非反応性であってもよい。

【 0 0 5 0 】

「マクロモノマー」又は「マクロマー」は、連鎖成長重合、特にフリーラジカル重合を受け、それによって標的高分子の化学構造内に繰り返し単位を作り出すことができる1つの基を有する高分子である。一般的に、マクロマーの化学構造は、標的高分子の化学構造とは異なり、すなわち、マクロマーのペンダント基の繰り返し単位は、標的高分子又はその主鎖の繰り返し単位とは異なる。モノマーとマクロマーとの間の差は、ペンダント基の

10

20

30

40

50

化学構造、分子量、及び分子量分布のうちの１つに過ぎない。結果として、かつ本明細書で使用される場合、特許文献は、約 1, 500 ダルトン以下の比較的低い分子量を有する重合性化合物としてモノマーを定義することがあり、これは、本質的にいくつかのマクロマーを含む。具体的には、モノメタクリルオキシプロピル末端モノ - n - ブチル末端ポリジメチルシロキサン（分子量 = 500 ~ 1500 g/mol）（mPDMS）及びモノ - （2 - ヒドロキシ - 3 - メタクリルオキシプロピル） - プロピルエーテル末端モノ - n - ブチル末端ポリジメチルシロキサン（分子量 = 500 ~ 1500 g/mol）（OH - mPDMS）は、モノマー又はマクロマーと称され得る。更に、特許文献は、１つ又は２つ以上の重合性基を有するものとしてマクロマーを定義することがあり、マクロマーの一般的な定義を本質的に拡大してプレポリマーを含む。結果として、かつ本明細書で使用される場合、二官能性及び多官能性マクロマー、プレポリマー、及び架橋剤は、互換的に使用され得る。 10

【0051】

「シリコン含有構成成分」は、典型的には、シロキシ基、シロキサン基、カルボシロキサン基、及びこれらの混合物の形態で、少なくとも１つのケイ素 - 酸素結合を有する、反応性混合物中のモノマー、マクロマー、プレポリマー、架橋剤、開始剤、添加剤、又はポリマーである。

【0052】

本発明において有用であるシリコン含有構成成分の例は、米国特許第 3, 808, 178 号、同第 4, 120, 570 号、同第 4, 136, 250 号、同第 4, 153, 641 号、同第 4, 740, 533 号、同第 5, 034, 461 号、同第 5, 070, 215 号、同第 5, 244, 981 号、同第 5, 314, 960 号、同第 5, 331, 067 号、同第 5, 371, 147 号、同第 5, 760, 100 号、同第 5, 849, 811 号、同第 5, 962, 548 号、同第 5, 965, 631 号、同第 5, 998, 498 号、同第 6, 367, 929 号、同第 6, 822, 016 号、同第 6, 943, 203 号、同第 6, 951, 894 号、同第 7, 052, 131 号、同第 7, 247, 692 号、同第 7, 396, 890 号、同第 7, 461, 937 号、同第 7, 468, 398 号、同第 7, 538, 146 号、同第 7, 553, 880 号、同第 7, 572, 841 号、同第 7, 666, 921 号、同第 7, 691, 916 号、同第 7, 786, 185 号、同第 7, 825, 170 号、同第 7, 915, 323 号、同第 7, 994, 356 号、同第 8, 022, 158 号、同第 8, 163, 206 号、同第 8, 273, 802 号、同第 8, 399, 538 号、同第 8, 415, 404 号、同第 8, 420, 711 号、同第 8, 450, 387 号、同第 8, 487, 058 号、同第 8, 568, 626 号、同第 8, 937, 110 号、同第 8, 937, 111 号、同第 8, 940, 812 号、同第 8, 980, 972 号、同第 9, 056, 878 号、同第 9, 125, 808 号、同第 9, 140, 825 号、同第 9, 156, 934 号、同第 9, 170, 349 号、同第 9, 217, 813 号、同第 9, 244, 196 号、同第 9, 244, 197 号、同第 9, 260, 544 号、同第 9, 297, 928 号、同第 9, 297, 929 号、及び欧州特許第 080539 号に見出すことができる。これらの特許は、それら全体が参照により本明細書に組み込まれる。 20 30 40

【0053】

「ポリマー」は、重合中に使用されるモノマーの繰り返し単位で構成される標的高分子である。例示的なポリマーは、ポリ（エチレングリコール）（PEG）、ポリカーボネート、ポリ（ビニルアルコール）（PVA）、ポリビニルピロリドン（PVP）、ポリスチレン（PS）、ポリカプロラクトン（PCL）、エチレンオリゴマー又はポリエチレン（PE）、ポリプロピレン（PP）、ポリ（メチルメタクリレート）（PMMA）、及び当技術分野で既知の他のポリマーを含み得る。

【0054】

本明細書で使用される場合、「熱可塑性」という用語は、ポリマーが溶融され、固化され、次いで再び首尾よく溶融及び固化され得る、ポリマーの特性を指す。このプロセスは 50

、官能性を喪失することなく、熱可塑性ポリマーについて数回繰り返され得る。

【 0 0 5 5 】

本明細書で使用される場合、「熱硬化性」という用語は、熱硬化性ポリマーが、加熱に起因して、又は硬化剤の添加を介してのいずれかで起こり得る、硬化のプロセスを介して三次元方向に成長する傾向がある明確な不可逆的化学ネットワークを形成し、したがって、その化学構成成分間の架橋形成を引き起こし、強度を増加させるために他の材料に添加され得る強固で剛性な構造を熱硬化性に与える、ポリマーの特性を指す。熱硬化性ポリマーが硬化中にネットワークを形成すると、ポリマーを再硬化させて、異なる方法で固化させることはできない。

【 0 0 5 6 】

10

「繰り返し単位」は、特定のモノマー又はマクロマーの重合に対応する、ポリマー内の最小の原子群である。

【 0 0 5 7 】

「反応開始剤」とは、続いてモノマーと反応してフリーラジカル重合反応を開始することができるラジカルに分解可能である分子である。熱開始剤は、温度に応じてある特定の速度で分解し、典型的な例は、1, 1'-アゾビスイソブチロニトリル及び4, 4'-アゾビス(4-シアノ吉草酸)などのアゾ化合物、ベンゾイルペルオキシド、tert-ブチルペルオキシド、tert-ブチルヒドロペルオキシド、tert-ブチルペルオキシベンゾエート、ジクミルペルオキシド、及びラウロイルペルオキシドなどのペルオキシド、過酢酸及び過硫酸カリウムなどの過酸、並びに様々な酸化還元系である。光開始剤は、光化学過程により分解し、典型例は、ベンジル、ベンゾイン、アセトフェノン、ベンゾフェノン、カンファーキノン、及びこれらの混合物の誘導体、並びに様々なモノアシル及びビスアシルホスフィンオキシド、並びにこれらの組み合わせである。

20

【 0 0 5 8 】

「架橋剤」は、分子上の2つ又は3つ以上の位置でフリーラジカル重合を受け、それによって分岐点及びポリマーネットワークを作り出すことができる、二官能性又は多官能性モノマー又はマクロマーである。一般的な例は、ビス(2-メタクリロイル)オキシエチルジスルフィド(DSDMA)、臭化セチルトリメチルアンモニウム(CTAB)、塩化セチルトリメチルアンモニウム(CTAC)、エチレングリコールジメタクリレート、テトラエチレングリコールジメタクリレート、トリメチロールプロパントリメタクリレート、メチレンビスアクリルアミド、トリアリルシアヌレートなどである。

30

【 0 0 5 9 】

「プレポリマー」は、更に反応を受けてポリマーを形成可能な、残存している重合性基を含有するモノマーの反応生成物である。

【 0 0 6 0 】

「ポリマーネットワーク」は、膨潤し得るが溶媒に溶解できない架橋高分子である。「ヒドロゲル」とは、典型的には少なくとも10重量パーセントの水を吸収し、水又は水溶液中で膨潤するポリマーネットワークである。「シリコーンヒドロゲル」とは、少なくとも1つの親水性構成成分とともに少なくとも1つのシリコーン含有構成成分から作製されるヒドロゲルである。親水性構成成分はまた、非反応性ポリマーを含んでもよい。

40

【 0 0 6 1 】

「従来のヒドロゲル」は、いかなるシロキシ、シロキサン、又はカルボシロキサン基も有しない構成成分から作製されたポリマーネットワークを指す。従来のヒドロゲルは、親水性モノマーを含む反応性混合物から調製される。例としては、2-ヒドロキシエチルメタクリレート(「HEMA」)、N-ビニルピロリドン(「N-vinyl pyrrolidone、NVP」)、N,N-ジメチルアクリルアミド(「N,N-dimethylacrylamide、DMA」)、又は酢酸ビニルが挙げられる。米国特許第4, 436, 887号、同第4, 495, 313号、同第4, 889, 664号、同第5, 006, 622号、同第5, 039, 459号、同第5, 236, 969号、同第5, 270, 418号、同第5, 298, 533号、同第5, 824, 719号、同第6, 420, 453号、同第6, 423, 761

50

号、同第6, 767, 979号、同第7, 934, 830号、同第8, 138, 290号、及び同第8, 389, 597号は、従来のヒドロゲルの形成を開示している。市販の従来のヒドロゲルとしては、エタフィルコン(etafilcon)、ゲンフィルコン(genfilcon)、ヒラフィルコン(hilafilcon)、レネフィルコン(lenefilcon)、ネソフィルコン(nesofilcon)、オマフィルコン(omafilcon)、ポリマコン(polymacon)、及びビフィルコン(vifilcon)(それらの変形の全てを含む)が挙げられるが、これらに限定されない。

【0062】

「シリコーンヒドロゲル」は、少なくとも1つの親水性構成成分及び少なくとも1つのシリコーン含有構成成分から作製されたポリマーネットワークを指す。シリコーンヒドロゲルの例としては、アクアフィルコン(acquafilcon)、アスモフィルコン(asmofilcon)、バラフィルコン(balafilcon)、コムフィルコン(comfilcon)、デレフィルコン(delefilcon)、エンフィルコン(enfilcon)、ファルコン(falcon)、ファンフィルコン(fanfilcon)、フォルモフィルコン(formofilcon)、ガリーフィルコン(galyfilcon)、ロトラフィルコン(lotrafilcon)、ナラフィルコン(narafilcon)、リオフィルコン(riofilcon)、サムフィルコン(samfilcon)、セノフィルコン(senofilcon)、ソモフィルコン(somofilcon)、及びステンフィルコン(stenfilcon)(それらの変形の全てを含む)、並びに米国特許第4, 659, 782号、同第4, 659, 783号、同第5, 244, 981号、同第5, 314, 960号、同第5, 331, 067号、同第5, 371, 147号、同第5, 998, 498号、同第6, 087, 415号、同第5, 760, 100号、同第5, 776, 999号、同第5, 789, 461号、同第5, 849, 811号、同第5, 965, 631号、同第6, 367, 929号、同第6, 822, 016号、同第6, 867, 245号、同第6, 943, 203号、同第7, 247, 692号、同第7, 249, 848号、同第7, 553, 880号、同第7, 666, 921号、同第7, 786, 185号、同第7, 956, 131号、同第8, 022, 158号、同第8, 273, 802号、同第8, 399, 538号、同第8, 470, 906号、同第8, 450, 387号、同第8, 487, 058号、同第8, 507, 577号、同第8, 637, 621号、同第8, 703, 891号、同第8, 937, 110号、同第8, 937, 111号、同第8, 940, 812号、同第9, 056, 878号、同第9, 057, 821号、同第9, 125, 808号、同第9, 140, 825号、同第9, 156, 934号、同第9, 170, 349号、同第9, 244, 196号、同第9, 244, 197号、同第9, 260, 544号、同第9, 297, 928号、同第9, 297, 929号、並びに国際公開第03/22321号、同第2008/061992号、及び米国特許出願公開第2010/0048847号で調製されているようなシリコーンヒドロゲルが挙げられる。これらの特許は、それら全体が参照により本明細書に組み込まれる。

【0063】

本明細書で使用される場合、「ゲル様」は、ゲルに関連する特性に一般的に関連する特性を有する物質を指す。「ゲル」は、粒子が塊全体にわたって微細なネットワークに分散されているか、又は配列されているかのいずれかである液体からなる凝集性の塊を指し得る。ゲルは、特に弾性であり得るか又は実質的に固体及び剛性であり得る(例えば、シリカゲルは堅い粒子のように見える)。ゲルはまた、液体媒体が多かれ少なかれ固体として挙動するのに十分な粘性になったコロイドとして見ることもできる。

【0064】

「相互貫入ポリマーネットワーク」は、分子スケールで少なくとも部分的に交絡しているが、互いに共有結合しておらず、制動化学結合なしに分離することができない、2つ又は3つ以上のネットワークを含む。「半相互貫入ポリマーネットワーク」は、1つ又は2つ以上のネットワークと、少なくとも1つのネットワークと少なくとも1つのポリマーとの間の分子レベルで何らかの混合によって特徴付けられる1つ又は2つ以上のポリマーと、を含む。異なるポリマーの混合物は、「ポリマーブレンド」である。半相互貫入ネット

ワークは、技術的にはポリマーブレンドであるが、場合によっては、ポリマーは、容易に除去することができないように絡まっている。

【 0 0 6 5 】

「反応性混合物」及び「反応性モノマー混合物」という用語は、一緒に混合され、重合条件に供されたとき、従来の又は本発明のシリコーンヒドロゲルを形成するとともに、そこから作製されるコンタクトレンズを形成する構成成分（反応性及び非反応性の両方）の混合物を指す。反応性モノマー混合物は、モノマー、マクロマー、プレポリマー、架橋剤、及び反応開始剤などの反応性構成成分、湿潤剤、離型剤、ポリマー、染料などの添加剤、光吸収化合物、例えば、UV吸収剤、顔料、染料、及びフォトクロミック化合物（それらのいずれも反応性又は非反応性であってもよいが、得られる生物医学的デバイス内に保持されることが可能である）、並びに医薬化合物及び栄養補助化合物、及び任意の希釈剤を含んでもよい。作製される生物医学的デバイス及びその使用目的に基づき、多様な添加剤が添加され得ることが理解されるであろう。反応性混合物の構成成分の濃度は、希釈剤を除いて、反応性混合物中の全ての構成成分の重量パーセンテージとして表される。希釈剤が使用される場合、それらの濃度は、反応性混合物中の全ての構成成分及び希釈剤の量に基づく重量パーセンテージとして表される。

10

【 0 0 6 6 】

「反応性構成成分」は、共有結合、水素結合、静電相互作用、相互貫入ポリマーネットワークの形成、又は任意の他の手段によって、得られるヒドロゲルのポリマーネットワークの化学構造の一部となる、反応性混合物の構成成分である。

20

【 0 0 6 7 】

「シリコーンヒドロゲルコンタクトレンズ」という用語は、少なくとも1つのシリコーン含有構成成分を含むヒドロゲルコンタクトレンズを指す。シリコーンヒドロゲルコンタクトレンズは、全般的に、従来のヒドロゲルと比較して増加した酸素透過性を有する。シリコーンヒドロゲルコンタクトレンズは、それらの含水量及びポリマー含有量の両方を機能させて酸素を眼に送る。

【 0 0 6 8 】

「多官能性」という用語は、2つ又は3つ以上の重合性基を有する構成成分を指す。「単官能性」という用語は、1つの重合性基を有する構成成分を指す。

【 0 0 6 9 】

「ハロゲン」又は「ハロ」という用語は、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素を指す。

30

【 0 0 7 0 】

本明細書で使用される場合、「アルキル」という用語は、示された数の炭素原子を含有する非置換又は置換の直鎖又は分岐鎖アルキル基を指す。数が示されていない場合、アルキル（アルキル上の任意の置換基を任意選択的に含む）は、1～16個の炭素原子を含有してもよい。好ましくは、アルキル基は、1～10個の炭素原子、代替的に1～7個の炭素原子、又は代替的に1～4個の炭素原子を含有する。アルキルの例としては、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、*i s o -*、*s e c -*及び*t e r t -*ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、3-エチルブチルなどが挙げられる。アルキル上の置換基の例としては、ヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボキシ、アルキルカルボキシ、カルボニル、アルコキシ、アミド、カルバメート、カ-ボネート、ハロゲン、フェニル、ベンジル、チオール、及びこれらの組み合わせから独立して選択される1、2、又は3つの基が挙げられる。「アルキレン」は、二価のアルキル基、例えば、 $-CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH_2CH_2-$ 、 $-CH_2CH(CH_3)CH_2-$ 、及び $-CH_2CH_2CH_2CH_2-$ を意味する。

40

【 0 0 7 1 】

「ハロアルキル」は、1個又は2個以上のハロゲン原子で置換された、上で定義されるアルキル基を指し、各ハロゲンは、独立して、F、Cl、Br、又はIである。好ましいハロゲンは、Fである。好ましいハロアルキル基は、1～6個の炭素、より好ましくは1～4個の炭素、更により好ましくは1～2個の炭素を含有する。「ハロアルキル」は、-

50

CF_3 - 又は $-\text{CF}_2\text{CF}_3$ - などのペルハロアルキル基を含む。「ハロアルキレン」は、 $-\text{CH}_2\text{CF}_2-$ などの二価ハロアルキル基を意味する。

【0072】

「シクロアルキル」は、示された数の環炭素原子を含有する非置換又は置換の環状炭化水素を指す。数が示されていない場合、シクロアルキルは、3～12個の環炭素原子を含有してもよい。好ましくは $\text{C}_3 \sim \text{C}_8$ シクロアルキル基、 $\text{C}_3 \sim \text{C}_7$ シクロアルキル、より好ましくは $\text{C}_4 \sim \text{C}_7$ シクロアルキル、更により好ましくは $\text{C}_5 \sim \text{C}_6$ シクロアルキルである。シクロアルキルの例としては、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、及びシクロオクチルが挙げられる。シクロアルキル上の置換基の例としては、アルキル、ヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボニル、アルコキシ、アミド、カルバマート、カルボナート、ハロ、フェニル、ベンジル、及びこれらの組み合わせから独立して選択される1つ、2つ、又は3つの基が挙げられる。「シクロアルキレン」は、1, 2-シクロヘキシレン、1, 3-シクロヘキシレン、又は1, 4-シクロヘキシレンなどの二価シクロアルキル基を意味する。

