

(19)日本国特許庁(JP)

(12)公表特許公報(A)

(11)公表番号
特表2025-500794
(P2025-500794A)

(43)公表日 令和7年1月15日(2025.1.15)

(51)国際特許分類		F I		テーマコード (参考)	
C 0 7 F	7/18 (2006.01)	C 0 7 F	7/18	W	3 D 1 3 1
C 0 8 L	9/00 (2006.01)	C 0 8 L	9/00		4 H 0 4 9
C 0 8 K	5/544(2006.01)	C 0 8 K	5/544		4 J 0 0 2
C 0 8 K	3/36 (2006.01)	C 0 8 K	3/36		
C 0 8 K	3/06 (2006.01)	C 0 8 K	3/06		
		審査請求	未請求	予備審査請求	未請求 (全40頁) 最終頁に続く
(21)出願番号	特願2024-534293(P2024-534293)			(71)出願人	508229301
(86)(22)出願日	令和4年12月9日(2022.12.9)				モメンティブ パフォーマンス マテリアルズ インコーポレイテッド
(85)翻訳文提出日	令和6年7月31日(2024.7.31)				Momentive Performance Materials Inc.
(86)国際出願番号	PCT/US2022/081281				アメリカ合衆国 ニューヨーク州 123
(87)国際公開番号	WO2023/108128				09 ニスカユナ ポールタウン ロード
(87)国際公開日	令和5年6月15日(2023.6.15)				2750
(31)優先権主張番号	63/288,325			(74)代理人	100087642
(32)優先日	令和3年12月10日(2021.12.10)				弁理士 古谷 聡
(33)優先権主張国・地域又は機関	米国(US)			(74)代理人	100082946
(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				弁理士 大西 昭広
	最終頁に続く			(74)代理人	100195693
					弁理士 細井 玲
				(72)発明者	ピノウ, マシュー, ジェイ
					最終頁に続く

(54)【発明の名称】 シラン官能性アミン組成物およびゴムにおけるそれらの使用

(57)【要約】

本開示は、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物；シラン官能性アミンの調製方法；少なくとも1つのシラン官能性アミン、少なくとも1つのジエン系ポリマー、シリカ、少なくとも1つの加工助剤、および硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージを含むゴム組成物；およびゴム組成物の調製プロセスに向けられている。

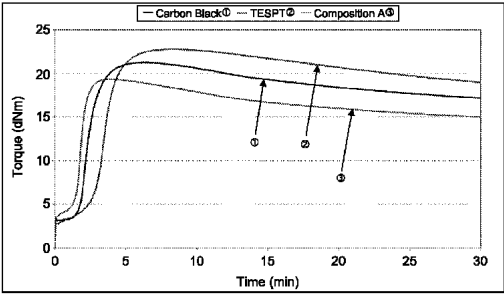


FIG. 1

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

少なくとも 1 つのシラン官能性アミンを含む組成物であって、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンは式 (I) : $(R^1)_a - G - (NR_2)_b$ の化合物であり ; さらにここで :

G は飽和または不飽和の環状部分であり ;

R^1 のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子を有するアルコキシ基、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキル基、6 から 12 の炭素原子を有するアリール基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され ;

R のそれぞれは独立して、水素および $-L-SiX^1X^2X^3$ からなる群より選択され ; 但し少なくとも 1 つの R は水素であり少なくとも 1 つの R は $-L-SiX^1X^2X^3$ であり ;

L のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニレン基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6 から 12 の炭素原子を有するアリーレン基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択され ;

X^1 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-OR^2$ および $-OC(=O)R^2$ からなる群より選択され ;

X^2 のそれぞれおよび X^3 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ および R^2 からなる群より選択され ;

R^2 のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキル基、6 から 12 の炭素原子を有するアリール基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され ;

a は 0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または 11 であり ; そして

b は 1 または 2 である、組成物。

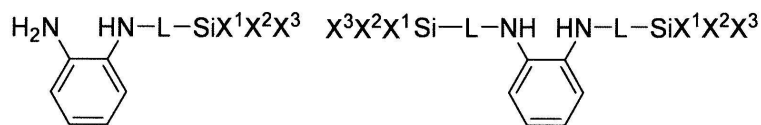
【請求項 2】

G はベンゼン環、シクロヘキサン環、およびピリジン環からなる群より選択される、請求項 1 に記載の組成物。

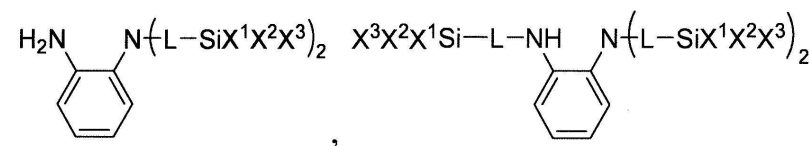
【請求項 3】

式 (I) の化合物は

【化 27】



【化 28】



およびこれらの組み合わせからなる群より選択される、請求項 1 または 2 に記載の組成物。

【請求項 4】

式 (I) の化合物は

10

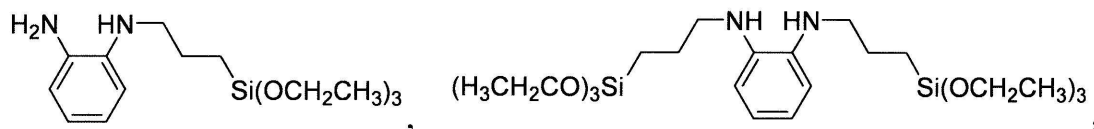
20

30

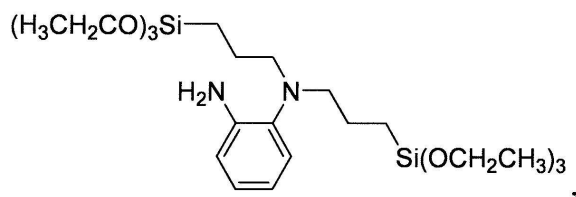
40

50

【化 2 9】

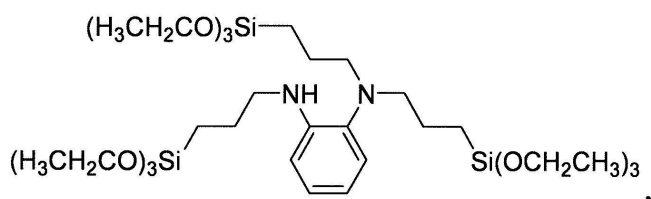


【化 3 0】



10

【化 3 1】



20

およびこれらの組み合わせからなる群より選択される、請求項 1 から 3 のいずれか 1 に記載の組成物。

【請求項 5】

請求項 1 から 4 のいずれか 1 に記載の少なくとも 1 つのシラン官能性アミンの調製方法であって、式 (I I) の化合物： $(\text{R}^1)_a - \text{G} - (\text{NH}_2)_b$ を 1 つまたはより多くの式 (I I I) の化合物： $\text{M} - \text{L} - \text{SiX}^1\text{X}^2\text{X}^3$ と反応させることを含み；M のそれぞれは独立してハロゲンであり；そして式 (I I I) の化合物の合計の式 (I I) の化合物に対するモル比は $2b - 1$ に等しいかより小さい、方法。

30

【請求項 6】

式 (I I I) の化合物の式 (I I) の化合物に対するモル比は 1.5 に等しいかより小さい、請求項 5 に記載の方法。

【請求項 7】

M はクロロ、ブロモ、またはヨードである、請求項 5 または 6 に記載の方法。

【請求項 8】

反応は塩基の存在下に生ずる、請求項 5 から 7 のいずれか 1 に記載の方法。

【請求項 9】

塩基はアルカリ金属アルコキシドである、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 10】

ゴム組成物であって：

- a. 請求項 1 から 4 のいずれか 1 に記載の少なくとも 1 つのシラン官能性アミンを含む組成物；
- b. 少なくとも 1 つのジエン系ポリマー；
- c. シリカ；
- d. 少なくとも 1 つの加工助剤；および
- e. 硫黄を含む少なくとも 1 つの加硫剤および少なくとも 1 つの促進剤を含む加硫パッケージ

を含むゴム組成物。

40

【請求項 11】

50

少なくとも1つのジエン系ポリマーは、少なくとも1つの官能基を含むジエン系ポリマー、官能基を含まないジエン系ポリマー、またはこれらの組み合わせである、請求項10に記載のゴム組成物。

【請求項12】

少なくとも1つのジエン系ポリマーは、天然ゴム、ポリイソプレン、ポリブタジエン、スチレン-ブタジエンコポリマー（SBR）、またはこれらの組み合わせである、請求項11に記載のゴム組成物。

【請求項13】

少なくとも1つのジエン系ポリマーは、天然ゴム、シス-1,4-ポリイソプレン、シス-1,4-ポリブタジエン、またはこれらの組み合わせである、請求項12に記載のゴム組成物。

10

【請求項14】

ゴム組成物であって：

（i）約100重量部のゴム、ここでゴムの重量は配合において使用される少なくとも1つの官能基を含むジエン系ポリマーのそれぞれの重量と、配合において使用される官能基を含まないジエン系ポリマーのそれぞれの重量の合計である；

（ii）100部のゴム（i）当たり約1から約20重量部の請求項1から4のいずれか1に記載の少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物；

（iii）100部のゴム（i）当たり約5から約140重量部のシリカ；

（iv）100部のゴム（i）当たり約0.1から約10重量部の少なくとも1つの加工助剤；および

20

（v）100部のゴム（i）当たり約0.1から約20重量部の硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージを含むゴム組成物。

【請求項15】

請求項1から4のいずれか1に記載の少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物およびシリカを少なくとも1つのジエン系ポリマーに添加することを含む、ゴム組成物の調製プロセス。

【請求項16】

請求項14に記載のゴム組成物を含む製造物品であって、タイヤまたはエンジンマウントである製造物品。

30

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物、および少なくとも1つのシラン官能性アミンを調製するための方法に関する。本開示はさらに、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物、少なくとも1つのジエン系ポリマー、シリカ、少なくとも1つの加工助剤、および加硫パッケージを含むゴム組成物、並びにゴム組成物の調製プロセスに関する。

【背景技術】

40

【0002】

タイヤのトレッドは歴史的に、摩耗性や引裂性が良好なことから、カーボンブラックや天然ゴムを用いて配合されている。カーボンブラックや天然ゴムを使用することの1つの欠点は、製造されたゴムトレッド組成物が高いヒステリシス（すなわち、高い転がり抵抗）を有し、それが燃料効率に負の影響を与えることである。企業別平均燃費（CAFE）基準、温室効果ガス（GHG）規制、環境保護庁（EPA）規制、および欧州タイヤラベル規制などの規制要因により、エネルギーの節約に重きが置かれるようになっている。その結果、タイヤ製造業者は、優れた摩耗性と引裂性を維持しつつ、転がり抵抗の低いタイヤを製造することにますます注力している。

【0003】

50

転がり抵抗を改善する（ヒステリシスを下げる）ための1つの手法は、硫黄を含有するシランおよびシリカフィラーを使用することであり、これは合成ゴムから作成されたタイヤには非常に有効である。しかしながら、標準的な硫黄含有シランを天然ゴムとシリカの配合に使用すると、カーボンブラックと天然ゴムの配合物と比較して、摩耗性および引裂性が低下する。カーボンブラックと天然ゴムの配合物と同様の優れた摩耗性／引裂性と、硫黄含有シランと天然ゴムおよびシリカの配合物と同様の低い転がり抵抗を備えた、天然ゴム系のトレッドコンパウンドを製造することは、タイヤ業界の長年の目標である。

【0004】

優れた摩耗性／引裂性と低いヒステリシス特性の両方を備えた、天然ゴムのトレッドコンパウンドを製造することに対してニーズが存在している。

10

【発明の概要】

【0005】

本願に開示する組成物は、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含み、この少なくとも1つのシラン官能性アミンは式（I）： $(R^1)_a - G - (NR_2)_b$ の化合物であり；またここで：

