

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載
 【部門区分】第3部門第2区分
 【発行日】令和6年6月28日(2024.6.28)

【国際公開番号】WO2023/080258
 【出願番号】特願2023-558106(P2023-558106)

【国際特許分類】

C 0 7 C 2 7 1 / 5 2 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 7 C 2 7 1 / 6 6 (2 0 0 6 . 0 1)

C 0 7 C 2 6 9 / 0 0 (2 0 0 6 . 0 1)

10

【F I】

C 0 7 C 2 7 1 / 5 2

C 0 7 C 2 7 1 / 6 6 C S P

C 0 7 C 2 6 9 / 0 0

【手続補正書】

【提出日】令和6年4月10日(2024.4.10)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

20

【補正方法】変更

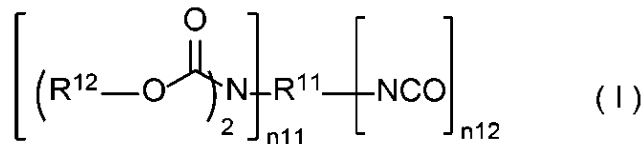
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(I)で表されるカルボニル化合物。

【化1】



30

(一般式(I)中、 R^{11} は $(n_{11} + n_{12})$ 価の有機基であり、 R^{12} は1価の有機基である。 n_{11} は1以上8以下の整数であり、 n_{12} は0以上7以下の整数であり、 n_{11} と n_{12} の和は2以上8以下の整数である。)

【請求項2】

前記 R^{11} が、1以上4以下のエステル基又は窒素原子を有してもよい、炭素数1以上20以下の2価以上4価以下の脂肪族炭化水素基、又は、炭素数6以上20以下の2価以上3価以下の芳香族炭化水素基であり、且つ、

前記 R^{12} が、酸素原子を含んでもよい、炭素数6以上20以下の1価の芳香族炭化水素基である、請求項1に記載のカルボニル化合物。

40

【請求項3】

前記 R^{11} が、1以上2以下のエステル基を有してもよい、炭素数5以上15以下の2価以上4価以下の脂肪族炭化水素基、又は、炭素数6以上15以下の2価以上3価以下の芳香族炭化水素基であり、

前記 R^{12} が、酸素原子を含んでもよい、炭素数6以上15以下の1価の芳香族炭化水素基であり、

前記 n_{11} が、1以上4以下の整数であり、

前記 n_{12} が、0以上3以下の整数であり、且つ、

前記 n_{11} と n_{12} の和が、2以上4以下の整数である、請求項1又は2に記載のカルボニル化合物。

50

【請求項 4】

請求項 1 又は 2 に記載のカルボニル化合物の製造方法であって、
イソシアネート化合物及びカルバメート化合物からなる群より選ばれる 1 種以上の化合物と、

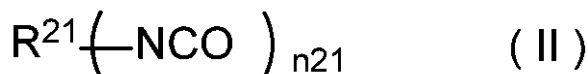
炭酸エステル及びヒドロキシ化合物からなる群より選ばれる 1 種以上の化合物と、
を、混合し、加熱して、前記カルボニル化合物を合成することを含む、製造方法。

【請求項 5】

前記イソシアネート化合物が下記一般式 (II) で表される化合物である、請求項 4 に記載の製造方法。

【化 2】

10



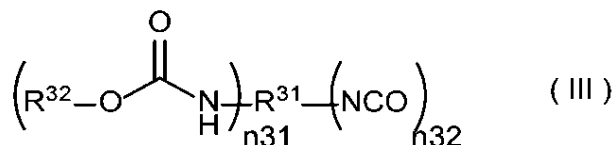
(一般式 (II) 中、 R^{21} は $n21$ 価の有機基であり、関係式： $R^{21} = R^{11}$ を満たす。 $n21$ は、2 以上 8 以下の整数であり、関係式： $n21 = n11 + n12$ を満たす。)

【請求項 6】

前記カルバメート化合物が、下記一般式 (III) で表される化合物である、請求項 4 に記載の製造方法。

20

【化 3】



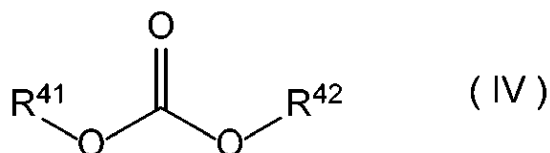
(一般式 (III) 中、 R^{31} は $(n31 + n32)$ 価の有機基であり、関係式： $R^{31} = R^{11}$ を満たす。 R^{32} は 1 価の有機基であり、関係式： $R^{32} = R^{12}$ を満たす。 $n31$ は 1 以上 8 以下の整数であり、 $n32$ は 0 以上 7 以下の整数であり、 $n31$ と $n32$ の和は 2 以上 8 以下の整数であり、関係式： $n31 + n32 = n11 + n12$ を満たす。)

30

【請求項 7】

前記炭酸エステルが下記一般式 (IV) で表される化合物である、請求項 4 に記載の製造方法。

【化 4】



40

(一般式 (IV) 中、 R^{41} 及び R^{42} は、それぞれ独立に、1 価の有機基であり、関係式： $R^{41} = R^{42} = R^{12}$ を満たす。)

