



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0166509
(43) 공개일자 2024년11월26일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 7/18 (2006.01) C08G 65/336 (2006.01)
C08G 77/388 (2006.01) C09D 171/02 (2006.01)
C09D 183/08 (2006.01) C09D 5/16 (2006.01)
C09K 3/18 (2006.01) G06F 3/041 (2006.01)
G09F 9/30 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
C07F 7/1804 (2018.08)
C08G 65/336 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2024-7032983
(22) 출원일자(국제) 2023년03월03일
심사청구일자 없음
- (85) 번역문제출일자 2024년10월02일
(86) 국제출원번호 PCT/JP2023/008162
(87) 국제공개번호 WO 2023/181863
국제공개일자 2023년09월28일
- (30) 우선권주장
JP-P-2022-049060 2022년03월24일 일본(JP)
- (71) 출원인
에이지씨 가부시키키가이샤
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 1초메 5방 1고
- (72) 발명자
와타나베 고키
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 1초메 5방 1고
에이지씨 가부시키키가이샤 나이
아오야마 모토시
일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 1초메 5방 1고
에이지씨 가부시키키가이샤 나이
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
특허법인코리어나

전체 청구항 수 : 총 16 항

(54) 발명의 명칭 **화합물, 조성물, 표면 처리제, 물품, 및 물품의 제조 방법**

(57) 요약

하기 기 1 과, 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 하기 기 2 를 포함하는 화합물.

기 1 : $-\text{SiR}^1_3$.

기 2 : $-\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n}$.

R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 0 ~ 2 의 정수이다.

(52) CPC특허분류

C08G 77/388 (2013.01)

C09D 171/02 (2013.01)

C09D 183/08 (2013.01)

C09D 5/16 (2013.01)

C09K 3/18 (2013.01)

G06F 3/041 (2013.01)

G09F 9/30 (2013.01)

(72) 발명자

히라타 야스히로

일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 1쵸메 5방 1고
에이지씨 가부시키키가이샤 나이

사카구치 히로노부

일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 1쵸메 5방 1고
에이지씨 가부시키키가이샤 나이

안라쿠 에이이치로

일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 1쵸메 5방 1고
에이지씨 가부시키키가이샤 나이

가와카미 시오리

일본 도쿄도 지요다쿠 마루노우치 1쵸메 5방 1고
에이지씨 가부시키키가이샤 나이

명세서

청구범위

청구항 1

하기 기 1 과, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 하기 기 2 를 포함하는 화합물.

기 1 : $-M^1R_3$

기 2 : $-Si(R^2)_nL_{3-n}$

M^1 은, Si, Sn, 또는 Ge 이고,

R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 0 ~ 2 의 정수이다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

하기 식 1 로 나타내는, 화합물.

$[R_3^1Si-(O)_r-Z]_pA(Si(R^2)_nL_{3-n})_q \cdots (1)$

식 1 중, R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, r 은 0 또는 1 이고, Z 는, 각각 독립적으로, 알킬렌 사슬 혹은 폴리알킬렌옥사이드 사슬이거나, 또는, 알킬렌 사슬과 2 개의 폴리실록산 잔기의 조합이고, A 는, 단결합 또는 p+q 개의 연결기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 각각 독립적으로, 0 ~ 2 의 정수이고, p 및 q 는 각각 독립적으로, 1 이상의 정수이다.

청구항 3

제 2 항에 있어서,

상기 식 1 중, Z 는 탄소수 10 이상의 알킬렌 사슬인, 화합물.

청구항 4

제 2 항에 있어서,

상기 식 1 중, Z 는, 반복수가 3 이상의 폴리알킬렌옥사이드 사슬인, 화합물.

청구항 5

제 2 항 내지 제 4 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 1 중, R^1 은 각각 독립적으로, 트리알킬실릴옥시기인, 화합물.

청구항 6

제 2 항 내지 제 5 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 1 중, R^1 은 각각 독립적으로, 트리메틸실릴옥시기 또는 트리에틸실릴옥시기인, 화합물.

청구항 7

제 2 항 내지 제 6 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 1 중, p 는 2 ~ 4 인, 화합물.

청구항 8

제 2 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 식 1 중, q 는 2 ~ 4 인, 화합물.

청구항 9

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물과, 액상 매체를 포함하는 조성물.

청구항 10

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는, 표면 처리제.

청구항 11

제 1 항 내지 제 8 항 중 어느 한 항에 기재된 화합물과, 액상 매체를 포함하는, 표면 처리제.

청구항 12

기재에 대하여, 제 10 항 또는 제 11 항에 기재된 표면 처리제를 사용하여 표면 처리를 실시하고, 기재 상에 표면 처리층이 형성된 물품을 제조하는, 물품의 제조 방법.

청구항 13

기재와, 상기 기재 상에 배치되고, 제 10 항에 기재된 표면 처리제로 표면 처리된 표면 처리층을 포함하는 물품.

청구항 14

제 13 항에 있어서,

광학 부재인, 물품.

청구항 15

제 13 항에 있어서,

디스플레이 또는 터치 패널인, 물품.

청구항 16

하기 기 1 과, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 하기 기 2 를 포함하는 화합물.

기 1 : $-M^1R_3$

기 2 : $-Si(R^2)_nL_{3-n}$

M^1 은, Si, Sn, 또는 Ge 이고,

R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 0 ~ 2 의 정수이다.

발명의 설명

기술 분야

본 개시는, 화합물, 조성물, 표면 처리제, 물품, 및 물품의 제조 방법에 관한 것이다.

[0001]

배경 기술

- [0002] 최근, 외관, 시인성 등의 성능을 향상시키기 위해서, 물품의 표면에 지문을 잘 묻지 않게 하는 기술이나, 오염을 없애기 쉽게 하는 기술이 요구되고 있다. 구체적인 방법으로서, 물품의 표면에 표면 처리제를 사용하여 표면 처리를 실시하는 방법이 알려져 있다.
- [0003] 예를 들어, 특허문헌 1 에는, 트리알킬실릴기를 적어도 1 개와, 가수분해성 규소기를 2 개 이상 갖는 유기 규소 화합물, 및 금속 원자에 가수분해성기가 적어도 1 개 결합하고 있는 금속 화합물을 포함하는 조성물이 기재되어 있다. 특허문헌 2 에는, 적어도 1 이상의 가수분해성기 또는 수산기를 갖는 금속계 계면 활성제, 및 그 금속계 계면 활성제와 상호 작용할 수 있는 촉매를 포함하는 유기 용매 용액에, 기재를 접촉시키는 공정을 적어도 갖는, 기재 표면에 유기 박막을 형성하는 유기 박막의 제조 방법이 기재되어 있다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0004] (특허문헌 0001) 일본 공개특허공보 2017-119849호
(특허문헌 0002) 국제 공개 제2008/016029호

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0005] 한편, 표면 처리제 등에 사용되는 조성물에는 발수성 및 내마모성의 관점에서, 추가적인 개량이 요구되고 있다.
- [0006] 본 개시는 이와 같은 사정을 감안하여 이루어진 것으로, 본 발명의 일 실시형태가 해결하고자 하는 과제는, 기재에 대하여, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 형성할 수 있는 표면 처리제로서 유용한 신규한 화합물 및 조성물을 제공하는 것에 있다.
- [0007] 본 발명의 일 실시형태가 해결하고자 하는 과제는, 기재에 대하여, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 형성할 수 있는 표면 처리제를 제공하는 것에 있다.
- [0008] 본 발명의 일 실시형태가 해결하고자 하는 과제는, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 갖는 물품 및 물품의 제조 방법을 제공하는 것에 있다.

과제의 해결 수단

- [0009] 본 개시는 이하의 양태를 포함한다.
- [0010] <1>
- [0011] 하기 기 1 과, 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 하기 기 2 를 포함하는 화합물.
- [0012] 기 1 : $-M^1R_3^1$
- [0013] 기 2 : $-Si(R^2)_nL_{3-n}$
- [0014] M^1 은, Si, Sn, 또는 Ge 이고,
- [0015] R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 0 ~ 2 의 정수이다.
- [0016] <2>
- [0017] 하기 식 1 로 나타내는, <1> 에 기재된 화합물.

- [0018] $[R^1_3Si-(O)_r-Z]_pA(Si(R^2)_nL_{3-n})_q \cdots (1)$
- [0019] 식 1 중, R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, r 은 0 또는 1 이고, Z 는, 각각 독립적으로, 알킬렌 사슬 혹은 폴리알킬렌옥사이드 사슬이거나, 또는, 알킬렌 사슬과 2 가의 폴리실록산 잔기의 조합이고, A 는, 단결합 또는 $p+q$ 가의 연결기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 각각 독립적으로, 0 ~ 2 의 정수이고, p 및 q 는 각각 독립적으로, 1 이상의 정수이다.
- [0020] <3>
- [0021] 식 1 중, Z 는 탄소수 10 이상의 알킬렌 사슬인, <2> 에 기재된 화합물.
- [0022] <4>
- [0023] 식 1 중, Z 는, 반복수가 3 이상의 폴리알킬렌옥사이드 사슬인, <2> 에 기재된 화합물.
- [0024] <5>
- [0025] 식 1 중, R^1 은 각각 독립적으로, 트리알킬실릴옥시기인, <2> ~ <4> 중 어느 1 개에 기재된 화합물.
- [0026] <6>
- [0027] 식 1 중, R^1 은 각각 독립적으로, 트리메틸실릴옥시기 또는 트리에틸실릴옥시기인, <2> ~ <5> 중 어느 1 개에 기재된 화합물.
- [0028] <7>
- [0029] 식 1 중, p 는 2 ~ 4 인, <2> ~ <6> 중 어느 1 개에 기재된 화합물.
- [0030] <8>
- [0031] 식 1 중, q 는 2 ~ 4 인, <2> ~ <7> 중 어느 1 개에 기재된 화합물.
- [0032] <9>
- [0033] <1> ~ <8> 중 어느 1 개에 기재된 화합물과, 액상 매체를 포함하는 조성물.
- [0034] <10>
- [0035] <1> ~ <8> 중 어느 1 개에 기재된 화합물을 포함하는, 표면 처리제.
- [0036] <11>
- [0037] <1> ~ <8> 중 어느 1 개에 기재된 화합물과, 액상 매체를 포함하는, 표면 처리제.
- [0038] <12>
- [0039] 기재에 대하여, <10> 또는 <11> 에 기재된 표면 처리제를 사용하여 표면 처리를 실시하고, 기재 상에 표면 처리층이 형성된 물품을 제조하는, 물품의 제조 방법.
- [0040] <13>
- [0041] 기재와, 기재 상에 배치되고, <10> 에 기재된 표면 처리제로 표면 처리된 표면 처리층을 포함하는 물품.
- [0042] <14>
- [0043] 광학 부재인, <13> 에 기재된 물품.
- [0044] <15>
- [0045] 디스플레이 또는 터치 패널인, <13> 에 기재된 물품.
- [0046] <16>
- [0047] 하기 기 1 과, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 하기 기 2 를 포함

하는 화합물.

[0048] 기 1 : $-M^1R_3^1$

[0049] 기 2 : $-Si(R^2)_nL_{3-n}$

[0050] M^1 은, Si, Sn, 또는 Ge 이고,

[0051] R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 0 ~ 2 의 정수이다.

발명의 효과

[0052] 본 발명의 일 실시형태에 의하면, 기재에 대하여, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 형성할 수 있는 표면 처리제로서 유용한 신규한 화합물 및 조성물이 제공된다.

[0053] 본 발명의 일 실시형태에 의하면, 기재에 대하여, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 형성할 수 있는 표면 처리제가 제공된다.

[0054] 본 발명의 일 실시형태에 의하면, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 갖는 물품 및 물품의 제조 방법이 제공된다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0055] 본 명세서에 있어서 「~」를 사용하여 나타낸 수치 범위에는, 「~」의 전후에 기재되는 수치가 각각 최소값 및 최대값으로서 포함된다.

[0056] 본 명세서 중에 단계적으로 기재되어 있는 수치 범위에 있어서, 1 개의 수치 범위에서 기재된 상한값 또는 하한값은, 다른 단계적인 기재의 수치 범위의 상한값 또는 하한값으로 치환해도 된다. 또, 본 명세서 중에 기재되어 있는 수치 범위에 있어서, 그 수치 범위의 상한값 또는 하한값은, 실시예에 나타나 있는 값으로 치환해도 된다.

[0057] 본 명세서에 있어서, 「표면 처리층」이란, 기재의 표면에, 표면 처리에 의해 형성되는 층을 의미한다.

[0058] 본 명세서에 있어서, 화합물 또는 기가 특정한 식 (X) 로 나타나는 경우, 당해 식 (X) 로 나타내는 화합물 또는 기를 각각 화합물 (X) 혹은 화합물 X, 및 기 (X) 혹은 기 X 로 기재하는 경우가 있다.

[0059] [화합물]

[0060] 본 개시의 화합물은, 하기 기 1 과, 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 하기 기 2 를 포함한다.

[0061] 기 1 : $-M^1R_3^1$

[0062] 기 2 : $-Si(R^2)_nL_{3-n}$

[0063] M^1 은, Si, Sn, 또는 Ge 이고, R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 0 ~ 2 의 정수이다.

[0064] 본 개시의 화합물을, 표면 처리제로서 사용한 경우에, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리제를 형성할 수 있다. 이 이유는 확실하지 않지만, 이하와 같이 추측된다.

[0065] 본 개시의 화합물에서는, 기 2 가 포함됨으로써, 기재와의 밀착성이 높고, 기재 상에 표면 처리층을 형성할 수 있다. 또, 기 1 이 포함됨으로써 발수성을 부여할 수 있고, 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조가 포함됨으로써, 분자간 상호 작용이 작용하여, 패킹 구조를 형성하기 때문에, 내마모성을 부여할 수 있다.

[0066] 특허문헌 1 에 기재된 화합물은, 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조를 포함하지 않기 때문에, 표면 처리제로서 사용한 경우에, 표면 처리층의 내마모성이 불충분하다고 생각된다. 특허문헌 2 에 기

재된 화합물은, 기 1 을 포함하지 않기 때문에, 표면 처리제로서 사용한 경우에, 표면 처리층의 발수성이 불충분하다고 생각된다.

[0067] 이하, 본 개시의 화합물에 대하여, 상세하게 설명한다.

[0068] 본 개시의 화합물은, 기 1 과, 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 하기 기 2 를 포함하고, 기 1, 기 2, 및 상기 부분 구조 이외의 구조를 포함하고 있어도 된다. 예를 들어, 본 개시의 화합물은 오르가노실록산 잔기를 포함하고 있어도 되고, 포함하지 않아도 된다.

[0069] (기 1)

[0070] 본 개시의 화합물은, 상기 기 1 을 포함한다. 화합물 중, 기 1 은 1 개만 포함되어 있어도 되고, 2 개 이상 포함되어 있어도 된다. 기 1 은 1 개의 기이기 때문에, 화합물의 말단에 위치한다.

[0071] 기 1 : $-M^1R^1_3$

[0072] M^1 은, Si, Sn, 또는 Ge 이다.

[0073] R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이다.

[0074] 기 1 이 1 분자 중에 복수 있는 경우, 복수의 기 1 은, 동일해도 되고, 서로 상이해도 된다. 원료의 입수 용이성, 및 화합물의 제조 용이성의 관점에서는, 복수의 기 1 은, 동일한 것이 바람직하다.

[0075] Si, Sn, 및 Ge 는 모두 제 14 족 원소이기 때문에, 동일한 효과를 발휘하지만, M^1 은, 원료의 입수 용이성의 관점에서, Si 인 것이 바람직하다.

[0076] R^1 로 나타내는 탄화수소기로는, 예를 들어, 지방족 탄화수소기 및 방향족 탄화수소기를 들 수 있다. 그 중에서도, 탄화수소기는, 지방족 탄화수소기가 바람직하고, 알킬기가 보다 바람직하다. 알킬기는, 직사슬형 알킬기, 분기사슬형 알킬기, 및 고리형 알킬기 중 어느 것이어도 되지만, 직사슬형 알킬기가 바람직하고, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 또는 n-부틸기가 보다 바람직하고, 메틸기가 더욱 바람직하다.

[0077] R^1 로 나타내는 트리알킬실릴옥시기에 포함되는 알킬기는, 직사슬형 알킬기, 분기사슬형 알킬기, 및 고리형 알킬기 중 어느 것이어도 되지만, 직사슬형 알킬기가 바람직하고, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 또는 n-부틸기가 보다 바람직하고, 메틸기가 더욱 바람직하다. R^1 이 트리알킬실릴옥시기인 경우, 3 개의 알킬실릴옥시기는 동일해도 되고, 서로 상이해도 되지만, 제조 용이성의 관점에서, 동일한 것이 바람직하다.

[0078] 기 1 로는, 예를 들어, 메틸디에틸실릴기, 메틸에틸프로필실릴기, 메틸에틸부틸실릴기, 메틸디프로필실릴기, 메틸프로필부틸실릴기, 메틸디부틸실릴기, 디메틸에틸실릴기, 디메틸프로필실릴기, 디메틸부틸실릴기, 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, 트리-n-프로필실릴기, 트리- 이소프로필실릴기, 및 이들의 기를 갖는 트리알킬실릴옥시기를 들 수 있다.

[0079] 그 중에서도, 표면 처리층의 발수성을 향상시키는 관점에서, 기 1 에 있어서의 R^1 은 트리알킬실릴옥시기가 바람직하고, 트리메틸실릴옥시기 또는 트리에틸실릴옥시기가 보다 바람직하다.

[0080] (기 2)

[0081] 본 개시의 화합물은, 상기 기 2 를 포함한다. 화합물 중, 기 2 는 1 개만 포함되어 있어도 되고, 2 개 이상 포함되어 있어도 된다. 예를 들어, 1 ~ 18 개여도 되고, 2 ~ 12 개여도 되고, 2 ~ 8 개여도 된다. 기 2 는 1 개의 기이기 때문에, 화합물의 말단에 위치한다.

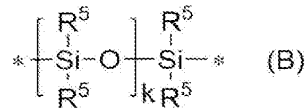
[0082] 기 2 : $-Si(R^2)_nL_{3-n}$

[0083] R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 0 ~ 2 의 정수이다.

[0084] 기 2 가 1 분자 중에 복수 있는 경우, 복수의 기 2 는, 동일해도 되고, 서로 상이해도 된다. 원료의 입수 용이성, 및 화합물의 제조 용이성의 관점에서는, 복수의 기 2 는, 동일한 것이 바람직하다.