【0006】

Gは飽和または不飽和の環状部分であり；

【0007】

R^1 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルコキシ基、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され；

20

【0008】

Rのそれぞれは独立して、水素および $-L-SiX^1X^2X^3$ からなる群より選択され；但し少なくとも1つのRは水素であり少なくとも1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ であり；

【0009】

Lのそれぞれは独立して、1から20の炭素原子および任意選択的に少なくとも1つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2から20の炭素原子を有するアルケニレン基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6から12の炭素原子を有するアリーレン基、および7から14の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択され；

30

【0010】

X^1 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル基、 $-OR^2$ および $-OC(=O)R^2$ からなる群より選択され；

【0011】

X^2 のそれぞれおよび X^3 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル基、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ および R^2 からなる群より選択され；

【0012】

R^2 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され；

40

【0013】

aは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または11であり；そして

【0014】

bは1または2である。

【0015】

本開示はさらに、少なくとも1つのシラン官能性アミンを調製するための方法に関し、式（II）の化合物： $(R^1)_a - G - (NH_2)_b$ を1つまたはより多くの式（III）の化合物： $M-L-SiX^1X^2X^3$ と反応させることを含み；そしてここで式（II

50

I) の化合物の合計と式 (I I) の化合物のモル比は $2b - 1$ に等しいかより小さく ; そしてさらにここで :

【0016】

G は飽和または不飽和の環状部分であり ;

【0017】

R^1 のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子を有するアルコキシ基、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキル基、6 から 12 の炭素原子を有するアリール基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され ;

【0018】

L のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニレン基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6 から 12 の炭素原子を有するアリーレン基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択され ;

【0019】

X^1 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル基、 $-OR^2$ および $-OC(=O)R^2$ からなる群より選択され ;

【0020】

X^2 のそれぞれおよび X^3 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル基、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ および R^2 からなる群より選択され ;

【0021】

R^2 のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキル基、6 から 12 の炭素原子を有するアリール基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され ;

【0022】

M のそれぞれはハロゲンであり ;

【0023】

a は 0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または 11 であり ; そして

【0024】

b は 1 または 2 である。

【0025】

本開示はさらに :

a . 少なくとも 1 つのシラン官能性アミンを含む組成物 ;

b . 少なくとも 1 つのジエン系ポリマー ;

c . シリカ ;

d . 少なくとも 1 つの加工助剤 ; および

e . 硫黄を含む少なくとも 1 つの加硫剤および少なくとも 1 つの促進剤を含む加硫パッケージ

を含むゴム組成物に関する。

【0026】

本開示はさらに :

(i) 約 100 部のゴム、ここでゴムの重量は配合において使用される少なくとも 1 つの官能基を含むジエン系ポリマーのそれぞれの重量と、配合において使用される官能基を含まないジエン系ポリマーのそれぞれの重量の合計であり ;

(ii) 100 部のゴム (i) 当たり約 1 から約 20 重量部の少なくとも 1 つのシラン官能性アミンを含む組成物 ;

(iii) 100 部のゴム (i) 当たり約 5 から約 140 重量部のシリカ ;

(iv) 100 部のゴム (i) 当たり約 0.1 から約 10 重量部の少なくとも 1 つの加工助剤 ; および

10

20

30

40

50

(v) 100部のゴム(i)当たり約0.1から約20重量部の硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージを含むゴム組成物を提供する。

【0027】

本開示はまた、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物およびシリカを少なくとも1つのジエン系ポリマーに添加することを含む、ゴム組成物の調製プロセスを提供する。

【0028】

本開示が提供するプロセスはさらに、少なくとも1つの加工助剤を硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージと同時に添加することを含んでいる。

【0029】

本開示は：

- a. 約0.05%から約12重量%の少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物；
 - b. 約5%から約70重量%の少なくとも1つのジエン系ポリマー；
 - c. 約10%から約40重量%のシリカ；
 - d. 約0.05%から約5重量%の少なくとも1つの加工助剤；および
 - e. 約0.05%から約5重量%の硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージ
- を含むゴム組成物を提供する。

【0030】

本開示はさらに、上記プロセスによって調製されたゴム組成物を提供する。

【0031】

本開示はまた、ゴム組成物を含む製造物品を提供する。

【図面の簡単な説明】

【0032】

本願に取り込まれている添付の図面は明細書の一部を形成し、本開示の実施形態を例示する。詳細な説明と共に、この図面はさらに開示された実施形態の原理を説明するのに役立ち、また関連技術分野の当業者が開示された実施形態を作成および使用することを可能にする。この図面は例示であることを意図しており、限定を行うものではない。

【0033】

図1はスコーチ安全性を含めたレオロジー的な硬化挙動を示す線グラフであり、組成物Aを含むゴム組成物がカーボンブラックまたはTESPTを含むゴム組成物と比較されている。

【発明を実施するための形態】

【0034】

本願において使用するところでは、詳細な発明の全体を通して、以下の用語は特に明記しない限り、以下の意味を有するものとして理解される。

【0035】

特に明記しない限り、本願の特定の態様を記述する文脈において（特に特許請求の範囲の文脈において）使用された用語「ある」および「1つの」および「その」並びに類似の記載は、単数および複数の両方を含むものとして解釈されうる。本願における値の範囲の記述は、その範囲内に入る個別の値のそれぞれを別々に参照することの簡便な方法として作用することを意図したものに過ぎない。本願において特に明記しない限り、個別の値のそれぞれは明細書中に、あたかも本願で別個に記載されたようにして取り入れられている。

【0036】

さらにまた「および／または」は、本願で使用するところでは、特定された2つの特徴や成分のそれぞれが、他方を伴いまたは伴わない具体的な開示として理解されるべきである。かくして用語「および／または」は、本願において「Aおよび／またはB」のような

10

20

30

40

50

言い回しにおいて使用されるところでは、「A および B」、「A または」、「A」（単独）、および「B」（単独）を含むことを意図している。同様に、用語「および／または」は、「A、B、および／または C」のような言い回しにおいて使用されるところでは、以下の態様のそれぞれを含むことを意図している：A、B、および C；A、B、または C；A または C；A または B；B または C；A および C；A および B；B および C；A（単独）；B（単独）；および C（単独）。

【0037】

本願において態様が「含む」という用語を用いて記載される場合は、「からなる」および／または「から本質的になる」という用語で記述される、他の点においては同様の態様もまた提示されていることが理解されよう。

【0038】

用語「ポリマー」は、物質、化学的化合物または化合物の混合物を意味しており、主としてまたは完全に、多数の小さな単位、（例えばモノマー単位）が一体に結合されてなる分子構造を有している。

【0039】

用語「官能化ジエン系ポリマー」は、「少なくとも1つの官能基を含むジエン系ポリマー（i）（a）」と同義であり、従って互換性がある。

【0040】

用語「非官能化ジエン系ポリマー」は、「官能基を含まないジエン系ポリマー（i）（b）」と同義であり、従って互換性がある。

【0041】

用語「約」は、あらゆる測定において生ずる実験誤差の範囲を包含する。用語「約」は記載された数値±10%を含む。かくして、「約10」は9から11を意味する。

【0042】

用語「エラストマー」は、「ゴム」と同義であり、従って互換性がある。

【0043】

用語「加硫された」は、「硬化された」と同義であり、従って互換性がある。

【0044】

表現「カップリング剤」は、ジエン系ポリマーとフィラーの間に有効な化学的および／または物理的結合を確立することのできる剤を意味し、または2つのジエン系ポリマーの間に有効な化学的および／または物理的結合を確立することのできる剤を意味する。有効なカップリング剤は、例えばカップリング剤のシラノール基とフィラーの表面ヒドロキシル（OH）基（例えばシリカの場合には表面のシラノール基）の間、または一方のジエンポリマーに結合したシラノール基と別のポリマーのシラノール基の間といったように、フィラーまたは第2のジエン系ポリマーと物理的および／または化学的に結合することのできる官能基を有し、また例えば、加硫（硬化）の結果としてジエン系ポリマーと物理的および／または化学的に結合することのできる硫黄原子を有している。

【0045】

用語「フィラー」は、ゴムを増量し、或いはまたエラストマー網を強化するために、ジエン系ポリマー（ゴム）に添加される物質を意味する。強化フィラーとは、エラストマー組成物のジエン系ポリマーよりも弾性率が高く、エラストマーが歪んだ場合にジエン系ポリマーから応力を吸収することのできる材料である。フィラーには、繊維、針状物、ナノチューブ、粒子、およびシート状構造が含まれ、そして無機鉱物、ケイ酸塩、シリカ、クレイ、セラミックス、カーボン、有機ポリマーおよび珪藻土がから構成されることができ

【0046】

用語「炭化水素」は本願で使用されるところでは、水素原子および炭素原子を含む任意の化学構造を指している。

【0047】

用語「アルキル」は、任意の1価の、飽和の直鎖または分岐鎖炭化水素基を意味し；用

10

20

30

40

50

語「アルケニル」は、任意の1価の、1つまたはより多くの炭素－炭素2重結合を含む直鎖または分岐鎖炭化水素を意味し、ここでこの基の結合位置は炭素－炭素2重結合または他のいずれであることもでき；そして用語「アルキニル」は任意の1価の、1つまたはより多くの炭素－炭素3重結合、および任意選択的に1つまたはより多くの炭素－炭素2重結合を含む直鎖または分岐鎖炭化水素を意味し、ここでこの基の結合位置は炭素－炭素3重結合、炭素－炭素2重結合または他のいずれであることもできる。

【0048】

アルキルの代表的な例には、メチル、エチル、プロピル、およびイソブチルが含まれる。アルケニルの例には、ビニル、プロペニル、アリル、メタリル、エチリデニルノルボルナン、エチリデンノルボルニル、エチリデニルノルボルネン、およびエチリデンノルボルネニルが含まれる。アルキニルの例には、アセチレニル、プロパルギル、およびメチルアセチレニルが含まれる。

10

【0049】

用語「シクロアルキル」は、任意の1価の環状脂肪族炭化水素基を意味し；用語「シクロアルケニル」は、任意の1価の、1つまたはより多くの炭素－炭素2重結合を含む環状脂肪族炭化水素基を意味し、ここでこの基の結合位置は炭素－炭素2重結合または他のいずれであることもでき；そして用語「シクロアルキニル」は、任意の1価の、1つまたはより多くの炭素－炭素3重結合、および任意選択的に1つまたはより多くの炭素－炭素2重結合を含む環状脂肪族炭化水素基を意味し、ここでこの基の結合位置は炭素－炭素3重結合、炭素－炭素2重結合または他のいずれであることもできる。

20

【0050】

シクロアルキルの代表的な例には、シクロペンチル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘプチル、およびシクロオクチルが含まれる。シクロアルケニルの例には、シクロペンテニル、シクロヘプテニル、およびシクロオクタトリエニルが含まれる。シクロアルキニルの例は、シクロヘプチニルである。

【0051】

用語「シクロアルキル」、「シクロアルケニル」、および「シクロアルキニル」は、2環式、3環式、およびより高次の環状構造、並びにアルキル基、アルケニル基、および／またはアルキニル基でさらに置換されたこれらの環状構造を含む。代表的な例には、ノルボルニル、ノルボルネニル、エチルノルボルニル、エチルノルボルネニル、シクロヘキシル、エチルシクロヘキシル、エチルシクロヘキセニル、シクロヘキシルシクロヘキシル、およびシクロドデカトリエニルが含まれる。