10

【0073】

「ヘテロシクロアルキル」は、少なくとも1つの環炭素が、窒素、酸素、及び硫黄から選択されるヘテロ原子で置換されている、上で定義されるシクロアルキル環又は環系を指す。ヘテロシクロアルキル環は、任意選択的に、他のヘテロシクロアルキル環及び/又は非芳香族炭化水素環及び/又はフェニル環に縮合しているか、又は他の方法で結合される。好ましいヘテロシクロアルキル基は、5～7員を有する。より好ましいヘテロシクロアルキル基は、5又は6員を有する。ヘテロシクロアルキレンは、二価ヘテロシクロアルキル基を意味する。

20

【0074】

「アリール」は、少なくとも1つの芳香環を含有する非置換又は置換の芳香族炭化水素環系を指す。アリール基は、示された数の環炭素原子を含有する。数が示されていない場合、アリールは、6～14個の環炭素原子を含有してもよい。芳香環は、任意選択的に、他の芳香族炭化水素環又は非芳香族炭化水素環に縮合していてもよい、又は他の方法で結合されてもよい。アリール基の例としては、フェニル、ナフチル、及びビフェニルが挙げられる。アリール基の好ましい例としては、フェニルが挙げられる。アリール上の置換基の例としては、アルキル、ヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボキシ、アルキルカルボキシ、カルボニル、アルコキシ、アミド、カルバマート、カルボナート、ハロ、フェニル、ベンジル、及びこれらの組み合わせから独立して選択される1つ、2つ、又は3つの基が挙げられる。「アリーレン」は、二価アリール基、例えば1, 2-フェニレン、1, 3-フェニレン、又は1, 4-フェニレンを意味する。

30

【0075】

「ヘテロアリール」は、上で定義したように、少なくとも1つの環炭素原子が、窒素、酸素、及び硫黄から選択されるヘテロ原子で置換されているアリール環又は環系を指す。ヘテロアリール環は、1つ又は2つ以上のヘテロアリール環、芳香族若しくは非芳香族の炭化水素環、又はヘテロシクロアルキル環に縮合していてもよい、又は別の方法で結合されてもよい。ヘテロアリール基の例としては、ピリジル、フリル、及びチエニルが挙げられる。「ヘテロアリーレン」は、二価ヘテロアリール基を意味する。

40

【0076】

「アルコキシ」は、酸素架橋を介して親分子部分に結合しているアルキル基を指す。アルコキシ基の例としては、例えば、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、及びイソプロポキシが挙げられる。「アリールオキシ」は、酸素架橋を介して親分子部分に結合しているアリール基を指す。例としては、フェノキシが挙げられる。「環状アルコキシ」は、酸素架橋を介して親部分に結合しているシクロアルキル基を意味する。

【0077】

「アルキルアミン」は、 $-\text{NH}$ 架橋を介して親分子部分に結合しているアルキル基を指す。アルキレンアミンは、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}-$ などの二価アルキルアミン基を意味する

50

。

【 0 0 7 8 】

「エステル」は、一般式 $RCOOR'$ を有する有機化合物のクラスを指し、式中、 R 及び R' は、任意の有機結合基である。 R 及び R' は、アルキル、置換アルキル、アルキレン、ハロアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アルコキシ、シクロアルコキシ、アルキルアミン、シロキサニル、シリル、アルキレンオキシ、オキサアルキレンなどを含む官能基から選択され得る。上述の官能基の定義は、本明細書に提供される。

【 0 0 7 9 】

本明細書で使用される場合、「エステル化」は、エステルを生成する反応を指す。この反応は、しばしば、アルコール及びブレンステッド酸（例えば、カルボン酸、硫酸、又はリン酸）を伴う。更に、「エステル交換」という用語は、アルコール分子と既存のエステル分子とが反応して、新しいエステルを形成する反応を指す。いくつかの態様において、エステル交換は、カルボニルジイミダゾールなどの他の化合物によって媒介され得る。

【 0 0 8 0 】

「シロキサニル」は、少なくとも1つの $Si-O-Si$ 結合を有する構造を指す。したがって、例えば、シロキサニル基は、少なくとも1つの $Si-O-Si$ 基（すなわち、シロキサン基）を有する基を意味し、シロキサニル化合物は、少なくとも1つの $Si-O-Si$ 基を有する化合物を意味する。「シロキサニル」は、モノマー（例えば、 $Si-O-Si$ ）、並びにオリゴマー/ポリマー構造（例えば、 $-[Si-O]_n$ （式中、 n は2又は3以上である））を包含する。シロキサニル基中の各ケイ素原子は、それらの原子価を完全なものにするために、独立して選択される R^A 基（ R^A は、式 A の選択肢（b）～（i）で定義されるとおりである）で置換されている。

【 0 0 8 1 】

「シリル」は、式 R_3Si- の構造を指し、「シロキシ」は、式 R_3Si-O- の構造を指し、式中、シリル又はシロキシ中の各 R は、トリメチルシロキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキル（好ましくは $C_1 \sim C_3$ アルキル、より好ましくはエチル又はメチル）、及び $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルから独立して選択される。

【 0 0 8 2 】

「アルキレンオキシ」は、一般式 $-(\text{アルキレン}-O)_p-$ 又は $-(O-\text{アルキレン})_p-$ の基を指し、式中、アルキレンは、上で定義されるとおりであり、 p は、1～200、又は1～100、又は1～50、又は1～25、又は1～20、又は1～10であり、各アルキレンは、独立して、ヒドロキシル、ハロ（例えば、フルオロ）、アミノ、アミド、エーテル、カルボニル、カルボキシル、及びこれらの組み合わせから独立して選択される1つ又は2つ以上の基で任意選択的に置換されている。 p が1より大きい場合、各アルキレンは、同じであっても異なってもよく、アルキレンオキシは、ブロック又はランダム構成であってもよい。アルキレンオキシが分子中の末端基を形成する場合、アルキレンオキシの末端は、例えば、ヒドロキシ又はアルコキシ（例えば、 $HO-[CH_2CH_2O]_p-$ 又は $CH_3O-[CH_2CH_2O]_p-$ ）であり得る。アルキレンオキシの例としては、ポリメチレンオキシ、ポリエチレンオキシ、ポリプロピレンオキシ、ポリブチレンオキシ、及びポリ（エチレンオキシ-co-プロピレンオキシ）が挙げられる。

【 0 0 8 3 】

「オキサアルキレン」は、1つ又は2つ以上の隣接していない CH_2 基が酸素原子で置換されている、 $-CH_2CH_2OCH(CH_3)CH_2-$ などの、上で定義されるアルキレン基を指す。「チアアルキレン」は、1つ又は2つ以上の隣接していない CH_2 基が硫黄原子で置換されている、 $-CH_2CH_2SCH(CH_3)CH_2-$ などの、上で定義されるアルキレン基を指す。

【 0 0 8 4 】

「連結基」という用語は、重合性基を親分子に連結する部分を指す。連結基は、それが一部である化合物の重合に不必要に干渉しない任意の部分であってもよい。例えば、連結

基は、結合であってもよいが、又は1つ若しくは2つ以上のアルキレン、ハロアルキレン、アミド、アミン、アルキレンアミン、カルバメート、カルボキシレート（ $-\text{CO}_2-$ ）、ジスルフィド、アリーレン、ヘテロアリーレン、シクロアルキレン、ヘテロシクロアルキレン、アルキレンオキシ、オキサアルキレン、チアアルキレン、ハロアルキレンオキシ（1つ又は2つ以上のハロ基で置換されたアルキレンオキシ、例えば、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CF}_2-$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CH}_2-$ ）、シロキサニル、アルキレンシロキサニル、チオール、若しくはこれらの組み合わせを含んでもよい。連結基は、1つ又は2つ以上の置換基によって、任意選択的に置換されてもよい。好適な置換基としては、アルキル、ハロ（例えば、フルオロ）、ヒドロキシル、 $\text{HO}-$ アルキレンオキシ、 $\text{CH}_3\text{O}-$ アルキレンオキシ、シロキサニル、シロキシ、シロキシ-アルキレンオキシ、シロキシ-アルキレン-アルキレンオキシ（2つ以上のアルキレンオキシ基が存在してもよく、アルキレン及びアルキレンオキシ中の各メチレンは、独立して、ヒドロキシルで任意選択的に置換されている）、エーテル、アミン、カルボニル、カルバメート、及びこれらの組み合わせから独立して選択されるものを挙げることができる。連結基はまた、（メタ）アクリレートなどの重合性基によって置換されてもよい（連結基が連結している重合性基に加えて）。

10

【0085】

好ましい連結基としては、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキレン（好ましくは $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ アルキレン）及び $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ オキサアルキレン（好ましくは $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ オキサアルキレン）が挙げられ、これらはそれぞれ、ヒドロキシル及びシロキシから独立して選択される1つ又は2つの基で任意選択的に置換されている。好ましい連結基としては、カルボキシレート、アミド、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキレン-カルボキシレート- $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキレン、又は $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキレンアミド- $\text{C}_1 \sim \text{C}_8$ アルキレンも挙げられる。

20

【0086】

連結基が上述のような部分（例えば、アルキレン及びシクロアルキレン）の組み合わせからなる場合、部分は、任意の順序で存在してもよい。例えば、下記の式Eにおいて、Lが、 $-\text{アルキレン}-\text{シクロアルキレン}-$ であると示されている場合、 R_g-L は、 $\text{R}_g-\text{アルキレン}-\text{シクロアルキレン}-$ 、又は $\text{R}_g-\text{シクロアルキレン}-\text{アルキレン}-$ のいずれかであってもよい。これにかかわらず、列記する順序は、連結基が結合している末端重合性基（ R_g ）から始まって、部分が化合物中に現れる好ましい順序を表す。例えば、式Eにおいて、L及び L^2 が、両方ともアルキレン-シクロアルキレンであるとして示されている場合、 R_g-L は、好ましくは、 $\text{R}_g-\text{アルキレン}-\text{シクロアルキレン}-$ であり、 $-\text{L}^2-\text{R}_g$ は、好ましくは、 $-\text{シクロアルキレン}-\text{アルキレン}-\text{R}_g$ である。

30

【0087】

本明細書で使用される場合、「酸化」は、元素の原子がより電気陰性の元素、最も一般には酸素に結合する化学プロセスを指す。このプロセスにおいて、酸化された元素は、原子の電荷を表すその酸化状態を増加させる。酸化反応は、一般に、還元された原子の酸化状態が減少する「還元」反応と組み合わせられる。

【0088】

本明細書で使用される場合、「固定」又は「固定機構」は、ナノ粒子がコロイドマトリックス又はポリマーマトリックスに埋め込まれ得るプロセスを指す。「固定」は、例示的なマトリックスのメンバーへのナノ粒子の架橋を介して化学的に、又はナノ粒子の表面に結合した分子と例示的なマトリックスのメンバーとの絡み合いを介して物理的に、のいずれかで起こり得る。

40

【0089】

本明細書で使用される場合、「可視スペクトル」は、電磁スペクトル内の波長の範囲を指し、この範囲は約 $380\text{ nm} \sim 700\text{ nm}$ にわたる。可視スペクトルは、赤色、橙色、黄色、緑色、青色、藍色、及び紫色を含む色に対応する異なる波長領域に分解され得る。可視スペクトルに含まれる波長のある特定の範囲は、人間の目に損傷を与えることが知られている。

【0090】

50

本明細書で使用される場合、「紫外線 (ultraviolet、UV) スペクトル」は、電磁スペクトル内の波長の範囲を指し、この範囲は約 10 nm ~ 400 nm にわたる。

【0091】

本明細書で使用される場合、「紫外線 (UV) 照射」は、紫外線スペクトルの波長に入る電磁波への曝露を指し、UV 照射は、硬化などのその効果を達成するために、選択された時間及び強度の曝露を使用する。UV 照射は、化学的变化 (光架橋、光酸化、又は光化学反応) 又は物理的变化 (表面形態など) をもたらし得る。UV 照射によって引き起こされる光化学反応は、表面に限定され得るか、又は (プラズマとは異なり) 材料のバルク内部深くで発生し得る。いくつかの例示的な UV 照射源は、中程度の光及びパルスレーザを有する連続波 (continuous wave、CW) UV ランプを含み得る。

10

【0092】

本明細書で使用される場合、「光吸収」は、電子が入光波 (すなわち、光子) のエネルギーを吸収し、それらのエネルギー状態を変化させる現象として定義される。これが起こるためには、入光波は電子のエネルギーレベル又はその近くでなければならぬ。所与の材料に特徴的な結果として得られる吸収パターンは、「吸収スペクトル」を使用して表示することができ、「吸収スペクトル」は、入射光の波長の関数として試料の吸光度の変化を示し、分光光度計を使用して測定することができる。「吸収スペクトル」に固有のものは「吸収ピーク」であり、所与の試料の周波数又は波長は、光吸収の最大又は最高スペクトル値を示す。可視スペクトルに対応する光の波長の光吸収に関して、可視スペクトルのある特定の波長の光波を吸収する材料又は物質によって、観察者には反射光中のこれらの波長が見えない場合がある。

20

【0093】

本明細書で使用される場合、「蛍光」は、気体、液体、又は固体物質において起こる発光のタイプを指す。蛍光は、光波 (すなわち、光子) の吸収の後に起こり、基底状態から励起状態へ促進された電子を促進し得る。蛍光において、電子のスピンは、燐光とは異なり、依然として基底状態の電子と対になっている。励起された電子が基底状態に戻るとき、吸収された光子よりも長い波長に対応する低エネルギーの光子を放出する。

【0094】

本明細書で使用される場合、「リン光」は、分子三重項状態からの励起電子の放射減衰に対応する遅延発光の現象を指す。一般的な特性として、リン光は、基礎となる三重項 - 一重項光子放出のスピン禁止に起因して、及びその分析が電子分子構造の深い知識を包含するため、化学物理学の課題を表す。リン光は、特徴的なスピン選択性及び磁場依存性を有するスピン禁制変換の例を提供する最も単純な物理的プロセスであり、より複雑な化学反応及びスピン触媒用途のモデルでもある。リン光は、一般に、蛍光に関して光子放出の代替方法として見られる。スピン結合を増加させるための重金属の使用など、蛍光対リン光放出の量を増加させるための方法が当技術分野に存在する。

30

【0095】

本明細書で使用される場合、「半値全幅 (FWHM)」は、曲線又は関数の一部の幅を説明するために一般に使用されるパラメータを指し、吸光度スペクトルに関連して使用され得る。これは、関数が従属軸上のその最大値の半分に達する曲線の独立軸上の点間の距離によって与えられる。

40

【0096】

「光フィルタリング」は、入射光を吸収する、散乱させる、かつ / 又は消滅させることを含み得る。光フィルタリングは、「光遮断材料」という用語を含み得る。光遮断は、電磁スペクトルの所与の領域内の入射光を吸収する、散乱させる、かつ / 又は消滅させる能力を有する材料を指し得る。したがって、「光遮断材料」又は「光フィルタリング材料」という用語は、電磁スペクトルの所与の領域内の入射光を吸収する、散乱させる、かつ / 又は消滅させる粒子を包含する。粒子は、光学的に透明な基板内に様々な量で組み込まれて、電磁スペクトル内の 1 つ又は 2 つ以上の波長又は波長の範囲で所望のレベルの光遮断を示す光学的に透明な材料を達成し得る。特定の波長における遮断パーセントは、材料の

50

透過スペクトルから決定することができる（遮断率 = 100 - 透過パーセント（%T））。

【0097】

本明細書で使用される場合、「光遮断プロファイル」又は「光遮断スペクトル」という用語は、光遮断材料の吸収、散乱、及び/又は消滅スペクトルを指す。

【0098】

「緑色光遮断」又は「緑色光吸収」という用語は、可視スペクトルの緑色領域内（例えば、およそ500nm～578nm）の入射光を吸収する、散乱させる、かつ/又は消滅させるある特定の粒子の能力を指す。したがって、「緑色光遮断」又は「緑色光吸収」という用語は、可視スペクトルの緑色領域内の入射光を吸収する、散乱させる、かつ/又は消滅させる粒子を包含する。粒子は、光学的に透明な基板内に様々な量で組み込まれて、緑色領域内の1つ又は2つ以上の波長又は波長の範囲で所望のレベルの緑色光遮断を示す光学的に透明な材料を達成し得る。

10

【0099】

本明細書で使用される場合、「有機染料」という用語は、それらが可視スペクトル内の光を吸収するため色を有し、少なくとも1つの発色団（色担持基）を有し、コンジュゲートされたシステムを有し、有機化合物における安定化力である電子の共鳴を示す有機化合物を指す（Abrahart, 1977）。ゲル様マトリックス中で使用される有機染料は浸出を示すことがあり、この場合、染料は、ゲル様マトリックスからゆっくりと出る。例示的な有機染料としては、ローダミンB及びローダミンG6などのローダミンベースの染料が挙げられ得る。

20

【0100】

本明細書で使用される場合、「ナノ粒子（Nanoparticle、NP）」は、100nm未満である少なくとも1つの寸法を有する粒子を指す。場合によっては、ナノ粒子は、50nm未満の少なくとも1つの寸法を有し得る。NPは、様々な形状を有し得る。いくつかの事例において、NPは、立方体形状、球状、ロッド形状、双角錐形状、八面体形状、十面体形状、立方八面体形状、四面体形状、菱形十二面体形状、切頭複正方柱形状、又は切頭二重四面体形状を有し得る。本明細書で使用される場合、「プラズモンナノ粒子」は、光波と相互作用することを可能にする局所表面プラズモン共鳴に起因する固有の光学的特性を有する金属ナノ粒子を指す。これらの特性は、ナノ粒子の表面を取り囲む形状、サイズ、組成、又は媒体を変化させることによって調整可能である。この用語は、表面プラズモン吸収及び散乱スペクトルを生じることになる様々な形状の全てのプラズモンナノ粒子を含むことが理解されるであろう。

30

【0101】

本明細書で使用される場合、「形状指向剤」は、ナノ粒子を特定の形態に成長させるために使用される界面活性剤又は試薬である。特定の形状指向剤を利用することによって、特定の形態が選択され得ることによって、結果として得られるナノ粒子の光学的特性が調整されることが可能になる。例示的な形状指向剤としては、AgNO₃、CTAB、CTAC、及び当技術分野で既知の他のそのような薬剤が挙げられ得るが、これらに限定されない。