【請求項 8】

前記ヒドロキシ化合物が下記一般式 (V) で表される化合物である、請求項 4 に記載の製造方法。

【化 5】



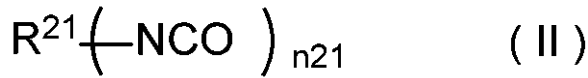
(一般式 (V) 中、 R^{51} は、1 価の有機基であり、関係式： $R^{51} = R^{12}$ を満たす。)

50

【請求項 9】

請求項 1 又は 2 に記載のカルボニル化合物存在下で、下記一般式 (II) で表されるイソシアネート化合物を含む反応液を蒸留精製し、連続的に気相成分として、前記イソシアネート化合物を回収することを含む、イソシアネート化合物の製造方法。

【化 6】

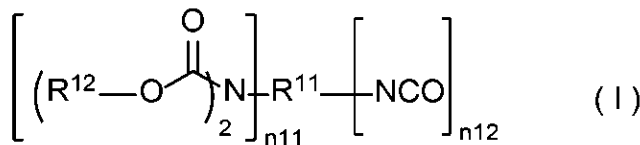


(一般式 (II) 中、 R^{21} は $n21$ 価の有機基であり、関係式： $R^{21} = R^{11}$ を満たす。 $n21$ は、2 以上 8 以下の整数であり、関係式： $n21 = n11 + n12$ を満たす。)

【請求項 10】

イソシアネート組成物の総質量に対して、
97 質量% 以上のイソシアネート化合物と、
2.0 質量 ppm 以上 1.0×10^4 質量 ppm 以下の下記一般式 (I) で表されるカルボニル化合物と、
を含有し、
前記イソシアネート化合物と前記カルボニル化合物は異なる化合物である、イソシアネート組成物。

【化 7】



(一般式 (I) 中、 R^{11} は ($n11 + n12$) 価の有機基であり、 R^{12} は 1 価の有機基である。 $n11$ は 1 以上 8 以下の整数であり、 $n12$ は 0 以上 7 以下の整数であり、 $n11$ と $n12$ の和は 2 以上 8 以下の整数である。)

【請求項 11】

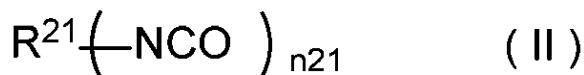
前記 R^{11} が、1 以上 4 以下のエステル基又は窒素原子を有してもよい、炭素数 1 以上 20 以下の 2 価以上 4 価以下の脂肪族炭化水素基、又は、炭素数 6 以上 20 以下の 2 価以上 3 価以下の芳香族炭化水素基であり、且つ、

前記 R^{12} が、酸素原子を含んでもよい、炭素数 6 以上 20 以下の 1 価の芳香族炭化水素基である、請求項 10 に記載のイソシアネート組成物。

【請求項 12】

前記イソシアネート化合物が、下記一般式 (II) で表される化合物である、請求項 10 又は 11 に記載のイソシアネート組成物。

【化 8】



(一般式 (II) 中、 R^{21} は $n21$ 価の有機基であり、関係式： $R^{21} = R^{11}$ を満たす。 $n21$ は、2 以上 8 以下の整数であり、関係式： $n21 = n11 + n12$ を満たす。)

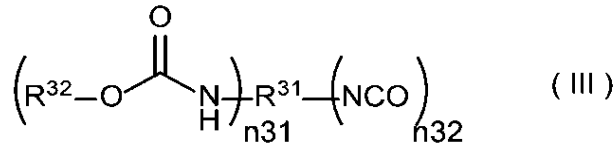
【請求項 13】

前記イソシアネート組成物の総質量に対して、それぞれ 2.0 質量 ppm 以上 1.0×10^4 質量 ppm 以下の、カルバメート化合物及び炭酸エステルからなる群より選ばれる 1 種以上の化合物を更に含有する、請求項 10 又は 11 に記載のイソシアネート組成物。

【請求項 1 4】

前記カルバメート化合物が、下記一般式 (III) で表される化合物である、請求項 1 3 に記載のイソシアネート組成物。

【化 9】

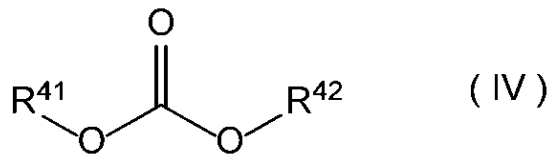


(一般式 (III) 中、 R^{31} は $(n31 + n32)$ 価の有機基であり、関係式： $\text{R}^{31} = \text{R}^{11}$ を満たす。 R^{32} は 1 価の有機基であり、関係式： $\text{R}^{32} = \text{R}^{12}$ を満たす。 $n31$ は 1 以上 8 以下の整数であり、 $n32$ は 0 以上 7 以下の整数であり、 $n31$ と $n32$ の和は 2 以上 8 以下の整数であり、関係式： $n31 + n32 = n11 + n12$ を満たす。)

【請求項 1 5】

前記炭酸エステルが、下記一般式 (IV) で表される化合物である、請求項 1 3 に記載のイソシアネート組成物。

【化 1 0】



(一般式 (IV) 中、 R^{41} 及び R^{42} は、それぞれ独立に、1 価の有機基であり、関係式： $\text{R}^{41} = \text{R}^{42} = \text{R}^{12}$ を満たす。)

30

40

50