- [0085] R^2 는, 탄화수소기이고, 포화 탄화수소기가 바람직하다. R^2 의 탄소수는, 1 ~ 6 이 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하고, 1 ~ 2 가 더욱 바람직하다.
- [0086] L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이다.
- [0087] 가수분해성기는, 가수분해 반응에 의해 수산기가 되는 기이다. 즉, Si-L 로 나타내는 가수분해성을 갖는 실릴기는, 가수분해 반응에 의해 Si-OH 로 나타내는 실란올기가 된다. 실란올기는, 또한 실란올기 사이에서 반응하여 Si-O-Si 결합을 형성한다. 또, 실란올기는, 기재의 표면에 존재하는 산화물에서 유래하는 실란올기와 탈수 축합 반응하여, Si-O-Si 결합을 형성할 수 있다.
- [0088] 가수 분해성기로는, 예를 들어, 알콕시기, 아릴옥시기, 할로젠 원자, 아실기, 아실옥시기, 및 이소시아나토기(-NCO) 를 들 수 있다. 알콕시기는, 탄소수 1 ~ 4 의 알콕시기인 것이 바람직하다. 아릴옥시기는, 탄소수 3 ~ 10 의 아릴옥시기인 것이 바람직하다. 단, 아릴옥시기의 아릴기는, 헤테로아릴기를 포함한다. 할로젠 원자는, 염소 원자인 것이 바람직하다. 아실기는, 탄소수 1 ~ 6 의 아실기인 것이 바람직하다. 아실옥시기는, 탄소수 1 ~ 6 의 아실옥시기인 것이 바람직하다.
- [0089] 그 중에서도, L 은, 화합물의 제조 용이성의 관점에서, 탄소수 1 ~ 4 의 알콕시기 또는 할로젠 원자인 것이 바람직하다. L 은, 도포시의 아웃 가스가 적고, 화합물의 보존 안정성이 보다 우수한 점에서, 탄소수 1 ~ 4 의 알콕시기인 것이 바람직하고, 에톡시기 또는 메톡시기가 보다 바람직하다.
- [0090] n 은, 0 ~ 2 의 정수이고, 0 또는 1 이 바람직하고, 0 이 보다 바람직하다. L 이 복수 존재함으로써, 표면 처리층의 기재에 대한 밀착성이 보다 강고해진다.
- [0091] n 이 1 이하인 경우, 1 분자 중에 존재하는 복수의 L 은, 동일해도 되고, 서로 상이해도 된다. 원료의 입수 용이성, 및 화합물의 제조 용이성의 관점에서, 복수의 L 은 동일한 것이 바람직하다. n 이 2 인 경우, 1 분자 중에 존재하는 복수의 R^2 는 동일해도 되고, 서로 상이해도 된다. 원료의 입수 용이성, 및 화합물의 제조 용이성의 관점에서, 복수의 R^2 는 동일한 것이 바람직하다.
- [0092] (알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조)
- [0093] 본 개시의 화합물은, 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조를 포함한다. 부분 구조는, 기 1 과 기 2 의 사이에 존재하는 것이 바람직하다. 기 1 과 부분 구조, 및 기 2 와 부분 구조는, 직접 결합하고 있어도 되고, 다른 구조를 개재하여 결합하고 있어도 된다.
- [0094] 알킬렌 사슬의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 2 이상이 바람직하고, 3 이상이 보다 바람직하고, 10 이상이 더욱 바람직하다. 알킬렌 사슬의 탄소수의 상한값은 특별히 한정되지 않지만, 예를 들어, 80 이고, 30 이 바람직하다. 구체적으로는, 알킬렌 사슬의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 3 ~ 30 이 보다 바람직하고, 4 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 5 ~ 15 가 특히 바람직하다.
- [0095] 알킬렌 사슬은, 직사슬형, 분기사슬형 및 고리형 중 어느 것이어도 된다.
- [0096] 그 중에서도, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 알킬렌 사슬은, 직사슬형인 것이 바람직하다.
- [0097] 기 1 과 알킬렌 사슬은 직접 결합하고 있어도 되고, 다른 구조를 개재하여 결합하고 있어도 된다. 예를 들어, 기 1 과 알킬렌 사슬 사이에는, 오르가노폴리실록산 잔기 (예를 들어, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기) 가 포함되어 있어도 되고, 포함되어 있지 않아도 된다.
- [0098] 예를 들어, 기 1 과 알킬렌 사슬은, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 개재하여, 결합하고 있어도 된다. 기 1, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기, 알킬렌 사슬의 순서로 배치되어 있는 경우, 기 1 과 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기 사이에, 다른 구조가 포함되어 있어도 된다. 기 1 과 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기 사이에, 예를 들어, 산소 원자 또는 알킬렌 사슬이 배치되어 있어도 된다.
- [0099] 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기는, 하기 식 B 로 나타내는 것이 바람직하다.
- [0100] 식 B 중, R^5 는, 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, k 는 1 이상의 정수이다.

[0101] [화학식 1]



[0102]

[0103] R^5 로 나타내는 탄화수소기로는, 예를 들어, 지방족 탄화수소기 및 방향족 탄화수소기를 들 수 있다. 그 중에서도, 탄화수소기는, 지방족 탄화수소기가 바람직하고, 알킬기가 보다 바람직하다. 알킬기는, 직사슬형 알킬기, 분기사슬형 알킬기, 및 고리형 알킬기 중 어느 것이어도 되지만, 직사슬형 알킬기가 바람직하고, 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 또는 n-부틸기가 보다 바람직하고, 메틸기가 더욱 바람직하다.

[0104] k 는 1 이상의 정수이고, 2 ~ 500 인 것이 바람직하고, 8 ~ 300 인 것이 보다 바람직하고, 15 ~ 60 인 것이 더욱 바람직하다. 내마모성이 우수한 점에서는, 9 ~ 50 이 바람직하고, 11 ~ 30 이 보다 바람직하고, 11 ~ 25 가 특히 바람직하다.

[0105] 알킬렌 사슬과, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기의 조합은, 하기 식 C1, C2, 또는 C3 으로 나타내는 것이 바람직하다.

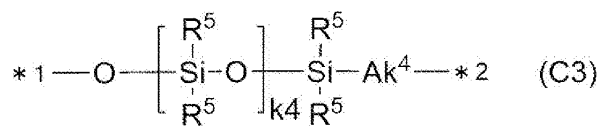
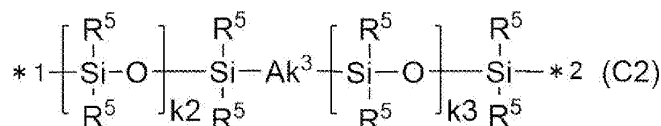
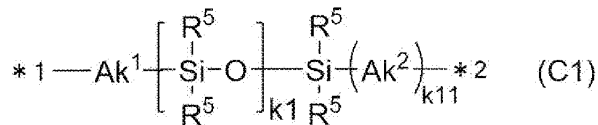
[0106] 식 C1 중, Ak^1 및 ak^2 는 각각 독립적으로, 알킬렌 사슬을 의미한다. R^5 는, 식 B 에 있어서의 R^5 와 동일하다. $k1$ 은 1 이상의 정수이다.

[0107] 식 C2 중, ak^3 은 알킬렌 사슬을 의미한다. R^5 는, 식 B 에 있어서의 R^5 와 동일하다. $k2$ 및 $k3$ 은 각각 독립적으로, 1 이상의 정수이다.

[0108] 식 C3 중, ak^4 는 알킬렌 사슬을 의미한다. R^5 는, 식 B 에 있어서의 R^5 와 동일하다. $k4$ 는 1 이상의 정수이다.

[0109] 식 C1, C2, 및 C3 에 있어서, *1 은 기 1 측과 연결되고, *2 는 기 2 측과 연결된다.

[0110] [화학식 2]



[0111]

[0112] 식 C1 중, ak^1 로 나타내는 알킬렌 사슬의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 2 이상이 바람직하고, 4 이상이 보다 바람직하다. 알킬렌 사슬의 탄소수의 상한값은 특별히 한정되지 않지만, 예를 들어, 30 이다.

[0113] ak^2 로 나타내는 알킬렌 사슬의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 1 ~ 30 이 바람직하고, 3 ~ 30 이 보다 바람직하고, 4 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 5 ~ 15 가 특히 바람직하다.

[0114] 알킬렌 사슬은, 직사슬형, 분기사슬형 및 고리형 중 어느 것이어도 된다.

[0115] 그 중에서도, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 알킬렌 사슬은, 직사슬형인 것이 바람직하다.

[0116] $k1$ 은 1 이상의 정수이고, 2 ~ 500 인 것이 바람직하고, 8 ~ 300 인 것이 보다 바람직하고, 15 ~ 60 인 것이

더욱 바람직하다. 내마모성이 우수한 점에서는, 9 ~ 50 이 바람직하고, 11 ~ 30 이 보다 바람직하고, 11 ~ 25 가 특히 바람직하다.

[0117] k_{11} 은 0 또는 1 이다.

[0118] 식 C2 중, Ak^3 으로 나타내는 알킬렌 사슬의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 1 이상이 바람직하고, 2 ~ 10 이 보다 바람직하고, 2 ~ 6 이 더욱 바람직하다.

[0119] 알킬렌 사슬은, 직사슬형, 분기사슬형 및 고리형 중 어느 것이어도 된다.

[0120] 그 중에서도, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 알킬렌 사슬은, 직사슬형인 것이 바람직하다.

[0121] k_2 및 k_3 은 각각 독립적으로, 1 이상의 정수이고, 2 ~ 500 인 것이 바람직하고, 8 ~ 300 인 것이 보다 바람직하고, 15 ~ 60 인 것이 더욱 바람직하다. 내마모성이 우수한 점에서는, 9 ~ 50 이 바람직하고, 11 ~ 30 이 보다 바람직하고, 11 ~ 25 가 특히 바람직하다.

[0122] 식 C3 중, Ak^4 로 나타내는 알킬렌 사슬의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 1 ~ 30 이 바람직하고, 3 ~ 30 이 보다 바람직하고, 4 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 5 ~ 15 가 특히 바람직하다.

[0123] 알킬렌 사슬은, 직사슬형, 분기사슬형 및 고리형 중 어느 것이어도 된다.

[0124] 그 중에서도, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 알킬렌 사슬은, 직사슬형인 것이 바람직하다.

[0125] k_4 는 1 이상의 정수이고, 2 ~ 500 인 것이 바람직하고, 8 ~ 300 인 것이 보다 바람직하고, 15 ~ 60 인 것이 더욱 바람직하다. 내마모성이 우수한 점에서는, 9 ~ 50 이 바람직하고, 11 ~ 30 이 보다 바람직하고, 11 ~ 25 가 특히 바람직하다.

[0126] 그 중에서도, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 알킬렌 사슬과 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기의 조합은, 식 C3 으로 나타내는 것이 바람직하다.

[0127] 폴리알킬렌옥사이드 사슬은, 하기 식 A 로 나타낸다.

[0128] $(XO)_m \cdots (A)$

[0129] 식 A 중, X 는, 각각 독립적으로, 알킬렌기이다.

[0130] 알킬렌기의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 1 ~ 20 이 바람직하고, 2 ~ 6 이 보다 바람직하다.

[0131] 알킬렌기는, 직사슬형, 분기사슬형 및 고리형 중 어느 것이어도 된다.

[0132] (XO) 의 구체예로는, $-CH_2O-$, $-C_2H_4O-$, $-C_3H_6O-$, $-C_4H_8O-$, $-C_5H_{10}O-$, $-C_6H_{12}O-$, $-CH(CH_3)CH_2O-$, $-CH(CH_3)CH_2CH_2O-$, $-cycloC_4H_6O-$, $-cycloC_5H_8O-$, 및 $-cycloC_6H_{10}O-$ 를 들 수 있다.

[0133] 여기서, $-cycloC_4H_6-$ 는, 시클로부탄디일기를 의미한다. 시클로부탄디일기로는, 시클로부탄-1,2-디일기, 및 시클로부탄-1,3-디일기를 들 수 있다. $-cycloC_5H_8-$ 는, 시클로펜탄디일기를 의미한다. 시클로펜탄디일기로는, 시클로펜탄-1,2-디일기, 및 시클로펜탄-1,3-디일기를 들 수 있다. $-cycloC_6H_{10}-$ 는, 시클로헥산디일기를 의미한다. 시클로헥산디일기로는, 시클로헥산-1,2-디일기, 시클로헥산-1,3-디일기, 및 시클로헥산-1,4-디일기를 들 수 있다.

[0134] (XO) 의 반복수 m 은, 2 이상의 정수이고, 3 ~ 200 의 정수가 보다 바람직하고, 5 ~ 150 의 정수가 더욱 바람직하고, 5 ~ 100 의 정수가 특히 바람직하고, 10 ~ 50 의 정수가 가장 바람직하다.

[0135] $(XO)_m$ 은, 2 종 이상의 (XO) 를 포함하고 있어도 된다.

[0136] 2 종 이상의 (XO) 의 결합 순서는 한정되지 않고, 랜덤, 교호, 및 블록 중 어느 것에 배치되어 있어도 된다.

- [0137] 2 종 이상의 (XO) 를 포함한다는 것은, 화합물 중에 있어서, 탄소수가 상이한 2 종 이상의 (XO) 가 존재하는 것, 및 탄소수가 동일해도 측사슬의 유무나 측사슬의 종류 (예를 들어, 측사슬의 수, 측사슬의 탄소수 등) 가 상이한 2 종 이상의 (XO) 가 존재하는 것을 말한다.
- [0138] 2 종 이상의 (XO) 의 배치에 대해서는, 예를 들어, $\{(CH_2O)_{m21}(C_2H_4O)_{m22}\}$ 로 나타내는 구조는, m21 개의 (CH_2O) 와 m22 개의 (C_2H_4O) 가 랜덤하게 배치되어 있는 것을 나타낸다. 또, $(C_2H_4O-C_3H_6O)_{m25}$ 로 나타내는 구조는, m25 개의 (C_2H_4O) 와 m25 개의 (C_3H_6O) 가 교대로 배치되어 있는 것을 나타낸다.
- [0139] 그 중에서도, $(XO)_m$ 은, $[(CH_2O)_{m11}(C_2H_4O)_{m12}(OC_3H_6)_{m13}(OC_4H_8)_{m14}(C_5H_{10}O)_{m15} \cdot (C_6H_{12}O)_{m16}(cycloC_4H_6-O)_{m17}(cycloC_5H_8-O)_{m18}(cycloC_6H_{10}-O)_{m19}]$ 가 바람직하다.
- [0140] m11, m12, m13, m14, m15, m16, m17, m18 및 m19 는, 각각 독립적으로, 0 이상의 정수이고, 100 이하가 바람직하다.
- [0141] m11+m12+m13+m14+m15+m16+m17+m18+m19 는 2 이상의 정수이고, 2 ~ 200 의 정수가 보다 바람직하고, 5 ~ 150 의 정수가 보다 바람직하고, 5 ~ 100 의 정수가 더욱 바람직하고, 10 ~ 50 의 정수가 특히 바람직하다.
- [0142] 그 중에서도, m12 는 2 이상의 정수가 바람직하고, 2 ~ 200 의 정수가 특히 바람직하다.
- [0143] 또, C_3H_6 , C_4H_8 , C_5H_{10} , 및 C_6H_{12} 는, 직사슬형이어도 되고, 분기사슬형이어도 되지만, 표면 처리층의 내마모성을 향상시키는 관점에서, 직사슬형이 바람직하다.
- [0144] 또한, 상기 식은 단위의 종류와 그 수를 나타내는 것이고, 단위의 배열을 나타내는 것은 아니다. 즉, m11 ~ m19 는 단위의 수를 나타내는 것이고, 예를 들어, $(CH_2O)_{m11}$ 은, (CH_2O) 단위가 m11 개 연속한 블록을 나타내는 것은 아니다. 동일하게, $(CH_2O) \sim (cycloC_6H_{10}-O)$ 의 기재 순서는, 그 기재 순서대로 그것들이 배열되어 있는 것을 나타내는 것은 아니다.
- [0145] 상기 식에 있어서, m11 ~ m19 의 2 이상이 0 이 아닌 경우 (즉, $(XO)_m$ 이 2 종 이상의 단위로 구성되어 있는 경우), 상이한 단위의 배열은, 랜덤 배열, 교호 배열, 블록 배열 및 그것들 배열의 조합 중 어느 것이어도 된다.
- [0146] $(XO)_m$ 은, 하기의 구조를 갖는 것이 바람직하다.
- [0147] $(C_2H_4O)_{m21}$,
- [0148] $(C_3H_6O)_{m22}$,
- [0149] $(C_2H_4O)_{m23}(C_3H_6O)_{m24}$,
- [0150] $(C_2H_4O-C_3H_6O)_{m25}$.
- [0151] 단, m21 은 2 이상의 정수이고, m22 는 2 이상의 정수이고, m23 및 m24 는 각각 독립적으로, 1 이상의 정수이고, m25 는, 1 이상의 정수이고, m26 및 m27 은 각각 독립적으로, 1 이상의 정수이다.
- [0152] 부분 구조의 수평균 분자량 (Mn) 은, 400 ~ 18,000 이 바람직하고, 500 ~ 15,000 이 보다 바람직하고, 600 ~ 10,000 이 특히 바람직하다.
- [0153] Mn 이 1,000 이상이면, 화합물의 분자 사슬의 유동성이 높아지므로, 표면 처리층의 내마모성이 보다 우수하다.
- [0154] 본 개시의 화합물은, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성이 보다 우수한 점에서, 하기 식 1 로 나타내는 것이 바람직하다.
- [0155] $[R^1_3M^1-(O)_r-Z]_pA(Si(R^2)_nL_{3-n})_q \cdots (1)$
- [0156] 식 1 중, M^1 은, Si, Sn, 또는 Ge 이고, R^1 은 각각 독립적으로, 탄화수소기 또는 트리알킬실릴옥시기이고, r 은 0 또는 1 이고, Z 는, 각각 독립적으로, 알킬렌 사슬 혹은 폴리알킬렌옥사이드 사슬이거나, 또는, 알킬렌 사

슬과 2 개의 폴리실록산 잔기의 조합이고, A 는, 단결합 또는 $p+q$ 개의 연결기이고, R^2 는 각각 독립적으로, 탄화수소기이고, L 은 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기이고, n 은 각각 독립적으로, 0 ~ 2 의 정수이고, p 및 q 는 각각 독립적으로, 1 이상의 정수이다.