40

【0102】

本明細書で使用される場合、「異方性」は、当該材料の所与の特性が、それが測定される指向に依存する材料を説明する。更に、「異方性」であるものは、それが測定される指向に従ってサイズ又はその物理的特性が変化する。異方性材料の例は、グラファイト、炭素繊維、ナノ粒子などを含み得る。

【0103】

本明細書で使用される場合、「等方性」は、当該材料の所与の特性が、それが測定される指向に依存しない材料を説明する。更に、「等方性」であるものは、それが測定される指向に従ってサイズ又はその物理的特性が一定のままである。

【0104】

50

本明細書で使用される場合、「表面エネルギー」は、過剰エネルギー（すなわち、ナノ粒子と無限に拡張された固体中の同じ数の原子との間のエネルギーの差）を指し得る。より広義には、粒子の表面エネルギーは、その形態を考慮してその安定性を定義することができ、所与のナノ粒子の熱力学に直接関係する。

【0105】

本明細書で使用される場合、「表面プラズモン共鳴（surface plasmon resonance、SPR）」は、金属の表面層における伝導電子が、ある特定の入射角を有する入射光の光子によって励起され、次いで励起された伝導電子が共鳴振動において金属表面に平行に伝搬することを引き起こし得る現象を指す（Zeng et al., 2017年）。光源波長が一定で金属表面層が薄い場合、SPRを引き起こすある特定の角度は、金属表面付近の材料の屈折率に依存する。本明細書で使用される場合、「局在表面プラズモン共鳴（localized surface plasmon resonance、LSPR）」は、光が入射波長よりも小さい伝導ナノ粒子と相互作用するときに光によって生成される光学現象を指す。表面プラズモン共鳴におけるように、入射光の電場は、伝導帯の電子を集散的に励起するように堆積されることができ、結果は、NPの組成、サイズ、幾何学形状、誘電環境、及び分離距離に強く依存する共鳴周波数を伴うコヒーレント局在プラズモン振動となる。

10

【0106】

本明細書で使用される場合、「局在表面プラズモン共鳴（LSPR）ピーク」は、局在表面プラズモン共鳴の最大又は最高スペクトル値を示す入射光の周波数又は波長を指す。LSPRピークに関して、2つの別個のピーク：「縦ピーク」及び「横ピーク」が観察されることが多い。前者は、利用されるナノ粒子の形状に関連し、後者は、使用される材料の固有特性の結果である。例えば、金は、530nm付近に本質的な横ピークを有するが、金NPの縦ピークは、その形態を調整することによって調整され得る。

20

【0107】

本明細書で使用される場合、「プラズモン光遮断剤」は、表面プラズモン共鳴（SPR）又は局在表面プラズモン共鳴（LSPR）に起因して電磁スペクトルの所与の領域内の入射光を吸収する、散乱させる、かつ/又は消滅させる能力を有する材料を指し、遮断される波長又は波長の範囲は、SPR又はLSPRを誘導する入射光の波長に対応する。したがって、「プラズモン光遮断剤」という用語は、SPR又はLSPRに起因して電磁スペクトルの所与の領域内の入射光を吸収する、散乱させる、かつ/又は消滅させる粒子を包含する。粒子は、光学的に透明な基板内に様々な量で組み込まれて、電磁スペクトル内の1つ又は2つ以上の波長又は波長の範囲で所望のレベルの光遮断を示す光学的に透明な材料を達成し得る。特定の波長における遮断パーセントは、材料の透過スペクトルから決定することができる（遮断率 = 100 - 透過パーセント（%T））。

30

【0108】

本明細書で使用される場合、「調整」は、ナノ粒子の光学的特性及び電子的特性を特定の用途に最適化するために、ナノ粒子のサイズ、形状、表面化学、又は凝集状態を変化させることを指す。プラズモンピークは、その全体が参照により本明細書に組み込まれる米国特許第9,005,890号で検討されているように、ナノ粒子の好適な設計によって任意の波長に調整され得る。

40

【0109】

本明細書で使用される場合、「リガンド」は、中心金属原子又はイオンに結合するイオン又は中性分子を指す。例示的なリガンドは、PVP、PVA、DSDMA、及び中心金属原子に結合することができる他の分子を含み得る。金属原子は、金などの貴金属を含むが、これに限定されない様々な金属を含み得る。リガンドは、金属中心原子と共有結合を形成するために使用される電子対を有する少なくとも1つのドナーを有する。

【0110】

本明細書で使用される場合、「中間リガンド」は、代替リガンドのコンジュゲーションを可能にするために更に交換される金属原子に一時的にコンジュゲートされたリガンドを指す。

50

【 0 1 1 1 】

別途記載のない限り、例えば、「2 ~ 1 0」のような数字範囲は、その範囲を定義する数字（例えば、2 及び 1 0）を含む。

【 0 1 1 2 】

本明細書で使用される場合、「生体適合性」という用語は、インビボで実質的な有害応答を引き出さない材料を説明することが意図される。ある特定の実施形態において、材料は、細胞に毒性がない場合、「生体適合性」である。ある特定の実施形態において、インビトロでの細胞への添加が20%細胞死以下となる場合、材料は「生体適合性」であり、かつ/又はインビボでのそれらの投与は、炎症若しくは他のそのような悪い効果を誘導しない。

10

【 0 1 1 3 】

本明細書で使用される場合、「静的濃度」という用語は、約1% ~ 約10%で変化し得るトリガの濃度を指す。例えば、静的濃度は、+/- 10%、+/- 5%、+/- 2%、又は+/- 1%変化し得る。

【 0 1 1 4 】

別途記載のない限り、比率、パーセンテージ、部などは重量による。

【 0 1 1 5 】

別途記載のない限り、例えば、「2 ~ 1 0」のような数字範囲は、その範囲を定義する数字（例えば、2 及び 1 0）を含む。

【 0 1 1 6 】

20

デバイス

結果として得られる光学的に透明な材料を使用して、光学レンズ（例えば、眼鏡レンズ、カメラレンズ、コンタクトレンズなど）、眼科用デバイス（例えば、コンタクトレンズ、角膜オンレイ、角膜インレイ、眼内レンズ、オーバーレイレンズなど）、スクリーンカバー（例えば、コンピュータモニタ、タブレットスクリーン、又は携帯電話スクリーンを覆うように構成された透明シート）、及びLEDディスプレイを有する電子デバイス用のハウジングを含む、様々な異なる物品を形成することができる。したがって、光学レンズ（例えば、眼鏡レンズ、カメラレンズ、コンタクトレンズなど）、眼科用デバイス（例えば、コンタクトレンズ、角膜オンレイ、角膜インレイ、眼内レンズ、オーバーレイレンズなど）、スクリーンカバー（例えば、コンピュータモニタ、タブレットスクリーン、又は携帯電話スクリーンを覆うように構成された透明シート）、及び本明細書に記載の光学的に透明な材料から全体的に又は部分的に形成されたLEDディスプレイを有する電子デバイス用のハウジングも提供される。

30

【 0 1 1 7 】

ハードコンタクトレンズ、ソフトコンタクトレンズ、角膜オンレイ、角膜インレイ、眼内レンズ、又はオーバーレイレンズを含む、本明細書に記載のナノ粒子を含有する様々な眼科用デバイスが調製され得る。好ましくは、眼科用デバイスは、従来の又はシリコーンヒドロゲル配合物から作製され得るソフトコンタクトレンズである。

【 0 1 1 8 】

眼科用デバイスは、本明細書に記載のナノ粒子の集団を含有する反応性混合物と、所望の眼科用デバイスを作製するために好適な1つ又は2つ以上のモノマーと、任意選択的な構成成分とを重合することによって調製され得る。場合によっては、反応性混合物は、上記のナノ粒子の集団に加えて、親水性構成成分、疎水性構成成分、シリコーン含有構成成分、ポリアミドなどの湿潤剤、架橋剤、並びに希釈剤及び開始剤などの更なる構成成分のうちの1つ又は2つ以上を含み得る。

40

【 0 1 1 9 】

シリコーン含有構成成分

使用に好適なシリコーン含有構成成分は、1つ又は2つ以上の重合性化合物を含み、各化合物は、独立して、少なくとも1つの重合性基、少なくとも1つのシロキサン基、及び重合性基をシロキサン基に接続する1つ又は2つ以上の連結基を含む。シリコーン含有構

50

成分は、例えば、下記に定義される基などの 1 ~ 220 個のシロキサン繰り返し単位を含有してもよい。シリコン含有構成成分はまた、少なくとも 1 個のフッ素原子も含有し得る。

【0120】

シリコン含有構成成分は、上で定義された 1 つ又は 2 つ以上の重合性基と、1 つ又は 2 つ以上の任意選択的に繰り返すシロキサン単位と、重合性基をシロキサン単位に接続する 1 つ又は 2 つ以上の連結基と、を含み得る。シリコン含有構成成分は、独立して、(メタ)アクリレート、スチリル、ビニルエーテル、(メタ)アクリルアミド、N - ビニラクトム、N - ビニルアミド、O - ビニルカルバマート、O - ビニルカルボナート、ビニル基、又はこれらの混合物である 1 つ又は 2 つ以上の重合性基と、1 つ又は 2 つ以上の任意選択的に繰り返すシロキサン単位と、重合性基をシロキサン単位に接続する 1 つ又は 2 つ以上の連結基と、を含み得る。

10

【0121】

シリコン含有構成成分は、独立して、(メタ)アクリレート、(メタ)アクリルアミド、N - ビニラクトム、N - ビニルアミド、スチリル、又は前述の混合物である 1 つ又は 2 つ以上の重合性基と、1 つ又は 2 つ以上の任意選択的に繰り返すシロキサン単位と、重合性基をシロキサン単位に接続する 1 つ又は 2 つ以上の連結基と、を含み得る。

【0122】

シリコン含有構成成分は、独立して、(メタ)アクリレート、(メタ)アクリルアミド、又は前述の混合物である 1 つ又は 2 つ以上の重合性基と、1 つ又は 2 つ以上の任意選択的に繰り返すシロキサン単位と、重合性基をシロキサン単位に接続する 1 つ又は 2 つ以上の連結基と、を含み得る。

20

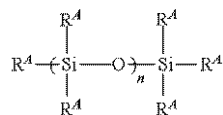
【0123】

式 A . シリコン含有構成成分は、式 A の 1 つ又は 2 つ以上の重合性化合物を含んでもよく、

【0124】

【化 1】

式A



30

式中、

少なくとも 1 つの R^A は、式 $\text{R}_g - \text{L} -$ の基であり、式中、 R_g は、重合性基であり、 L は、連結基であり、残りの R^A は、それぞれ独立して、

(a) $\text{R}_g - \text{L} -$ 、

(b) 1 つ又は 2 つ以上のヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボキシ、アルキルカルボキシ、カルボニル、アルコキシ、アミド、カルバメート、カーボネート、ハロ、フェニル、ベンジル、若しくはこれらの組み合わせで任意選択的に置換されている $\text{C}_{1 \sim 6}$ アルキル、

40

(c) 1 つ又は 2 つ以上のアルキル、ヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボニル、アルコキシ、アミド、カルバメート、カーボネート、ハロ、フェニル、ベンジル、若しくはこれらの組み合わせで任意選択的に置換されている $\text{C}_3 \sim \text{C}_{12}$ シクロアルキル、

(d) 1 つ又は 2 つ以上のアルキル、ヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボキシ、アルキルカルボキシ、カルボニル、アルコキシ、アミド、カルバメート、カーボネート、ハロ、フェニル、ベンジル、若しくはこれらの組み合わせで任意選択的に置換されている $\text{C}_6 \sim \text{C}_{14}$ アリール基、

(e) ハロ、

(f) アルコキシ、環状アルコキシ、若しくはアリールオキシ、

(g) シロキシ、

50

(h) ポリエチレンオキシアルキル、ポリプロピレンオキシアルキル、若しくはポリ(エチレンオキシ - c o - プロピレンオキシアルキル)などの、アルキレンオキシ - アルキル若しくはアルコキシ - アルキレンオキシ - アルキル、又は

(i) アルキル、アルコキシ、ヒドロキシ、アミノ、オキサ、カルボキシ、アルキルカルボキシ、アルコキシ、アミド、カルバメート、ハロ、若しくはこれらの組み合わせで任意選択的に置換されている 1 ~ 100 個のシロキサン繰り返し単位を含む一価シロキサン鎖であり、

n は、0 ~ 500、又は 0 ~ 200、又は 0 ~ 100、又は 0 ~ 20 であり、n が 0 以外であるとき、n が表示値と同等のモードを有する分布であることが理解される。n が 2 又は 3 以上であるとき、SiO 単位は、同じ又は異なる R^A 置換基を持っていてもよく、異なる R^A 置換基が存在する場合、n 基は、ランダム構成又はブロック構成であり得る。

10

【0125】

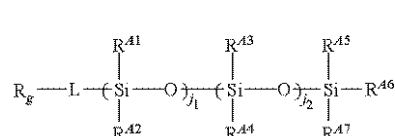
式 A において、3 つの R^A がそれぞれ、重合性基を含み得るか、代替的に 2 つの R^A がそれぞれ、重合性基を含み得るか、又は代替的に 1 つの R^A が、重合性基を含み得る。

【0126】

式 B . 式 A のシリコン含有構成成分は、式 B の単官能性重合性化合物であってもよく、

【0127】

【化 2】



20

式中、

R_g は、重合性基であり、

L は、連結基であり、

j₁ 及び j₂ は、それぞれ独立して、0 ~ 220 の整数であり、ただし、j₁ 及び j₂ の合計は 1 ~ 220 であり、

R^{A1}、R^{A2}、R^{A3}、R^{A4}、R^{A5}、及び R^{A7} は独立して、それぞれの出現において、C₁ ~ C₆ アルキル、C₃ ~ C₁₂ シクロアルキル、C₁ ~ C₆ アルコキシ、C₄ ~ C₁₂ 環状アルコキシ、アルコキシ - アルキレンオキシ - アルキル、アリール (例えば、フェニル)、アリール - アルキル (例えば、ベンジル)、ハロアルキル (例えば、部分的な又は完全なフッ素化アルキル)、シロキシ、フルオロ、又はこれらの組み合わせであり、前述の基の各アルキル基は、1 つ又は 2 つ以上のヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボキシ、アルキルカルボキシ、カルボニル、アルコキシ、カルバメート、カーボネート、ハロ、フェニル、又はベンジルで任意選択的に置換されており、各シクロアルキルは、1 つ又は 2 つ以上のアルキル、ヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボニル、アルコキシ、カルバメート、カーボネート、ハロ、フェニル、又はベンジルで任意選択的に置換されており、各アリールは、1 つ又は 2 つ以上のアルキル、ヒドロキシ、アミノ、アミド、オキサ、カルボキシ、アルキルカルボキシ、カルボニル、アルコキシ、カルバメート、カーボネート、ハロ、フェニル、又はベンジルで任意選択的に置換されており、

30

40

R^{A6} は、シロキシ、C₁ ~ C₈ アルキル (例えば、C₁ ~ C₄ アルキル、又はブチル、又はメチル)、又はアリール (例えば、フェニル) であり、アルキル及びアリールは、1 つ又は 2 つ以上のフッ素原子で任意選択的に置換され得る。

【0128】

式 B - 1 . 式 B の化合物は、式 B - 1 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、j₁ が 0 であり、j₂ が 1 ~ 220 であるか、又は j₂ が 1 ~ 100 であるか、又は j₂ が 1 ~ 50 であるか、又は j₂ が 1 ~ 20 であるか、又は j₂ が 1 ~ 5 であるか、又は j₂ が 1 である、式 B の化合物である。

50

【 0 1 2 9 】

B - 2 . 式 B の化合物は、式 B - 2 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 j_1 及び j_2 が、独立して 4 ~ 1 0 0、又は 4 ~ 2 0、又は 4 ~ 1 0、又は 2 4 ~ 1 0 0、又は 1 0 ~ 1 0 0 である、式 B の化合物である。

【 0 1 3 0 】

B - 3 . 式 B、B - 1、及び B - 2 の化合物は、式 B - 3 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、及び R^{A4} が、独立して、それぞれの出現において、 $C_1 \sim C_6$ アルキル又はシロキシである、式 B、B - 1、又は B - 2 の化合物である。好ましいアルキルは、 $C_1 \sim C_3$ アルキル、又はより好ましくはメチルである。好ましいシロキシは、トリメチルシロキシである。

10

【 0 1 3 1 】

B - 4 . 式 B、B - 1、B - 2、及び B - 3 の化合物は、式 B - 4 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R^{A5} 及び R^{A7} が、独立して、アルコキシ - アルキレンオキシ - アルキルであり、好ましくはそれらが、独立して、式 $CH_3O - [CH_2CH_2O]_p - CH_2CH_2CH_2$ のメトキシでキャップされたポリエチレンオキシアルキルである (式中、 p は、1 ~ 5 0 の整数である)、式 B、B - 1、B - 2、又は B - 3 の化合物である。

【 0 1 3 2 】

B - 5 . 式 B、B - 1、B - 2、及び B - 3 の化合物は、式 B - 5 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R^{A5} 及び R^{A7} が、独立して、トリメチルシロキシなどのシロキシである、式 B、B - 1、B - 2、又は B - 3 の化合物である。

20

【 0 1 3 3 】

B - 6 . 式 B、B - 1、B - 2、及び B - 3 の化合物は、式 B - 6 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R^{A5} 及び R^{A7} が、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル、代替的に $C_1 \sim C_4$ アルキル、又は代替的にブチル若しくはメチルである、式 B、B - 1、B - 2、又は B - 3 の化合物である。

【 0 1 3 4 】

B - 7 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、及び B - 6 の化合物は、式 B - 7 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R^{A6} が、 $C_1 \sim C_8$ アルキル、好ましくは $C_1 \sim C_6$ アルキル、より好ましくは $C_1 \sim C_4$ アルキル (例えば、メチル、エチル、 n - プロピル、又は n - ブチル) である、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、又は B - 6 の化合物である。より好ましくは、 R^{A6} は、 n - ブチルである。