30

【0052】

用語「アリール」は、1つの水素原子が除去された任意の芳香族炭化水素を含んでいる；「アラルキル」は、上記したアルキル基の任意のものであって1つまたはより多くの水素原子が同じ数の同様のおよび／または異なるアリール（本願で定義した通り）置換基で置換されたものを含んでいる；そして「アレーニル」は、上記したアリール基の任意のものであって、1つまたはより多くの水素原子が同じ数の同様のおよび／または異なるアルキル（本願で定義した通り）置換基で置換されたものを含んでいる。アリール基の具体的な非限定的な例には、フェニルおよびナフチルが含まれる。アラルキル基の具体的な非限定的な例には、ベンジルおよびフェネチルが含まれる。アレーニル基の具体的な非限定的な例には、トリルおよびキシリルが含まれる。

40

【0053】

用語「アルキレン」は、アルカンから2つの水素原子を除去することにより導かれる2価の飽和脂肪族ラジカルである。

【0054】

用語「ヘテロ原子」は、炭素を除く13～17族の元素のいずれかを意味し、そして例えば、酸素、窒素、ケイ素、硫黄、リン、フッ素、塩素、臭素、およびヨウ素を含んでいる。

【0055】

50

用語「ハロ」または「ハロゲン」は、それ自体で使用される場合、または別の基の一部として、 $-Cl$ 、 $-F$ 、 $-Br$ 、または $-I$ を指している。

【0056】

用語「ヒドロキシ」は、それ自体で使用される場合、または別の基の一部として、 $-OH$ を指している。

【0057】

用語「アルコキシ」は、それ自体で使用される場合、または別の基の一部として、末端酸素原子に結合した、任意選択的に置換されたアルキル、任意選択的に置換されたシクロアルキル、任意選択的に置換されたアルケニル、または任意選択的に置換されたアルキニルを指している。アルコキシ基は、末端酸素原子に結合した $C_{1\sim 20}$ アルキル、例えば、メトキシ、エトキシ、および $tert$ -ブトキシから選択される。

10

【0058】

実施例以外において、または特に断りがない限り、本明細書および特許請求の範囲に記載された材料の量、反応条件、時間の長さ、物質の定量化された特性およびその他を表現するすべての数値は、すべての場合において用語「約」によって修飾されているものとして理解される。

【0059】

本願で記載した任意の数値範囲はその範囲内のすべての部分範囲、およびそうした範囲または部分範囲の種々の端点の任意の組み合わせを含むことが理解される。

【0060】

さらに、構成的、組成的および／または機能的に関連する化合物、材料または物質の群に属するものとして本明細書に明示的または黙示的に開示され、および／または請求項において記載されたすべての化合物、材料または物質は、その群の個々の構成因子およびそれらのすべての組み合わせを含むことが理解される。

20

【0061】

本願において開示する組成物は、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含み、ここで少なくとも1つのシラン官能性アミンは式(I)： $(R^1)_a-G-(NR^2)_b$ の化合物であり；そしてさらにここで：

【0062】

Gは飽和または不飽和の環状部分であり；

30

【0063】

R^1 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルコキシ基、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され；

【0064】

Rのそれぞれは独立して、水素および $-L-SiX^1X^2X^3$ からなる群より選択され；但し少なくとも1つのRは水素であり、少なくとも1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ であり；

【0065】

Lのそれぞれは独立して、1から20の炭素原子および任意選択的に少なくとも1つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2から20の炭素原子を有するアルケニレン基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6から12の炭素原子を有するアリーレン基、および7から14の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択され；

40

【0066】

X^1 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-OR^2$ および $-OC(=O)R^2$ からなる群より選択され；

【0067】

X^2 のそれぞれおよび X^3 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ および R^2 からなる群より選択され；

50

【0068】

R²のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され；

【0069】

aは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または11であり；そして

【0070】

bは1または2である。

【0071】

幾つかの態様において、bは1であり、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10または11であり、そしてアミノ基に対してオルソ位置にある少なくとも1つのR¹基は少なくとも1つのα水素原子を有する。

10

【0072】

幾つかの態様において、bは1であり、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10または11であり、そしてアミノ基に対してパラ位置にある少なくとも1つのR¹基は少なくとも1つのα水素原子を有する。

【0073】

幾つかの態様において、bは1であり、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10または11であり、そして少なくとも1つのR¹はアミノ基に対してメタ位置にある。

20

【0074】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、シクロヘプタン環、シクロオクタン環、デカリン環、ジオキサン環、ピリジン環、ピリミジン環、ピラン環、イソキノリン環、キノリン環、およびキサンテン環からなる群より選択される飽和または不飽和の環状部分である。

【0075】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環、シクロヘキサン環、およびピリジン環からなる群より選択される。

【0076】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1または2であり、そしてaは0、1、2、3、4、または5であり；但しaおよびbの合計は6に等しいかまたはより小さい。

30

【0077】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、4、または5である。

【0078】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは2であり、そしてaは0、1、2、3、または4である。

【0079】

幾つかの態様において、Gはシクロヘキサン環であり、bは1または2であり、そしてaは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または11であり；但しaおよびbの合計は12に等しいかまたはより小さい。

40

【0080】

幾つかの態様において、Gはシクロヘキサン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または11である。

【0081】

幾つかの態様において、Gはシクロヘキサン環であり、bは2であり、そしてaは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、または10である。

【0082】

幾つかの態様において、Gはピリジン環であり、bは1または2であり、そしてaは0

50

、1、2、3、または4であり；但しaおよびbの合計は5に等しいかまたはより小さい。

【0083】

幾つかの態様において、Gはピリジン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、または4である。

【0084】

幾つかの態様において、Gはピリジン環であり、bは2であり、そしてaは0、1、2、または3である。

【0085】

1つの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、aは1、2、3、4、または5であり、1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ であり、そして他のRは水素である。

10

【0086】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、aは1であり、1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ であり、そして他のRは水素である。

【0087】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、aは1であり、1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ であり、そして他のRは水素である；そしてここで R^1 基はアミノ基に対してオルソ位置にあり、また R^1 基は少なくとも1つの α 水素原子を有する。

【0088】

20

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、aは1であり、1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ であり、そして他のRは水素である；そしてここで R^1 基はアミノ基に対してパラ位置にあり、また R^1 基は少なくとも1つの α 水素原子を有する。

【0089】

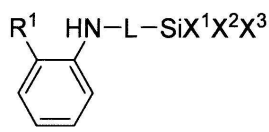
幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、aは1であり、1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ であり、そして他のRは水素である；そしてここで R^1 基はアミノ基に対してメタ位置にある。

【0090】

幾つかの態様において、式(I)の化合物は

【化1】

30



そしてここで R^1 基は少なくとも1つの α 水素原子を有する。

【0091】

幾つかの態様において、 R^1 は1から20の炭素原子を有するアルコキシ基、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択される。

40

【0092】

幾つかの態様において、 R^1 は1から20の炭素原子を有するアルコキシ基、1から20の炭素原子を有するアルキル基、または2から20の炭素原子を有するアルケニル基である。

【0093】

幾つかの態様において、 R^1 は1から20の炭素原子を有するアルキル基である。

【0094】

幾つかの態様において、 R^1 は $-CH_2CH_3$ である。

【0095】

50

幾つかの態様において、Lは1から20の炭素原子および任意選択的に少なくとも1つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2から20の炭素原子を有するアルケニレン基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6から12の炭素原子を有するアリーレン基、および7から14の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択される。

【0096】

幾つかの態様において、Lは1から20の炭素原子および任意選択的に少なくとも1つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2から20の炭素原子を有するアルケニレン基、または6から12の炭素原子を有するアリーレン基である。

【0097】

幾つかの態様において、Lは1から20の炭素原子および任意選択的に少なくとも1つのヘテロ原子を有するアルキレン基である。

【0098】

幾つかの態様において、Lは1から20の炭素原子を有するアルキレン基である。

【0099】

幾つかの態様において、Lは $-CH_2CH_2CH_2-$ である。

【0100】

幾つかの態様において、 X^1 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、または $-OC(=O)R^2$ である。

【0101】

幾つかの態様において、 X^2 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ 、または R^2 である。

【0102】

幾つかの態様において、 X^3 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ 、または R^2 である。

【0103】

幾つかの態様において、 X^1 、 X^2 および X^3 のそれぞれは独立して $-OR^2$ である。

【0104】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択される。

【0105】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、または6から12の炭素原子を有するアリール基である。

【0106】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基である。

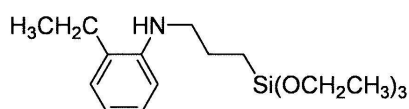
【0107】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して $-CH_2CH_3$ である。

【0108】

幾つかの態様において、式(I)の化合物は

【化2】



である。

【0109】

別の態様において、Gはベンゼン環であり、bは2であり、aは0、1、2、3、または4であり、少なくとも1つのRは水素であり、そして少なくとも1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ である。

【0110】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは2であり、aは0であり、少なくとも1つのRは水素であり、そして少なくとも1つのRは $-L-SiX^1X^2X^3$ である。

【0111】

幾つかの態様において、1つのアミノ基は他のアミノ基のオルソ位置にある。

【0112】

幾つかの態様において、1つのアミノ基は他のアミノ基のパラ位置にある。

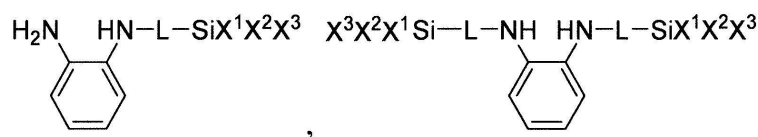
【0113】

幾つかの態様において、1つのアミノ基は他のアミノ基のメタ位置にある。

【0114】

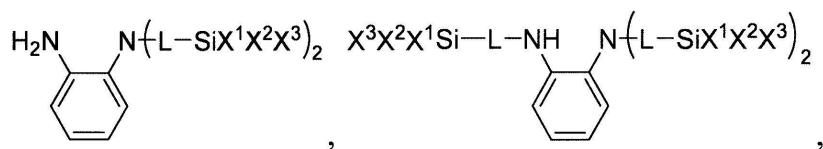
幾つかの態様において、式(I)の化合物は

【化3】



20

【化4】



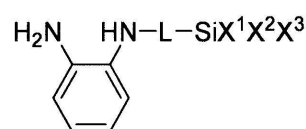
およびこれらの組み合わせからなる群より選択される。

【0115】

幾つかの態様において、式(I)の化合物は

30

【化5】

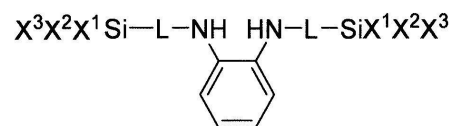


である。

【0116】

幾つかの態様において、式(I)の化合物は

【化6】



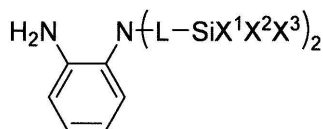
である。

【0117】

幾つかの態様において、式(I)の化合物は

50

【化 7】

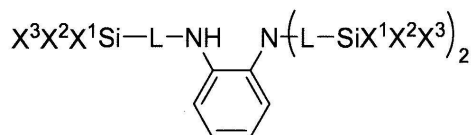


である。

【0118】

幾つかの態様において、式 (I) の化合物は

【化 8】



である。

【0119】

幾つかの態様において、L のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニレン基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6 から 12 の炭素原子を有するアリーレン基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択される。

【0120】

幾つかの態様において、L のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニレン基、または 6 から 12 の炭素原子を有するアリーレン基である。

【0121】

幾つかの態様において、L のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基である。

【0122】

幾つかの態様において、L のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子を有するアルキレン基である。

【0123】

幾つかの態様において、L のそれぞれは独立して $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ である。

【0124】

幾つかの態様において、 X^1 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-\text{OR}^2$ 、または $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^2$ である。

【0125】

幾つかの態様において、 X^2 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-\text{OR}^2$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^2$ 、または R^2 である。