- [0157] 식 1 에 있어서의 R^1 및 M^1 은, 상기 기 1 에 있어서의 R^1 및 M^1 과 동일하기 때문에, 설명을 생략한다.
- [0158] 식 1 중, M^1 은 Si 가 바람직하다.
- [0159] 식 1 중, R^1 은 트리알킬실릴옥시기가 바람직하고, 트리메틸실릴옥시기 또는 트리에틸실릴옥시기가 보다 바람직하다.
- [0160] 식 1 에 있어서의 R^2 , L, 및 n 은, 상기 기 2 에 있어서의 R^2 , L, 및 n 과 동일하기 때문에, 설명을 생략한다.
- [0161] Z 로 나타내는 폴리알킬렌옥사이드 사슬은, 부분 구조인 폴리알킬렌옥사이드 사슬과 동일하기 때문에, 설명을 생략한다.
- [0162] Z 는, 알킬렌 사슬인 것이 바람직하다. 알킬렌 사슬의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 2 이상이 바람직하고, 3 이상이 보다 바람직하고, 10 이상이 더욱 바람직하다. 알킬렌 사슬의 탄소수의 상한값은 특별히 한정되지 않지만, 예를 들어, 80 이고, 30 이 바람직하다. 구체적으로는, 알킬렌 사슬의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 3 ~ 30 이 보다 바람직하고, 4 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 5 ~ 15 가 특히 바람직하다.
- [0163] Z 가, 알킬렌 사슬과 2 개의 폴리실록산 잔기의 조합인 경우, 「 $R^1_3M^1-(O)_r-$ 」과 결합하는 측은 알킬렌 사슬이어도 되고, 2 개의 폴리실록산 잔기여도 된다.
- [0164] 또, Z 는, $-Z^{11}-Z^{12}-$ 로 나타내고, Z^{11} 은 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기이고, Z^{12} 는 알킬렌 사슬인 것이 바람직하다.
- [0165] Z^{11} 로 나타내는 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기는, 상기 식 B 로 나타내는 것이 바람직하다.
- [0166] Z^{12} 로 나타내는 알킬렌 사슬의 탄소수는, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 향상시키는 관점에서, 1 ~ 30 이 바람직하고, 3 ~ 30 이 보다 바람직하고, 4 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 5 ~ 15 가 특히 바람직하다.
- [0167] 식 1 중, A 는, 단결합 또는 $p+q$ 개의 연결기이다.
- [0168] 단, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, A 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌기는 아니다.
- [0169] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, A 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌옥사이드기는 아니다.
- [0170] A 로는, 본 개시의 효과를 저해하지 않는 기이면 되고, 예를 들어, 에테르성 산소 원자 또는 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 갖고 있어도 되는 알킬렌기, 탄소 원자, 질소 원자, 규소 원자, 2 ~ 8 개의 오르가노폴리실록산 잔기, 및 후술하는 식 (3-1A), 식 (3-1B), 식 (3-1A-1) ~ (3-1A-7) 내지 $Si(R^2)_nL_{3-n}$ 을 제외한 기를 들 수 있다.
- [0171] 또, A 는, 후술하는 기 (g2-1) ~ 기 (g2-14) 여도 된다.
- [0172] p 는, 1 이상의 정수이다. 표면 처리층의 발수성이 보다 우수한 점에서, p 는 1 ~ 6 인 것이 바람직하고, 2 ~ 4 인 것이 바람직하다.
- [0173] p 가 2 이상인 경우, 복수의 $[R^1_3Si-(O)_r-Z]$ 는 동일해도 되고, 서로 상이해도 된다.
- [0174] q 는, 1 이상의 정수이다. 표면 처리층의 내마모성이 보다 우수한 점에서, q 는, 1 ~ 15 인 것이 바람직하고, 1 ~ 6 인 것이 보다 바람직하고, 2 ~ 4 인 것이 더욱 바람직하고, 2 또는 3 인 것이 특히 바람직하다.
- [0175] q 가 2 이상인 경우, 복수의 $[Si(R^2)_nL_{3-n}]$ 은 동일해도 되고, 서로 상이해도 된다.

- [0176] 식 1 에 있어서의 $A(\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n})_q$ 로 나타내는 기는, 기 (3-1A) 또는 기 (3-1B) 가 바람직하고, 기 (3-1A) 가 보다 바람직하다.
- [0177] $-\text{Q}^a-\text{X}^{31}(-\text{Q}^b-\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n})_h(-\text{R}^{31})_i \cdots$ (3-1A)
- [0178] $-\text{Q}^c-[\text{CH}_2\text{C}(\text{R}^{32})(-\text{Q}^d-\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n})]_y-\text{R}^{33} \cdots$ (3-1B)
- [0179] 또한, 식 (3-1A) 및 식 (3-1B) 중, R^2 , L, 및 n 의 정의는, 상기 서술한 바와 같다.
- [0180] 식 (3-1A) 중, Q^a 는, 단결합 또는 2 개의 연결기이다.
- [0181] 단, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, Q^a 의 Z 와 결합하는 측의 말단은, 알킬렌기는 아니다.
- [0182] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, Q^a 의 Z 와 결합하는 측의 말단은, 알킬렌옥사이드기는 아니다.
- [0183] 2 개의 연결기로는, 예를 들어, 2 개의 탄화수소기, 2 개의 복소 고리기, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{SO}_2-$, $-\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{C}(\text{O})-$, $-\text{Si}(\text{R}^a)_2-$ 및 이들을 2 종 이상 조합한 기를 들 수 있다.
- [0184] 상기 2 개의 탄화수소기로는, 2 개의 포화 탄화수소기, 2 개의 방향족 탄화수소기, 알케닐렌기, 알키닐렌기여도 된다. 2 개의 포화 탄화수소기는, 직사슬형, 분기사슬형 또는 고리형이어도 되고, 예를 들어, 알킬렌기를 들 수 있다. 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 4 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 5 ~ 15 가 특히 바람직하다. 또, 2 개의 방향족 탄화수소기로는, 탄소수 5 ~ 20 의 것이 바람직하고, 예를 들어, 페닐렌기를 들 수 있다. 그 이외에도, 탄소수 2 ~ 20 의 알케닐렌기, 탄소수 2 ~ 20 의 알키닐렌기여도 된다.
- [0185] 상기 R^a 는, 알킬기 (바람직하게는 탄소수 1 ~ 10), 또는, 페닐기이다. 상기 R^d 는, 수소 원자 또는 알킬기 (바람직하게는 탄소수 1 ~ 10) 이다.
- [0186] 또한, 상기 이들을 2 종 이상 조합한 기로는, 예를 들어, $-\text{OC}(\text{O})-$, $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(\text{O})\text{S}-$, $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})\text{O}-$, $-\text{OC}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{SO}_2-$, $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{OC}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, 에테르성 산소 원자를 갖는 알킬렌기, $-\text{S}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{OC}(\text{O})-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{C}(\text{O})\text{S}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, 알킬렌기- $\text{Si}(\text{R}^a)_2$ -페닐렌기- $\text{Si}(\text{R}^a)_2$ 를 들 수 있다.
- [0187] 그 중에서도, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우에는, Q^a 는, 알킬렌기 이외의 2 개의 탄화수소기, 2 개의 복소 고리기, $-\text{O}-$, $-\text{S}-$, $-\text{SO}_2-$, $-\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{C}(\text{O})-$, $-\text{Si}(\text{R}^a)_2-$, $-\text{OC}(\text{O})-$, $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$, $-\text{C}(\text{O})\text{S}-$, $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})\text{O}-$, $-\text{OC}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^d)-$, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{SO}_2-$, $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{OC}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, 에테르성 산소 원자를 갖는 알킬렌기, $-\text{S}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{OC}(\text{O})-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{C}(\text{O})\text{S}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, 또는 $-\text{SO}_2\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기가 바람직하고, $-\text{OC}(\text{O})-$, $-\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{OC}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, 에테르성 산소 원자를 갖는 알킬렌기, $-\text{S}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{C}(\text{O})\text{S}-$ 를 갖는 알킬렌기, $-\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, 또는 $-\text{N}(\text{R}^d)\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{R}^d)-$ 를 갖는 알킬렌기가 보다 바람직하고, $-\text{C}(\text{O})\text{O}-$ 를 갖는 알킬렌기, 또

는 $-C(O)N(R^d)-$ 를 갖는 알킬렌기가 더욱 바람직하다.

[0188] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우에는, Q^a 는, 2 개의 탄화수소기, 2 개의 복소 고리기, $-SO_2-$, $-C(O)-$, $-Si(R^a)_2-$, $-C(O)O-$, $-C(O)S-$, $-C(O)N(R^d)-$, $-SO_2N(R^d)-$, $-C(O)N(R^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, $-C(O)O-$ 를 갖는 알킬렌기, $-SO_2N(R^d)-$ 를 갖는 알킬렌기, 알킬렌기- $-Si(R^a)_2-$ -페닐렌기- $-Si(R^a)_2$ 가 바람직하고, $-C(O)-$ 가 보다 바람직하다.

[0189] 식 (3-1A) 중, X^{31} 은, 단결합, 알킬렌기, 탄소 원자, 질소 원자, 규소 원자, 2 ~ 8 개의 오르가노폴리실록산 잔기, 또는 $(h+i+1)$ 개의 고리를 갖는 기이다.

[0190] 단, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬, 또한, Q^a 가 단결합인 경우, X^{31} 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌기는 아니다.

[0191] 또, Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬, 또한, Q^a 가 단결합인 경우, X^{31} 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 폴리알킬렌옥사이드기는 아니다. 상기 이외의 경우, X^{31} 의 말단은 알킬렌기여도 되고, 알킬렌옥사이드기여도 된다.

[0192] 또한, 상기 알킬렌기는, $-O-$, 실페닐렌 골격기, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기 또는 디알킬실릴렌기를 갖고 있어도 된다. 알킬렌기는, $-O-$, 실페닐렌 골격기, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기 및 디알킬실릴렌기로 이루어지는 군에서 선택되는 기를 복수 갖고 있어도 된다.

[0193] X^{31} 로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 20 이 바람직하고, 1 ~ 10 이 보다 바람직하다.

[0194] 2 ~ 8 개의 오르가노폴리실록산 잔기로는, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기, 및 후술하는 $(w+1)$ 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 들 수 있다.

[0195] 식 (3-1A) 중, X^{31} 이 $(h+i+1)$ 개의 고리를 갖는 기인 경우, Q^a , $(-Q^b-Si(R^2)_nL_{3-n})$ 및 R^{31} 은, 그 고리를 구성하는 원자에 직접 결합하고 있다. 단, 그 고리는 오르가노폴리실록산 고리 이외의 고리이다.

[0196] X^{31} 에 있어서의 고리는, 단고리, 축합 다고리, 가교 고리, 스피로 고리 및 집합 다고리 중 어느 것이어도 되고, 고리를 구성하는 원자는, 탄소 원자만으로 이루어지는 탄소 고리여도 되고, 2 개 이상의 원자수를 갖는 헤테로 원자와 탄소 원자로 이루어지는 헤테로 고리여도 된다. 또, 고리를 구성하는 원자간의 결합은, 단결합이어도 되고, 다중 결합이어도 된다. 또한 고리는 방향족성의 고리여도 되고, 비방향족성의 고리여도 된다.

[0197] 단고리로는, 4 원 고리 ~ 8 원 고리가 바람직하고, 5 원 고리 및 6 원 고리가 보다 바람직하다. 축합 다고리로는, 4 원 고리 ~ 8 원 고리의 2 이상이 축합된 축합 다고리가 바람직하고, 5 원 고리 및 6 원 고리에서 선택되는 고리의 2 또는 3 개 결합된 축합 다고리, 및 5 원 고리 및 6 원 고리에서 선택되는 고리의 1 또는 2 개와 4 원 고리 1 개가 결합된 축합 다고리가 보다 바람직하다. 가교 고리로는, 5 원 고리 또는 6 원 고리를 최대의 고리로 하는 가교 고리가 바람직하고, 스피로 고리로는, 4 원 고리 ~ 6 원 고리의 2 개로 이루어지는 스피로 고리가 바람직하다. 집합 다고리로는, 5 원 고리 및 6 원 고리에서 선택되는 고리의 2 또는 3 개가 단결합, 탄소 원자의 1 ~ 3 개, 또는 원자수가 2 또는 3 의 헤테로 원자 1 개를 개재하여 결합된 집합 다고리가 바람직하다. 또한, 집합 다고리에 있어서는, 각 고리에 Q^a , $(-Q^b-Si(R^2)_nL_{3-n})$ 및 R^{31} ($i = 1$ 이상인 경우) 중 어느 것이 결합되어 있는 것이 바람직하다.

[0198] 상기 고리를 구성하는 헤테로 원자로는, 질소 원자, 산소 원자 및 황 원자가 바람직하고, 질소 원자 및 산소 원자가 보다 바람직하다. 고리를 구성하는 헤테로 원자의 수는 3 개 이하가 바람직하다. 또, 고리를 구성하는 헤테로 원자의 수가 2 개 이상인 경우, 그들의 헤테로 원자는 상이해도 된다.

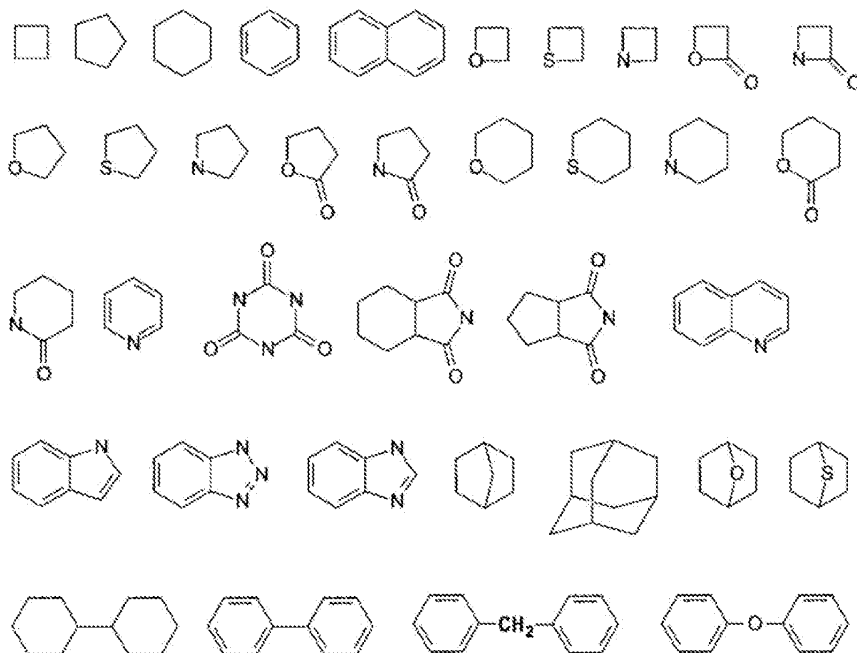
[0199] X^{31} 에 있어서의 고리로는, 화합물을 제조하기 쉽고, 표면 처리층의 내마모성이 더욱 우수한 점에서, 3 ~ 8 원 고리의 지방족 고리, 벤젠 고리, 3 ~ 8 원 고리의 헤테로 고리, 이들의 고리 중 2 또는 3 개가 축합된 축합 고리, 5 원 고리 또는 6 원 고리를 최대의 고리로 하는 가교 고리, 및 이들의 고리 중 2 개 이상을 갖고, 연결기가 단결합, 탄소수 3 이하의 알킬렌기, 산소 원자 또는 황 원자인 집합 다고리로 이루어지는 군에서 선택되는 1

종이 바람직하다.

[0200] 바람직한 고리는, 벤젠 고리, 5 원 또는 6 원의 지방족 고리, 질소 원자 또는 산소 원자를 갖는 5 원 또는 6 원의 헤테로 고리, 및 5 원 또는 6 원의 탄소 고리와 4 ~ 6 원의 헤테로 고리의 총합 고리이다.

[0201] 구체적인 고리로는, 이하에 나타내는 고리와, 1,3-시클로헥사디엔 고리, 1,4-시클로헥사디엔 고리, 안트라센 고리, 시클로프로판 고리, 테카하이드로나프탈렌 고리, 노르보르넨 고리, 노르보르나디엔 고리, 푸란 고리, 피롤 고리, 티오펜 고리, 피라진 고리, 모르폴린 고리, 아지리딘 고리, 이소퀴놀린 고리, 옥사졸 고리, 이소옥사졸 고리, 티아졸 고리, 이미다졸 고리, 피라졸 고리, 피란 고리, 피리다진 고리, 피리미딘 고리, 및 인텐 고리를 들 수 있다. 또한, 이하에는, 옥소기 (=O) 를 갖는 고리도 나타낸다.

[0202] [화학식 3]



[0203]

[0204] X^{31} 에 있어서의 고리를 구성하는 원자의 고리를 구성하지 않는 결합손은, Q^a , $(-Q^b-Si(R^2)_{nL3-n})$ 또는 R^{31} 에 결합하는 결합손이다. 잔여의 결합손이 있는 경우에는, 잔여의 결합손은, 수소 원자 또는 치환기에 결합하고 있다. 그 치환기로는, 할로젠 원자, 알킬기(탄소-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자를 포함하고 있어도 된다), 시클로알킬기, 알케닐기, 알릴기, 알콕시기, 옥소기(=O) 등을 들 수 있다.

[0205] 또, 고리를 구성하는 탄소 원자의 1 개가, Q^a , $(-Q^b-Si(R^2)_nL_{3-n})$ 또는 R^{31} 에 결합하는 결합손을 2 개 갖는 경우, 그 1 개의 탄소 원자에 Q^a 와 $(-Q^b-Si(R^2)_nL_{3-n})$ 이 결합하고 있어도 되고, 2 개의 $(-Q^b-Si(R^2)_nL_{3-n})$ 이 결합하고 있어도 된다. Q^a 와, $(-Q^b-Si(R^2)_nL_{3-n})$ 또는 R^{31} 은 다른 고리 구성 원자에 결합하고 있는 것이 바람직하다.

h 개의 $(-\text{Q}^{\text{b}}-\text{Si}(\text{R}^2)_{\text{n}}\text{L}_{3-\text{n}})$ 은 각각 별개의 고리 구성 원자에 결합해도 되고, 그 중의 2 개는 1 개의 고리 구성 탄소 원자에 결합해도 되고, 또한 2 개의 $(-\text{Q}^{\text{b}}-\text{Si}(\text{R}^2)_{\text{n}}\text{L}_{3-\text{n}})$ 이 결합된 고리 구성 탄소 원자는 2 개 이상 존재해도 된다. i 개의 R^{31} 은 각각 별개의 고리 구성 원자에 결합해도 되고, 그 중의 2 개는 1 개의 고리 구성 탄소 원자에 결합해도 되고, 또한 2 개의 R^{31} 이 결합된 고리 구성 탄소 원자는 2 개 이상 존재해도 된다.

[0206] 그 중에서도, X^{31} 은, 표면 처리층의 내마모성을 향상시키는 관점에서, 탄소 원자, 질소 원자, 규소 원자, 4 ~ 8 개의 오르가노폴리실록산 잔기, 또는 (h + i + 1) 개의 고리를 갖는 기가 바람직하고, 탄소 원자가 보다 바람직하다.

[0207] 식 (3-1A) 중, Q^b 는, 단결합 또는 2 개의 연결기이다.