30

【 0 1 3 5 】

B - 8 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、及び B - 7 の化合物は、式 B - 8 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g が、スチリル、ビニルカーボネート、ビニルエーテル、ビニルカルバメート、 N - ビニルラクタム、 N - ビニルアミド、(メタ) アクリレート、又は (メタ) アクリルアミドを含む、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、又は B - 7 の化合物である。好ましくは、 R_g は、(メタ) アクリレート、(メタ) アクリルアミド、又はスチリルを含む。より好ましくは、 R_g は、(メタ) アクリレート又は (メタ) アクリルアミドを含む。

40

【 0 1 3 6 】

R_g が (メタ) アクリルアミドであるとき、窒素基は、 R^{A9} で置換されてもよく、 R^{A9} は、 H 、 $C_1 \sim C_8$ アルキル (好ましくは $C_1 \sim C_4$ アルキル、例えば、 n - ブチル、 n - プロピル、メチル、又はエチル)、又は $C_3 \sim C_8$ シクロアルキル (好ましくは $C_5 \sim C_6$ シクロアルキル) であり、アルキル及びシクロアルキルは、ヒドロキシル、アミド、エーテル、シリル (例えば、トリメチルシリル)、シロキシ (例えば、トリメチルシロキシ)、アルキル - シロキサニル (アルキルは、それ自体がフルオロで任意選択的に置換されている)、アリール - シロキサニル (アリールは、それ自体がフルオロで任意選択的に置換されている)、及びシリル - オキサアルキレン (オキサアルキレンは、それ自体がヒドロキシルで任意選択的に置換されている) から独立して選択される 1 つ又は 2 つ以

50

上の基で任意選択的に置換されている。

【 0 1 3 7 】

B - 9 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、及び B - 8 の化合物は、式 B - 9 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、アルキレン（好ましくは $C_1 \sim C_4$ アルキレン）、シクロアルキレン（好ましくは $C_5 \sim C_6$ シクロアルキレン）、アルキレンオキシ（好ましくはエチレンオキシ）、ハロアルキレンオキシ（好ましくはハロエチレンオキシ）、アミド、オキサアルキレン（好ましくは 3 ~ 6 個の炭素原子を含有する）、シロキサニル、アルキレンシロキサニル、カルバメート、アルキレンアミン（好ましくは $C_1 \sim C_6$ アルキレンアミン）、又はこれらの 2 つ若しくは 3 つ以上の組み合わせを含み、連結基が、アルキル、ヒドロキシル、エーテル、アミン、カルボニル、シロキシ、及びカルバメートから独立して選択される 1 つ又は 2 つ以上の置換基で任意選択的に置換されている、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、又は B - 8 の化合物である。

【 0 1 3 8 】

B - 10 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、及び B - 9 の化合物は、式 B - 10 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、アルキレン - シロキサニル - アルキレン - アルキレンオキシ -、又はアルキレン - シロキサニル - アルキレン - [アルキレンオキシ - アルキレン - シロキサニル] q - アルキレンオキシ - （式中、 q は 1 ~ 50 である）である、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、又は B - 9 の化合物である。

【 0 1 3 9 】

B - 11 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、及び B - 9 の化合物は、式 B - 11 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、 $C_1 \sim C_6$ アルキレン、好ましくは $C_1 \sim C_3$ アルキレン、より好ましくは n - プロピレンである、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、又は B - 9 の化合物である。

【 0 1 4 0 】

B - 12 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、及び B - 9 の化合物は、式 B - 12 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、アルキレン - カルバメート - オキサアルキレンである、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、又は B - 9 の化合物である。好ましくは、連結基は、 $CH_2CH_2N(H) - C(=O) - O - CH_2CH_2 - O - CH_2CH_2CH_2$ である。

【 0 1 4 1 】

B - 13 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、及び B - 9 の化合物は、式 B - 13 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、オキサアルキレンである、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、又は B - 9 の化合物である。好ましくは、連結基は、 $CH_2CH_2 - O - CH_2CH_2CH_2$ である。

【 0 1 4 2 】

B - 14 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、及び B - 9 の化合物は、式 B - 14 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、アルキレン - [シロキサニル - アルキレン] q - である（式中、 q は 1 ~ 50 である）、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、又は B - 9 の化合物である。そのような連結基の例は、 $-(CH_2)_3 - [Si(CH_3)_2 - O - Si(CH_3)_2 - (CH_2)_2]_q -$ である。

【 0 1 4 3 】

B - 15 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、及び B - 9 の化合物は、式 B - 15 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、アルキレンオキシ - カルバメート - アルキレン - シクロアルキレン - カルバメート -

オキサアルキレンであり、シクロアルキレンが、1つ、2つ、又は3つの独立して選択されたアルキル基（好ましくは $C_1 \sim C_3$ アルキル、より好ましくはメチル）で任意選択的に置換されている、式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、又はB-9の化合物である。そのような連結基の例は、 $-[OCH_2CH_2]_q - OC(=O) - NH - CH_2 - [1, 3 - \text{シクロヘキシレン}] - NHC(=O)O - CH_2CH_2 - O - CH_2CH_2 -$ であり、式中、シクロヘキシレンは、1及び5位で3つのメチル基で置換されている。

【0144】

B-16. 式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、及びB-9の化合物は、式B-16の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g が、スチリルを含み、連結基が、アルキレンオキシであり、アルキレンオキシ中の各アルキレンが、独立して、ヒドロキシルで任意選択的に置換されている、式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、又はB-9の化合物である。そのような連結基の例は、 $-O - (CH_2)_3 -$ である。そのような連結基の別の例は、 $-O - CH_2CH(OH)CH_2 - O - (CH_2)_3 -$ である。

【0145】

B-17. 式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、及びB-9の化合物は、式B-17の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g が、スチリルを含み、連結基が、アルキレンアミンである、式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、又はB-9の化合物である。そのような連結基の例は、 $-NH - (CH_2)_3 -$ である。

【0146】

B-18. 式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、及びB-9の化合物は、式B-18の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、ヒドロキシル、シロキシ、又はシリル-アルキレンオキシで任意選択的に置換されているオキサアルキレンである（アルキレンオキシは、それ自体がヒドロキシルで任意選択的に置換されている）、式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、又はB-9の化合物である。そのような連結基の例は、 $-CH_2CH(G)CH_2 - O - (CH_2)_3 -$ であり、式中、Gはヒドロキシルである。別の例において、Gは $R_3SiO -$ であり、2つのR基はトリメチルシロキシであり、3番目は $C_1 \sim C_8$ アルキル（好ましくは $C_1 \sim C_3$ アルキル、より好ましくはメチル）であるか、又は3番目は $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルである。更なる例において、Gは $R_3Si - (CH_2)_3 - O - CH_2CH(OH)CH_2 - O -$ であり、2つのR基はトリメチルシロキシであり、3番目は $C_1 \sim C_8$ アルキル（好ましくは $C_1 \sim C_3$ アルキル、より好ましくはメチル）又は $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルである。なおも更なる例において、Gは、（メタ）アクリレートなどの重合性基である。そのような化合物は、架橋剤として機能し得る。

【0147】

B-19. 式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、及びB-9の化合物は、式B-19の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g が、スチリルを含み、連結基が、ヒドロキシルで任意選択的に置換されているアミン-オキサアルキレンである、式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、又はB-9の化合物である。そのような連結基の別の例は、 $-NH - CH_2CH(OH)CH_2 - O - (CH_2)_3 -$ である。

【0148】

B-20. 式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、及びB-9の化合物は、式B-20の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g が、スチリルを含み、連結基が、アルキレンオキシ-カルバメート-オキサアルキレンである、式B、B-1、B-2、B-3、B-4、B-5、B-6、B-7、B-8、又はB-9の化合物である。そのような連結基の例は、 $-O - (CH_2)_2 - N(H)C(=O)O - (CH_2)_2 - O - (CH_2)_3 -$ である。

【 0 1 4 9 】

B - 2 1 . 式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、及び B - 9 の化合物は、式 B - 2 1 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、連結基が、アルキレン - カルバメート - オキサアルキレンである、式 B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、又は B - 9 の化合物である。そのような連結基の例は、 $-(CH_2)_2-N(H)C(=O)O-(CH_2)_2-O-(CH_2)_3-$ である。

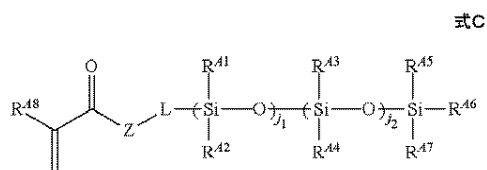
【 0 1 5 0 】

式 C . 式 A、B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、B - 9、B - 10、B - 11、B - 12、B - 13、B - 14、B - 15、B - 18、及び B - 2 1 のシリコン含有構成成分は、式 C の化合物を含んでもよく、これらは、次の構造を有する式 A、B、B - 1、B - 2、B - 3、B - 4、B - 5、B - 6、B - 7、B - 8、B - 9、B - 10、B - 11、B - 12、B - 13、B - 14、B - 15、B - 18、又は B - 2 1 の化合物であり、

10

【 0 1 5 1 】

【 化 3 】



20

式中、

R^{A8} は、水素又はメチルであり、

Z は、O、S、又は $N(R^{A9})$ であり、かつ

L、j 1、j 2、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^{A7} 、及び R^{A9} は、式 B 又はその様々な下位式（例えば、B - 1、B - 2 など）で定義されるとおりである。

【 0 1 5 2 】

C - 1 . 式 C の化合物は、式 C - 1 の（メタ）アクリレートを含んでもよく、これらは、式中、Z が O である、式 C の化合物である。

30

【 0 1 5 3 】

C - 2 . 式 C の化合物は、式 C - 2 の（メタ）アクリルアミドを含んでもよく、これらは、式中、Z が $N(R^{A9})$ であり、 R^{A9} が H である、式 C の化合物である。

【 0 1 5 4 】

C - 3 . 式 C の化合物は、式 C - 3 の（メタ）アクリルアミドを含んでもよく、これらは、式中、Z が $N(R^{A9})$ であり、 R^{A9} が非置換であるか、又は上記のように任意選択的に置換されている $C_1 \sim C_8$ アルキルである、式 C の化合物である。 R^{A9} の例としては、 CH_3 、 $-CH_2CH(OH)CH_2(OH)$ 、 $-(CH_2)_3$ -シロキサニル、 $-(CH_2)_3-SiR_3$ 、及び $-CH_2CH(OH)CH_2-O-(CH_2)_3-SiR_3$ が挙げられ、前述の基の各 R は、トリメチルシロキシ、 $C_1 \sim C_8$ アルキル（好ましくは $C_1 \sim C_3$ アルキル、より好ましくはメチル）、及び $C_3 \sim C_8$ シクロアルキルから独立して選択される。 R^{A9} の更なる例としては、 $-(CH_2)_3-Si(Me)(SiMe_3)_2$ 、及び $-(CH_2)_3-Si(Me_2)-[O-SiMe_2]_{1-10}-CH_3$ が挙げられる。

40

【 0 1 5 5 】

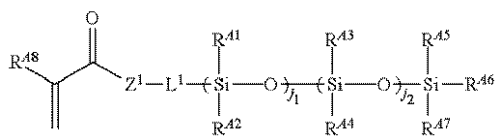
式 D . 式 C の化合物は、式 D の化合物を含んでもよく、

【 0 1 5 6 】

50

【化 4】

式D



式中、

R^{A8} は、水素又はメチルであり、

Z^1 は、O 又は N (R^{A9}) であり、

10

L^1 は、1 ~ 8 個の炭素原子を含有するアルキレン、又は 3 ~ 10 個の炭素原子を含有するオキサアルキレンであり、 L^1 は、ヒドロキシルで任意選択的に置換されており、

j_2 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^{A7} 、及び R^{A9} は、式 B 又はその様々な下位式 (例えば、B - 1、B - 2 など) において上で定義されるとおりである。

【0157】

D - 1 . 式 D の化合物は、式 D - 1 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 L^1 が、ヒドロキシルで任意選択的に置換されている $C_2 \sim C_5$ アルキレンである、式 D の化合物である。好ましくは、 L^1 は、ヒドロキシルで任意選択的に置換されている n - プロピレンである。

【0158】

20

D - 2 . 式 D の化合物は、式 D - 2 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 L^1 が、ヒドロキシルで任意選択的に置換されている 4 ~ 8 個の炭素原子を含有するオキサアルキレンである、式 D の化合物である。好ましくは、 L^1 は、ヒドロキシルで任意選択的に置換されている 5 又は 6 個の炭素原子を含有するオキサアルキレンである。例としては、 $-(CH_2)_2-O-(CH_2)_3-$ 、及び $-CH_2CH(OH)CH_2-O-(CH_2)_3-$ が挙げられる。

【0159】

D - 3 . 式 D、D - 1、及び D - 2 の化合物は、式 D - 3 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 Z^1 が O である、式 D、D - 1、又は D - 2 の化合物である。

【0160】

30

D - 4 . 式 D、D - 1、及び D - 2 の化合物は、式 D - 4 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 Z^1 が N (R^{A9}) であり、 R^{A9} が H である、式 D、D - 1、又は D - 2 の化合物である。

【0161】

D - 5 . 式 D、D - 1、及び D - 2 の化合物は、式 D - 5 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 Z^1 が N (R^{A9}) であり、 R^{A9} が、ヒドロキシル、シロキシ、及び $C_1 \sim C_6$ アルキル - シロキサニル - から選択される 1 つ又は 2 つの置換基で任意選択的に置換されている $C_1 \sim C_4$ アルキルである、式 D、D - 1、又は D - 2 の化合物である。

【0162】

D - 6 . 式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、及び D - 5 の化合物は、式 D - 6 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 j_2 が 1 である、式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、又は D - 5 の化合物である。

40

【0163】

D - 7 . 式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、及び D - 5 の化合物は、式 D - 7 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 j_2 が 2 ~ 220、又は 2 ~ 100、又は 10 ~ 100、又は 24 ~ 100、又は 4 ~ 20、又は 4 ~ 10 である、式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、又は D - 5 の化合物である。

【0164】

D - 8 . 式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、D - 5、D - 6、及び D - 7 の化合物は、式 D - 8 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、R

50

R^{A6} 、及び R^{A7} が、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル又はシロキシである、式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、D - 5、D - 6、又は D - 7 の化合物である。好ましくは、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、及び R^{A7} は、メチル、エチル、 n - プロピル、 n - ブチル、及びトリメチルシロキシから独立して選択される。より好ましくは、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、及び R^{A7} は、メチル、 n - ブチル、及びトリメチルシロキシから独立して選択される。

【0165】

D - 9 . 式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、D - 5、D - 6、及び D - 7 の化合物は、式 D - 9 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R^{A3} 及び R^{A4} が、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル（例えば、メチル又はエチル）又はシロキシ（例えば、トリメチルシロキシ）であり、 R^{A5} 、 R^{A6} 、及び R^{A7} が、独立して、 $C_1 \sim C_6$ アルキル（例えば、メチル、エチル、 n - プロピル、又は n - ブチル）である、式 D、D - 1、D - 2、D - 3、D - 4、D - 5、D - 6、又は D - 7 の化合物である。

10

【0166】

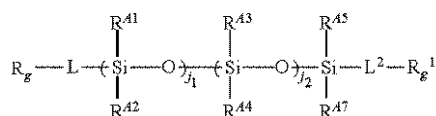
式 E . シリコン含有構成成分は、多官能性シリコン含有構成成分を含み得る。したがって、例えば、式 A のシリコン含有構成成分は、式 E の二官能性材料を含んでもよく、

【0167】

【化5】

式E

20



式中、

R_g 、 L 、 j_1 、 j_2 、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、及び R^{A7} は、式 B 又はその様々な下位式（例えば、B - 1、B - 2 など）について上で定義されるとおりであり、

L^2 は、連結基であり、

R_g^1 は、重合性基である。

30

【0168】

E - 1 . 式 E の化合物は、式 E - 1 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g 及び R_g^1 がそれぞれ、構造 $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{O} - \text{C}(=\text{O}) - \text{O} -$ 又は構造 $\text{CH}_2 = \text{C}(\text{CH}_3) - \text{O} - \text{C}(=\text{O}) - \text{O} -$ のビニルカーボネートである、式 E の化合物である。

【0169】

E - 2 . 式 E の化合物は、式 E - 2 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g 及び R_g^1 がそれぞれ、（メタ）アクリレートである、式 E の化合物である。

【0170】

E - 3 . 式 E の化合物は、式 E - 3 の化合物を含んでもよく、これらは、式中、 R_g 及び R_g^1 がそれぞれ、（メタ）アクリルアミドであり、窒素基が、 R^{A9} で置換され得る（ R^{A9} は、上で定義されるとおりである）、式 E の化合物である。

40

【0171】

E - 4 . 式 E、E - 1、E - 2、及び E - 3 の好適な化合物は、式 E - 4 の化合物を含み、これらは、式中、 j_1 が 0 であり、 j_2 が 1 ~ 220 であるか、又は j_2 が 1 ~ 100 であるか、又は j_2 が 1 ~ 50 であるか、又は j_2 が 1 ~ 20 である、式 E、E - 1、E - 2、又は E - 3 の化合物である。

【0172】

E - 5 . 式 E、E - 1、E - 2、及び E - 3 の好適な化合物は、式 E - 5 の化合物を含み、これらは、式中、 j_1 及び j_2 が、独立して、4 ~ 100 である、式 E、E - 1、E - 2、又は E - 3 の化合物である。

50

【 0 1 7 3 】

E - 6 . 式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、及び E - 5 の好適な化合物は、式 E - 6 の化合物を含み、これらは、式中、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、及び R^{A5} が、独立して、それぞれの出現において、 $C_1 \sim C_6$ アルキルであるか、好ましくは、それらが、独立して、 $C_1 \sim C_3$ アルキルであるか、又は好ましくは、それぞれがメチルである、式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、又は E - 5 の化合物である。

【 0 1 7 4 】

E - 7 . 式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、E - 5、及び E - 6 の好適な化合物は、式 E - 7 の化合物を含み、これらは、式中、 R^{A7} が、アルコキシ - アルキレンオキシ - アルキルであり、好ましくは、式 $CH_3O - [CH_2CH_2O]_p - CH_2CH_2CH_2$ (式中、p は、1 ~ 50、又は 1 ~ 30、又は 1 ~ 10、又は 6 ~ 10 の整数である) のメトキシキャップされたポリエチレンオキシアルキルである、式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、E - 5、又は E - 6 の化合物である。