【0126】

幾つかの態様において、 X^3 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-\text{OR}^2$ 、 $-\text{OC}(=\text{O})\text{R}^2$ 、または R^2 である。

【0127】

幾つかの態様において、 X^1 、 X^2 および X^3 のそれぞれは独立して $-\text{OR}^2$ である。

【0128】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキル基、6 から 12 の炭素原子を有するアリール基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択される。

【 0 1 2 9 】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、または6から12の炭素原子を有するアリール基である。

【 0 1 3 0 】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して1から20の炭素原子を有するアルキル基である。

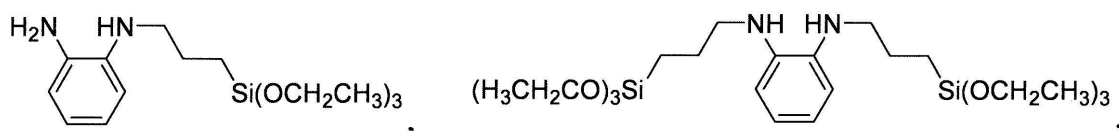
【 0 1 3 1 】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して $-CH_2CH_3$ である。

【 0 1 3 2 】

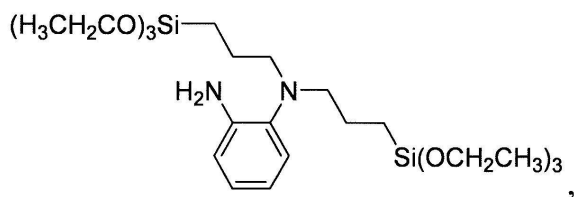
幾つかの態様において、式 (I) の化合物は

【化 9】



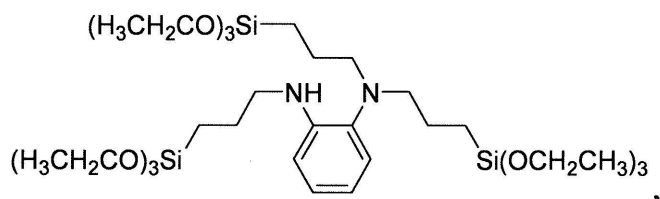
10

【化 1 0】



20

【化 1 1】



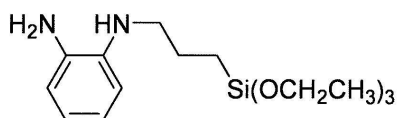
30

およびこれらの組み合わせからなる群より選択される。

【 0 1 3 3 】

幾つかの態様において、式 (I) の化合物は

【化 1 2】



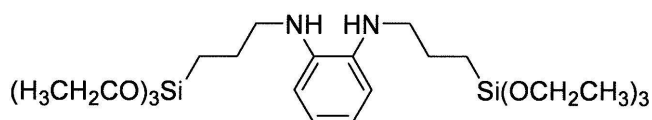
40

である。

【 0 1 3 4 】

幾つかの態様において、式 (I) の化合物は

【化 1 3】



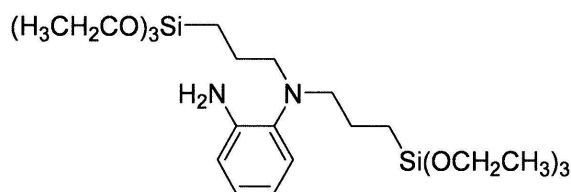
50

である。

【0135】

幾つかの態様において、式（I）の化合物は

【化14】



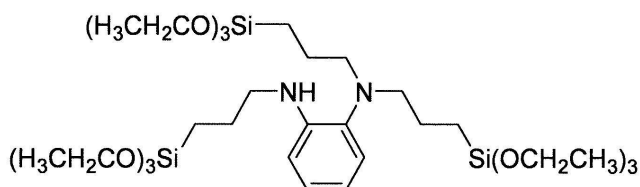
10

である。

【0136】

幾つかの態様において、式（I）の化合物は

【化15】



20

である。

【0137】

本開示はさらに、式（II）の化合物： $(R^1)_a - G - (NH_2)_b$ を1つまたはより多くの式（III）の化合物： $M - L - SiX^1X^2X^3$ と反応させることを含む少なくとも1つのシラン官能性アミンの調製方法に関し；そしてここで式（III）の化合物の合計の式（II）の化合物に対するモル比は $2b - 1$ に等しいかより小さく；そしてさらにここで：

【0138】

Gは飽和または不飽和の環状部分であり；

【0139】

R^1 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルコキシ基、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され；

【0140】

Lのそれぞれは独立して、1から20の炭素原子および任意選択的に少なくとも1つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2から20の炭素原子を有するアルケニレン基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6から12の炭素原子を有するアリーレン基、および7から14の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択され；

【0141】

X^1 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-OR^2$ および $-OC(=O)R^2$ からなる群より選択され；

【0142】

X^2 のそれぞれおよび X^3 のそれぞれは独立して、ヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ および R^2 からなる群より選択され；

【0143】

R^2 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択され；

50

【0144】

Mのそれぞれは独立してハロゲンであり；

【0145】

aは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または11であり；そして

【0146】

bは1または2である。

【0147】

幾つかの態様において、bは1であり、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10または11であり、そしてアミノ基に対してオルソ位置にある少なくとも1つのR¹基は少なくとも1つのα水素原子を有する。

10

【0148】

幾つかの態様において、bは1であり、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10または11であり、そしてアミノ基に対してパラ位置にある少なくとも1つのR¹基は少なくとも1つのα水素原子を有する。

【0149】

幾つかの態様において、bは1であり、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10または11であり、そして少なくとも1つのR¹基はアミノ基に対してメタ位置にある。

【0150】

幾つかの態様において、式(III)の化合物の合計の式(II)の化合物に対するモル比は、約3.0から約0.1、約2.9から約0.1、約2.8から約0.1、約2.7から約0.2、約2.6から約0.2、約2.5から約0.2、約2.4から約0.3、約2.3から約0.3、約2.2から約0.4、約2.1から約0.4、約2.0から約0.5、約1.9から約0.5、約1.8から約0.6、約1.7から約0.6、約1.6から約0.7、約1.5から約0.7、約1.4から約0.8、約1.3から約0.8、約1.2から約0.9、または約1.1から約0.9である。幾つかの態様において、式(III)の化合物の合計の式(II)の化合物に対するモル比は約1である。

20

【0151】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、シクロペンタン環、シクロヘキサン環、シクロヘプタン環、シクロオクタン環、デカリン環、ジオキサン環、ピリジン環、ピリミジン環、ピラン環、イソキノリン環、キノリン環、およびキサンテン環からなる群より選択される飽和または不飽和の環状部分である。

30

【0152】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環、シクロヘキサン環、およびピリジン環からなる群より選択される。

【0153】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1または2であり、そしてaは0、1、2、3、4、または5であり；但しaおよびbの合計は6に等しいかまたはより小さい。

【0154】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、4、または5である。

40

【0155】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは2であり、そしてaは0、1、2、3、または4である。

【0156】

幾つかの態様において、Gはシクロヘキサン環であり、bは1または2であり、そしてaは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または11であり；但しaおよびbの合計は12に等しいかまたはより小さい。

【0157】

50

幾つかの態様において、Gはシクロヘキサン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、または11である。

【0158】

幾つかの態様において、Gはシクロヘキサン環であり、bは2であり、そしてaは0、1、2、3、4、5、6、7、8、9、または10である。

【0159】

幾つかの態様において、Gはピリジン環であり、bは1または2であり、そしてaは0、1、2、3、または4であり；但しaおよびbの合計は5に等しいかまたはより小さい。

【0160】

幾つかの態様において、Gはピリジン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、または4である。

【0161】

幾つかの態様において、Gはピリジン環であり、bは2であり、そしてaは0、1、2、または3である。

【0162】

1つの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、4、または5であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1.5に等しいかより小さい。

【0163】

1つの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1、2、3、4、または5であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1に等しいかより小さい。

【0164】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1.5に等しいかより小さい。

【0165】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1に等しいかより小さい。

【0166】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1.5に等しいかより小さく；R¹基はアミノ基に対してオルソ位置にあり；そしてR¹基は少なくとも1つのα水素原子を有する。

【0167】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1に等しいかより小さく；R¹基はアミノ基に対してオルソ位置にあり；そしてR¹は少なくとも1つのα水素原子を有する。

【0168】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1.5に等しいかより小さく；R¹基はアミノ基に対してオルソ位置にあり；そしてR¹基は少なくとも1つのα水素原子を有する。

【0169】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは1であり、そしてaは1であり；そしてここで式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1に等しいかより小さく；R¹基はアミノ基に対してパラ位置にあり；そしてR¹基は少なくとも1つ

10

20

30

40

50

の α 水素原子を有する。

【0170】

幾つかの態様において、G はベンゼン環であり、b は 1 であり、そして a は 1 であり；そしてここで式 (III) の化合物の式 (II) の化合物に対するモル比は 1.5 に等しいかより小さく；そして R^1 基はアミノ基に対してメタ位置にある。

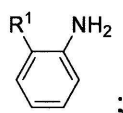
【0171】

幾つかの態様において、G はベンゼン環であり、b は 1 であり、そして a は 1 であり；そしてここで式 (III) の化合物の式 (II) の化合物に対するモル比は 1 に等しいかより小さく；そして R^1 基はアミノ基に対してメタ位置にある。

【0172】

幾つかの態様において、式 (II) の化合物は

【化16】



であり、そしてここで R^1 基は少なくとも 1 つの α 水素原子を有する。

【0173】

幾つかの態様において、 R^1 は 1 から 20 の炭素原子を有するアルコキシ基、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキル基、6 から 12 の炭素原子を有するアリール基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択される。

【0174】

幾つかの態様において、 R^1 は 1 から 20 の炭素原子を有するアルコキシ基、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、または 2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基である。

【0175】

幾つかの態様において、 R^1 は 1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基である。

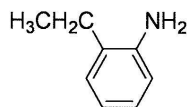
【0176】

幾つかの態様において、 R^1 は $-CH_2CH_3$ である。

【0177】

幾つかの態様において、式 (II) の化合物は

【化17】

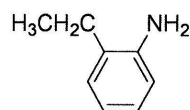


である。

【0178】

幾つかの態様において、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンは式 (II) の化合物：

【化18】



を式 (III) の化合物： $M-L-SiX^1X^2X^3$ と反応させることによって調製され；そしてここで式 (III) の化合物の式 (II) の化合物に対するモル比は 1.5 に等しいかより小さい。

【0179】

幾つかの態様において、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンは式 (II) の化合物：

10

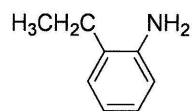
20

30

40

50

【化 19】



を式 (I I I) の化合物： $M-L-S i X^1 X^2 X^3$ と反応させることによって調製され；そしてここで式 (I I I) の化合物の式 (I I) の化合物に対するモル比は 1 に等しいかより小さい。

【0180】

幾つかの態様において、L は 1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニレン基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6 から 12 の炭素原子を有するアリーレン基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択される。

10

【0181】

幾つかの態様において、L は 1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニレン基、または 6 から 12 の炭素原子を有するアリーレン基である。

【0182】

幾つかの態様において、L は 1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基である。

20

【0183】

幾つかの態様において、L は $-CH_2CH_2CH_2-$ である。

【0184】

幾つかの態様において、 X^1 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、または $-OC(=O)R^2$ である。

【0185】

幾つかの態様において、 X^2 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ 、または R^2 である。

【0186】

幾つかの態様において、 X^3 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ 、または R^2 である。

30

【0187】

幾つかの態様において、 X^1 、 X^2 および X^3 のそれぞれは独立して $-OR^2$ である。

【0188】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して、1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニル基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキル基、6 から 12 の炭素原子を有するアリール基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択される。