- [0208] 2 개의 연결기의 정의는, 상기 서술한 Q^a 에서 설명한 정의와 동일한 의미이다.
- [0209] 단, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬, 또한, Q^a 및 X^{31} 이 단결합인 경우, Q^b 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌기는 아니다.
- [0210] 또, Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬, 또한, Q^a 및 X^{31} 이 단결합인 경우, Q^b 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌옥사이드기는 아니다. 상기 이외의 경우, Q^b 의 말단은 알킬렌기여도 되고, 알킬렌옥사이드기여도 된다.
- [0211] 그 중에서도, Q^b 는, 에테르성 산소 원자를 가져도 되는 알킬렌기인 것이 바람직하다. 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 되고, 2 ~ 5 여도 된다. 예를 들어 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다.
- [0212] 식 (3-1A) 중, R^{31} 은, 수소 원자, 수산기 또는 알킬기이다.
- [0213] 알킬기의 탄소수는, 1 ~ 5 가 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하고, 1 이 더욱 바람직하다.
- [0214] X^{31} 이 단결합 또는 알킬렌기인 경우, h 는 1, i 는 0 이고,
- [0215] X^{31} 이 질소 원자인 경우, h 는 1 ~ 2 의 정수이고, i 는 0 ~ 1 의 정수이고, $h+i = 2$ 를 만족하고,
- [0216] X^{31} 이 탄소 원자 또는 규소 원자인 경우, h 는 1 ~ 3 의 정수이고, i 는 0 ~ 2 의 정수이고, $h+i = 3$ 을 만족하고,
- [0217] X^{31} 이 2 ~ 8 개의 오르가노폴리실록산 잔기인 경우, h 는 1 ~ 7 의 정수이고, i 는 0 ~ 6 의 정수이고, $h+i = 1 \sim 7$ 을 만족한다.
- [0218] X^{31} 이 $(h+i+1)$ 개의 고리를 갖는 기인 경우, h 는 1 ~ 7 의 정수이고, i 는 0 ~ 6 의 정수이고, $h+i = 1 \sim 7$ 을 만족한다.
- [0219] $(-Q^b-Si(R)_nL_{3-n})$ 이 2 개 이상 있는 경우에는, 2 개 이상의 $(-Q^b-Si(R)_nL_{3-n})$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다. R^{31} 이 2 개 이상 있는 경우에는, 2 개 이상의 $(-R^{31})$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0220] 그 중에서도, 표면 처리층의 내마모성을 향상시키는 관점에서, i 는 0 인 것이 바람직하다.
- [0221] 식 (3-1A) 중, Q^a , X^{31} , 및 Q^b 가 단결합인 경우, $[Si(R^2)_nL_{3-n}]$ 은, Z 와 직접 결합하며, Z 는 알킬렌 사슬이다.
- [0222] 식 (3-1B) 중, Q^c 는, 단결합 또는 2 개의 연결기이다.
- [0223] 단, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, Q^c 의 Z 와 결합하는 측의 말단은, 알킬렌기는 아니다.
- [0224] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, Q^c 의 Z 와 결합하는 측의 말단은, 알킬렌옥사이드기는 아니다.
- [0225] 2 개의 연결기의 정의는, 상기 서술한 Q^a 에서 설명한 정의와 동일한 의미이다.
- [0226] 식 (3-1B) 중, R^{32} 는, 수소 원자 또는 탄소수 1 ~ 10 의 알킬기이고, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 수소 원자인 것이 바람직하다.
- [0227] 알킬기로는, 메틸기가 바람직하다.
- [0228] 식 (3-1B) 중, Q^d 는, 단결합 또는 알킬렌기이다. 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 10 이 바람직하고, 1 ~ 6 이 보다 바람직하다. 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, Q^d 는, 단결합 또는 CH_2- 인 것이 바람직하다.

- [0229] 식 (3-1B) 중, R^{33} 은, 수소 원자 또는 할로젠 원자이고, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 수소 원자인 것이 바람직하다.
- [0230] y 는, 1 ~ 10 의 정수이고, 1 ~ 6 의 정수인 것이 바람직하다.
- [0231] 2 개 이상의 $[CH_2C(R^{32})(-Q^d-Si(R^2)_nL_{3-n})]$ 는, 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0232] 기 (3-1A) 로는, 기 (3-1A-1) ~ (3-1A-7) 이 바람직하다.
- [0233] $-(X^{32})_{s1}-Q^{b1}-Si(R^2)_nL_{3-n} \cdots (3-1A-1)$
- [0234] $-(X^{33})_{s2}-Q^{a2}-N[-Q^{b2}-Si(R^2)_nL_{3-n}]_2 \cdots (3-1A-2)$
- [0235] $-Q^{a3}-Si(R^g)[-Q^{b3}-Si(R^2)_nL_{3-n}]_2 \cdots (3-1A-3)$
- [0236] $-[Q^e]_{s4}-Q^{a4}-(O)_{t4}-C[-(O)_{u4}-Q^{b4}-Si(R^2)_nL_{3-n}]_{3-w1}(-R^{31})_{w1} \cdots (3-1A-4)$
- [0237] $-Q^{a5}-Si[-Q^{b5}-Si(R^2)_nL_{3-n}]_3 \cdots (3-1A-5)$
- [0238] $-[Q^e]_v-Q^{a6}-Z^a[-Q^{b6}-Si(R^2)_nL_{3-n}]_{w2} \cdots (3-1A-6)$
- [0239] $-[Q^e]_{s4}-Q^{a4}-(O)_{t4}-Z^c[-(O-Q^{b4})_{u4}-Si(R^2)_nL_{3-n}]_{w3}(-OH)_{w4} \cdots (3-1A-7)$
- [0240] 또한, 식 (3-1A-1) ~ (3-1A-7) 중, R^2 , L , 및 n 의 정의는, 상기 서술한 바와 같다.
- [0241] 단, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 기 (3-1A-1) ~ (3-1A-7) 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌기는 아니다.
- [0242] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 기 (3-1A-1) ~ (3-1A-7) 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌옥사이드기는 아니다.
- [0243] 그 중에서도, 기 (3-1A) 는, 기 (3-1A-4) 가 바람직하다.
- [0244] 기 (3-1A-1) 에 있어서, X^{32} 는, $-O-$, $-S-$, $-N(R^d)-$, $-C(O)-$, $-C(O)O-$, $-C(O)S-$, $-SO_2N(R^d)-$, $-N(R^d)SO_2-$, $-N(R^d)C(O)-$, $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$, $-OC(O)N(R^d)-$, 또는 $-C(O)N(R^d)-$ 이다 (단, 식 중의 N 은 Q^{b1} 에 결합한다).
- [0245] R^d 의 정의는, 상기 서술한 바와 같다.
- [0246] $s1$ 은, 0 또는 1 이다.
- [0247] 그 중에서도, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우에는, X^{32} 는, $-O-$, $-S-$, $-N(R^d)-$, $-C(O)-$, $-C(O)O-$, $-C(O)S-$, $-SO_2N(R^d)-$, $-N(R^d)SO_2-$, $-N(R^d)C(O)-$, $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$, $-OC(O)N(R^d)-$, 또는, $-C(O)N(R^d)-$ 가 바람직하고, $-O-$, $-S-$, $-N(R^d)-$, $-C(O)O-$, $-C(O)S-$, $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$, $-OC(O)N(R^d)-$, 또는 $-C(O)N(R^d)-$ 가 보다 바람직하고, $-C(O)O-$ 또는 $-C(O)N(R^d)-$ 가 더욱 바람직하다.
- [0248] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우에는, X^{32} 는, $-C(O)O-$, $-C(O)S-$, $-SO_2N(R^d)-$, 또는 $-C(O)N(R^d)-$ 가 바람직하고, $-C(O)-$ 가 보다 바람직하다.
- [0249] Q^{b1} 은, 단결합 또는 알킬렌기이다. 또한, 알킬렌기는, $-O-$, 실페닐렌 골격기, 또는 디알킬실릴렌기를 갖고 있어도 된다. 알킬렌기는, $-O-$, 실페닐렌 골격기, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기 및 디알킬실릴렌기로 이루어지는 군에서 선택되는 기를 복수 갖고 있어도 된다.
- [0250] 또한, 알킬렌기가 $-O-$, 실페닐렌 골격기, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기 또는 디알킬실릴렌기를 갖는 경우,

탄소 원자-탄소 원자간에 이들의 기를 갖는 것이 바람직하다.

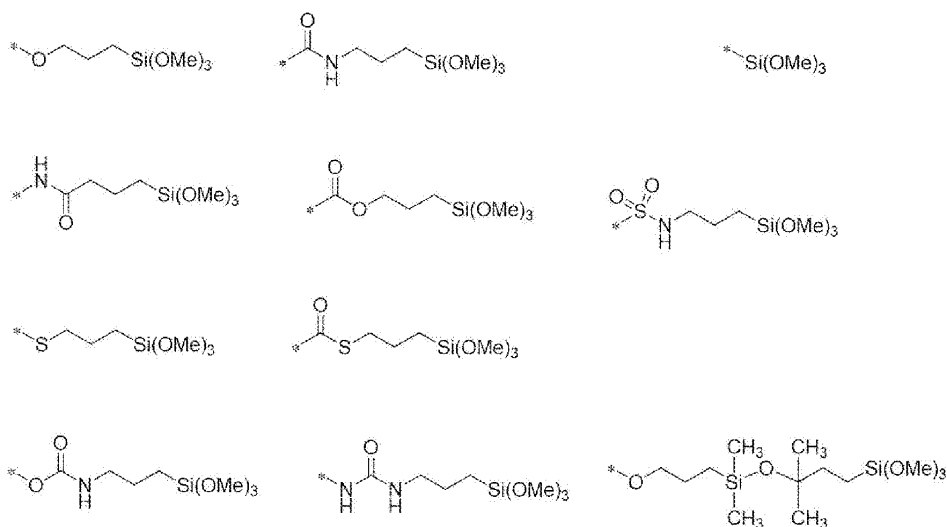
[0251] Q^{b1} 로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 6 이 특히 바람직하다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다.

[0252] 그 중에서도, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우에는, s1 은 1 인 것이 바람직하고, Q^{b1} 은, 탄소수 2 ~ 6 의 알킬렌기가 바람직하다.

[0253] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우에는, s1 은 0 인 것이 바람직하고, Q^{b1} 은, 탄소수 2 ~ 6 의 알킬렌기가 바람직하다.

[0254] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우에, 기 (3-1A-1) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

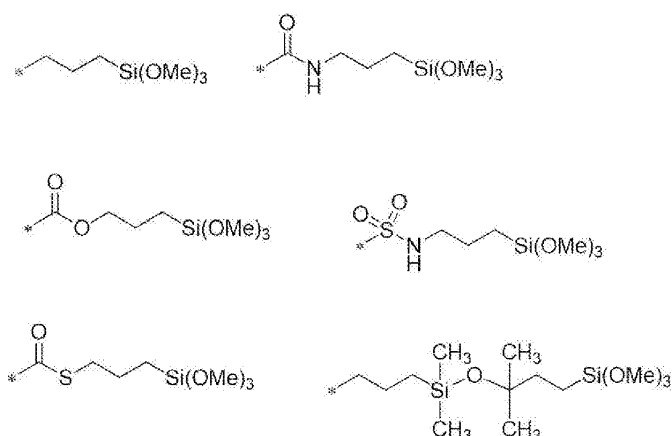
[0255] [화학식 4]



[0256]

[0257] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우에, 기 (3-1A-1) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

[0258] [화학식 5]



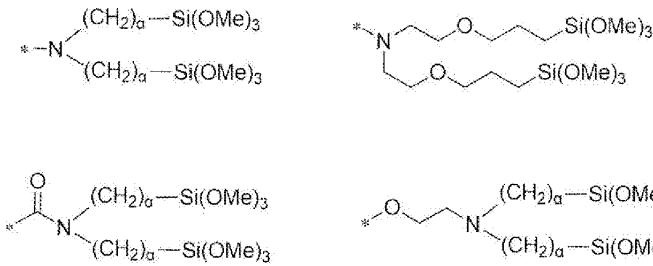
[0259]

[0260] 기 (3-1A-2) 에 있어서, X^{33} 은, -O-, -S-, -N(R^d)-, -C(O)-, -C(O)O-, -C(O)S-, -SO₂N(R^d)-, -N(R^d)SO₂-, -N(R^d)C(O)-, -N(R^d)C(O)N(R^d)-, -OC(O)N(R^d)-, 또는 -C(O)N(R^d)- 이다.

[0261] R^d 의 정의는, 상기 서술한 바와 같다.

- [0262] s_2 는, 0 또는 1 이다. s_2 는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 0 이 바람직하다.
- [0263] 그 중에서도, Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우에는, X^{33} 은, $-O-$, $-S-$, $-N(R^d)-$, $-C(O)-$, $-C(O)O-$, $-C(O)S-$, $-SO_2N(R^d)-$, $-N(R^d)SO_2-$, $-N(R^d)C(O)-$, $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$, $-OC(O)N(R^d)-$, 또는, $-C(O)N(R^d)-$ 가 바람직하다.
- [0264] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우에는, X^{33} 은, $-C(O)O-$, $-C(O)S-$, $-SO_2N(R^d)-$, 또는 $-C(O)N(R^d)-$ 가 바람직하다.
- [0265] Q^{a2} 는, 단결합, 알킬렌기, $-C(O)-$, 또는, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자, $-C(O)-$, $-C(O)O-$, $-OC(O)-$, $-C(O)N(R^d)-$, $-N(R^d)C(O)-$, $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$, $-N(R^d)C(O)O-$, $-OC(O)N(R^d)-$, $-SO_2N(R^d)-$, $-N(R^d)SO_2-$, $-C(O)N(R^d)-$, 혹은 $-NH-$ 를 갖는 기이다.
- [0266] Q^{a2} 로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 20 이 바람직하고, 1 ~ 10 이 보다 바람직하고, 1 ~ 6 이 더욱 바람직하고, 1 ~ 3 이 특히 바람직하다.
- [0267] Q^{a2} 로 나타내는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자, $-C(O)-$, $-C(O)O-$, $-OC(O)-$, $-C(O)N(R^d)-$, $-N(R^d)C(O)-$, $-N(R^d)C(O)N(R^d)-$, $-N(R^d)C(O)O-$, $-OC(O)N(R^d)-$, $-SO_2N(R^d)-$, $-N(R^d)SO_2-$, $-C(O)N(R^d)-$, 또는 $-NH-$ 를 갖는 기의 탄소수는, 2 ~ 10 이 바람직하고, 2 ~ 6 이 보다 바람직하다.
- [0268] Q^{a2} 는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 단결합이 바람직하다.
- [0269] Q^{b2} 는, 알킬렌기, 또는, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기, 에테르성 산소 원자 혹은 $-NH-$ 를 갖는 기이다.
- [0270] Q^{b2} 로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다.
- [0271] Q^{b2} 로 나타내는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기, 에테르성 산소 원자 또는 $-NH-$ 를 갖는 기의 탄소수는, 2 ~ 10 이 바람직하고, 2 ~ 6 이 보다 바람직하다.
- [0272] Q^{b2} 로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, $-CH_2CH_2CH_2-$, $-CH_2CH_2OCH_2CH_2CH_2-$ 가 바람직하다 (단, 우측이 Si 에 결합한다).
- [0273] 2 개의 $[-Q^{b2}-Si(R^2)_nL_{3-n}]$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0274] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 기 (3-1A-2) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다. 또, 식 중, 반응성 실릴기에 결합하는 $(CH_2)_a$ 에 있어서의 a 는 메틸렌기의 수를 나타내는 정수이고, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어, 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다. 동일 화합물 중에 포함되는 복수의 a 는 동일해도 되고 상이해도 되지만, 동일한 것이 바람직하다. 예를 들어, 동일 화합물 중에 포함되는 복수의 a 가 모두 2, 3, 8, 9, 11 이다. 이하 동일하다.

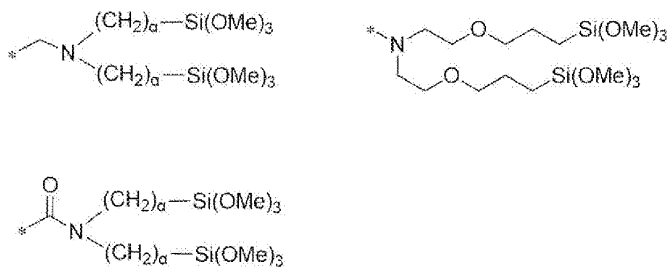
[0275] [화학식 6]



[0276]

[0277] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 기 (3-1A-2) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

[0278] [화학식 7]



[0279]

[0280] 기 (3-1A-3) 에 있어서, Q^{a3} 은, 단결합, 또는, 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기이다. 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, Q^{a3} 은, 단결합이 바람직하다.

[0281] 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 10 이 바람직하고, 2 ~ 6 이 특히 바람직하다.

[0282] R^g 는, 수소 원자, 수산기 또는 알킬기이다.

[0283] R^g 로는, 화합물을 제조하기 쉬운 관점에서는, 수소 원자 또는 알킬기가 바람직하다. 알킬기의 탄소수는 1 ~ 10 이 바람직하고, 1 ~ 4 가 보다 바람직하고, 메틸기가 더욱 바람직하다.

[0284] Q^{b3} 은, 알킬렌기, 또는, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자 혹은 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 갖는 기이다.

[0285] Q^{b3} 으로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어, 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다.

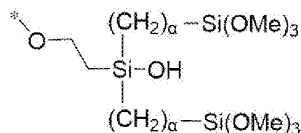
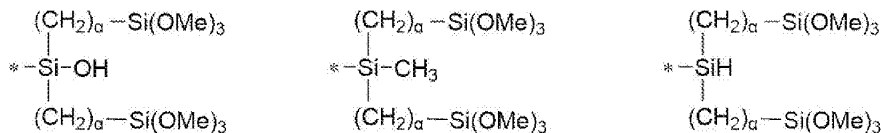
[0286] Q^{b3} 으로 나타내는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자 또는 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 갖는 기의 탄소수는, 2 ~ 20 이 바람직하고, 2 ~ 10 이 보다 바람직하고, 2 ~ 6 이 더욱 바람직하다.

[0287] Q^{b3} 은, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, -CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂-, 또는 -CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂- 가 바람직하다.

[0288] 2 개의 [-Q^{b3}-Si(R²)_nL_{3-n}] 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0289] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 기 (3-1A-3) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

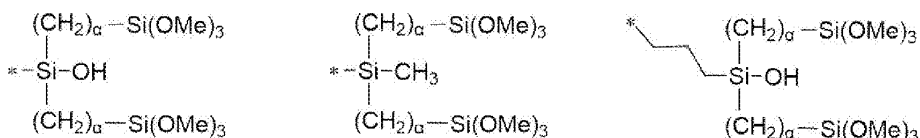
[0290] [화학식 8]



[0291]

[0292] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 기 (3-1A-3) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

[0293] [화학식 9]



[0294]

[0295] 기 (3-1A-4) 에 있어서, Q^e 는, -C(O)O-, -SO₂N(R^d)-, -N(R^d)SO₂-, -N(R^d)C(O)-, 또는, -C(O)N(R^d)- 이다.