10

【 0 1 7 5 】

E - 8 . 式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、E - 5、E - 6、及び E - 7 の好適な化合物は、式 E - 8 の化合物を含み、これらは、式中、L が、アルキレン、カルバメート、シロキサニル、シクロアルキレン、アミド、ハロアルキレンオキシ、オキサアルキレン、又はこれらの 2 つ又は 3 つ以上の組み合わせを含み、連結基が、アルキル、ヒドロキシル、エーテル、アミン、カルボニル、及びカルバメートから独立して選択される 1 つ又は 2 つ以上の置換基で任意選択的に置換されている、式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、E - 5、E - 6、又は E - 7 の化合物である。

20

【 0 1 7 6 】

E - 9 . 式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、E - 5、E - 6、E - 7、及び E - 8 の好適な化合物は、式 E - 9 の化合物を含み、これらは、式中、 L^2 が、アルキレン、カルバメート、シロキサニル、シクロアルキレン、アミド、ハロアルキレンオキシ、オキサアルキレン、又はこれらの 2 つ若しくは 3 つ以上の組み合わせを含み、連結基が、アルキル、ヒドロキシル、エーテル、アミン、カルボニル、及びカルバメートから独立して選択される 1 つ又は 2 つ以上の置換基で任意選択的に置換されている、式 E、E - 1、E - 2、E - 3、E - 4、E - 5、E - 6、E - 7、又は E - 8 の化合物である。

【 0 1 7 7 】

本発明で使用するのに好適なシリコーン含有構成成分の例としては、以下の表に列記する化合物が挙げられるが、これらに限定されない。以下の表中の化合物がポリシロキサン基を含む場合、そのような化合物中の SiO 繰り返し単位の数、別途記載のない限り、好ましくは 3 ~ 100 個、より好ましくは 3 ~ 40 個、又は更により好ましくは 3 ~ 20 個である。

30

【 0 1 7 8 】

40

50

【表 1 - 1】

- 1 モノメタクリルオキシプロピル末端モノ-n-ブチル末端ポリジメチルシロキサン
(mPDMS) (好ましくは、3~15個のSiO繰り返し単位を含有する)
- 2 モノアクリルオキシプロピル末端モノ-n-ブチル末端ポリジメチルシロキサン
- 3 モノ(メタ)アクリルオキシプロピル末端モノ-n-メチル末端
ポリジメチルシロキサン
- 4 モノ(メタ)アクリルオキシプロピル末端モノ-n-ブチル末端ポリジエチルシロキサン
- 5 モノ(メタ)アクリルオキシプロピル末端モノ-n-メチル末端ポリジエチルシロキサン
- 6 モノ(メタ)アクリルアミドアルキルポリジアルキルシロキサン
- 7 モノ(メタ)アクリルオキシアルキル末端モノアルキルポリジアリールシロキサン
- 8 3-メタクリルオキシプロピルトリス(トリメチルシロキシ)シラン(TRIS)
- 9 3-メタクリルオキシプロピルビス(トリメチルシロキシ)メチルシラン
- 10 3-メタクリルオキシプロピルペンタメチルジシロキサン
- 11 モノ(メタ)アクリルアミドアルキルポリジアルキルシロキサン
- 12 モノ(メタ)アクリルアミドアルキルポリジメチルシロキサン
- 13 N-(2, 3-ジヒドロキシプロパン)-N'-(プロピルテトラ(ジメチルシロキシ)
ジメチルブチルシラン)アクリルアミド
- 14 N-[3-トリス(トリメチルシロキシ)シリル]-プロピルアクリルアミド(TRIS-Am)
- 15 2-ヒドロキシ-3-[3-メチル-3, 3-ジ(トリメチルシロキシ)シリルプロポキシ]-プロピルメタクリ
レート
(SiMAA)
- 16 2-ヒドロキシ-3-メタクリルオキシプロピルオキシプロピルトリス(トリメチルシロキシ)シラン
モノ-(2-ヒドロキシ-3-メタクリルオキシプロピル)-プロピルエーテル末端モノ-n-ブチル
末端ポリジメチルシロキサン(OH-mPDMS) (4~30、又は10
~20、又は4~8個のSiO繰り返し単位を含有する)

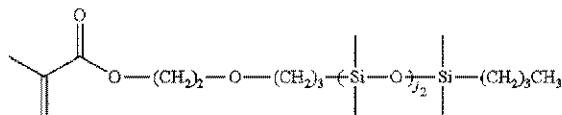
10

20

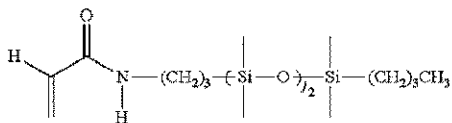
30

40

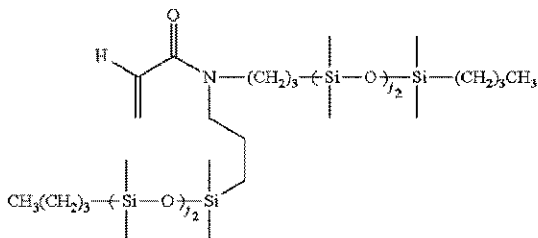
18



19

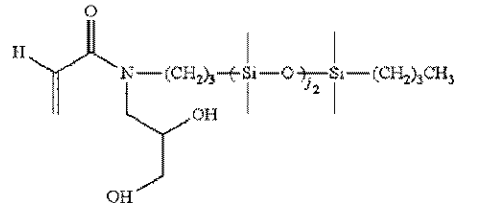
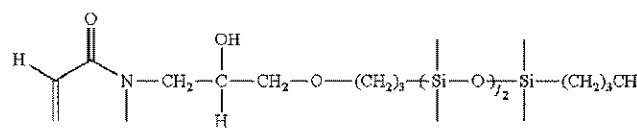
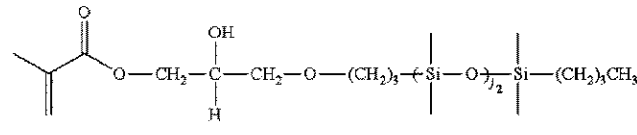
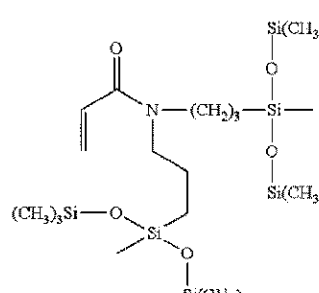


20



【 0 1 7 9 】

【表 1 - 2】

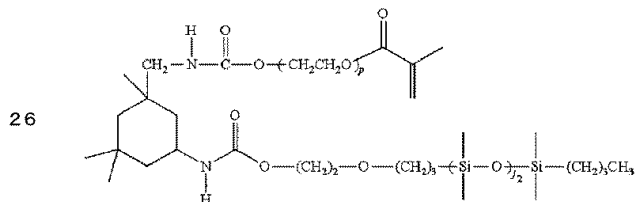
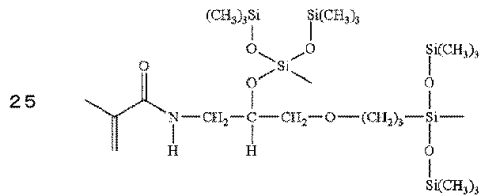
21		
22		10
23		
24		20

【0180】

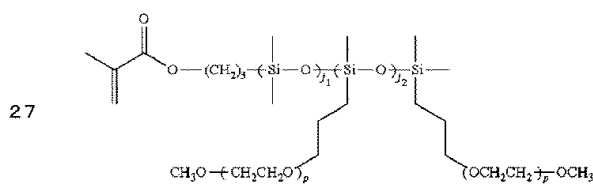
好適なシリコン含有構成成分の追加の非限定的な例を、以下の表に列挙する。別途記載のない限り、適用可能な場合、j 2 は、好ましくは 1 ~ 100、より好ましくは 3 ~ 40、又は更により好ましくは 3 ~ 15 である。j 1 及び j 2 を含有する化合物において、j 1 と j 2 との合計は、好ましくは 2 ~ 100、より好ましくは 3 ~ 40、又は更により好ましくは 3 ~ 15 である。

【0181】

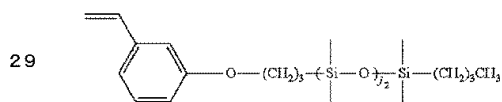
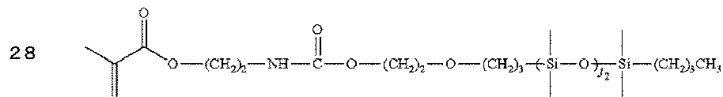
【表 2 - 1】



pは、1～10である



pは、5～10である



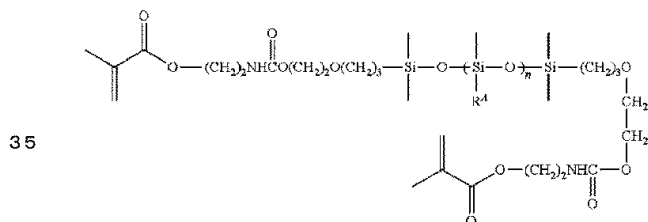
30 1, 3-ビス[4-(ビニルオキシカルボニルオキシ)ブター-1-イル][トリス(トリメチルシロキシ)シリル]テトラメチルジシロキサン

31 3-(ビニルオキシカルボニルチオ)プロピル-(トリメチルシロキシ)シラン

32 3-[トリス(トリメチルシロキシ)シリル]プロピルアリルカルバマート

33 3-[トリス(トリメチルシロキシ)シリル]プロピルビニルカルバマート

34 トリス(トリメチルシロキシ)シリルスチレン(スチリル-TRIS)



$R^A = \text{CH}_3$ (a) 又は $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CF}_3$ (b) 又は $\text{CH}_2 - (\text{CH}_2)_2 - [\text{OCH}_2\text{CH}_2]_{1-10} - \text{OCH}_3$ (c) ;
 $a + b + c = n$

【 0 1 8 2 】

10

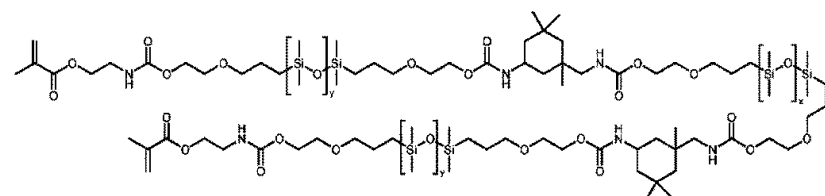
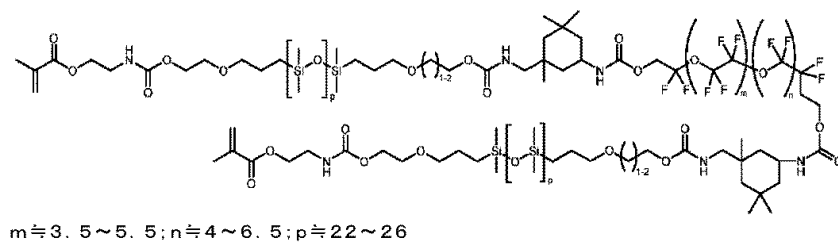
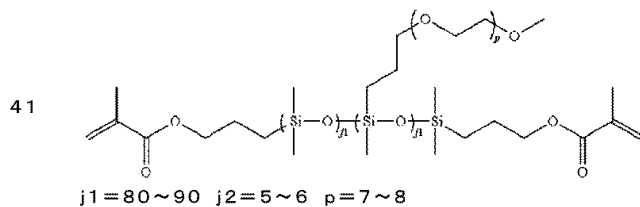
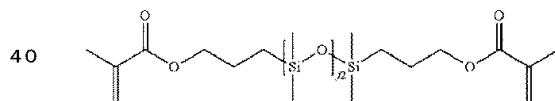
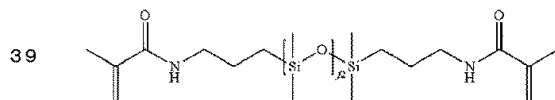
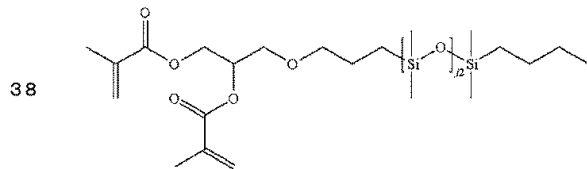
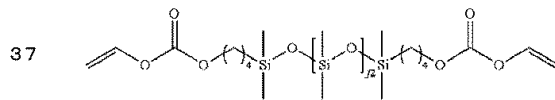
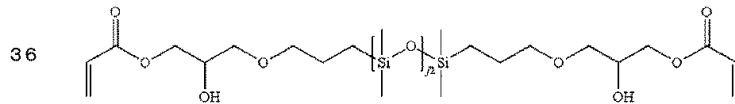
20

30

40

50

【表 2 - 2】



IEM-PDMS ($M_n \cong 3000$)-IPDI-PDMS ($M_n \cong 2000$)-IPDI-PDMS ($M_n \cong 3000$)-IEM
(国際公開第2016100457号を参照)

【0183】

シリコン含有構成成分は、約400～約4000ダルトンの平均分子量を有することができる。

【0184】

シリコン含有構成成分は、反応性混合物（希釈剤を除く）の、全ての反応性構成成分に基づいて、最大約95重量%、又は約10～約80重量%、又は約20～約70重量%の量で存在し得る。

【0185】

ポリアミド

反応性モノマー混合物は、少なくとも１つのポリアミドを含んでもよい。本明細書で用される場合、「ポリアミド」という用語は、アミド基を含有する繰り返し単位を含むポリマー及びコポリマーを指す。ポリアミドは、環状アミド基、非環状アミド基、及びこれらの組み合わせを含んでいてよく、当業者に既知の任意のポリアミドであってもよい。非環状ポリアミドは、ペンダント非環状アミド基を含み、ヒドロキシル基との会合が可能である。環状ポリアミドは、環状アミド基を含み、ヒドロキシル基との会合が可能である。

【 0 1 8 6 】

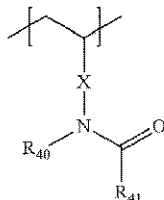
好適な非環状ポリアミドの例としては、式 G 1 及び G 2 の繰り返し単位を含むポリマー及びコポリマーが挙げられ、

【 0 1 8 7 】

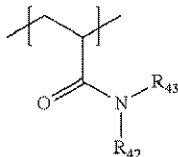
10

【 化 6 】

式G1



式G2



20

式中、Xは、直接結合、 $-(CO)-$ 、又は $-(CONHR_{44})-$ であり、 R_{44} は、 $C_1 \sim C_3$ アルキル基であり、 R_{40} は、H、直鎖又は分岐鎖で、置換又は非置換の $C_1 \sim C_4$ アルキル基から選択され、 R_{41} は、H、直鎖又は分岐鎖で、置換又は非置換の $C_1 \sim C_4$ アルキル基、最大２個の炭素原子を有するアミノ基、最大４個の炭素原子を有するアミド基、及び最大２個の炭素基を有するアルコキシ基から選択され、 R_{42} は、H、直鎖又は分岐鎖で、置換又は非置換の $C_1 \sim C_4$ アルキル基から選択され、又はメチル、エトキシ、ヒドロキシエチル、及びヒドロキシメチルから選択され、 R_{43} は、H、直鎖又は分岐鎖で、置換又は非置換の $C_1 \sim C_4$ アルキル基から選択され、又はメチル、エトキシ、ヒドロキシエチル、及びヒドロキシメチルから選択され、 R_{40} 及び R_{41} の炭素原子の数は、合計で、7、6、5、4、3、又はそれ未満を含む、8以下であり、 R_{42} 及び R_{43} の炭素原子の数は、合計で、7、6、5、4、3、又はそれ未満を含む、8以下である。 R_{40} 及び R_{41} の炭素原子の数は、合計で、6以下又は4以下であり得る。 R_{42} 及び R_{43} の炭素原子の数は、合計で、6以下であり得る。本明細書で用いられる場合、置換アルキル基は、アミン基、アミド基、エーテル基、ヒドロキシル基、カルボニル基、若しくはカルボキシ基、又はこれらの組み合わせによって置換されているアルキル基を含む。

30

40

【 0 1 8 8 】

R_{40} 及び R_{41} は、H、置換又は非置換の $C_1 \sim C_2$ アルキル基から独立して選択され得る。Xは、直接結合であってもよく、 R_{40} 及び R_{41} は、H、置換又は非置換の $C_1 \sim C_2$ アルキル基から独立して選択され得る。 R_{42} 及び R_{43} は、H、置換又は非置換の $C_1 \sim C_2$ アルキル基、メチル、エトキシ、ヒドロキシエチル、及びヒドロキシメチルから独立して選択され得る。

【 0 1 8 9 】

本発明の非環状ポリアミドは、式 L V 若しくは式 L V I の繰り返し単位を主要な部分として含み得るか、又は非環状ポリアミドは、少なくとも約 70 モルパーセント及び少なくとも 80 モルパーセントなど、式 G 若しくは式 G 1 の繰り返し単位の少なくとも 50 モル

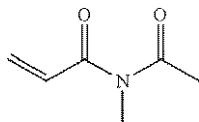
50

パーセントを含み得る。式 G 及び式 G 1 の繰り返し単位の具体的な例としては、N - ビニル - N - メチルアセトアミド、N - ビニルアセトアミド、N - ビニル - N - メチルプロピオンアミド、N - ビニル - N - メチル - 2 - メチルプロピオンアミド、N - ビニル - 2 - メチル - プロピオンアミド、N - ビニル - N , N ' - ジメチル尿素、N , N - ジメチルアクリルアミド、メタクリルアミド、並びに式 G 2 及び G 3 のアクリルアミドから誘導される繰り返し単位が挙げられる。