【0189】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して 1 から 20 の炭素原子を有するアルキル基である。

40

【0190】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して $-CH_2CH_3$ である。

【0191】

幾つかの態様において、M はハロゲンである。

【0192】

幾つかの態様において、M はクロロ、ブロモ、またはヨードである。

【0193】

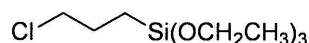
幾つかの態様において、M はクロロである。

50

【0194】

幾つかの態様において、式（III）の化合物は

【化20】



である。

【0195】

幾つかの態様において、式（III）の化合物の式（II）の化合物に対するモル比は1.5に等しいかより小さい。

10

【0196】

幾つかの態様において、式（III）の化合物の式（II）の化合物に対するモル比は約1.0から約0.1、約0.8から約0.2、約0.7から約0.3、または約0.6から約0.4である。幾つかの態様において、式（III）の化合物の式（II）の化合物に対するモル比は約0.5である。

【0197】

別の態様において、Gはベンゼン環であり、bは2であり、そしてaは0、1、2、3、または4であり；そしてここで式（III）の化合物の合計の式（II）の化合物に対するモル比は3に等しいかより小さい。

20

【0198】

幾つかの態様において、Gはベンゼン環であり、bは2であり、そしてaは0であり；そしてここで式（III）の化合物の合計の式（II）の化合物に対するモル比は3に等しいかより小さい。

【0199】

幾つかの態様において、1つのアミノ基は他のアミノ基のオルソ位置にある。

【0200】

幾つかの態様において、1つのアミノ基は他のアミノ基のパラ位置にある。

【0201】

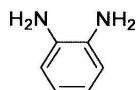
幾つかの態様において、1つのアミノ基は他のアミノ基のメタ位置にある。

【0202】

30

幾つかの態様において、式（II）の化合物は

【化21】



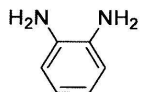
である。

【0203】

幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンは式（II）の化合物：

【化22】

40



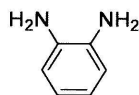
を1つまたはより多くの式（III）の化合物： $M-L-SiX^1X^2X^3$ と反応させることによって調製され；そしてここで式（III）の化合物の合計の式（II）の化合物に対するモル比は3に等しいかより小さい。

【0204】

幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンは式（II）の化合物：

50

【化 2 3】



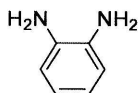
を 3 つの式 (I I I) の化合物 : $M-L-S i X^1 X^2 X^3$ と反応させることによって調製され ; そしてここで式 (I I I) の化合物の合計の式 (I I) の化合物に対するモル比は 3 に等しいかより小さい。

【 0 2 0 5】

幾つかの態様において、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンは式 (I I) の化合物 :

10

【化 2 4】



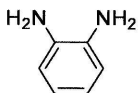
を 2 つの式 (I I I) の化合物 : $M-L-S i X^1 X^2 X^3$ と反応させることによって調製され ; そしてここで式 (I I I) の化合物の合計の式 (I I) の化合物に対するモル比は 3 に等しいかより小さい。

【 0 2 0 6】

幾つかの態様において、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンは式 (I I) の化合物 :

20

【化 2 5】



を 1 つの式 (I I I) の化合物 : $M-L-S i X^1 X^2 X^3$ と反応させることによって調製され ; そしてここで式 (I I I) の化合物の式 (I I) の化合物に対するモル比は 3 に等しいかより小さい。

【 0 2 0 7】

幾つかの態様において、L は 1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基、2 から 20 の炭素原子を有するアルケニレン基、3 から 10 の炭素原子を有するシクロアルキレン基、6 から 12 の炭素原子を有するアリーレン基、および 7 から 14 の炭素原子を有するアラルキレン基からなる群より選択される。

30

【 0 2 0 8】

幾つかの態様において、L は 1 から 20 の炭素原子および任意選択的に少なくとも 1 つのヘテロ原子を有するアルキレン基である。

【 0 2 0 9】

幾つかの態様において、L は $-CH_2CH_2CH_2-$ である。

【 0 2 1 0】

幾つかの態様において、 X^1 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、または $-OC(=O)R^2$ である。

40

【 0 2 1 1】

幾つかの態様において、 X^2 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ 、または R^2 である。

【 0 2 1 2】

幾つかの態様において、 X^3 はヒドロキシル、 $-OR^2$ 、 $-OC(=O)R^2$ 、または R^2 である。

【 0 2 1 3】

幾つかの態様において、 X^1 、 X^2 および X^3 のそれぞれは独立して $-OR^2$ である。

50

【0214】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して、1から20の炭素原子を有するアルキル基、2から20の炭素原子を有するアルケニル基、3から10の炭素原子を有するシクロアルキル基、6から12の炭素原子を有するアリール基、および7から14の炭素原子を有するアラルキル基からなる群より選択される。

【0215】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して1から20の炭素原子を有するアルキル基である。

【0216】

幾つかの態様において、 R^2 のそれぞれは独立して $-CH_2CH_3$ である。

10

【0217】

幾つかの態様において、Mはハロゲンである。

【0218】

幾つかの態様において、Mはクロロ、ブロモ、またはヨードである。

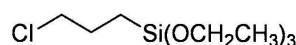
【0219】

幾つかの態様において、Mはクロロである。

【0220】

幾つかの態様において、式(III)の化合物は

【化26】



20

である。

【0221】

幾つかの態様において、反応は塩基の存在下に生ずる。

【0222】

幾つかの態様において、塩基はアルカリ金属アルコキシドである。

【0223】

幾つかの態様において、塩基はナトリウムエトキシドである。

【0224】

幾つかの態様において、式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は、約3.0から約0.1、約2.9から約0.1、約2.8から約0.1、約2.7から約0.2、約2.6から約0.2、約2.5から約0.2、約2.4から約0.3、約2.3から約0.3、約2.2から約0.4、約2.1から約0.4、約2.0から約0.5、約1.9から約0.5、約1.8から約0.6、約1.7から約0.6、約1.6から約0.7、約1.5から約0.7、約1.4から約0.8、約1.3から約0.8、約1.2から約0.9、または約1.1から約0.9である。

30

【0225】

幾つかの態様において、式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は1.5に等しいかより小さい。

【0226】

幾つかの態様において、式(III)の化合物の式(II)の化合物に対するモル比は約1である。

40

【0227】

幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンは上記に説明した式(I)の化合物： $(R^1)_a-G-(NR_2)_b$ である。

【0228】

本開示はさらに：

a. 上述した式(I)： $(R^1)_a-G-(NR_2)_b$ の少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物；

b. 少なくとも1つのジエン系ポリマー；

50

c. シリカ；

d. 少なくとも1つの加工助剤；および

e. 硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージ

を含むゴム組成物に関する。幾つかの態様において、ジエン系ポリマーは、少なくとも1つの官能基を含むジエン系ポリマー、官能基を含まないジエン系ポリマー、またはこれらの組み合わせである。

【0229】

幾つかの態様において、ジエン系ポリマーは少なくとも1つの官能基を含むジエン系ポリマーである。

【0230】

幾つかの態様において、ジエン系ポリマーは官能基を含まないジエン系ポリマーである。

【0231】

幾つかの態様において、ジエン系ポリマーは天然ゴム、シス-1,4-ポリイソプレン、シス-1,4-ポリブタジエン、またはこれらの組み合わせである。

【0232】

幾つかの態様において、ジエン系ポリマーは天然ゴムである。

【0233】

幾つかの態様において、ジエン系ポリマーはシス-1,4-ポリイソプレンである。

【0234】

幾つかの態様において、ジエン系ポリマーはシス-1,4-ポリブタジエンである。

【0235】

幾つかの態様において、ジエン系ポリマーは天然ゴム、ポリイソプレン、ポリブタジエン、スチレン-ブタジエンコポリマー（SBR）、またはこれらの組み合わせである。

【0236】

幾つかの態様において、加工助剤は2,2,4-トリメチル-1,2-ジヒドロキノリン、オクチルトリエトキシシラン、トリエトキシシリル炭化水素、またはこれらの組み合わせである。

【0237】

幾つかの態様において、加工助剤は2,2,4-トリメチル-1,2-ジヒドロキノリンである。

【0238】

幾つかの態様において、加工助剤はオクチルトリエトキシシランである。

【0239】

幾つかの態様において、加工助剤はトリエトキシシリル炭化水素である。

【0240】

幾つかの態様において、加硫剤中の硫黄は、元素状硫黄、硫黄供与化合物、およびこれらの組み合わせからなる群より選択される。

【0241】

幾つかの態様において、加硫剤中の硫黄は元素状硫黄である。

【0242】

幾つかの態様において、加硫剤中の硫黄は硫黄供与化合物である。

【0243】

幾つかの態様において、促進剤はベンゾチアゾール、グアニジン誘導体、チオカルバメート、およびこれらの組み合わせからなる群より選択される。

【0244】

幾つかの態様において、促進剤はベンゾチアゾールである。

【0245】

幾つかの態様において、促進剤はグアニジン誘導体である。

10

20

30

40

50

【0246】

幾つかの態様において、促進剤はチオカルバメートである。

【0247】

幾つかの態様において、促進剤は、メルカプトベンゾチアゾール、ベンゾチアゾールジスルフィド、ジフェニルグアニジン、ジチオカルバミン酸亜鉛、アルキルフェノールジスルフィド、ブチルキサントゲン酸亜鉛、N-ジシクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド、N-シクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド、N-オキシジエチレンベンゾチアゾール-2-スルフェンアミド、N,N-ジフェニルチオ尿素、ジチオカルバミルスルフェンアミド、N,N-ジイソプロピルベンゾチオゾール-2-スルフェンアミド、亜鉛-2-メルカプトトルイミダゾール、ジチオビス（N-メチルピペラジン）、ジチオビス（N-β-ヒドロキシエチルピペラジン）、ジチオビス（ジベンジルアミン）およびこれらの組み合わせからなる群より選択される。

10

【0248】

幾つかの態様において、促進剤はN-シクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミドである。

【0249】

幾つかの態様において、促進剤はジフェニルグアニジンである。

【0250】

幾つかの態様において、ゴム組成物はさらに少なくとも1つのフィラーを含む。

【0251】

幾つかの態様において、フィラーは、二酸化チタン、アルミナ、アルミノケイ酸塩、珪質物質、カーボンブラック、アセチレンブラック、炭酸カルシウム、硫酸バリウムおよびこれらの組み合わせからなる群より選択される。

20

【0252】

幾つかの態様において、フィラーはカーボンブラックである。

【0253】

幾つかの態様において、ゴム組成物はさらに少なくとも1つのプロセス油を含む。

【0254】

幾つかの態様において、プロセス油は処理済み蒸留芳香族抽出物（TDAE）油である。

30

【0255】

幾つかの態様において、ゴム組成物はさらに少なくとも1つのアクチベータを含む。

【0256】

幾つかの態様において、アクチベータは酸化亜鉛である。

【0257】

幾つかの態様において、アクチベータはステアリン酸である。

【0258】

幾つかの態様において、ゴム組成物はさらに少なくとも1つの劣化防止剤を含む。

【0259】

幾つかの態様において、劣化防止剤はN-（1,3-ジメチルブチル）-N'-フェニル-p-フェニレンジアミンである。

40

【0260】

幾つかの態様において、劣化防止剤は2,2,4-トリメチル-1,2-ジヒドロキノリンポリマーである。

【0261】

幾つかの態様において、劣化防止剤はマイクロクリスタリンワックスである。

【0262】

幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンは少なくとも1つのジエン系ポリマーと反応性である。

【0263】

50

幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンはシリカと反応性である。

【0264】

幾つかの態様において、組成物は硬化性である。

【0265】

幾つかの態様において、組成物はASTM D-1646法を使用して測定して約75 MUから約160 MU、約80 MUから約160 MU、約85 MUから約160 MU、約90 MUから約160 MU、約95 MUから約160 MU、約100 MUから約155 MU、約105 MUから約155 MU、約110 MUから約155 MU、約115 MUから約155 MU、約120 MUから約155 MU、約125 MUから約150 MU、約130 MUから約150 MU、約135 MUから約150 MU、約140 MUから約148 MU、約141 MUから約147 MU、約142 MUから約146 MU、または約143 MUから約145 MUのムーニー粘度を有する。幾つかの態様において、組成物は約144 MUのムーニー粘度を有する。