[0296] R³¹ 의 정의는, 상기 서술한 바와 같다. w1 이 1 또는 2 인 경우, R³¹ 은 수소 원자인 것이 바람직하다.

[0297] s4 는, 0 또는 1 이다.

[0298] Q^{a4} 는, 단결합, 또는, 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기이다.

[0299] 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 20 이 바람직하고, 1 ~ 10 이 보다 바람직하고, 1 ~ 6 이 더욱 바람직하고, 1 ~ 3 이 특히 바람직하다.

[0300] t4 는, 0 또는 1 (단, Q^{a4} 가 단결합인 경우에는 0 이다) 이다.

[0301] -Q^{a4}-(O)_{t4}- 로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, s4 가 0 인 경우에는, 단결합, -CH₂O-, -CH₂OCH₂-, -CH₂OCH₂CH₂O-, -CH₂OCH₂CH₂OCH₂-, -CH₂OCH₂CH₂CH₂CH₂OCH₂- 가 바람직하고 (단, 좌측이 (XO)_m 에 결합한다), s4 가 1 인 경우에는, 단결합, -CH₂-, -CH₂CH₂- 가 바람직하다.

[0302] Q^{b4} 는, 알킬렌기이고, 상기 알킬렌기는 -O-, -C(O)N(R^d)-(R^d의 정의는, 상기 서술한 바와 같다), 실페닐렌 골격기, 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기 또는 디알킬실릴렌기를 갖고 있어도 된다.

[0303] 또한, 알킬렌기가 -O- 또는 실페닐렌 골격기를 갖는 경우, 탄소 원자-탄소 원자간에 -O- 또는 실페닐렌 골격기를 갖는 것이 바람직하다. 또, 알킬렌기가 -C(O)N(R^d)-, 디알킬실릴렌기 또는 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 갖는 경우, 탄소 원자-탄소 원자간 또는 (O)_{u4} 와 결합하는 측의 말단에 이들의 기를 갖는 것이 바람직하다.

[0304] Q^{b4} 로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어, 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다.

[0305] u4 는, 0 또는 1 이다.

[0306] -(O)_{u4}-Q^{b4}- 로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, -CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂-, -CH₂OCH₂CH₂CH₂-, -CH₂OCH₂CH₂CH₂CH₂CH₂-

, $-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{OSi}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{OSi}(\text{CH}_3)_2\text{OSi}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{PhSi}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 가 바람직하다 (단, 우측이 Si 에 결합한다).

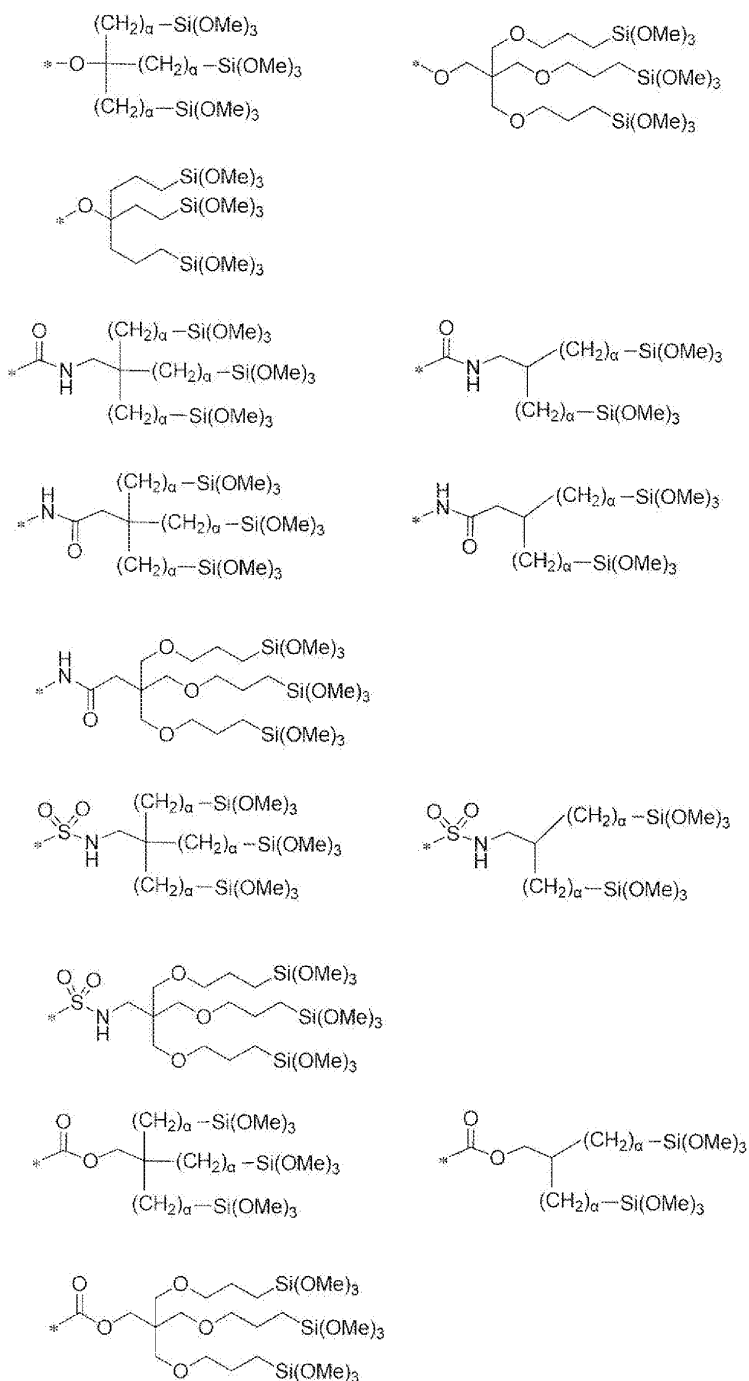
[0307] w1 은, 0 ~ 2 의 정수이고, 0 또는 1 이 바람직하고, 0 이 특히 바람직하다.

[0308] $[-(\text{O})_{u4}-\text{Q}^{\text{b4}}-\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n}]$ 이 2 개 이상 있는 경우에는, 2 개 이상의 $[-(\text{O})_{u4}-\text{Q}^{\text{b4}}-\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n}]$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0309] R^{31} 이 2 개 이상 있는 경우에는, 2 개 이상의 $(-\text{R}^{31})$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0310] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 기 (3-1A-4) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다.
하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

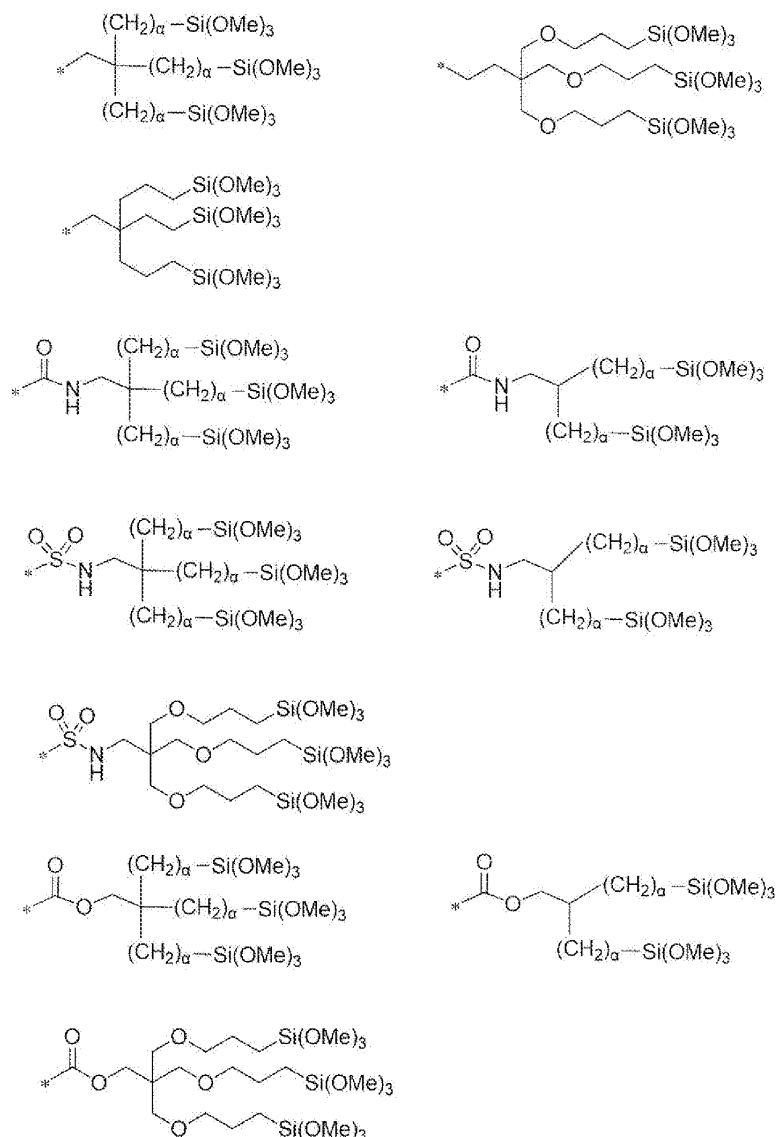
[0311] [화학식 10]



[0312]

[0313] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 기 (3-1A-4) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

[0314] [화학식 11]



[0315]

[0316] 기 (3-1A-5) 에 있어서, Q^{a5} 는, 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기이다.

[0317] 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 10 이 바람직하고, 2 ~ 6 이 특히 바람직하다.

[0318] Q^{a5} 로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, -OCH₂CH₂CH₂-, -OCH₂CH₂OCH₂CH₂CH₂-, -CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂- 가 바람직하다 (단, 우측이 Si 에 결합한다).

[0319] Q^{b5} 는, 알킬렌기, 또는, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자 혹은 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 갖는 기이다.

[0320] Q^{b5} 로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어, 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다.

[0321] Q^{b5} 로 나타내는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자 또는 2 개의 오르가

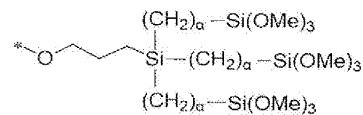
노폴리실록산 잔기를 갖는 기의 탄소수는, 2 ~ 20 이 바람직하고, 2 ~ 10 이 보다 바람직하고, 2 ~ 6 이 더욱 바람직하다.

[0322] Q^{b5} 로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 이 바람직하다 (단, 우측이 $\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n}$ 에 결합한다).

[0323] 3 개의 $[-Q^{b5}-\text{Si}(\text{R}^2)_n\text{L}_{3-n}]$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0324] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 기 (3-1A-5) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

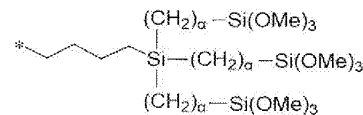
[0325] [화학식 12]



[0326]

[0327] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 기 (3-1A-5) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

[0328] [화학식 13]



[0329]

[0330] 기 (3-1A-6) 중의 Q^e 의 정의는, 상기 서술한 기 (3-1A-4) 에 있어서 정의한 바와 같다.

[0331] v 는, 0 또는 1 이다.

[0332] Q^{a6} 은, 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기이다.

[0333] 에테르성 산소 원자를 갖고 있어도 되는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 10 이 바람직하고, 2 ~ 6 이 특히 바람직하다.

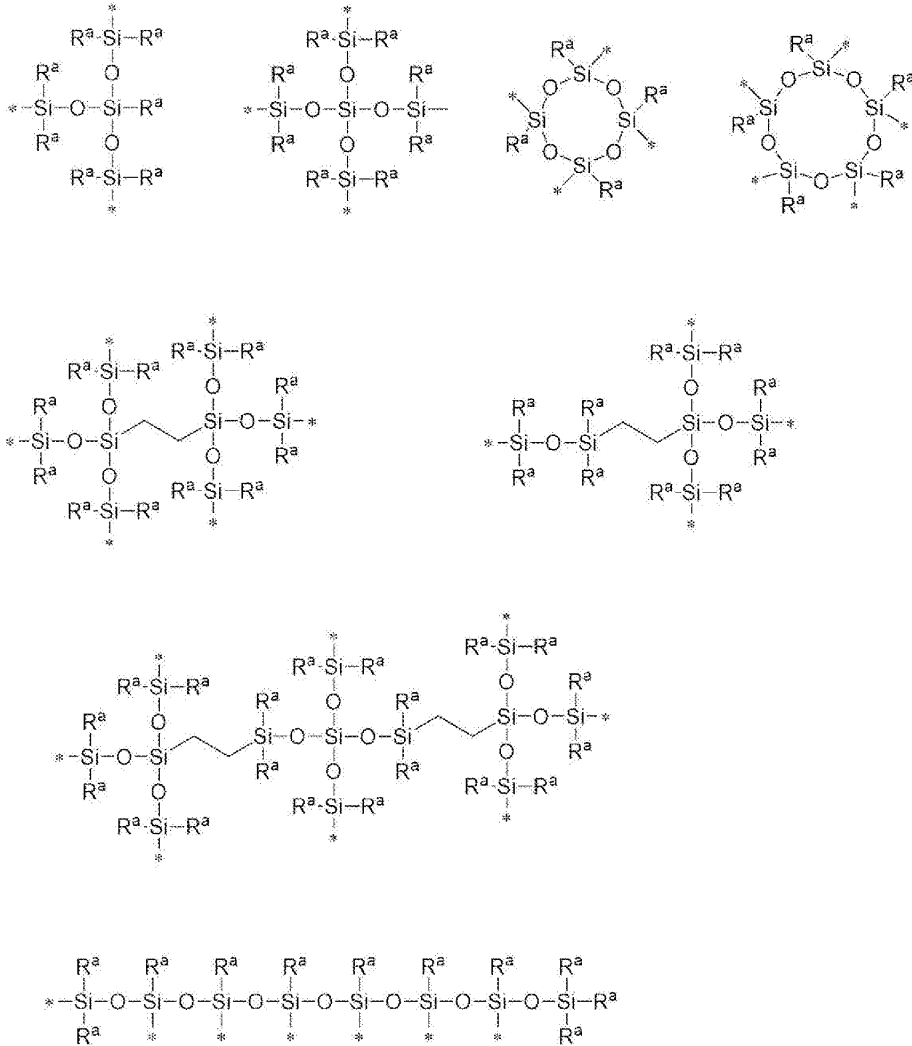
[0334] Q^{a6} 으로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 가 바람직하다 (단, 우측이 Z^a 에 결합한다).

[0335] Z^a 는, (w2+1) 가의 오르가노폴리실록산 잔기, 또는, (w2+1) 가로서, 오르가노폴리실록산 잔기와 오르가노폴리실록산 잔기 사이에 알킬렌기를 갖는 기이다.

[0336] w2 는, 2 ~ 7 의 정수이다.

[0337] (w2+1) 가의 오르가노폴리실록산 잔기, 및 (w2+1) 가로서, 오르가노폴리실록산 잔기와 오르가노폴리실록산 잔기 사이에 알킬렌기를 갖는 기로는, 하기의 기를 들 수 있다. 단, 하기 식에 있어서의 R^a 는, 상기 서술한 바와 같다. * 는, 결합 부위를 나타낸다.

[0338] [화학식 14]



[0339]

[0340] Q^{b6} 은, 알킬렌기, 또는, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자 혹은 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 갖는 기이다.

[0341] Q^{b6} 으로 나타내는 알킬렌기의 탄소수는, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어, 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 된다.

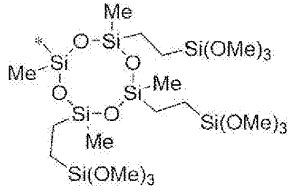
[0342] Q^{b6} 으로 나타내는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자 또는 2 개의 오르가노폴리실록산 잔기를 갖는 기의 탄소수는, 2 ~ 20 이 바람직하고, 2 ~ 10 이 보다 바람직하고, 2 ~ 6 이 더욱 바람직하다.

[0343] Q^{b6} 으로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 가 바람직하다.

[0344] $w2$ 개의 $[-Q^{b6}-\text{Si}(\text{R}^a)_n\text{L}_{3-n}]$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0345] 기 (3-1A-6) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

[0346] [화학식 15]



[0347]

[0348] 기 (3-1A-7) 에 있어서, Z^c 는 $(w_3 + w_4 + 1)$ 가의 탄화수소기이다.

[0349] w_3 은, 4 이상의 정수이다.

[0350] w_4 는, 0 이상의 정수이다.

[0351] Q^e , s_4 , Q^{a4} , t_4 , Q^{b4} , 및 u_4 의 정의 및 바람직한 범위는 기 (3-1A-4) 중의 각 부호의 정의와 동일하다.

[0352] Z^c 는 탄화수소 사슬로 이루어져도 되고, 탄화수소 사슬의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자를 가져도 되고, 탄화수소 사슬로 이루어지는 것이 바람직하다.

[0353] Z^c 의 가수는 5 ~ 20 가가 바람직하고, 5 ~ 10 가가 보다 바람직하고, 5 ~ 8 가가 더욱 바람직하고, 5 ~ 6 가가 특히 바람직하다.

[0354] Z^c 의 탄소수는 3 ~ 50 이 바람직하고, 4 ~ 40 이 보다 바람직하고, 5 ~ 30 이 더욱 바람직하다.

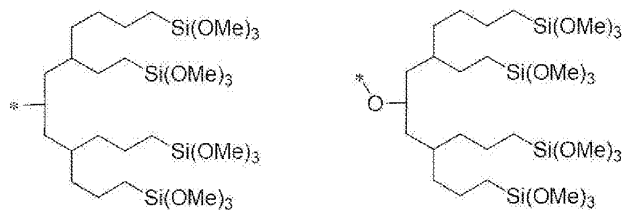
[0355] w_3 은, 4 ~ 20 이 바람직하고, 4 ~ 16 이 보다 바람직하고, 4 ~ 8 이 더욱 바람직하고, 4 ~ 5 가 특히 바람직하다.

[0356] w_4 는, 0 ~ 10 이 바람직하고, 0 ~ 8 이 보다 바람직하고, 0 ~ 6 이 더욱 바람직하고, 0 ~ 3 이 특히 바람직하고, 0 ~ 1 이 가장 바람직하다.

[0357] $[-(O-Q^{b4})_{u4}-Si(R^2)_{nL3-n}]$ 이 2 개 이상 있는 경우에는, 2 개 이상의 $[-(O-Q^{b4})_{u4}-Si(R^2)_{nL3-n}]$ 은, 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0358] Z 의 A 측 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 기 (3-1A-7) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

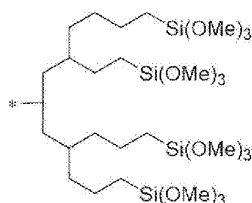
[0359] [화학식 16]



[0360]

[0361] Z 의 A 측 말단이 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 기 (3-1A-7) 의 구체예로는, 이하의 기를 들 수 있다. 하기 식 중, * 는, Z 와의 결합 위치를 나타낸다.