【 0 1 9 0 】

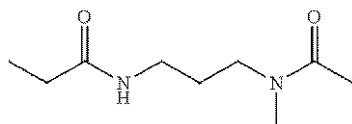
【 化 7 】

式G2



10

式G3



20

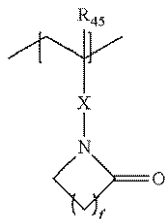
【 0 1 9 1 】

環状ポリアミドを形成するために使用され得る好適な環状アミドの例としては、 α - ラクタム、 β - ラクタム、 γ - ラクタム、 δ - ラクタム、及び ϵ - ラクタムが挙げられる。好適な環状ポリアミドの例としては、式 G 4 の繰り返し単位を含むポリマー及びコポリマーが挙げられ、

【 0 1 9 2 】

【 化 8 】

式G4



30

式中、 R_{45} は、水素原子又はメチル基であり、 f は、1 ~ 10 の数であり、 X は、直接結合、 $-(CO)-$ 、又は $-(CONHR_{46})-$ であり、 R_{46} は、 $C_1 \sim C_3$ アルキル基である。式 L I X 中、 f は、7、6、5、4、3、2、又は1を含む、8 以下であり得る。式 G 4 中、 f は、5、4、3、2、又は1を含む、6 以下であり得る。式 G 4 中、 f は、2、3、4、5、6、7、又は8を含む、2 ~ 8 であり得る。式 L I X 中、 f は、2 又は3であり得る。 X が直接結合のとき、 f は、2 であり得る。そのような事例において、環状ポリアミドは、ポリビニルピロリドン (polyvinylpyrrolidone、PVP) であり得る。

40

【 0 1 9 3 】

環状ポリアミドは、式 G 4 の繰り返し単位の 50 モルパーセント又はそれ以上を含んでもよく、又は環状ポリアミドは、少なくとも 70 モルパーセント、及び少なくとも 80 モルパーセントなど、式 G 4 の繰り返し単位の少なくとも 50 モルパーセントを含んでもよい。

【 0 1 9 4 】

ポリアミドはまた、環状アミド及び非環状アミドの両方の繰り返し単位を含むコポリマ

50

ーであってもよい。追加の繰り返し単位は、ヒドロキシアルキル（メタ）アクリレート、アルキル（メタ）アクリレート、他の親水性モノマー、及びシロキサン置換（メタ）アクリレートから選択されるモノマーから形成され得る。好適な親水性モノマーとして列挙されるモノマーのいずれも、追加の繰り返し単位を形成するためにコモノマーとして使用され得る。ポリアミドを形成するために使用され得る追加のモノマーの具体的な例としては、2-ヒドロキシエチル（メタ）アクリレート、酢酸ビニル、アクリロニトリル、ヒドロキシプロピル（メタ）アクリレート、メチル（メタ）アクリレート及びヒドロキシブチル（メタ）アクリレート、ジヒドロキシプロピル（メタ）アクリレート、ポリエチレングリコールモノ（メタ）アクリレートなど、並びにこれらの混合物が挙げられる。イオン性モノマーも含まれ得る。イオン性モノマーの例としては、（メタ）アクリル酸、N-[(エテニルオキシ)カルボニル]-β-アラニン(VINAL、CAS # 148969-96-4)、3-アクリルアミドプロパン酸(3-acrylamidopropanoic acid、ACA1)、5-アクリルアミドペンタン酸(5-acrylamidopentanoic acid、ACA2)、3-アクリルアミド-3-メチルブタン酸(3-acrylamido-3-methylbutanoic acid、AMBA)、2-(メタクリロイルオキシ)エチルトリメチルアンモニウムクロリド(Q塩又は2-(methacryloyloxy)ethyl trimethylammonium chloride、METAC)、2-アクリルアミド-2-メチルプロパンスルホン酸(2-acrylamido-2-methylpropane sulfonic acid、AMPS)、1-プロパンアミニウム、N-(2-カルボキシエチル)-N,N-ジメチル-3-[(1-オキシ-2-プロペン-1-イル)アミノ]-,分子内塩(CBT)、1-プロパンアミニウム、N,N-ジメチル-N-[3-[(1-オキシ-2-プロペン-1-イル)アミノ]プロピル]-3-スルホ-,分子内塩(SBT)、3,5ジオキサ-8-アザ-4-ホスファウンデカ-10-エン-1-アミニウム、4-ヒドロキシ-N,N,N-トリメチル-9-オキシ-,分子内塩,4-オキシド(9CI)(PBT)、2-メタクリロイルオキシエチルホスホリルコリン、3-(ジメチル(4-ビニルベンジル)アンモニオ)プロパン-1-スルホナート(3-(dimethyl(4-vinylbenzyl)ammonio)propane-1-sulfonate、DMVBAPS)、3-((3-アクリルアミドプロピル)ジメチルアンモニオ)プロパン-1-スルホナート(3-((3-acrylamidopropyl)dimethylammonio)propane-1-sulfonate、AMPDAPS)、3-((3-メタクリルアミドプロピル)ジメチルアンモニオ)プロパン-1-スルホナート(3-((3-methacrylamidopropyl)dimethylammonio)propane-1-sulfonate、MAMPDAPS)、3-((3-(アクリロイルオキシ)プロピル)ジメチルアンモニオ)プロパン-1-スルホナート(3-((3-(acryloyloxy)propyl)dimethylammonio)propane-1-sulfonate、APDAPS)、3-((3-(メタクリロイルオキシ)プロピル)ジメチルアンモニオ)プロパン-1-スルホナート(3-((3-(methacryloyloxy)propyl)dimethylammonio)propane-1-sulfonate、MAPDAPS)が挙げられる。

【0195】

反応性モノマー混合物は、非環状ポリアミド及び環状ポリアミドの両方又はそれらのコポリマーを含んでもよい。非環状ポリアミドは、本明細書に説明される非環状ポリアミド又はこれらのコポリマーのいずれかであり得るが、環状ポリアミドは、本明細書に説明される環状ポリアミド又はこれらのコポリマーのいずれかであり得る。ポリアミドは、ポリビニルピロリドン(PVP)、ポリビニルメチルアセトアミド(PVMA)、ポリジメチルアクリルアミド(PDMA)、ポリビニルアセトアミド(PNVA)、ポリ(ヒドロキシエチル(メタ)アクリルアミド)、ポリアクリルアミド、並びにそれらのコポリマー及び混合物の群から選択され得る。

【0196】

反応性混合物中の全てのポリアミドの総量は、あらゆる場合において、反応性モノマー混合物の反応性構成成分の総重量に基づいて、1重量パーセント～約15重量パーセントの範囲、及び約5重量パーセント～約15重量パーセントの範囲など、1重量パーセント～約35重量パーセントの範囲であり得る。

【0197】

理論に束縛されるものではないが、シリコーンヒドロゲルとともに使用されるとき、ポリアミドは内部湿潤剤として機能する。ポリアミドは、非重合性であってもよく、この場合、半相互貫入ネットワークとしてシリコーンヒドロゲル内に組み込まれる。ポリアミドは、シリコーンヒドロゲル内に封入されるか、又は物理的に保持される。代替的に、ポリアミドは、例えば、ポリアミドマクロマー又はプレポリマーとして重合性であり得、この場合、シリコーンヒドロゲル内に共有結合的に組み込まれる。重合性及び非重合性のポリアミドの混合物もまた使用され得る。

【0198】

ポリアミドが反応性モノマー混合物内に組み込まれているとき、ポリアミドは、少なくとも100,000ダルトン、約150,000超、約150,000～約2,000,000ダルトン、約300,000ダルトン～約1,800,000ダルトンの重量平均分子量を有し得る。反応性モノマー混合物と相溶性である場合、より高分子量のポリアミドを使用してもよい。

【0199】

架橋剤

概して、架橋モノマー、多官能性マクロマー、及びプレポリマーとも称される1つ又は2つ以上の架橋剤を反応性混合物に添加することが望ましい。架橋剤は、二官能性架橋剤、三官能性架橋剤、四官能性架橋剤、及びこれらの混合物から選択されてもよく、これにはシリコーン含有架橋剤及び非シリコーン含有架橋剤が含まれる。非シリコーン含有架橋剤としては、エチレングリコールジメタクリレート(EGDMA)、テトラエチレングリコールジメタクリレート(TEGDMA)、トリメチロールプロパントリメタクリレート(TMPTMA)、トリアリルシアヌレート(TAC)、グリセロールトリメタクリレート、メタクリルオキシエチルビニルカーボネート(HEMAVC)、アリルメタクリレート、メチレンビスアクリルアミド(MBA)、及びポリエチレングリコールジメタクリレートが挙げられ、ポリエチレングリコールは、最大約5000ダルトンの分子量を有する。架橋剤は、通常、例えば、反応性配合物100グラム当たり約0.000415～約0.0156モルで反応性混合物中に用いられる。代替的に、親水性モノマー及び/又はシリコーン含有構成成分が分子設計により、又は不純物のために多官能性である場合、反応性混合物への架橋剤の添加は、任意選択である。架橋剤として作用することができ、存在する場合に反応性混合物への追加の架橋剤の添加を必要としない親水性モノマー及びマクロマーの例としては、(メタ)アクリレート及び(メタ)アクリルアミドでエンドキャップされたポリエーテルが挙げられる。他の架橋剤は当業者に既知となり、本発明のシリコーンヒドロゲルを作製するために使用され得る。

【0200】

配合物中の他の反応性構成成分のうちの1つ又は2つ以上に対して同様の反応性を有する架橋剤を選択することが望ましい場合がある。場合によっては、得られるシリコーンヒドロゲルのいくつかの物理的、機械的、又は生物学的特性を制御するために、異なる反応性を有する架橋剤の混合物を選択することが望ましい場合がある。シリコーンヒドロゲルの構造及び形態は、使用される希釈剤及び硬化条件によっても影響を受け得る。

【0201】

弾性率を更に増加させ、引張強度を維持するために、マクロマー、架橋剤、及びプレポリマーを含む、多官能性シリコーン含有構成成分も含まれ得る。シリコーン含有架橋剤は、単独で、又は他の架橋剤と組み合わせて使用され得る。架橋剤として作用することができ、存在する場合に反応性混合物への架橋モノマーの添加を必要としないシリコーン含有構成成分の例としては、 α , ω -ビスメタクリロイルプロピル(bismethacryloxypropyl)ポリジメチルシロキサンが挙げられる。

【0202】

剛直化学構造、及びフリーラジカル重合を受ける重合性基を有する架橋剤もまた使用され得る。好適な硬い構造の非限定的な例としては、1,4-フェニレンジアクリレート、

1, 4 - フェニレンジメタクリレート、2, 2 - ビス (4 - メタクリルオキシフェニル) - プロパン、2, 2 - ビス [4 - (2 - アクリルオキシエトキシ) フェニル] プロパン、2, 2 - ビス [4 - (2 - ヒドロキシ - 3 - メタクリルオキシプロポキシ) フェニル] プロパン、及び 4 - ビニルベンジルメタクリレート、並びにこれらの組み合わせなど、フェニル及びベンジル部分を含む架橋剤が挙げられる。剛直な架橋剤は、全ての反応性構成成分の総重量に基づき、約 0.5 ~ 約 15、又は約 2 ~ 10、3 ~ 7 の量で含まれ得る。本発明のシリコンヒドロゲルの物理的及び機械的特性は、反応性混合物中の構成成分を調整することによって特定の用途に最適化され得る。

【0203】

シリコン架橋剤の非限定的な例としては、式 E (及びその下位式) の化合物及び上記の表に示される多官能性化合物などの、上記の多官能性シリコン含有構成成分も挙げられる。

【0204】

本明細書に記載の組成物がシリコンヒドロゲルコンタクトレンズにおいて使用される場合、レンズは、好ましくは以下の特性を示し得る。全ての値の前には「約」が付き、このレンズは、列挙する特性の任意の組み合わせを有し得る。特性は、例えば、参照により本明細書に組み込まれる米国特許出願公開第 20180037690 号に記載されているように、当業者に既知の方法によって決定することができる。

含水重量 % : 少なくとも 20 %、少なくとも 25 %、少なくとも約 30 %、又は少なくとも約 35 %、及び最大 80 % 若しくは最大 70 %

曇り度 : 30 % 以下、又は 10 % 以下

前進動的接触角 (ウィルヘルミープレート法) : 100 ° 以下、80 ° 以下、又は 50 ° 以下

引張弾性率 (p s i) : 120 以下、又は 80 ~ 120

酸素透過性 (D k 、バーラー) : 少なくとも 80、又は少なくとも 100、又は少なくとも 150、又は少なくとも 200

破断伸び : 少なくとも 100

【0205】

イオン性シリコンヒドロゲルに関しては、(前述したものに加えて) 以下の性質もまた好ましい場合がある。

リゾチーム取り込み (μ g / レンズ) : 少なくとも 100、又は少なくとも 150、又は少なくとも 500、又は少なくとも 700

ポリクオタニウム 1 (P Q 1) 取り込み (%) : 15 以下、又は 10 以下、又は 5 以下

【実施例】

【0206】

本開示は、少なくとも以下の実施例を含む。以下の実施例は、本明細書に記載の材料及び方法のある特定の態様を更に例示することを意図するものであり、特許請求の範囲を限定することを意図するものではない。

【0207】

態様 1 : 光フィルタリングのための組成物であって、組成物が、ベース材料と、ベース材料中に分散された複数の金ナノ粒子であって、複数の金ナノ粒子が、約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収値を示す、複数の金ナノ粒子と、ベース材料中に分散された化学染料であって、化学染料が、複数の金ナノ粒子のピーク光吸収と少なくとも部分的に重複する放出ピークを有する、化学染料と、複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

【0208】

態様 2 : 組成物が、約 58 nm ~ 118 nm の半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、態様 1 に記載の組成物。

【0209】

態様 3 : ベース材料が、生体材料を含む、態様 1 ~ 2 のいずれか 1 つに記載の組成物。

【 0 2 1 0 】

態様 4 : ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、態様 1 ~ 2 のいずれか 1 つに記載の組成物。

【 0 2 1 1 】

態様 5 : ベース材料が、ヒドロゲルを含む、態様 1 ~ 2 のいずれか 1 つに記載の組成物。

【 0 2 1 2 】

態様 6 : ベース材料が、シリコーンベースのヒドロゲルを含む、態様 1 ~ 2 のいずれか 1 つに記載の組成物。

【 0 2 1 3 】

態様 7 : ベース材料が、H E M A ベースの材料を含む、態様 1 ~ 2 のいずれか 1 つに記載の組成物。

【 0 2 1 4 】

態様 8 : 複数の金ナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、態様 1 ~ 7 のいずれか 1 つに記載の組成物。

【 0 2 1 5 】

態様 9 : 複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の形状が、複数の金ナノ粒子の一部が約 6 5 0 n m ~ 約 8 0 0 n m の範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、請求項 1 に記載の組成物。

【 0 2 1 6 】

態様 1 0 : 化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【 0 2 1 7 】

態様 1 1 : 化学染料が、ローダミン B、ローダミン 6 G、又は T R I T C のうちの 1 つ又は 2 つ以上を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【 0 2 1 8 】

態様 1 2 : ナノ粒子コーティング材料が、末端チオール化ポリ(エチレングリコール)を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【 0 2 1 9 】

態様 1 3 : ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルピロリドン)を含む、請求項 1 に記載の組成物。

【 0 2 2 0 】

態様 1 4 : 複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、請求項 1 に記載の組成物。

【 0 2 2 1 】

態様 1 5 : 請求項 1 に記載の組成物を作製する、方法。

【 0 2 2 2 】

態様 1 6 : 光フィルタリングのための組成物であって、組成物が、ベース材料と、ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、複数のナノ粒子が、約 6 5 0 n m ~ 約 8 0 0 n m の範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、ベース材料中に分散された化学染料であって、化学染料が、約 5 3 0 n m ~ 約 5 6 0 n m の範囲のアブソプションピークを有する、化学染料と、複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

【 0 2 2 3 】

態様 1 7 : 組成物が、約 5 8 n m ~ 1 1 8 n m の半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、請求項 1 6 に記載の組成物。

【 0 2 2 4 】

態様 1 8 : ベース材料が、生体材料を含む、請求項 1 6 に記載の組成物。

【 0 2 2 5 】

態様 1 9 : ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、請求項 1 6 に記載の組成物。

【 0 2 2 6 】

10

20

30

40

50

- 態様 20 : ベース材料が、ヒドロゲルを含む、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0227】
- 態様 21 : ベース材料が、HEMA ベースの材料を含む、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0228】
- 態様 22 : 複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0229】
- 態様 23 : 複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、複数のナノ粒子の一部が約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、請求項 16 に記載の組成物。 10
- 【0230】
- 態様 24 : 化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0231】
- 態様 25 : 化学染料が、ローダミン B、ローダミン 6 G、又は TRITC のうちの 1 つ又は 2 つ以上を含む、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0232】
- 態様 26 : ナノ粒子コーティング材料が、末端チオール化ポリ(エチレングリコール)を含む、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0233】
- 態様 27 : ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルピロリドン)を含む、請求項 16 に記載の組成物。 20
- 【0234】
- 態様 28 : 複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0235】
- 態様 29 : ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0236】
- 態様 30 : ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、請求項 16 に記載の組成物。
- 【0237】
- 態様 31 : ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、請求項 16 に記載の組成物。 30
- 【0238】
- 態様 32 : 請求項 16 に記載の組成物を作製する、方法。
- 【0239】
- 態様 33 : 光フィルタリングのための組成物であって、組成物が、ベース材料と、ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、複数のナノ粒子が、約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、ベース材料中に分散された化学染料であって、化学染料が、ナノ粒子のスペクトル曲線のフィルタリングによって少なくとも部分的に消光されるスペクトルピークを有する、化学染料と、ベース材料中に分散された固定機構であって、固定機構が、メタクリロイル誘導モノマーを含む、固定機構と、複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。 40
- 【0240】
- 態様 34 : 組成物が、約 58 nm ~ 118 nm の半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、請求項 33 に記載の組成物。
- 【0241】
- 態様 35 : ベース材料が、生体材料を含む、請求項 33 に記載の組成物。
- 【0242】
- 態様 36 : ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、請求項 33 に記載の組成物。
- 【0243】
- 態様 37 : ベース材料が、ヒドロゲルを含む、請求項 33 に記載の組成物。 50

【 0 2 4 4 】

態様 38 : ベース材料が、H E M A ベースの材料を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 4 5 】