10

【0266】

幾つかの態様において、組成物はASTM D-1646法を使用して測定して3ポイント上昇したムーニスコーチタイムが約1分から約20分、約1分から約19分、約1分から約18分、約2分から約17分、約2分から約16分、約2分から約15分、約3分から約14分、約3分から約13分、約3分から約12分、約4分から約11分、約5分から約10分、約6分から約10分、または約7分から約9分である。幾つかの態様において、組成物は3ポイント上昇したムーニスコーチタイムが約8分である。

20

【0267】

幾つかの態様において、組成物はASTM D-412法を使用して測定して約5 MPaから約30 MPa、約6 MPaから約30 MPa、約7 MPaから約29 MPa、約8 MPaから約29 MPa、約9 MPaから約28 MPa、約10 MPaから約28 MPa、約11 MPaから約27 MPa、約12 MPaから約26 MPa、約13 MPaから約25 MPa、約14 MPaから約24 MPa、約15 MPaから約23 MPa、約16 MPaから約22 MPa、約17 MPaから約21 MPa、または約18 MPaから約20 MPaの引張強度を有する。幾つかの態様において、組成物は約19 MPaの引張強度を有する。

30

【0268】

幾つかの態様において、組成物はASTM D-5963法を使用して測定して約80 mm³から約120 mm³、約80 mm³から約118 mm³、約81 mm³から約116 mm³、約81 mm³から約114 mm³、約82 mm³から約112 mm³、約82 mm³から約110 mm³、約83 mm³から約108 mm³、約83 mm³から約106 mm³、約84 mm³から約104 mm³、約85 mm³から約102 mm³、約86 mm³から約100 mm³、約87 mm³から約99 mm³、約88 mm³から約98 mm³、約89 mm³から約97 mm³、約90 mm³から約96 mm³、約91 mm³から約95 mm³、または約92 mm³から約94 mm³のDIN摩耗量を有する。幾つかの態様において、組成物は約93 mm³のDIN摩耗量を有する。

40

【0269】

幾つかの態様において、組成物はASTM D-7121-05法を使用して測定して70℃において約40%から約80%のリバウンドを有する。幾つかの態様において、組成物は70℃において約41%から約79%、約42%から約78%、約43%から約77%、約44%から約76%、約45%から約75%、約46%から約74%、約47%から約73%、約48%から約72%、約49%から約71%、約50%から約70%、約51%から約69%、約52%から約68%、約53%から約67%、約54%から約66%、約55%から約66%、約56%から約65%、約57%から約65%、約58%から約64%、約59%から約63%、または約60%から約62%のリバウンドを有する。幾つかの態様において、組成物は70℃において約61%のリバウンドを有する。

50

【0270】

本開示はさらに：

(i) 約100部のゴム、ここでゴムの重量は配合において使用される少なくとも1つの官能基を含むジエン系ポリマーのそれぞれの重量と、配合において使用される官能基を含まないジエン系ポリマーのそれぞれの重量の合計である；

(ii) 100部のゴム(i)当たり約1から約20重量部の上述した式(I)： $(R^1)_a - G - (NR_2)_b$ の少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物；

(iii) 100部のゴム(i)当たり約5から約140重量部のシリカ；

(iv) 100部のゴム(i)当たり約0.1から約10重量部の少なくとも1つの加工助剤；および

(v) 100部のゴム(i)当たり約0.1から約20重量部の硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージを含むゴム組成物を提供する。

10

【0271】

幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物はゴム100重量部当たり約1から約20重量部、約1から約18重量部、約1から約16重量部、約2から約14重量部、約2から約12重量部、約2から約10重量部、約3から約8重量部、約3から約6重量部、または約3から約5重量部である。幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物は100重量部のゴム当たり約4重量部である。

20

【0272】

幾つかの態様において、シリカはゴム100重量部当たり約5から約140重量部、約10から約130重量部、約15から約120重量部、約20から約110重量部、約25から約100重量部、約30から約90重量部、約35から約80重量部、約40から約70重量部、約40から約60重量部、または約45から約55重量部である。幾つかの態様において、シリカはゴム100重量部当たり約50重量部である。

【0273】

幾つかの態様において、少なくとも1つの加工助剤はゴム100重量部当たり約0.1から約10重量部、約0.1から約8重量部、約0.1から約6重量部、約0.1から約4重量部、約0.1から約2重量部、約0.1から約1重量部、約0.1から約0.9重量部、約0.2から約0.8重量部、約0.3から約0.7重量部、または約0.4から約0.6重量部である。幾つかの態様において、少なくとも1つの加工助剤はゴム100重量部当たり約0.5重量部である。

30

【0274】

幾つかの態様において、硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージはゴム100重量部当たり約0.1から約20重量部、約0.5から約15重量部、約1.0から約10重量部、約1.5から約8重量部、約2から約6重量部、または約3から約5重量部である。幾つかの態様において、硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージはゴム100重量部当たり約4重量部である。

40

【0275】

本開示はまた、上述した式(I)： $(R^1)_a - G - (NR_2)_b$ の少なくとも1つのシラン官能性アミンを含む組成物およびシリカを少なくとも1つのジエン系ポリマーに添加することを含む、ゴム組成物の調製プロセスを提供する。

【0276】

本開示が提供するプロセスはさらに、硫黄を含む少なくとも1つの加硫剤および少なくとも1つの促進剤を含む加硫パッケージと同時に、少なくとも1つの加工助剤を添加することを含んでいる。

【0277】

幾つかの態様において、少なくとも1つのシラン官能性アミンは、式(II)の化合物

50

： $(R^1)_a - G - (NH_2)_b$ を上述した 1 つまたはより多くの式 (I I I) の化合物
 ： $M - L - SiX^1X^2X^3$ と反応させることを含む方法によって調製される。

【0278】

幾つかの態様において、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンは少なくとも 1 つのジエン系ポリマーと反応性である。

【0279】

幾つかの態様において、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンはシリカと反応性である。

【0280】

幾つかの態様において、ゴム組成物は：

- a. 約 0.05 % から約 12 重量% の上述した少なくとも 1 つのシラン官能性アミンを含む組成物；
 - b. 約 5 % から約 70 重量% の少なくとも 1 つのジエン系ポリマー；
 - c. 約 10 % から約 40 重量% のシリカ；
 - d. 約 0.05 % から約 5 重量% の少なくとも 1 つの加工助剤；および
 - e. 約 0.05 % から約 5 重量% の硫黄を含む少なくとも 1 つの加硫剤および少なくとも 1 つの促進剤を含む加硫パッケージ
- を含んでいる。

【0281】

幾つかの態様において、ゴム組成物は約 0.05 % から約 12 重量%、約 0.1 % から約 11 %、約 0.2 % から約 10 %、約 0.3 % から約 9 %、約 0.4 % から約 8 %、約 0.5 % から約 7 %、約 0.6 % から約 6 %、約 0.7 % から約 5.5 %、約 0.8 % から約 5 %、約 0.9 % から約 4.5 %、約 1.0 % から約 4 %、約 1.25 % から約 3.5 %、約 1.5 % から約 3.0 %、約 1.75 % から約 2.75 %、または約 2.0 % から約 2.5 % の、少なくとも 1 つのシラン官能性アミンを含む組成物を含んでいる。幾つかの態様において、ゴム組成物は約 2.25 重量% の少なくとも 1 つのシラン官能性アミンを含む組成物を含んでいる。

【0282】

幾つかの態様において、ゴム組成物は約 5 % から約 70 重量%、約 15 % から約 68 %、約 25 % から約 66 %、約 35 % から約 64 %、約 45 % から約 62 %、約 50 % から約 60 %、約 52 % から約 59 %、約 54 % から約 58 %、または約 55 % から約 57 % の少なくとも 1 つのジエン系ポリマーを含んでいる。幾つかの態様において、ゴム組成物は約 56 重量% の少なくとも 1 つのジエン系ポリマーを含んでいる。

【0283】

幾つかの態様において、ゴム組成物は、約 10 % から約 40 重量%、約 15 % から約 38 %、約 20 % から約 36 %、約 22 % から約 34 %、約 24 % から約 32 %、約 26 % から約 30 %、または約 27 % から約 29 % のシリカを含む。幾つかの態様において、ゴム組成物は約 28 重量% のシリカを含む。

【0284】

幾つかの態様において、ゴム組成物は、約 0.05 % から約 5 重量%、約 0.10 % から約 4 %、約 0.15 % から約 3 %、約 0.18 % から約 2 %、約 0.20 % から約 1 %、約 0.21 % から約 0.8 %、約 0.22 % から約 0.7 %、約 0.23 % から約 0.6 %、約 0.24 % から約 0.5 %、約 0.25 % から約 0.4 %、約 0.26 % から約 0.3 %、または約 0.27 % から約 0.29 % の少なくとも 1 つの加工助剤を含む。幾つかの態様において、ゴム組成物は約 0.28 重量% の少なくとも 1 つの加工助剤を含む。

【0285】

幾つかの態様において、ゴム組成物は、約 0.05 % から約 5 重量%、約 0.10 % から約 4.5 %、約 0.50 % から約 4 %、約 1 % から約 3.5 %、約 1.5 % から約 3 %、約 1.75 % から約 2.75 %、または約 2 % から約 2.5 % の、硫黄を含む少なくとも 1 つの加硫剤および少なくとも 1 つの促進剤を含む加硫パッケージを含む。幾つかの態様において

10

20

30

40

50

、ゴム組成物は約 2.25 重量%の、硫黄を含む少なくとも 1 つの加硫剤および少なくとも 1 つの促進剤を含む加硫パッケージを含む。

【0286】

本開示はさらに、上記したプロセスによって調製されるゴム組成物を提供する。

【0287】

本開示はまた、上記したゴム組成物を含む製造物品を提供する。幾つかの態様において、製造物品には、限定するものではないが、タイヤ、コンベヤベルト、エンジンマウント、および靴底が含まれる。幾つかの態様において、製造物品はタイヤまたはエンジンマウントである。

実施例

10

【0288】

ゴム組成物を調製するための成分は：

【0289】

天然ゴムは、シス-1,4-ポリイソプレンゴムであり、標準インドネシアゴム S I R-20 という商品名で H B ケミカル社から入手可能である。

【0290】

高シス-1,4-ポリブタジエンゴムは、K i b i p o l 登録商標 H B R P R-040 G という商品名でチーメイ社から入手可能である。

【0291】

合成アモルファス沈降シリカは、B E T 表面積 165 m²/g を有する高分散シリカ (H D S) ミクロパールであり、Z E O S I L 1165 M P という商品名でソルベイグループ (以前はローディア社として知られていた) から入手可能である。

20

【0292】

カーボンブラックは、V u l c a n 登録商標 9 という商品名でキャボット社から入手可能である。

【0293】

プロセス油は、処理済み蒸留芳香族抽出物 (T D A E) 油であり、V i v a t e c 500 という商品名で H & R グループから入手可能である。

【0294】

T E S P T シランは、ビス [3- (トリエトキシシリル) プロピル] テトラスルフィドであり、S C A 98 という商品名でストラクトール・アメリカ社から入手可能である。