[0362] [화학식 17]

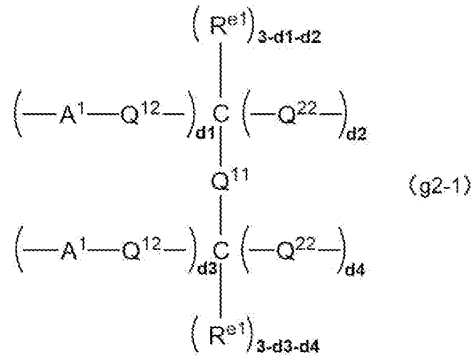


[0363]

[0364] 식 1 에 있어서의 A 는, 기 (g_2-1) (단, $j_1 = d_1 + d_3$, $g_1 = d_2 + d_4$ 이다), 기 (g_2-2) (단, $j_1 = e_1$, $g_1 = e_2$

이다), 기 (g2-3) (단, $j1 = 1$, $g1 = 2$ 이다), 기 (g2-4) (단, $j1 = h1$, $g1 = h2$ 이다), 기 (g2-5) (단, $j1 = i1$, $g1 = i2$ 이다), 기 (g2-6) (단, $j1 = 1$, $g1 = 1$ 이다), 또는, 기 (g2-7) (단, $j1 = 1$, $g1 = i3$ 이다) 이어도 된다.

[0365] [화학식 18]



[0366]

[0367] $(-A^1-Q^{12}-)_{e1} C(R^{e2})_{4-e1-e2} (-Q^{22}-)_{e2} \cdots (g2-2)$

[0368] $-A^1-Q^{13}-N(-Q^{23}-)_2 \cdots (g2-3)$

[0369] $(-A^1-Q^{14}-)_{h1} Z^1 (-Q^{24}-)_{h2} \cdots (g2-4)$

[0370] $(-A^1-Q^{15}-)_{i1} Si(R^{e3})_{4-i1-i2} (-Q^{25}-)_{i2} \cdots (g2-5)$

[0371] $-A^1-Q^{26}- (g2-6)$

[0372] $-A^1-Q^{12}-CH(-Q^{22}-)-Si(R^{e3})_{3-i3} (-Q^{25}-)_{i3} \cdots (g2-7)$

[0373] 단, 식 (g2-1) ~ (g2-7) 에 있어서는, A^1 측이 Z 와 결합하고, Q^{22} , Q^{23} , Q^{24} , Q^{25} 또는 Q^{26} 측이 $[-Si(R^2)_n L_{3-n}]$ 과 결합한다.

[0374] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, A^1 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌기는 아니다.

[0375] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, A^1 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌옥사이드기는 아니다.

[0376] A^1 은, 단결합, $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-OC(O)O-$, $-NHC(O)O-$, $-NHC(O)NR^6-$, $-O-$ 또는 SO_2NR^6- 이다.

[0377] Q^{11} 은, 단결합, $-O-$, 알킬렌기, 또는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기이다.

[0378] Q^{12} 는, 단결합, 알킬렌기, 또는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기이고, A 가 Q^{12} 를 2 이상 갖는 경우, 2 이상의 Q^{12} 는 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0379] Q^{13} 은, 단결합 (단, A^1 은 $-C(O)-$ 이다), 알킬렌기, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기, 또는 알킬렌기의 N 측의 말단에 $-C(O)-$ 를 갖는 기이다.

[0380] Q^{14} 는, Q^{14} 가 결합하는 Z^1 에 있어서의 원자가 탄소 원자인 경우, Q^{12} 이고, Q^{14} 가 결합하는 Z^1 에 있어서의 원자가 질소 원자인 경우, Q^{13} 이고, A^2 가 Q^{14} 를 2 이상 갖는 경우, 2 이상의 Q^{14} 는 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0381] Q^{15} 는, 알킬렌기, 또는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를

갖는 기이고, A 가 Q^{15} 를 2 이상 갖는 경우, 2 이상의 Q^{15} 는 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0382] Q^{22} 는, 알킬렌기, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기, 알킬렌기의 Si 에 접속하지 않는 측의 말단에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기, 또는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖고 또한 Si 에 접속하지 않는 측의 말단에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기이고, A 가 Q^{22} 를 2 이상 갖는 경우, 2 이상의 Q^{22} 는 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0383] Q^{23} 은, 알킬렌기, 또는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기이고, 2 개의 Q^{23} 은 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0384] Q^{24} 는, Q^{24} 가 결합하는 Z^1 에 있어서의 원자가 탄소 원자인 경우, Q^{22} 이고, Q^{24} 가 결합하는 Z^1 에 있어서의 원자가 질소 원자인 경우, Q^{23} 이고, A 가 Q^{24} 를 2 이상 갖는 경우, 2 이상의 Q^{24} 는 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0385] Q^{25} 는, 알킬렌기, 또는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기이고, A 가 Q^{25} 를 2 이상 갖는 경우, 2 이상의 Q^{25} 는 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0386] Q^{26} 은, 알킬렌기, 또는 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 또는 $O-$ 를 갖는 기이다.

[0387] Q^{22} , Q^{23} , Q^{24} , Q^{25} , Q^{26} 이 알킬렌기인 경우, 탄소수는 1 ~ 20 이 바람직하고, 1 ~ 10 이 보다 바람직하고, 1 ~ 6 이 더욱 바람직하다.

[0388] Z^1 은, Q^{14} 가 직접 결합하는 탄소 원자 또는 질소 원자를 갖고 또한 Q^{24} 가 직접 결합하는 탄소 원자 또는 질소 원자를 갖는 h1+h2 개의 고리 구조를 갖는 기이다.

[0389] R^{e1} 은, 수소 원자 또는 알킬기이고, A 가 R^{e1} 을 2 이상 갖는 경우, 2 이상의 R^{e1} 은 동일해도 되고 상이해도 된다.

[0390] R^{e2} 는, 수소 원자, 수산기, 알킬기 또는 아실옥시기이다.

[0391] R^{e3} 은, 알킬기이다. R^6 은, 수소 원자, 탄소수 1 ~ 6 의 알킬기 또는 페닐기이다.

[0392] d1 은, 0 ~ 3 의 정수이고, 1 또는 2 인 것이 바람직하다.

[0393] d2 는, 0 ~ 3 의 정수이고, 1 또는 2 인 것이 바람직하다.

[0394] d1+d2 는, 1 ~ 3 의 정수이다.

[0395] d3 은, 0 ~ 3 의 정수이고, 0 또는 1 인 것이 바람직하다.

[0396] d4 는, 0 ~ 3 의 정수이고, 2 또는 3 인 것이 바람직하다.

[0397] d3+d4 는, 1 ~ 3 의 정수이다.

[0398] d1+d3 은, 1 ~ 5 의 정수이고, 1 또는 2 인 것이 바람직하다.

[0399] d2+d4 는, 1 ~ 5 의 정수이고, 4 또는 5 인 것이 바람직하다.

[0400] e1+e2 는, 3 또는 4 이다.

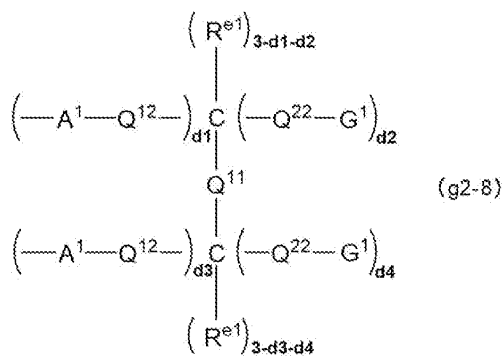
[0401] e1 은, 1 ~ 3 의 정수이고, 1 또는 2 인 것이 바람직하다.

[0402] e2 는, 1 ~ 3 의 정수이고, 2 또는 3 인 것이 바람직하다.

[0403] h1 은, 1 이상의 정수이고, 1 또는 2 인 것이 바람직하다.

- [0404] h_2 는, 1 이상의 정수이고, 2 또는 3 인 것이 바람직하다.
- [0405] i_1+i_2 는, 3 또는 4 이다.
- [0406] i_1 은, 1 ~ 3 의 정수이고, 1 또는 2 인 것이 바람직하다.
- [0407] i_2 는, 1 ~ 3 의 정수이고, 2 또는 3 인 것이 바람직하다.
- [0408] i_3 은, 2 또는 3 이다.
- [0409] Q^{11} , Q^{12} , Q^{13} , Q^{14} , Q^{15} , Q^{22} , Q^{23} , Q^{24} , Q^{25} 및 Q^{26} 의 알킬렌기의 탄소수는, 화합물을 제조하기 쉬운 점, 및 표면 처리층의 내마모성이 더욱 우수한 점에서, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 되고, 1 ~ 6 이어도 되고, 1 ~ 4 여도 된다. 단, 탄소-탄소 원자간에 특정한 결합을 갖는 경우의 알킬렌기의 탄소수의 하한값은 2 이다.
- [0410] Z^1 에 있어서의 고리 구조로는, 상기 서술한 고리 구조를 들 수 있고, 바람직한 형태도 동일하다. 또한, Z^1 에 있어서의 고리 구조에는 Q^{14} 나 Q^{24} 가 직접 결합하기 때문에, 예를 들어, 고리 구조에 알킬렌기가 연결되고, 그 알킬렌기에 Q^{14} 나 Q^{24} 가 연결되는 경우는 없다.
- [0411] R^{e1} , R^{e2} 또는 R^{e3} 의 알킬기의 탄소수는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 1 ~ 6 이 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하고, 1 ~ 2 가 특히 바람직하다.
- [0412] R^{e2} 의 아실옥시기의 알킬기 부분의 탄소수는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 1 ~ 6 이 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하고, 1 ~ 2 가 특히 바람직하다.
- [0413] h_1 은, 화합물을 제조하기 쉬운 점, 그리고, 표면 처리층의 내마모성이 더욱 우수한 점에서, 1 ~ 6 이 바람직하고, 1 ~ 4 가 보다 바람직하고, 1 또는 2 가 더욱 바람직하고, 1 이 특히 바람직하다.
- [0414] h_2 로는, 화합물을 제조하기 쉬운 점, 그리고, 표면 처리층의 내마모성이 더욱 우수한 점에서, 2 ~ 6 이 바람직하고, 2 ~ 4 가 보다 바람직하고, 2 또는 3 이 특히 바람직하다.
- [0415] A 의 다른 형태로는, 기 (g2-8) (단, $j_1 = d_1+d_3$, $g_1 = d_2 \times k_3 + d_4 \times k_3$ 이다), 기 (g2-9) (단, $j_1 = e_1$, $g_1 = e_2 \times k_3$ 이다), 기 (g2-10) (단, $j_1 = 1$, $g_1 = 2 \times k_3$ 이다), 기 (g2-11) (단, $j_1 = h_1$, $g_1 = h_2 \times k_3$ 이다), 기 (g2-12) (단, $j_1 = i_1$, $g_1 = i_2 \times k_3$ 이다), 기 (g2-13) (단, $j_1 = 1$, $g_1 = k_3$ 이다), 또는 기 (g2-14) (단, $j_1 = 1$, $g_1 = i_3 \times k_3$ 이다) 를 들 수 있다.

[0416] [화학식 19]



[0417]

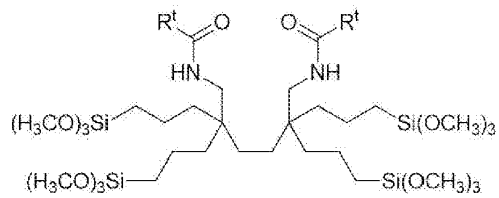
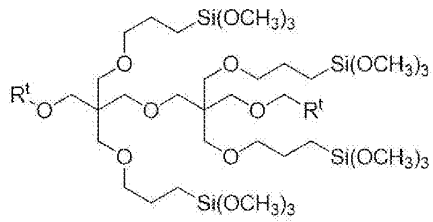
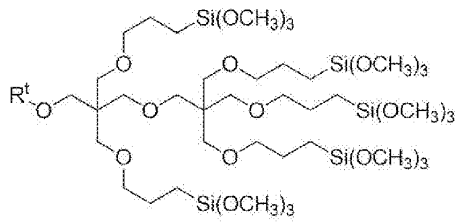
[0418] $(-A^1-Q^{12})_{e_1}C(R^{e2})_{4-e_1-e_2}(-Q^{22}-G^1)_{e_2} \cdots (g2-9)$

[0419] $-A^1-Q^{13}-N(-Q^{23}-G^1)_2 \cdots (g2-10)$

[0420] $(-A^1-Q^{14})_{h_1}Z^1(-Q^{24}-G^1)_{h_2} \cdots (g2-11)$

- [0421] $(-A^1-Q^{15})_{i1}Si(R^{e3})_{4-i1-i2}(-Q^{25}-G^1)_{i2} \cdots (g2-12)$
- [0422] $-A^1-Q^{26}-G^1 \cdots (g2-13)$
- [0423] $-A^1-Q^{12}-CH(-Q^{22}-G^1)-Si(R^{e3})_{3-i3}(-Q^{25}-G^1)_{i3} \cdots (g2-14)$
- [0424] 단, 식 (g2-8) ~ (g2-14) 에 있어서는, A^1 측이 Z 와 결합하고, G^1 측이 $[-Si(R^2)_nL_{3-n}]$ 과 결합한다.
- [0425] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, A^1 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌기는 아니다.
- [0426] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, A^1 의 Z 와 결합하는 측의 말단은 알킬렌옥사이드기는 아니다.
- [0427] G^1 은, 하기 기 (g3) 이고, A 가 갖는 2 이상의 G^1 은 동일해도 되고 상이해도 된다. G^1 이외의 부호는, 식 (g2-1) ~ (g2-7) 에 있어서의 부호와 동일하다.
- [0428] $-Si(R^8)_{3-k3}(-Q^3)_{k3} \cdots (g3)$
- [0429] 단, 기 (g3) 에 있어서는, Si 측이 Q^{22} , Q^{23} , Q^{24} , Q^{25} 및 Q^{26} 에 접속하고, Q^3 측이 $[-Si(R^2)_nL_{3-n}]$ 에 접속한다.
 R^8 은, 알킬기이다. Q^3 은, 알킬렌기, 탄소수 2 이상의 알킬렌기의 탄소-탄소 원자간에 $-C(O)NR^6-$, $-C(O)-$, $-NR^6-$ 혹은 $-O-$ 를 갖는 기, 또는 $(OSi(R^9)_2)_p-O-$ 이고, 2 이상의 Q^3 은 동일해도 되고 상이해도 된다. $k3$ 은, 2 또는 3 이다. R^6 은, 수소 원자, 탄소수 1 ~ 6 의 알킬기 또는 페닐기이다. R^9 는, 알킬기, 페닐기 또는 알콕시기이고, 2 개의 R^9 는 동일해도 되고 상이해도 된다. p 는, 0 ~ 5 의 정수이고, p 가 2 이상인 경우, 2 이상의 $(OSi(R^9)_2)$ 는 동일해도 되고 상이해도 된다.
- [0430] Q^3 의 알킬렌기의 탄소수는, 화합물을 제조하기 쉬운 점, 그리고, 표면 처리층의 내마모성이 더욱 우수한 점에서, 1 ~ 30 이 바람직하고, 1 ~ 20 이 보다 바람직하고, 2 ~ 20 이 더욱 바람직하고, 2 ~ 10 이어도 되고, 2 ~ 6 이어도 된다. 예를 들어 2, 3, 8, 9, 11 을 들 수 있다. 또, 상기 탄소수는 1 ~ 10 이어도 되고, 1 ~ 6 이어도 되고, 1 ~ 4 여도 된다. 단, 탄소-탄소 원자간에 특정한 결합을 갖는 경우의 알킬렌기의 탄소수의 하한값은 2 이다.
- [0431] R^8 의 알킬기의 탄소수는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 1 ~ 6 이 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하고, 1 ~ 2 가 더욱 바람직하다.
- [0432] R^9 의 알킬기의 탄소수는, 화합물을 제조하기 쉬운 점에서, 1 ~ 6 이 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하고, 1 ~ 2 가 더욱 바람직하다.
- [0433] R^9 의 알콕시기의 탄소수는, 화합물의 보존 안정성이 우수한 점에서, 1 ~ 6 이 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하고, 1 ~ 2 가 특히 바람직하다.
- [0434] p 는, 0 또는 1 이 바람직하다.
- [0435] 본 개시의 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다. 하기 식의 화합물은, 공업적으로 제조하기 쉽고, 취급하기 쉬우며, 표면 처리층의 발수성 및 내마모성이 더욱 우수한 점에서 바람직하다. 하기 식의 화합물에 있어서의 R^1 는, 상기 서술한 식 1 에 있어서의 $[R^1_3Si-(O)_r-Z]$ 와 동일하고, 바람직한 형태도 동일하다.
- [0436] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-1) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

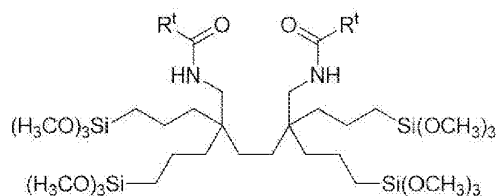
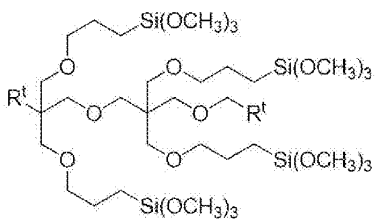
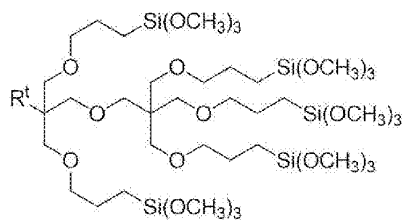
[0437] [화학식 20]



[0438]

[0439] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-1) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

[0440] [화학식 21]

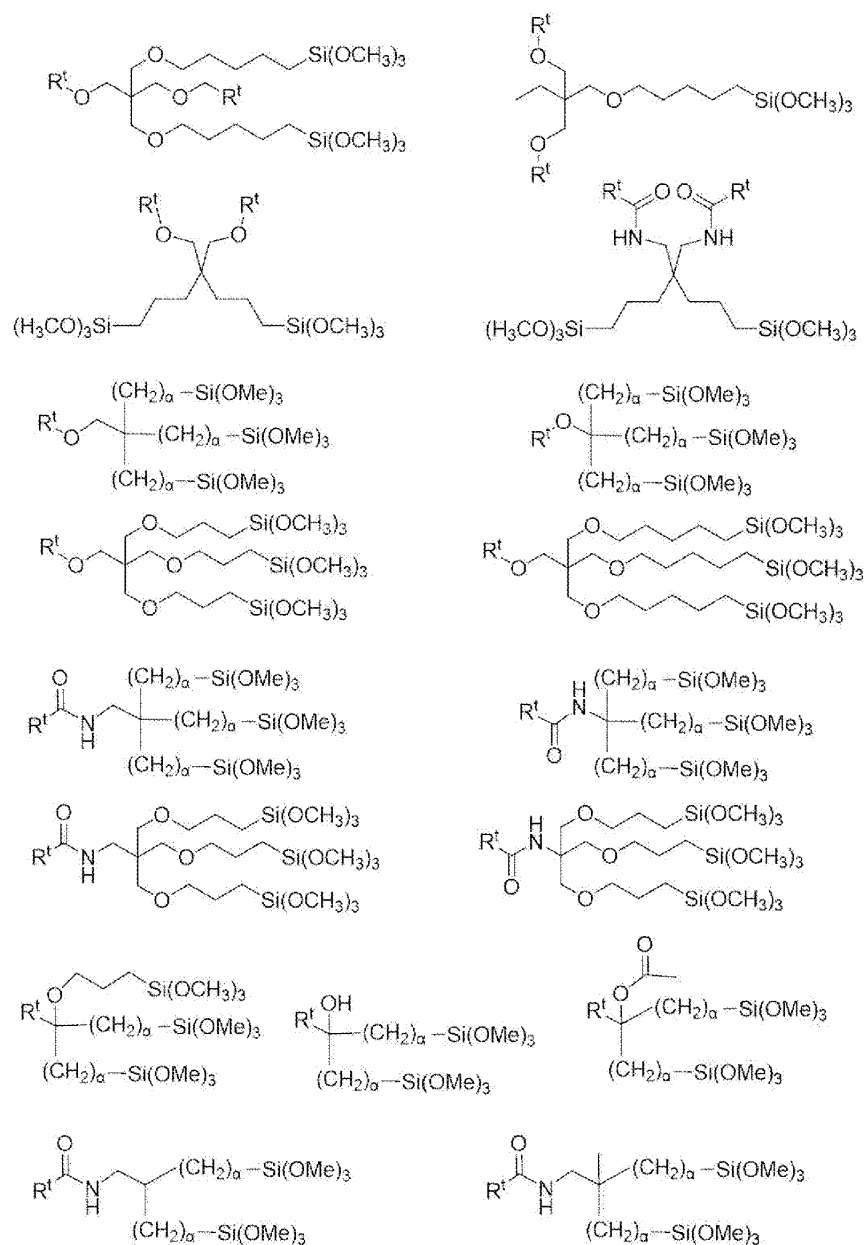


[0441]

[0442] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-2)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다. 하기 식에 있어서, Ak는 알킬기 (예를 들어, 탄소수 1 ~ 15의 알킬기)를 의미한다.