態様 39 : 複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 4 6 】

態様 40 : 複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、複数の一部が約 650 nm ~ 約 800 nm の範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 4 7 】

態様 41 : 化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 4 8 】

態様 42 : 化学染料が、ローダミン B、ローダミン 6 G、又は T R I T C のうちの 1 つ又は 2 つ以上を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 4 9 】

態様 43 : 固定機構が、グリシジルメタクリレートを含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 5 0 】

態様 44 : ナノ粒子コーティング材料が、ポリ (ビニルアルコール) を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 5 1 】

態様 45 : 複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 5 2 】

態様 46 : ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 5 3 】

態様 47 : ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 5 4 】

態様 48 : ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、請求項 33 に記載の組成物。

【 0 2 5 5 】

態様 49 : 請求項 33 に記載の組成物を作製する、方法。

【 0 2 5 6 】

金ナノ粒子の蛍光消光を伴う染料の特定の光遮断が、患者対応レンズを生成するように設計された戦略 (図 1 A ~ 図 1 C) 。

【 0 2 5 7 】

図 1 A ~ 図 1 C は、本開示の実施形態による表面修飾戦略を示す。本開示の表面修飾戦略は、赤色 - 緑色色覚欠乏に関連するため、コントラストを改善するために赤色錐体と緑色錐体との間のエリアを人工的に遮断するように設計された。

【 0 2 5 8 】

図 2 A ~ 図 2 B は、本開示の実施形態による光遮断材料のためのプラットフォームとしての金ナノスターの選択を示す。局在表面プラズモン共鳴 (L S P R) ピークに対して正規化された金ナノスターの溶液の紫外線 - 可視 (U V - V i s) 吸光度スペクトルを示す図 2 A に見ることができるように、金ナノスターを光遮断材料のためのプラットフォームとして選択した。ピークは、フェルスター共鳴エネルギー移動 (Forster Resonance Energy Transfer、F R E T) (すなわち、蛍光消光) が起こるために標的領域 (及び染料の放出スペクトル) に十分に近かったが、全体的な光遮断プロファイルに著しく寄与しないように十分に除去された。ナノスターは赤色光領域を遮断したため、溶液は青色に見えた。金 (A u) ナノスターの代表的な透過電子顕微鏡 (Transmission Electron Microscopy、T E M) の顕微鏡写真を図 2 B に見ることができる。

【 0 2 5 9 】

光遮断材料として金ナノスターを選択した。金ナノスターは、図2Aに見ることができるように、標的領域(530~560nm)よりも長い波長の光を遮断した。しかしながら、LSPRピークは、蛍光消光がFRETを介して依然として起こり得る蛍光染料の放出スペクトルに十分に近かった。金ナノスターのTEM顕微鏡写真は、図2Bに見ることができるように、予想された形態(4~6個の分岐を有する小さなコア、それぞれおよそ10~20nm)を確認した。分岐のサイズ及び長さは、色プロファイルを適応させ、異なる染料によるFRET蛍光消光を達成するために、異なる赤色光領域を遮断するように改変されてもよい。非限定的な例として、金ナノスター分岐のサイズ及び長さにおけるこれらの改変は、使用されるシードの量の変更の結果であり得る。これを示すために、金ナノスターを、全てのパラメータを同じに維持するが、添加されるシードの量を36μlから360μlに変更して成長させ(図3)、結果として得られた金ナノスターの様々なサイズ及び「スパイク性」をもたらした。TEM画像を作成して、36μl(図4A)、100μl(図4B)、150μl(図4C)、及び360μl(図4D)で合成された金ナノスターの形態を表示した。

10

【0260】

チオール末端ポリ(エチレングリコール)(PEG-SH)を用いてナノスターを最初に合成した。次いで、シスタミン又は別の好適な小さな多官能性化合物を使用して、以下に記載されるように、有機染料をナノスター表面に係留した。

【0261】

15mMのシスタミン及び0.15mMのローダミンB-N-ヒドロキシスクシンイミド(Rhodamine B-N-hydroxysuccinimide、Rhob-NHS)のストック溶液を、MilliQ中100mMのNaHCO₃の緩衝液中で調製した。次いで、シスタミン(2ml)及びRhob-NHS(1ml)をシンチレーションバイアル中で混合し、4で4時間反応させた。

20

【0262】

20mlのシンチレーションバイアルにおいて、2mMのクエン酸三ナトリウム(1ml)、25.4mMのHAuCl₄(0.188ml)、及び0.1Mの氷冷NaBH₄(60μl)をMilliQ(18.822ml)に順次添加した。この溶液を反応が完了するまで激しく攪拌して、ナノシードを形成した。第2の20mlのシンチレーションバイアルにおいて、11mMのHAuCl₄(0.64ml)、10mMのAgNO₃(0.2ml)、及び0.1MのL-アスコルビン酸(0.103ml、滴下添加)を7.33mMのCTAB(15ml)に順次添加した。最後の1滴のL-アスコルビン酸を添加すると、溶液は透明になり、所望の体積のナノシードを添加した(例えば、150μl)。これらの試料を、反応が完了するまで穏やかに攪拌した。次いで、ナノ粒子を遠心分離し(15,000rpmで10分間)、上清を除去し、ナノ粒子を染料-シスタミン(3ml)と100mMのPEG-SH又はポリビニルピロリドン(PVP)(1ml、MilliQ中)のいずれかとの混合物に再懸濁した。試料をドラフト内で一晩静置し、翌日から使用した。

30

【0263】

染料でコンジュゲートされたNPを12,000×gで15分間遠心分離し、上清中の色が喪失されるまで(約3~4回)5mlのMilliQに再懸濁した。精製された染料-NPのアリコート(300μl)を収集し、UV-Vis分光光度法(ステップサイズ:1nm、フラッシュ数:8、Tecan Infinite M Plex分光光度計)を使用した分析のために96ウェルマイクロプレート(96ウェルマイクロプレート、ポリスチレン、透明、Greiner Bio-One、Cat.No.:82050-760)に添加した。400メッシュの純粋なC、Cuグリッド(Ted Pella, Inc., Redding, USA)上にそれぞれの溶液(5μl)を滴下キャスティングすることによってTEM試料を調製し、フード蒸発下で乾燥させた。滴下キャスティングの前に、遠心分離及びMilliQ中の再懸濁を介してNPを調製して、残留キャッピング剤を除去した。画像化の前に、紫外線光を介してグリッドを洗浄した(片面当たり6

40

50

分間)。TEM画像を、300kVの電子加速電圧でHitachi HF-3300 300kV Environmental TEMを使用して取得した。

【0264】

図5A～図5Bは、本開示の実施形態による溶液中の染料・ナノ粒子（染料・NP）光遮断剤のスペクトルを示す。図5A～図5Bは、溶液中の染料・NP光遮断剤のスペクトルであり、水中のUV-Vis分光法吸光度プロファイルを示す。図5Aは、水に溶解したローダミンB染料（Rhodamine B、Rhob）及びRhobでコンジュゲートされた金ナノスター（Rhob-conjugated gold nanostar、Rhob-NP）を示す。図5Bは、標的範囲にわたるピークを有する金ナノスターにコンジュゲートされた様々な染料を示し、「TRITC」は、「テトラメチルローダミンイソチオシアネート」を指す。染料・NPに関する全てのUV-Visデータを、試料を12,000×gで15分間遠心分離して、上清が無色になるまで任意の過剰な染料を除去した後に収集した。

10

【0265】

1-エチル-3-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド/N-ヒドロキシスクシンイミド(1-Ethyl-3-(3-dimethylaminopropyl)carbodiimide/N-hydroxy succinimide、EDC/NHS)クリックケミストリーを介した金ナノスターへのコンジュゲーションを行うと、ローダミンB染料は、図5Aに見ることができるように、いくらかの広がり及び赤色シフトを有するその選択的光遮断ピークを保持した。光遮断プラットフォームはまた、図5Bに見ることができるように、適応された光遮断プロファイルを生成するために、様々な市販の染料に適合され得る。

20

【0266】

図6は、本開示の実施形態による既存の方法と比較した染料・NP光遮断剤の色プロファイルを示す。図6は、標的範囲で遮断する金ナノスフィア、水中のRhob染料、及び溶液中の染料・NPの組み合わせ（すなわち、図5A～図5Bから）の直接比較を示す。染料・NPの組み合わせにおいて結果として得られた色プロファイルは、紫色（染料からはピンク色/赤色、ナノスターからは青色）であり、染料単独と比較して明度及び強度が低かった。

【0267】

既存の方法と比較した染料・NP光遮断剤の色プロファイルを示した。AuNP（左）、染料（中央）、及び染料でコンジュゲートされたAuNPナノスター（右）の間の色プロファイルの差を図6に示す。AuNPナノスターは、染料の特定の光遮断を犠牲にすることなく、染料の鮮明なピンク色を軟化させて、より患者に対応した紫色を生成した。

30

【0268】

図7～図10は、様々な表面化学を有するナノ粒子の様々な吸光度スペクトルを示す。ローダミン6G、ローダミンB、テトラメチルローダミン（TRITC）、及び5-カルボキシ-テトラメチルローダミンを含むが、これらに限定されない様々なローダミン染料にコンジュゲートされたナノ粒子を合成した。これらの様々なナノ粒子は、溶液中のローダミン6Gナノ粒子光フィルタの97nm（図7）、溶液中のローダミンBナノ粒子光フィルタの70nm（図8）、溶液中のテトラメチルローダミン（TRITC）ナノ粒子光フィルタの118nm（図9）、及び溶液中の5-カルボキシ-テトラメチルローダミンナノ粒子光フィルタの70nm（図10）を含むが、これらに限定されない様々な半値全幅（FWHM）値を有するように調整することができた。そのような結果は、ナノ粒子を様々なローダミン染料にコンジュゲートする能力を実証したが、この方法は、任意のNHS官能化染料及び追加の様式で官能化された他の染料に適用可能であり得ることが理解されるべきである。そのようなコンジュゲーションは、所望の標的波長吸収によって動機付けられ、調整可能な標的波長吸収及びFWHM値をもたらした。

40

【0269】

有機染料及び安定化機構（例えば、PVP、PEG-SHなど）にコンジュゲートされた金ナノスターは、上記のように合成されている。固定機構を金ナノスターにコンジュゲートして、有機染料、安定化機構、及び固定機構に同時にコンジュゲートされたナノ粒子

50

を形成するための例示的なプロセスは、Hermanson, G. T., Bioconjugate Techniques: Third Edition, Elsevier Inc. (2013) 及び Vu - Quang H., et al., Polymers (Basel) (2019) から改変されており、ここに記載される。最初に、10 mM のローダミン B (Rhob) (2 ml、無水ジメチルスルホキシド (dimethylsulfoxide、DMSO) 中) を 23 μ mol のカルボニルジイミダゾール (carbonyldiimidazole、CDI) と混合する。CDI は、DMSO に直接添加されるべきであり、予め溶解されるべきではない。混合物を光から保護し、ドラフト内で激しく攪拌しながら > 24 時間反応させる。上に示したように、有機染料はローダミン B である必要はなく、当技術分野で既知のいくつかの有機染料であってもよい。次に、200 mM のポリビニルアルコール (PVA) (5 ml、無水 DMSO 中) を Rhob - CDI 溶液に添加し (ここで、PVA は固定機構として働くことができる)、混合物をもう一度光から保護し、ドラフト内で激しく攪拌しながら > 24 時間反応させる。このプロセスは、ゼロ長架橋剤として CDI を使用して、エステル化を介して Rhob を PVA とコンジュゲートさせる。ポリマーは PVA である必要はなく、当技術分野で既知のいくつかのポリマー及び同様の化合物であってもよい。反応が完了したら、溶液を 4 L の MilliQ 水に対して > 24 時間透析し、培地交換を繰り返し、次いで凍結乾燥する。ここで、Rhob - PVA を使用して、金ナノ粒子 (gold nanoparticle、AuNP) をコーティングすることができる。様々な量の Rhob - PVA (特定の光遮断及びメタクリル化のため)、追加の非官能化 PVA (メタクリル化のため)、及び PVP (安定化のため) を導入することによって、染料の完全な補完物、並びに安定化機構及び固定機構を生成することができ、固定機構は、同じナノ粒子上にメタクリル化を含み得る。

【0270】

添付の特許請求の範囲のシステム、方法、組成物、及びデバイスは、本明細書に記載される特定の材料及びデバイスによって範囲が限定されるものではなく、特許請求の範囲のいくつかの態様の事例として意図される。機能的に同等である任意のシステム、方法、組成物、及びデバイスは、特許請求の範囲内に入ることが意図される。本明細書に示され、記載されるものに加えて、システム、方法、組成物、及びデバイスの様々な変更は、添付の特許請求の範囲内に入ることが意図される。更に、本明細書に開示されるある特定の代表的なシステム、方法、組成物、及びデバイスのみが具体的に説明されているが、システム、方法、組成物、及びデバイスの他の組み合わせもまた、具体的に記載されていない場合であっても、添付の特許請求の範囲内に入ることが意図される。したがって、要素、構成成分、又は構成要素の組み合わせは、本明細書で明示的に言及され得るが、明示的に記載されていないなくても、要素、構成成分、及び構成要素の他の組み合わせが含まれる。

【0271】

本明細書で使用される場合、「含む (comprising)」という用語及びその変化形は、「含む (including)」という用語及びその変化形と同義語として使用されるオープンで非限定的な用語である。「含む (comprising)」及び「含む (including)」という用語は、様々な実施形態を説明するために本明細書で使用されてきたが、「から本質的になる (consisting essentially of)」及び「からなる (consisting of)」という用語は、本発明のより具体的な実施形態を提供するために「含む (comprising)」及び「含む (including)」の代わりに使用され得、また開示される。特記されている場合を除き、本明細書及び特許請求の範囲で使用される幾何学的形状、寸法などを表す全ての数字は、少なくとも、特許請求の範囲への均等論の適用を制限しようとするものではなく、有効桁数及び通常の四捨五入法の数に照らして解釈されるものと理解されるべきである。

【0272】

別段の定めがある場合を除き、本明細書で用いられる全ての科学技術用語は、開示された発明が属する技術分野における当業者が一般に理解するものと同じ意味を有する。本明細書に引用される刊行物及びそれらが引用される材料は、参照により具体的に組み込まれ

る。

【0273】

〔実施の態様〕

(1) 光フィルタリングのための組成物であって、前記組成物が、ベース材料と、

前記ベース材料中に分散された複数の金ナノ粒子であって、前記複数の金ナノ粒子が、約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収値を示す、複数の金ナノ粒子と、

前記ベース材料中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、前記複数の金ナノ粒子の前記ピーク光吸収と少なくとも部分的に重複する放出ピークを有する、化学染料と、

前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

(2) 前記組成物が、約58nm～118nmの半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、実施態様1に記載の組成物。

(3) 前記ベース材料が、生体材料を含む、実施態様1に記載の組成物。

(4) 前記ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、実施態様1に記載の組成物。

(5) 前記ベース材料が、ヒドロゲルを含む、実施態様1に記載の組成物。

【0274】

(6) 前記ベース材料が、シリコンベースのヒドロゲルを含む、実施態様1に記載の組成物。

(7) 前記ベース材料が、HEMAベースの材料を含む、実施態様1に記載の組成物。

(8) 前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、実施態様1に記載の組成物。

(9) 前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数の金ナノ粒子の前記一部が約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、実施態様1に記載の組成物。

(10) 前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、実施態様1に記載の組成物。

【0275】

(11) 前記化学染料が、ローダミンB、ローダミン6G、又はTRITCのうちの1つ又は2つ以上を含む、実施態様1に記載の組成物。

(12) 前記ナノ粒子コーティング材料が、末端チオール化ポリ(エチレングリコール)を含む、実施態様1に記載の組成物。

(13) 前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルピロリドン)を含む、実施態様1に記載の組成物。

(14) 前記複数の金ナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、実施態様1に記載の組成物。

(15) 実施態様1に記載の組成物を作製する、方法。

【0276】

(16) 光フィルタリングのための組成物であって、前記組成物が、ベース材料と、

前記ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、前記複数のナノ粒子が、約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、

前記ベース材料中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、約530nm～約560nmの範囲のアブソープションピークを有する、化学染料と、

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

(17) 前記組成物が、約58nm～118nmの半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、実施態様16に記載の組成物。

(18) 前記ベース材料が、生体材料を含む、実施態様16に記載の組成物。

(19) 前記ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、実施態様16に記載の組成

10

20

30

40

50

物。

(20) 前記ベース材料が、ヒドロゲルを含む、実施態様16に記載の組成物。

【0277】

(21) 前記ベース材料が、HEMAベースの材料を含む、実施態様16に記載の組成物。

(22) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、実施態様16に記載の組成物。

(23) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数のナノ粒子の前記一部が約650nm~約800nmの範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、実施態様16に記載の組成物。

10

(24) 前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、実施態様16に記載の組成物。

(25) 前記化学染料が、ローダミンB、ローダミン6G、又はTRITCのうちの1つ又は2つ以上を含む、実施態様16に記載の組成物。

【0278】

(26) 前記ナノ粒子コーティング材料が、末端チオール化ポリ(エチレングリコール)を含む、実施態様16に記載の組成物。

(27) 前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルピロリドン)を含む、実施態様16に記載の組成物。

(28) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、実施態様16に記載の組成物。

20

(29) 前記ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、実施態様16に記載の組成物。

(30) 前記ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、実施態様16に記載の組成物。

【0279】

(31) 前記ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、実施態様16に記載の組成物。

(32) 実施態様16に記載の組成物を作製する、方法。

(33) 光フィルタリングのための組成物であって、前記組成物が、ベース材料と、

前記ベース材料中に分散された複数のナノ粒子であって、前記複数のナノ粒子が、約650nm~約800nmの範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、

30

前記ベース材料中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、前記ナノ粒子のスペクトル曲線のフィルタリングによって少なくとも部分的に消光されるスペクトルピークを有する、化学染料と、

前記ベース材料中に分散された固定機構であって、前記固定機構が、メタクリロイル誘導モノマーを含む、固定機構と、

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含む、組成物。

(34) 前記組成物が、約58nm~118nmの半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、実施態様33に記載の組成物。