30

【0295】

組成物 A は、モメンティブ・パフォーマンス・マテリアルズ社により合成されたシラン官能性アミン混合物である。

【0296】

アクチベータ 1 は酸化亜鉛であり、酸化亜鉛 C R-40 という商品名でハーウィック・スタンダード社から入手可能である。

【0297】

アクチベータ 2 はステアリン酸であり、ステアリン酸 F-2000 という商品名でハーウィック・スタンダード社から入手可能である。

40

【0298】

劣化防止剤 1 は、N- (1,3-ジメチルブチル) -N'-フェニル-p-フェニレンジアミンであり、S t a n g a r d 登録商標 6 P P D という商品名でハーウィック・スタンダード社から入手可能である。

【0299】

劣化防止剤 2 は、2,2,4-トリメチル-1,2-ジヒドロキノリンポリマーであり、S t a n g a r d 登録商標 T M Q という商品名でハーウィック・スタンダード社から入手可能である。

【0300】

劣化防止剤 3 はマイクロクリスタリン-パラフィンブレンドワックスであり、A K R O

50

WAX登録商標5084という商品名でアクロケム社から入手可能である。

【0301】

硬化剤は硫黄であり、Rubber Makers Sulfurという商品名でジョージアガルフサルファー社から入手可能である。

【0302】

促進剤1はN-シクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミドであり、KEMAI CBS GRという商品名でハーウィック・スタンダード社から入手可能である。

【0303】

促進剤2はジフェニルグアニジンであり、Ekaland DPG Cという商品名でハーウィック・スタンダード社から入手可能である。

【0304】

表1は、加硫（硬化）ゴム組成物を評価するための試験手順を列挙している。

【表1】

表1

性能指標	測定	装置	方法
処理の指標	ムーニー粘度 ML(1+4) 100°C	モンサント社 MV2000	ASTM D-1646
処理の指標	3ポイント上昇の ムーネースコーチ	モンサント社 MV2000	ASTM D-1646
転がり抵抗の指標	60°CでのRPA歪み掃引G'	TAインスツルメンツ社 RPA	MPM内部試験法
転がり抵抗の指標	60°CでのRPA $\tan \delta$ 最大値	TAインスツルメンツ社 RPA	MPM内部試験法
転がり抵抗の指標	RPAペイン効果	TAインスツルメンツ社 RPA	MPM内部試験法
摩耗の指標	DIN摩耗(質量減少)	DIN ロータリー摩耗試験機	ASTM D-5963
ハンドリング性の指標	ショアA硬度	ツビック社 ショア硬度計	ASTM D-2240
グリップ性の指標	70°C、100°Cにおける リバウンド	ツビック社 5109反発弾性試験機	ASTM D-7121
摩耗の指標	強化インデックス	ツビック社 リング試験機	ASTM D-412
耐久性	高速引裂エネルギー(HSTE)	ツビック社 HIT50P	ASTM D-624
加工性	粘度	モンサント社 可動ダイレオメーター モデルMDR2000	ASTM F-5289-12
摩耗の指標	引張強度	ツビック社 リング試験機	ASTM D-412
ハンドリング性の指標	弾性率	ツビック社 リング試験機	ASTM D-412
摩耗の指標	%伸び	ツビック社 リング試験機	ASTM D-412

【0305】

ゴム加工試験機はR P Aと略称されている。

実施例 1

組成物 A の調製

【0306】

クロロプロピルトリエトキシシラン（133.6グラム、0.56モル）、*o*-フェニレンジアミン（60.0グラム、0.56モル）、およびキシレン（100.0グラム）を、メカニカルスターラー、添加漏斗、6インチのビグリュウカラム、ショートパス蒸留ヘッド、マントルヒーター、および温度コントローラを備えた、1リットルの丸底フラスコに仕込んだ。ナトリウムエトキシド（エタノール中21重量%、170.8グラム、0.53モル）を添加漏斗に仕込んだ。フラスコ中の反応混合物は2時間にわたり160℃で加熱攪拌し、その後添加漏斗からナトリウムエトキシドを添加した。ナトリウムエトキシドは反応温度を160℃に保持しながら、7～8時間かけてゆっくりと添加した。ナトリウムエトキシドの添加完了後、容器内温度は徐々に低減された。

10

【0307】

反応混合物から得られた固形分を遠心分離によって取り出した。有機成分を30%エチレンジアミン／エチレンジアミン塩酸塩溶液で3回洗浄して、未反応の*o*-フェニレンジアミンを除去した。洗浄後、有機成分を真空下にストリッピングして溶媒および低沸点の洗浄試薬を除去し、そして122グラムの組成物 A が回収された。

実施例 2

組成物 A の調製

【0308】

所定量の*o*-フェニレンジアミン（220.4グラム、2.04モル）およびキシレン異性体混合物（406.4グラム）を反応容器内に仕込んだ。反応容器は、温度コントローラにより給電されたマントルヒーターに支持された、5リットルの丸底フラスコである。このフラスコには、メカニカルスターラー、添加漏斗、および取り出しの制御された蒸留ヘッドが装着された15cmのビグリュウカラムが備えられていた。次いで、クロロプロピルトリエトキシシラン（492.7グラム、2.05モル）およびヘキサデカン（42.3グラム）の混合物がフラスコ内に添加された。この反応混合物は乾燥窒素雰囲気下に攪拌しながら保持された。反応混合物は160℃に加熱され、添加漏斗を通じてナトリウムエトキシドを添加するまで67分保持された。次いでナトリウムエトキシド（エタノール中21重量%、616.0グラム、1.90モル）が添加漏斗を介して6時間にわたり一定速度で添加された。

20

30

【0309】

反応混合物は次いで室温まで冷却され、液層を固形分からデカンテーションした。その後固形分はトルエンですすいだ。有機層は合わせて0.1 torrにおいて真空ストリッピングして、濃い紫色の液体を生成し、それを-20℃の冷凍庫内に～2日間置いた。追加の固形分が形成され、有機層は再度固形分からデカンテーションして除去した。この有機層はさらに0.1 torrにおいて昇温下で真空ストリッピングし、透明な濃い紫色の液体の組成物 A が残された。

実施例 3

組成物 B の調製

【0310】

クロロプロピルトリエトキシシラン（0.25モル）、クロロブチルジメチルエトキシシラン（0.28モル）、*o*-フェニレンジアミン（0.50モル）、およびキシレン（100.0グラム）を、メカニカルスターラー、添加漏斗、6インチのビグリュウカラム、ショートパス蒸留ヘッド、マントルヒーター、および温度コントローラを備えた、1リットルの丸底フラスコに仕込んだ。ナトリウムエトキシド（170.8グラム、エタノール中21%、0.53モル）を添加漏斗に仕込んだ。フラスコ中の反応混合物は2時間にわたり160℃で加熱攪拌し、その後ナトリウムエトキシドを添加した。ナトリウムエトキシドは反応温度を160℃に保持しながら、7～8時間かけてゆっくりと添加した。次い

40

50

で、容器内温度は徐々に低減された。

【0311】

反応混合物から得られた固形分を遠心分離によって取り出した。有機成分を30%エチレンジアミン／エチレンジアミン塩酸塩溶液で3回洗浄して、未反応のo-フェニレンジアミンを除去した。洗浄後、有機成分を真空下にストリッピングして溶媒および低沸点の洗浄試薬を除去し、そして組成物Bが回収された。

実施例4

組成物Bの調製

【0312】

クロロプロピルトリエトキシシラン(0.25モル)、o-フェニレンジアミン(0.50モル)、およびキシレン(100.0グラム)を、メカニカルスターラー、添加漏斗、6インチのピグリュウカラム、ショートパス蒸留ヘッド、マントルヒーター、および温度コントローラを備えた、1リットルの丸底フラスコに仕込んだ。フラスコ中の反応混合物は2時間にわたり160℃で加熱攪拌した。次いで、クロロブチルジメチルエトキシシラン(0.28モル)をフラスコに添加した。フラスコ内の反応混合物は2時間にわたって反応を続けた。その後ナトリウムエトキシド(170.8グラム、エタノール中21%、0.53モル)を反応温度を160℃に保持しながら、7～8時間かけてゆっくりと添加した。容器内温度は徐々に低減された。

【0313】

反応混合物から得られた固形分を遠心分離によって取り出した。有機成分を30%エチレンジアミン／エチレンジアミン塩酸塩溶液で3回洗浄して、未反応のo-フェニレンジアミンを除去した。洗浄後、有機成分を真空下にストリッピングして溶媒および低沸点の洗浄試薬を除去し、そして組成物Bが回収された。

比較例

ゴム組成物の調製および評価

【0314】

表2は、天然ゴム／シス-1,4-ポリブタジエンの80／20ブレンドを使用し、Vulcan登録商標9カーボンブラック(コントロール)、並びにTESPTおよび組成物Aを用いてシリカに結合したシランを含んで調製されたゴム組成物に使用された成分を列挙している。組成物Aは本発明のシランである。

10

20

30

40

50

【表 2】

表2

成分	カーボンブラック含有ゴム (PHR(ゴム100部に対する 重量部))	TESPTシラン含有ゴム (PHR(ゴム100部に対する 重量部))	組成物A含有ゴム (PHR(ゴム100部に対する 重量部))
第1の非生産混合(NP1)			
天然ゴム	80.0	80.0	80.0
シス-1,4-ポリブタジエン	20.0	20.0	20.0
シリカ	0.0	50.0	50.0
カーボンブラック	25.0	5.0	5.0
TDAEプロセス油	1.0	1.0	1.0
TESPTシラン	0.0	4.0	0.0
組成物A	0.0	0.0	4.0
酸化亜鉛	1.5	1.5	1.5
ステアリン酸	1.0	1.0	1.0
NP1合計	128.5	162.5	162.5
第2の非生産混合(NP2)			
カーボンブラック	25.0	5.0	5.0
N-(1,3-ジメチルブチル)-N'-フェ ニル-p-フェニレンジアミン(6- PPD)	2.0	2.0	2.0
2,2,4-トリメチル-1,2-ジヒドロ キノリンポリマー(TMQ)	0.5	0.5	0.5
マイクロクリスタリンワックス	1.3	1.3	1.3
酸化亜鉛	1.5	1.5	1.5
ステアリン酸	1.0	1.0	1.0
NP2合計	159.8	173.8	173.8
生産用			
硫黄	1.600	1.600	1.600
N-シクロヘキシル-2-ベンゾチア ゾールスルフェンアミド(CBS)	1.100	2.000	2.000
ジフェニルグアニジン(DPG)	0.4	0.4	0.4
最終生産用混合物合計	162.9	177.8	177.8

【0315】

シリカ含有配合物は、シリカが促進剤をその表面に吸着する傾向があることから、N-シクロヘキシル-2-ベンゾチアゾールスルフェンアミド(CBS)を僅かに多く必要とする。これら3つの配合物は、2つの連続した非生産混合工程に続く最終生産用混合を伴う混合手順を用いて、密閉式ゴム混練機において混合された。TESPTを含むシリカ配合物は、2つの非生産的過程の間、150秒間にわたって145℃で熱処理された(必要なシラン化反応を推進するため)。組成物Aを含むシリカ配合物は、2つの非生産的過程の間、90秒間にわたって155℃で熱処理された。