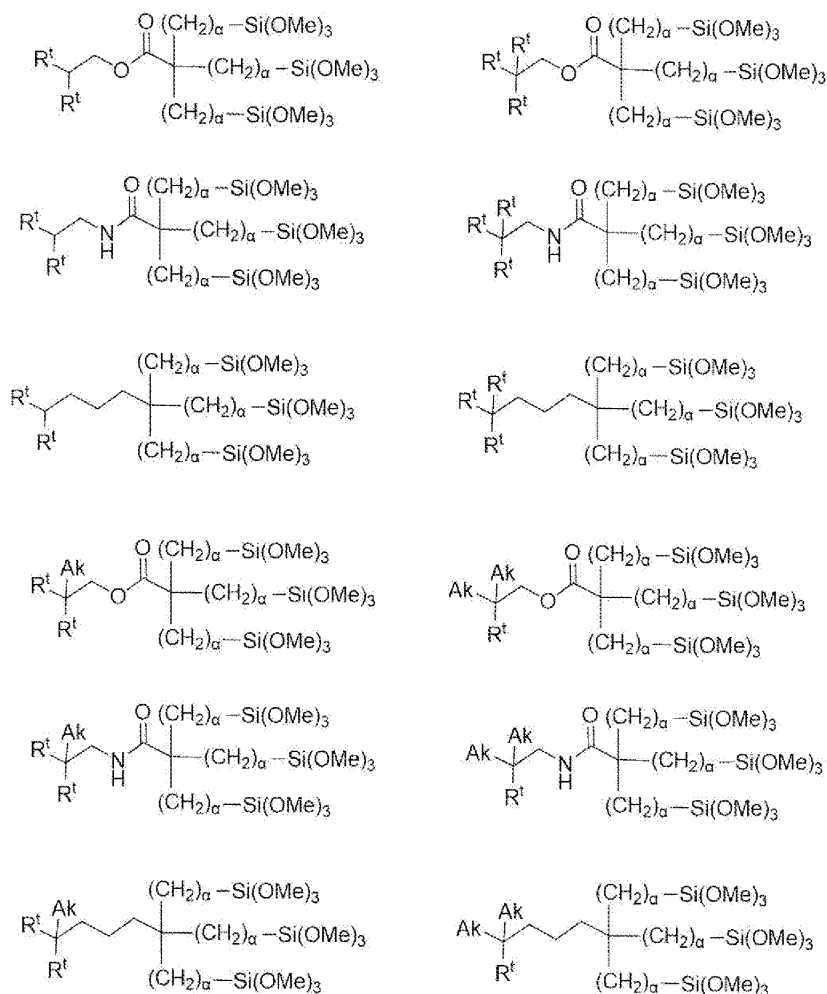
[0443]

[화학식 22]



[0444]

[0445] [화학식 23]

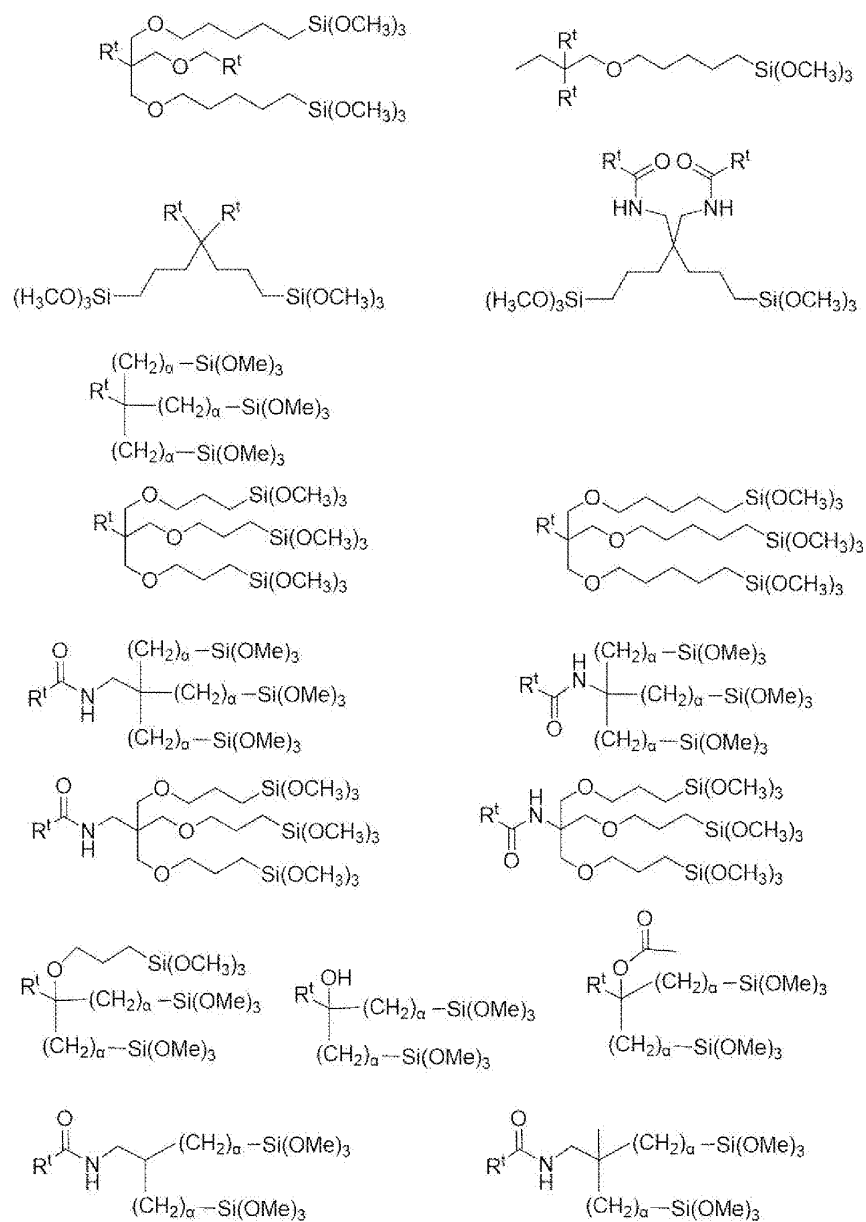


[0446]

[0447] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-2) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

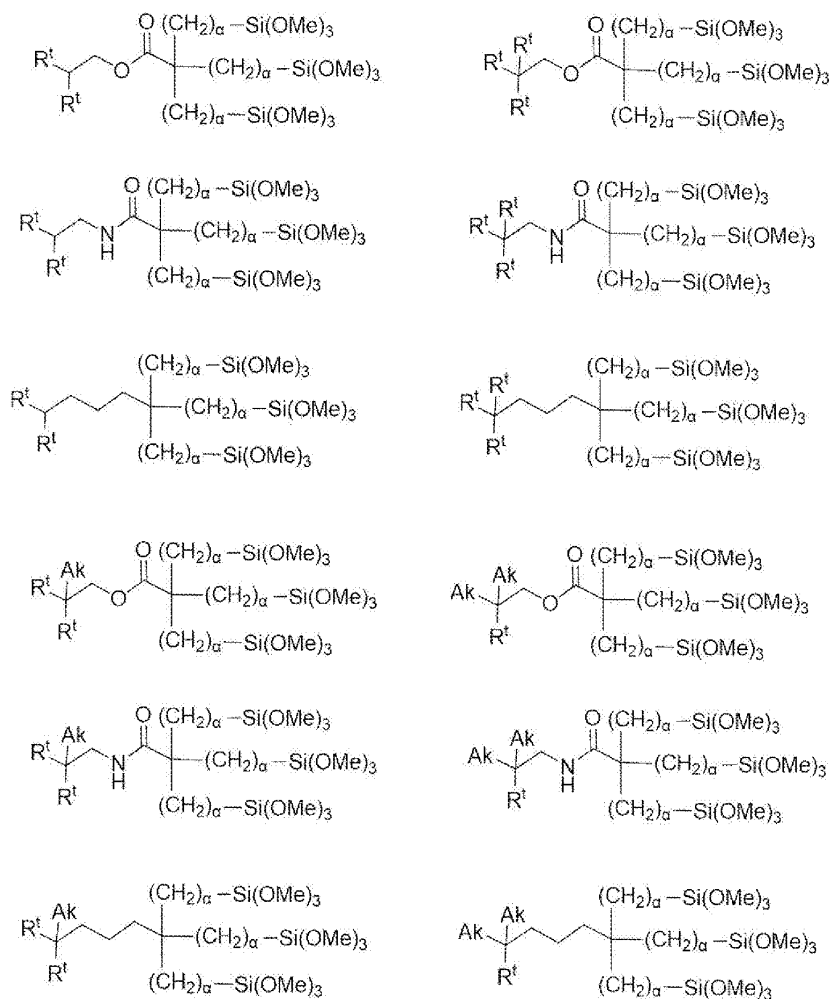
[0448]

[화학식 24]



[0449]

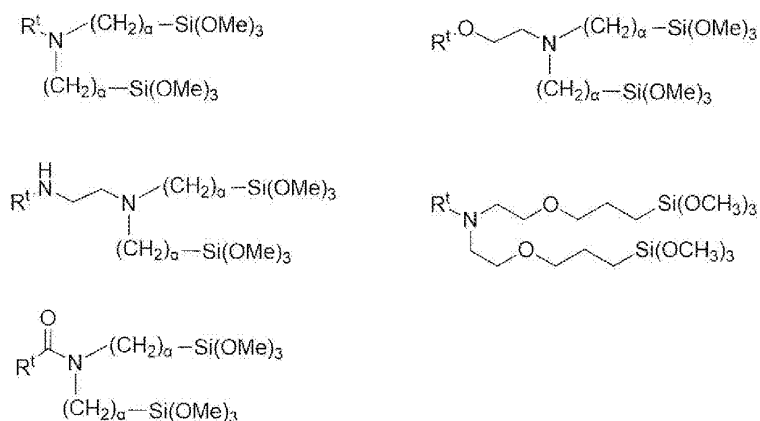
[0450] [화학식 25]



[0451]

[0452] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기(g2-3)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

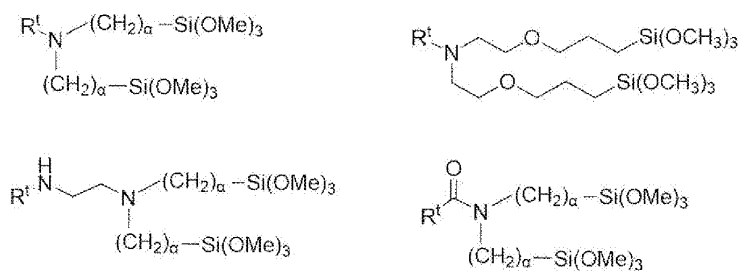
[0453] [화·학식 26]



[0454]

[0455] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-3) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

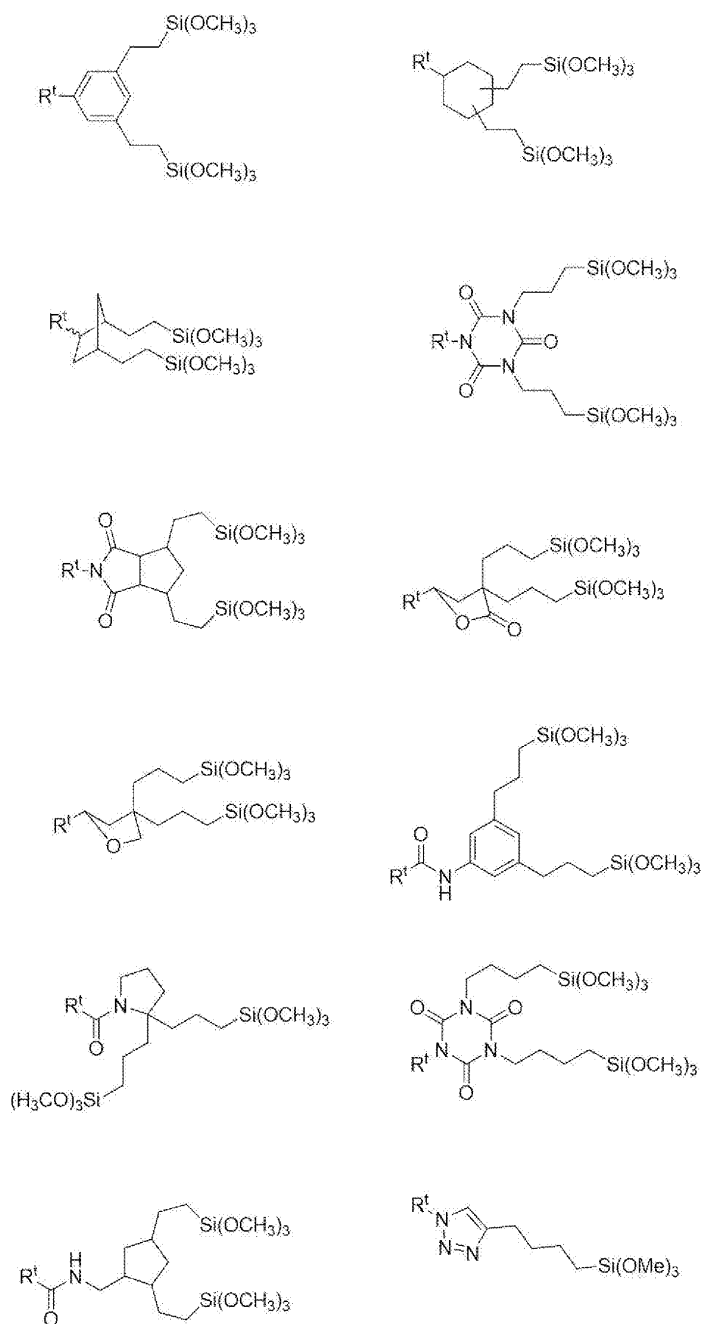
[0456] [화학식 27]



[0457]

[0458] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기($g \geq 4$)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

[0459] [화학식 28]



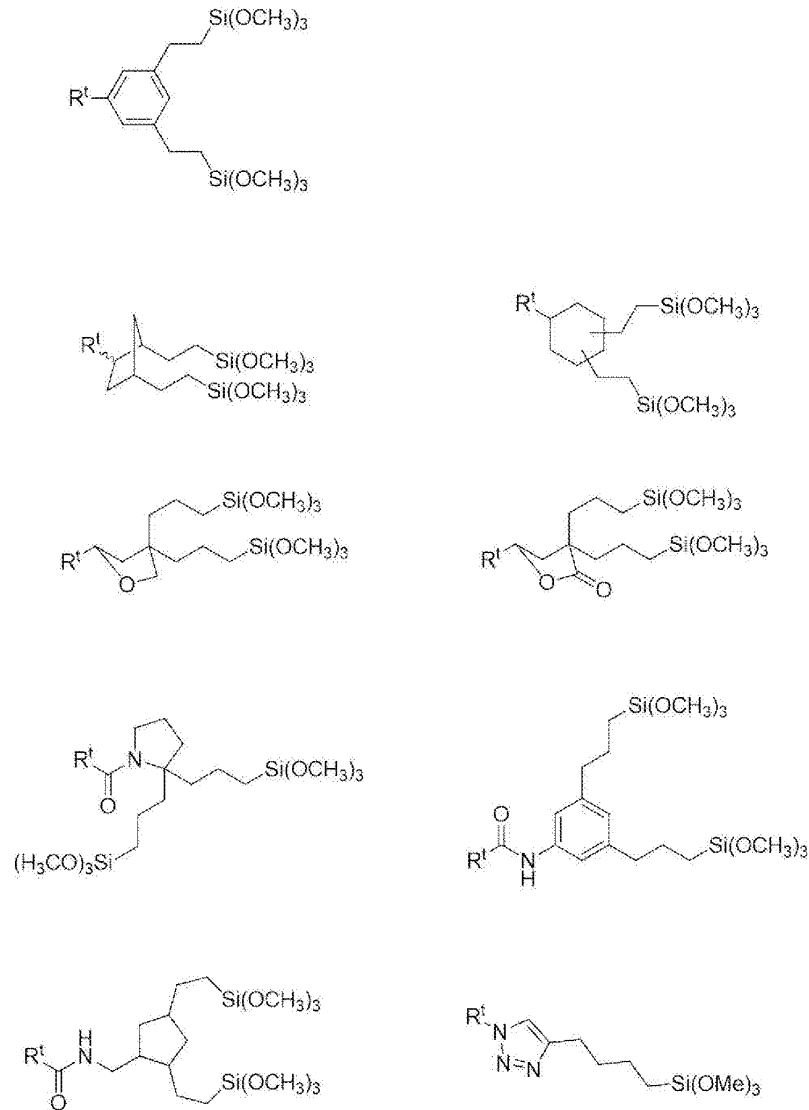
[0460]

[0461] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-4) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의

화합물을 들 수 있다.