(35) 前記ベース材料が、生体材料を含む、実施態様33に記載の組成物。

40

【0280】

(36) 前記ベース材料が、生体材料マトリックスを含む、実施態様33に記載の組成物。

(37) 前記ベース材料が、ヒドロゲルを含む、実施態様33に記載の組成物。

(38) 前記ベース材料が、HEMAベースの材料を含む、実施態様33に記載の組成物。

(39) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、実施態様33に記載の組成物。

(40) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数の前記一部が約650nm~約800nmの範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、実施態様33

50

に記載の組成物。

【0281】

(41) 前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、実施態様33に記載の組成物。

(42) 前記化学染料が、ローダミンB、ローダミン6G、又はTRITCのうちの1つ又は2つ以上を含む、実施態様33に記載の組成物。

(43) 前記固定機構が、グリシジルメタクリレートを含む、実施態様33に記載の組成物。

(44) 前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルアルコール)を含む、実施態様33に記載の組成物。

(45) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、実施態様33に記載の組成物。

【0282】

(46) 前記ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、実施態様33に記載の組成物。

(47) 前記ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、実施態様33に記載の組成物。

(48) 前記ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、実施態様33に記載の組成物。

(49) 実施態様33に記載の組成物を作製する、方法。

(50) 1つ又は2つ以上のシリコン含有構成成分と、1つ又は2つ以上の親水性構成成分と、を含む反応性混合物のフリーラジカル反応生成物であるコンタクトレンズであって、前記コンタクトレンズが、少なくとも約20重量パーセントの含水率及び少なくとも約80パーセントの酸素透過性を有し、前記コンタクトレンズが、光フィルタリングのための組成物を更に含み、前記組成物が、

前記コンタクトレンズ中に分散された複数のナノ粒子であって、前記複数のナノ粒子が、約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収値を示す、複数のナノ粒子と、

前記コンタクトレンズ中に分散された化学染料であって、前記化学染料が、前記ナノ粒子のスペクトル曲線のフィルタリングによって少なくとも部分的に消光されるスペクトルピークを有する、化学染料と、

前記コンタクトレンズ中に分散された固定機構であって、前記固定機構が、メタクリロイル誘導モノマーを含む、固定機構と、

前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の上に配置されたナノ粒子コーティング材料と、を含有する、コンタクトレンズ。

【0283】

(51) 前記組成物が、約58nm～118nmの半値全幅を有する吸収スペクトルを示す、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

(52) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部が、星形状を有する、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

(53) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、前記複数の前記一部が約650nm～約800nmの範囲のピーク光吸収を示すように調整されている、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

(54) 前記化学染料が、ローダミンベースの染料を含む、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

(55) 前記化学染料が、ローダミンB、ローダミン6G、又はTRITCのうちの1つ又は2つ以上を含む、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

【0284】

(56) 前記固定機構が、グリシジルメタクリレートを含む、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

(57) 前記ナノ粒子コーティング材料が、ポリ(ビニルアルコール)を含む、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

(58) 前記複数のナノ粒子の少なくとも一部の形状が、蛍光消光をもたらすように調整されている、実施態様50に記載のコンタクトレンズ。

10

20

30

40

50

(5 9) 前記ナノ粒子が、プラズモンナノ粒子を含む、実施態様 5 0 に記載のコンタクトレンズ。

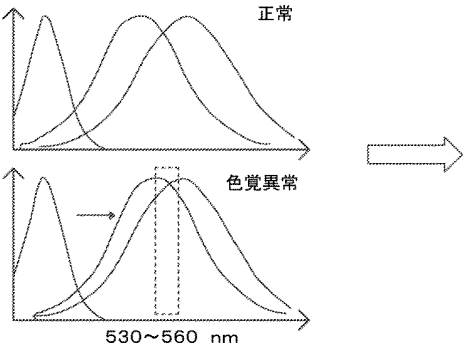
(6 0) 前記ナノ粒子が、金属ナノ粒子を含む、実施態様 5 0 に記載のコンタクトレンズ。

【 0 2 8 5 】

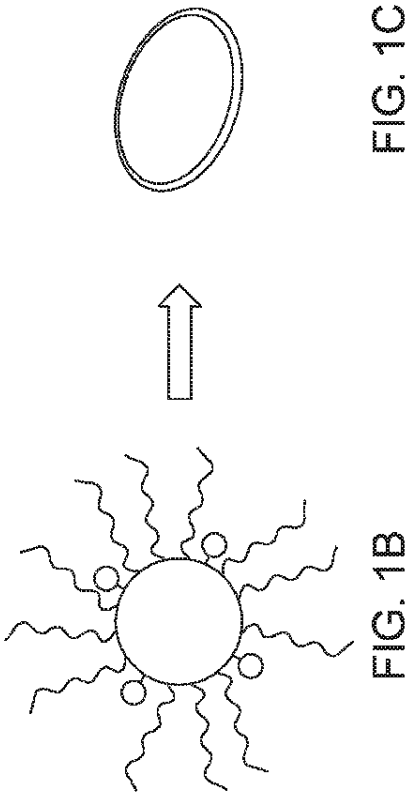
(6 1) 前記ナノ粒子が、金ナノ粒子を含む、実施態様 5 0 に記載のコンタクトレンズ。

【 図 面 】

【 図 1 A 】



【 図 1 B - 1 C 】



10

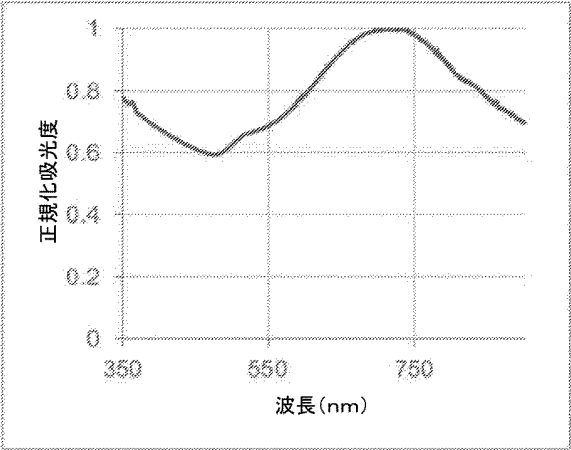
20

30

40

50

【 図 2 A 】



【 図 2 B 】

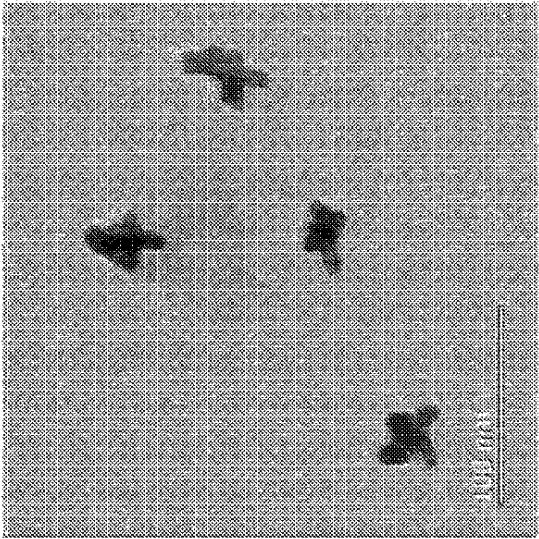
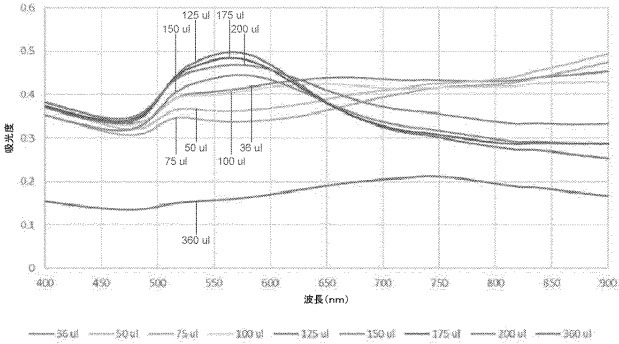


FIG. 2B

【 図 3 】



【 図 4 A - 4 D 】

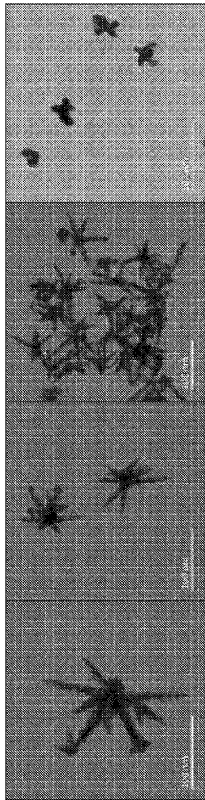


FIG. 4D

FIG. 4C

FIG. 4B

FIG. 4A

10

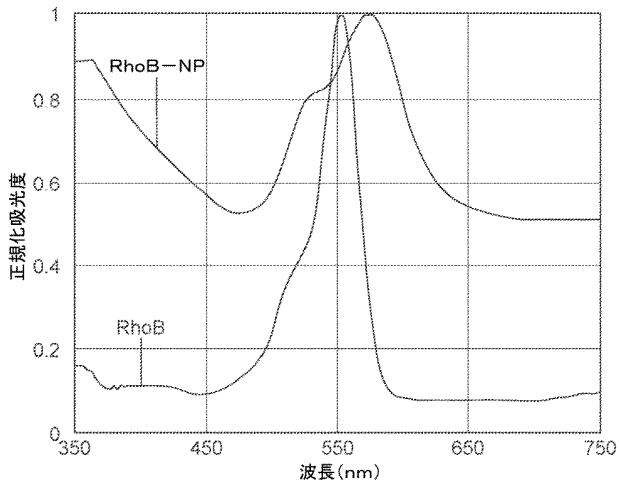
20

30

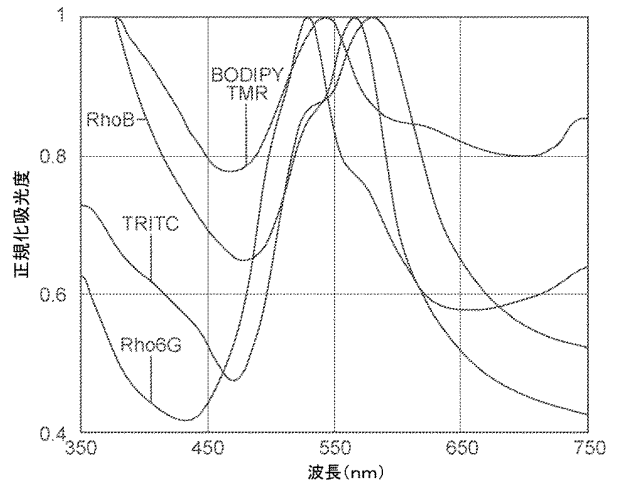
40

50

【 図 5 A 】



【 図 5 B 】



10

【 図 6 】

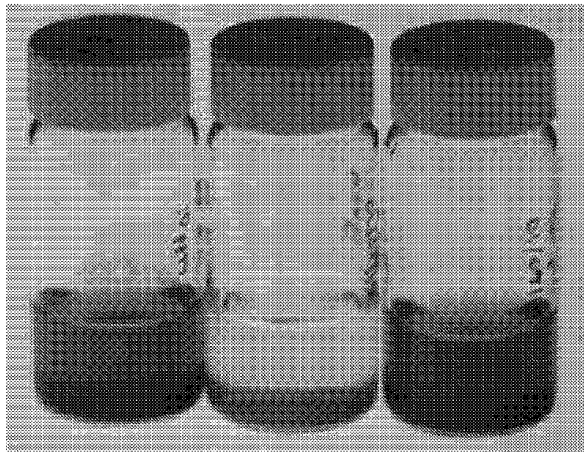
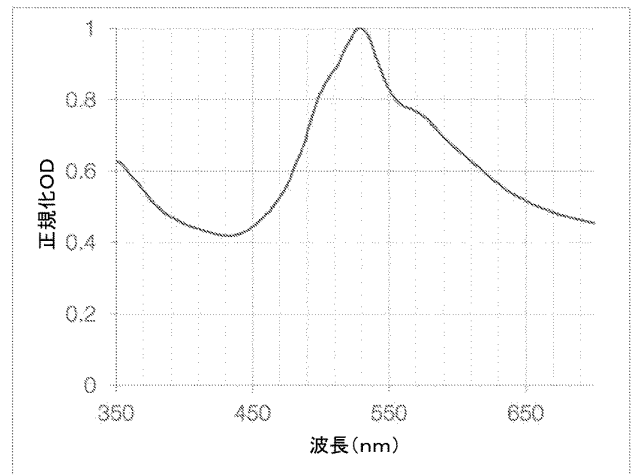


FIG. 6

【 図 7 】



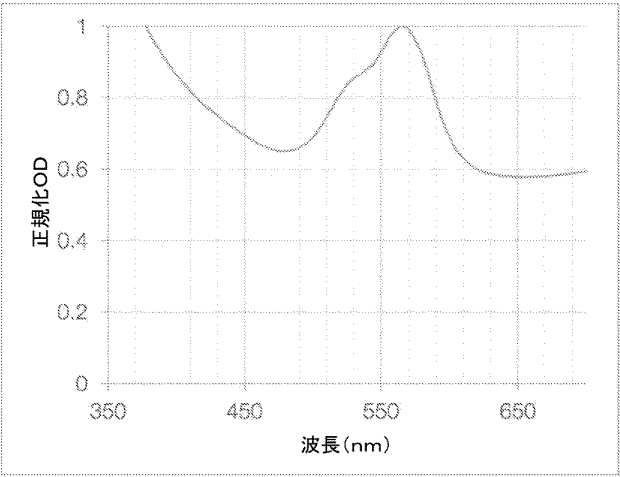
20

30

40

50

【 図 8 】



【 図 9 】

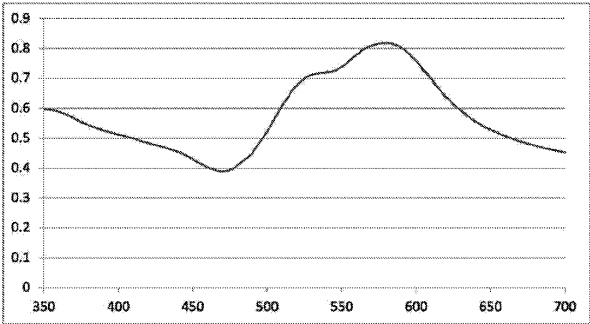


FIG. 9

【 図 1 0 】

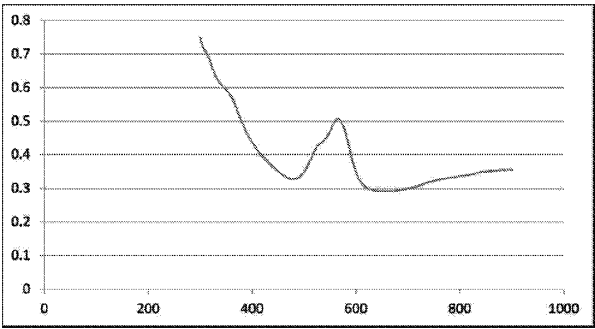


FIG. 10

10

20

30

40

50

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/IB2023/052020

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. G02B1/04
ADD.

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
G02B

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

EPO-Internal, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2007/133197 A1 (NANOSPECTRA BIOSCIENCES INC [US]; PAYNE J DONALD [US] ET AL.) 22 November 2007 (2007-11-22) gold nanoparticles coated with PVP for contact lenses; claim 40; figure 5 abstract -----	1-61
A	JP 2006 070300 A (MITSUBISHI MATERIALS CORP; DAINIPPON TORYO KK) 16 March 2006 (2006-03-16) optical filter; spherical nanoparticles and nanorods and dispersant in example; paragraph [0026]; claim 13 ----- -/--	1-61

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

12 June 2023

Date of mailing of the international search report

26/06/2023

Name and mailing address of the ISA/
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Stabel, Andreas

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/IB2023/052020

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	EP 2 165 791 A2 (MITSUBISHI MATERIALS CORP [JP]; DAINIPPON TORYO KK [JP]) 24 March 2010 (2010-03-24) gold nanorods absorbing in the near-infrared; abstract; figures -----	1-61

1

10

20

30

40

50

INTERNATIONAL SEARCH REPORT						
Information on patent family members				International application No		
				PCT/IB2023/052020		
Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)		Publication date	
WO 2007133197	A1	22-11-2007	EP	2016458	A1	21-01-2009
			JP	2009536549	A	15-10-2009
			WO	2007133197	A1	22-11-2007

JP 2006070300	A	16-03-2006	JP	4517230	B2	04-08-2010
			JP	2006070300	A	16-03-2006

EP 2165791	A2	24-03-2010	CN	102019434	A	20-04-2011
			EP	1661648	A1	31-05-2006
			EP	2165791	A2	24-03-2010
			EP	2189232	A1	26-05-2010
			KR	20060083971	A	21-07-2006
			KR	20070104954	A	29-10-2007
			TW	200514751	A	01-05-2005
			WO	2005023466	A1	17-03-2005

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類	F I	テーマコード (参考)
C 0 8 L 83/10 (2006.01)	C 0 8 L 83/10	
C 0 8 L 33/14 (2006.01)	C 0 8 L 33/14	
C 0 8 K 3/08 (2006.01)	C 0 8 K 3/08	
,MC,ME,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CV,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IQ,IR,IS,IT,JM,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PA,PE,PG,PH,PL,PT,QA,RO,RS,RU,RW,SA,SC,SD,SE,SG,SK,SL,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,WS,ZA,ZM,ZW		
弁理士 大島 孝文		
(72)発明者	チェン・ポール	
	カナダ国、エム 5 エス 2 イー 1 オンタリオ州、トロント、デボンシャー・プレイス 4	
(72)発明者	クラスキー・アーロン	
	カナダ国、エム 1 イー 3 ブイ 7 オンタリオ州、スカーパロー、マンス・ロード 4 4 7	
(72)発明者	グ・フランク	
	カナダ国、エム 5 シー 3 シー 5 オンタリオ州、トロント、キング・ストリート・イースト 2 0 0 6 - 7	
F ターム (参考)	2H006 BB01 BB03 BB05 BB07 BE05	
	2H148 CA04 CA14 CA20	
	4J002 AA031 BE021 BG071 CP171 CP181 DA076 FA086 FB086 FB266 FD206	
	GP01 GT00	