【0316】

3つの配合物は最後の生産用混合物において硬化剤と180秒間にわたって105℃で混合された。これらのゴム組成物は160℃で15分間硬化された。

【0317】

表3は、3つのゴム組成物について得られた物理的性質および動的性質を列挙している

。

【表 3】

表3

試料	カーボンブラック	TESPTシラン	組成物A
ムーニー			
100°Cにおける塑性ML1+4(MU)	75.4	70.2	144.2
スコーチタイム3ポイント(分)	8.3	12.6	7.6
レオメーター、160 °C			
最大トルク、dNm	21.26	22.80	19.35
最小トルク、dNm	3.13	2.78	3.57
デルタトルク、dNm	18.1	20.00	15.8
応力-歪み			
引張強度、MPa	22.7	21.7	19.2
破断時伸び、%	504	498	454
100%モジュラス、MPa	2.3	2.4	1.8
300%モジュラス、MPa	12.4	12.5	11.3
強化指数	5.5	5.2	6.4
ショアA硬度			
25°CにおけるショアA	62.00	63.3	58.7
耐久性			
高速引裂エネルギー(HSTE)、 MJ/m ³	6.7	6.9	6.7
DIN摩耗損失、mm ³	95.8	99.7	92.8
動的性質			
10%歪み、60°Cにおける硬化RPA 歪み掃引G'、MPa	2.2	2.4	1.8
10%歪み、60°Cにおける硬化RPA tan δ	0.164	0.140	0.100
硬化RPAペイン効果、MPa	6.58	5.23	2.74
70°Cにおけるリバウンド	55.1	58.7	60.9
100°Cにおけるリバウンド	59.0	62.4	63.9

10

20

30

【0318】

組成物Aを含むゴム組成物についてのショアA硬度は、カーボンブラックゴム組成物およびTESPTゴム組成物の両者のショアA硬度よりも低い。

40

【0319】

組成物Aを含むゴム組成物について観察される高いムーニー粘度は恐らくは、ディールス・アルダー機構によるシランのポリマー（単数または複数）との架橋、またはフリーラジカルにより開始された混合プロセスの間のポリマーとの直接的な架橋に起因する。

【0320】

組成物Aを含むゴム組成物のスコーチ安全性および硬化挙動は、TESPTゴム組成物に匹敵する。組成物Aを含むゴム組成物について観察される高い最小トルクは、グリーンコンパウンドのより高い粘度に起因する。デルタトルクは一般に硫黄の架橋の度合いに関連している；かくして、組成物Aを含むゴム組成物はカーボンブラックゴム組成物やTE

50

SPTゴム組成物と比較して、より低い度合いの架橋を有することが考えられる。混合プロセスの間にシランによりポリマーのプレ架橋が生じうることも、この筋書きを想定させる。

【0321】

組成物Aを含むゴム組成物は、カーボンブラックゴム組成物およびTESPTゴムの両者よりも高い剛性（強化指数）を有する。この強化の向上は、耐摩擦性および耐摩耗性の改善を示す良好な指標である。

【0322】

組成物Aを含むゴム組成物について引張強度および伸びが僅かに小さいことは、マトリックス中に存在する短く僅かに強いC-N結合に帰因させることができる。これら3つのバッチは同様の高速引裂エネルギーを有するが、これは天然ゴムタイヤ配合物における耐カットチップ性の指標である。

【0323】

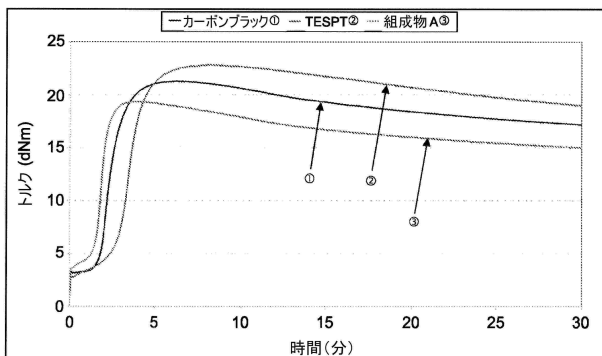
組成物Aを含むゴム組成物は、DIN摩耗試験機を使用して測定されているように、シリカコンパウンドに優れた耐摩耗性をもたらす。

【0324】

ペイン効果は、フィラーとフィラーの相互作用の程度を示す測定値であり、組成物Aを含むゴム組成物について著しく低い。これもまた混合プロセスの間におけるシランとポリマーの間での予備的な架橋に起因する可能性があり、こうした予備架橋はフィラーの集合物が再凝集する機会を最低限にする。タイヤの転がり抵抗は、10～100Hzの周波数および50～70℃の温度におけるタイヤの変形に関連しており、周期的な変形の下における粘性係数と弾性係数の比である $\tan \delta$ に比例する。表3は、組成物Aを含むゴム組成物がカーボンブラックゴム組成物およびTESPTゴム組成物よりもずっと小さな $\tan \delta$ 値を有することを示している。かくして組成物Aを含むゴム組成物は、天然ゴムタイヤ配合物における耐摩耗性と転がり抵抗の間でのトレードオフを最小化することができると考えられる。

【図面】

【図1】



10

20

30

40

50

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/US 22/81281

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. C08C 19/22, C08C 19/30 (2023.01) IPC - ADD. C08K 3/34 (2023.01) INV. C08C 19/22, C08C 19/30 CPC - ADD. C08K 3/34 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) See Search History document		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched See Search History document		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) See Search History document		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	"Pubchem CID 69082511", Create date: 30 November 2012 (30.11.2012), entire document, especially page 2, compound listed	1-2
Y	US 2011/0007489 A1 (Ohigashi et al.), 13 January 2011 (13.01.2011), entire document, especially para[0089]	1-2
A	US 2006/269760 A1 (Sugama, T.), 30 November 2006 (30.11.2006), entire document, especially para[0010]-[0015], [0109]	1-2
A	US 2012/0149831 A1 (Nagahama et al.), 14 June 2012 (14.06.2012), entire document, especially para[0031]-[0040]	1-2
A	US 11,018,371 B1 (Enevate Corporation), 25 May 2021 (25.05.2021), entire document, especially col 9, ln 1-67; col 10, ln 1-49	1-2
A	US 2005/0100738 A1 (Hirota et al.), 12 May 2005 (12.05.2005), entire document, especially para[0037], [0071]	1-2
A	"Pubchem CID 13147680", Create date: 08 February 2007 (08.02.2007), entire document, especially page 2, compound listed	1-2
☐ 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 "D" document cited by the applicant in the international application "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 08 February 2023		Date of mailing of the international search report MAY 04 2023
Name and mailing address of the ISA/US Mail Stop PCT, Attn: ISA/US, Commissioner for Patents P.O. Box 1450, Alexandria, Virginia 22313-1450 Facsimile No. 571-273-8300		Authorized officer Karl Rodriguez Telephone No. PCT Helpdesk: 571-272-4300

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2022)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/US 22/81281

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:
2. ☐ Claims Nos.:
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:
3. ☒ Claims Nos.: 4-16
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:
---see supplemental box---

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☒ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:
1-2

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
- ☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/US 22/81281

Box III: lack of unity

This application contains the following inventions or groups of inventions which are not so linked as to form a single general inventive concept under PCT Rule 13.1. In order for all inventions to be searched, the appropriate additional search fees must be paid.

Group I+: Claims 1-3 are directed to a composition comprising at least one silane functional amine wherein the at least one silane functional amine is a compound of formula (I) as seen in claim 1. Claim 1 will be searched to the extent that it encompasses the first species of claim 1, represented by a compound of formula (I) wherein G is an unsaturated cyclic moiety wherein the moiety is a benzene ring as defined in instant claim 2; R1 is absent; one R group is H; the other R group is -L-SiX1X2X3; L is -CH2-; X1 is hydroxyl; X2 is hydroxyl; X3 is hydroxyl; a is 0; b is 1. It is believed that claims 1-2 read on this first named invention, and thus these claims will be searched without fee. This first named invention has been selected based on the guidance set forth in section 10.54 of the PCT International Search and Preliminary Examination Guidelines. Applicant is invited to elect additional compounds of claim 1, wherein each additional compound elected will require one additional invention fee. Applicants must specify the claims that encompass any additionally elected compound. Applicants must further indicate, if applicable, the claims which encompass the first named invention, if different than what was indicated above for this group. Failure to clearly identify how any paid additional invention fees are to be applied to the '+' group(s) will result in only the first claimed invention to be searched. Additionally, an exemplary election wherein different actual variables are selected is suggested. An exemplary election would be a composition comprising at least one silane functional amine wherein the at least one silane functional amine is a compound of formula (I) wherein G is an unsaturated cyclic moiety wherein the moiety is a benzene ring; R1 is absent; one R group is H; the other R group is -L-SiX1X2X3; L is -CH2-; X1 is hydroxyl; X2 is hydroxyl; X3 is -OR2; R2 is C1 alkyl; a is 0; b is 1. (i.e., claims 1-2).

The group of inventions listed above do not relate to a single general inventive concept under PCT Rule 13.1 because, under PCT Rule 13.2, they lack the same or corresponding special technical features for the following reasons:

Special Technical Features:

Each invention in Group I+ includes the technical feature of a unique compound of formula (I), which is not required by any other invention of Group I+.

Common technical features:

The inventions of Groups I+ share the technical feature of a compound of formula (I).

These shared technical features, however, do not provide a contribution over the prior art as being anticipated by a document entitled "Pubchem CID 69082511" (hereinafter 'Pubchem-511'). Pubchem-511 teaches a composition comprising at least one silane functional amine, wherein at least one silane functional amine is a compound of formula (I) as seen in instant claim 1 and further wherein G is a benzene ring; R1 is absent; one R group is H; the other R group is -L-SiX1X2X3; L is -CH2-; X1 is hydroxyl; X2 is hydroxyl; X3 is hydroxyl; a is 0; b is 1 (see page 2, compound listed).

As said compound was known in the art at the time of the invention, these cannot be considered special technical features that would otherwise unify the inventions of Groups I+. The inventions of Group I+ thus lack unity under PCT Rule 13.

Note:

Claims 4-16 are unsearchable because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 8.4(a).

フロントページの続き

(51)国際特許分類

C 0 8 L

7/00 (2006.01)

B 6 0 C

1/00 (2006.01)

F I

C 0 8 L

7/00

B 6 0 C

1/00

Z

テーマコード (参考)

,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

アメリカ合衆国 ニューヨーク州 1 0 5 9 1, タリータウン, オールド ソー ミル リバー ロード 7 6 9, モメンティブ パフォーマンス マテリアルズ インコーポレイテッド内

(72)発明者

アデベトウン, アデイエミ, エイ

アメリカ合衆国 ノースカロライナ州 2 8 2 7 8, シャーロット, オースティンズ クリーク ドライブ 1 7 4 2 8

(72)発明者

クルーズ, リチャード, ダブリュー

アメリカ合衆国 ニューヨーク州 1 0 5 9 1, タリータウン, オールド ソー ミル リバー ロード 7 6 9, モメンティブ パフォーマンス マテリアルズ インコーポレイテッド内

(72)発明者

ファン, レズリー

アメリカ合衆国 ニューヨーク州 1 0 5 1 4, チャパクア, ビスチョフ アベニュー 8 7

(72)発明者

ウィンチェスター, ナンシー

アメリカ合衆国 ノースカロライナ州 2 8 2 7 3, シャーロット, エラ ジェーン レーン ディー 7 7 2 2

(72)発明者

ヴェセレ, リンダ

アメリカ合衆国 ニューヨーク州 1 0 5 9 1, タリータウン, オールド ソー ミル リバー ロード 7 6 9, モメンティブ パフォーマンス マテリアルズ インコーポレイテッド内

(72)発明者

チュー, ヤンジン

アメリカ合衆国 ニューヨーク州 1 0 5 9 1, タリータウン, オールド ソー ミル リバー ロード 7 6 9, モメンティブ パフォーマンス マテリアルズ インコーポレイテッド内

F ターム (参考)

3D131

AA01 AA02 BA01 BA02 BA03 BA05 BA07 BA12 BA18 BA20

BC02 BC33

4H049

VN01 VP01 VP02 VP03 VQ35 VR21 VR43 VU17

4J002

AC001 AC011 AC031 AC051 AC061 AC081 DA048 DJ016 ER028 EU059

EV028 EV088 EV128 EV138 EV278 EV328 EX039 EX077 FD016 FD148 FD207

FD209 GN00 GN01