[0462]

[화학식 29]



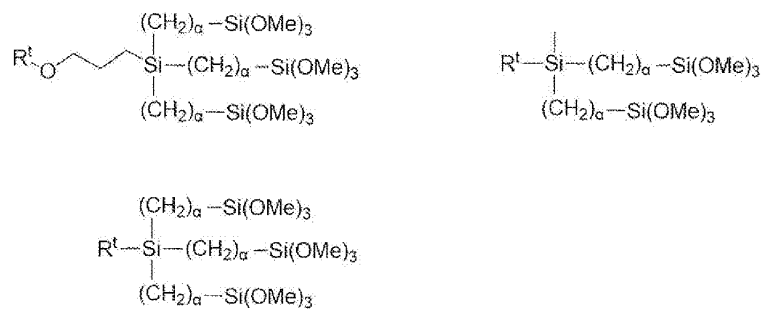
[0463]

[0464]

Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-5)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

[0465]

[화학식 30]



[0466]

[0467]

Z가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-5)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

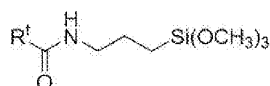
[0468] [화학식 31]



[0469]

[0470] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-6)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

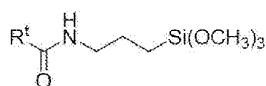
[0471] [화학식 32]



[0472]

[0473] Z가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-6)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

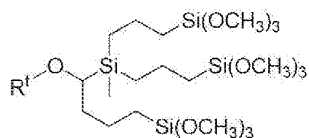
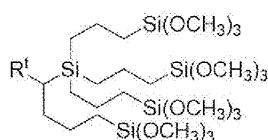
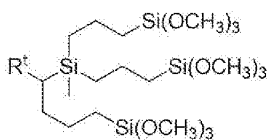
[0474] [화학식 33]



[0475]

[0476] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-7)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

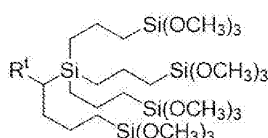
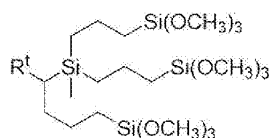
[0477] [화학식 34]



[0478]

[0479] Z가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-7)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

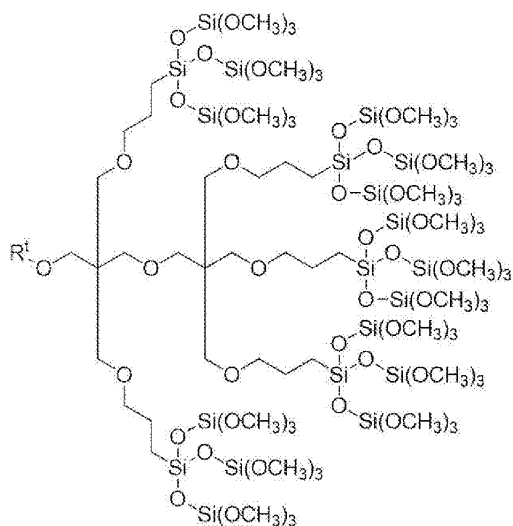
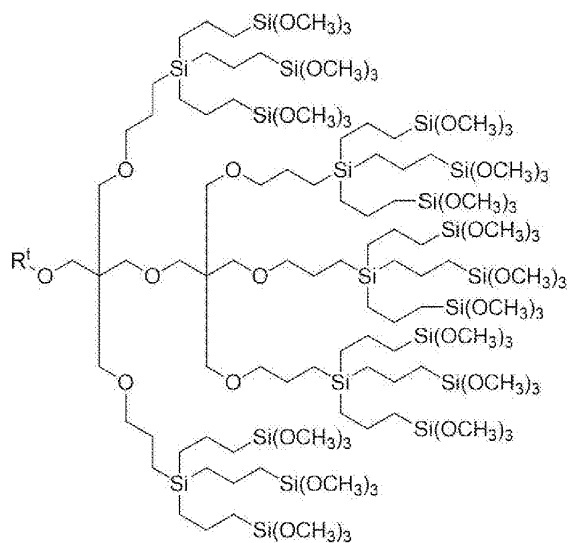
[0480] [화학식 35]



[0481]

[0482] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-8)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

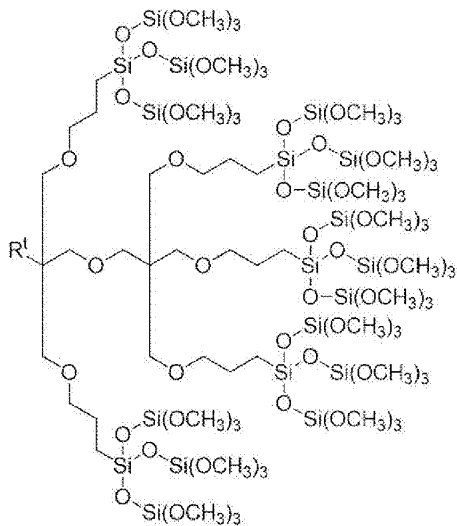
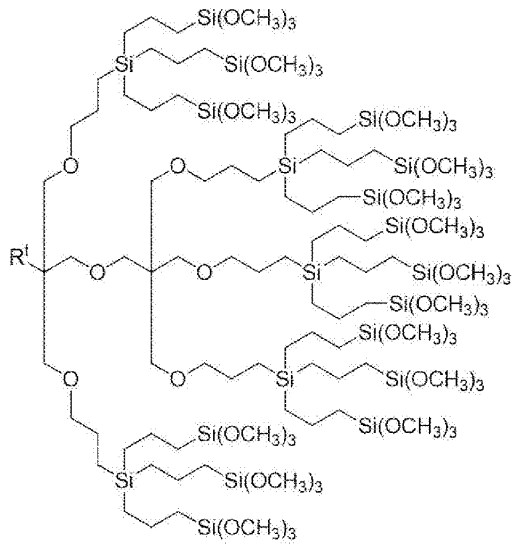
[0483] [화학식 36]



[0484]

[0485] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-8) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

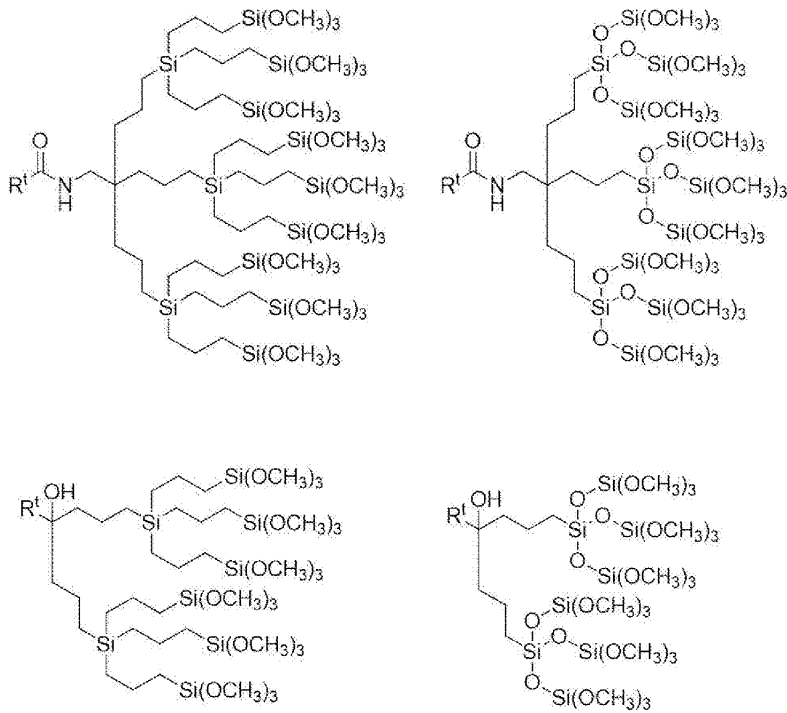
[0486] [화학식 37]



[0487]

[0488] 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-9) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

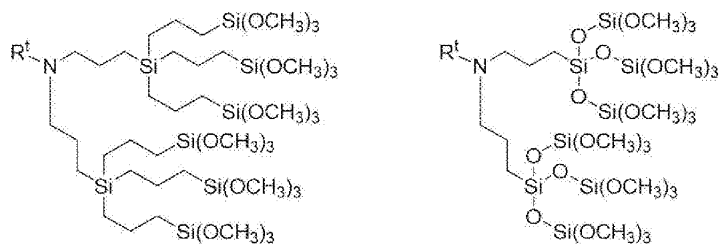
[0489] [화학식 38]



[0490]

[0491] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-10)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

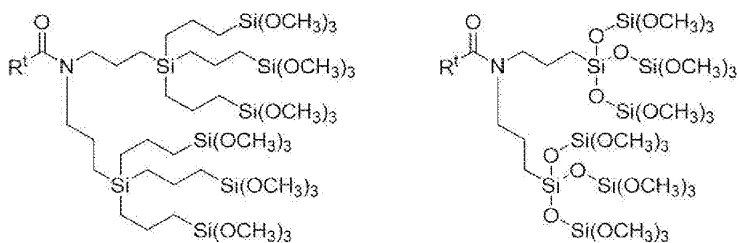
[0492] [화학식 39]



[0493]

[0494] Z가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-10)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

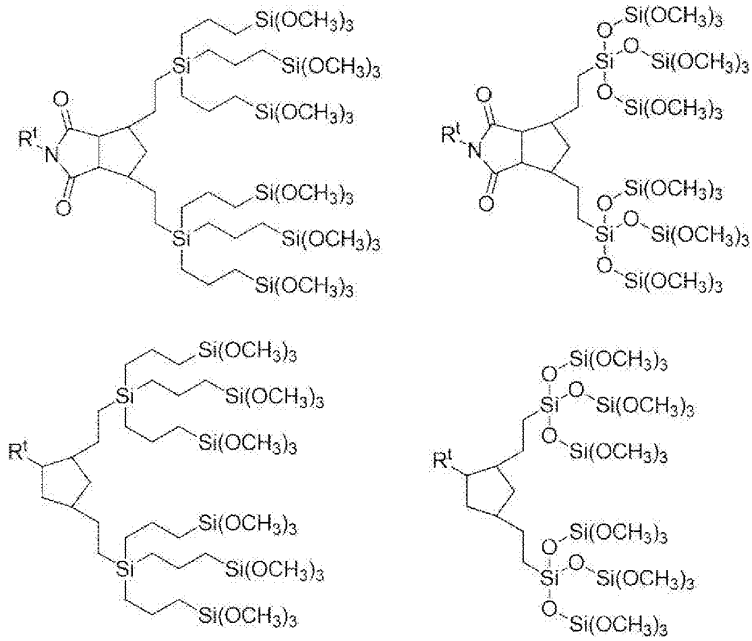
[0495] [화학식 40]



[0496]

[0497] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-11)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

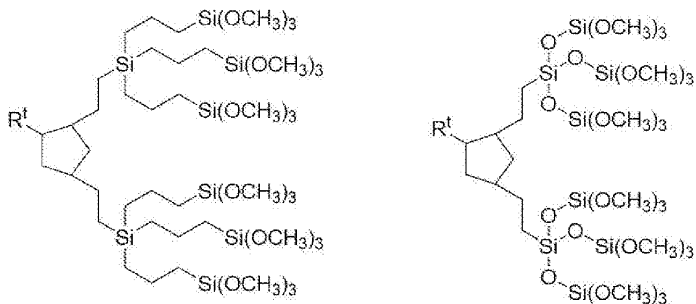
[0498] [화학식 41]



[0499]

[0500] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-11) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

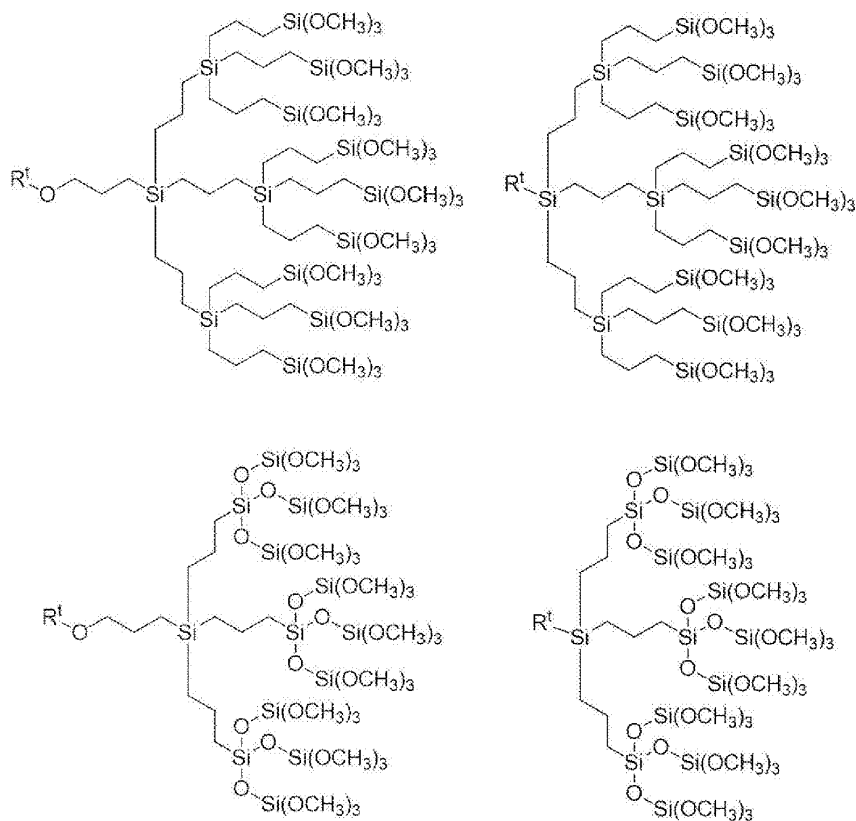
[0501] [화학식 42]



[0502]

[0503] Z 의 A 와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-12) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

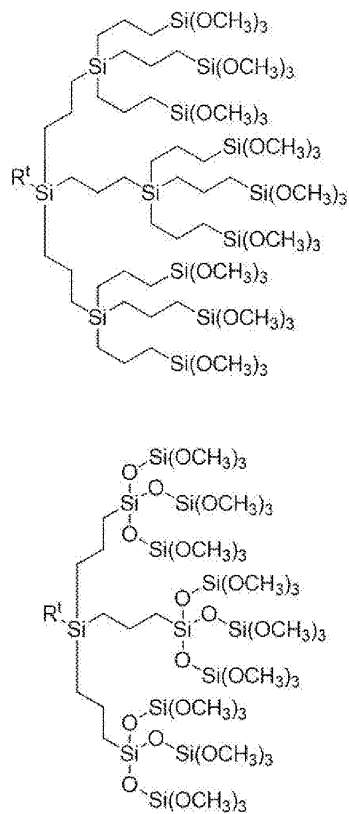
[0504] [화학식 43]



[0505]

[0506] Z 가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1 에 있어서의 A 가 기 (g2-12) 인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

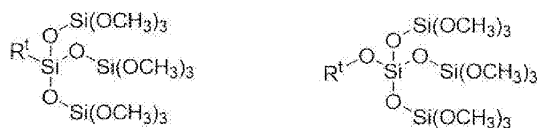
[0507] [화학식 44]



[0508]

[0509] Z의 A와 결합하는 측의 말단이 알킬렌 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-13)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

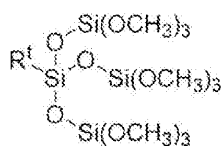
[0510] [화학식 45]



[0511]

[0512] Z가 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 경우, 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-13)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

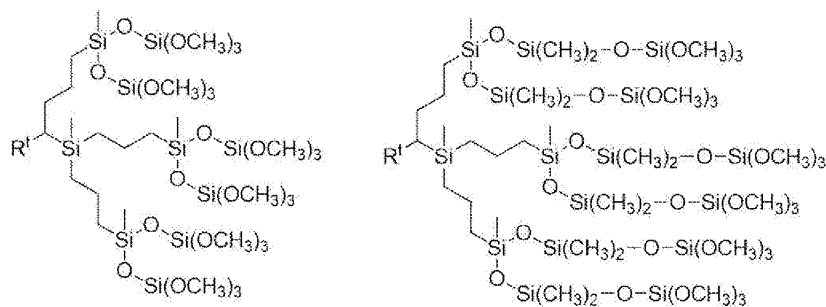
[0513] [화학식 46]



[0514]

[0515] 식 1에 있어서의 A가 기 (g2-14)인 화합물로는, 예를 들어, 하기 식의 화합물을 들 수 있다.

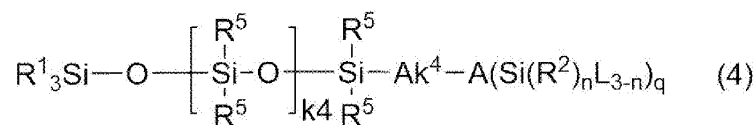
[0516] [화학식 47]



[0517]

[0518] 본 개시의 화합물은, 하기 식 4로 나타내는 화합물인 것이 바람직하다.

[0519] [화학식 48]



[0520]

[0521] 식 4 중, R^1 은, 기 1에 있어서의 R^1 과 동일하다.

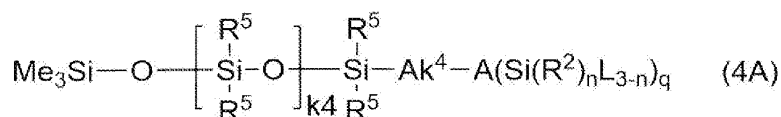
[0522] R^5 는, 식 B에 있어서의 R^5 와 동일하다. k^4 는, 식 C3에 있어서의 k^4 와 동일하다.

[0523] $A(Si(R^2)_nL_{3-n})_q$ 로 나타내는 기는, 식 1에 있어서의 $A(Si(R^2)_nL_{3-n})_q$ 로 나타내는 기와 동일하다.

[0524] Ak^4 는, 식 C3에 있어서의 Ak^4 와 동일하다.

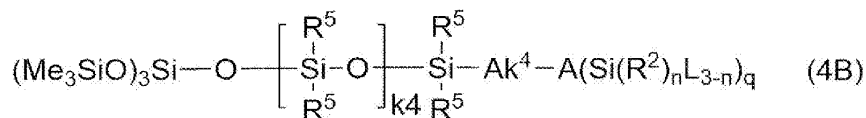
[0525] 본 개시의 화합물은, 하기 식 4A 또는 4B로 나타내는 화합물인 것이 바람직하다.

[0526] [화학식 49]



[0527]

[0528] [화학식 50]



[0529]

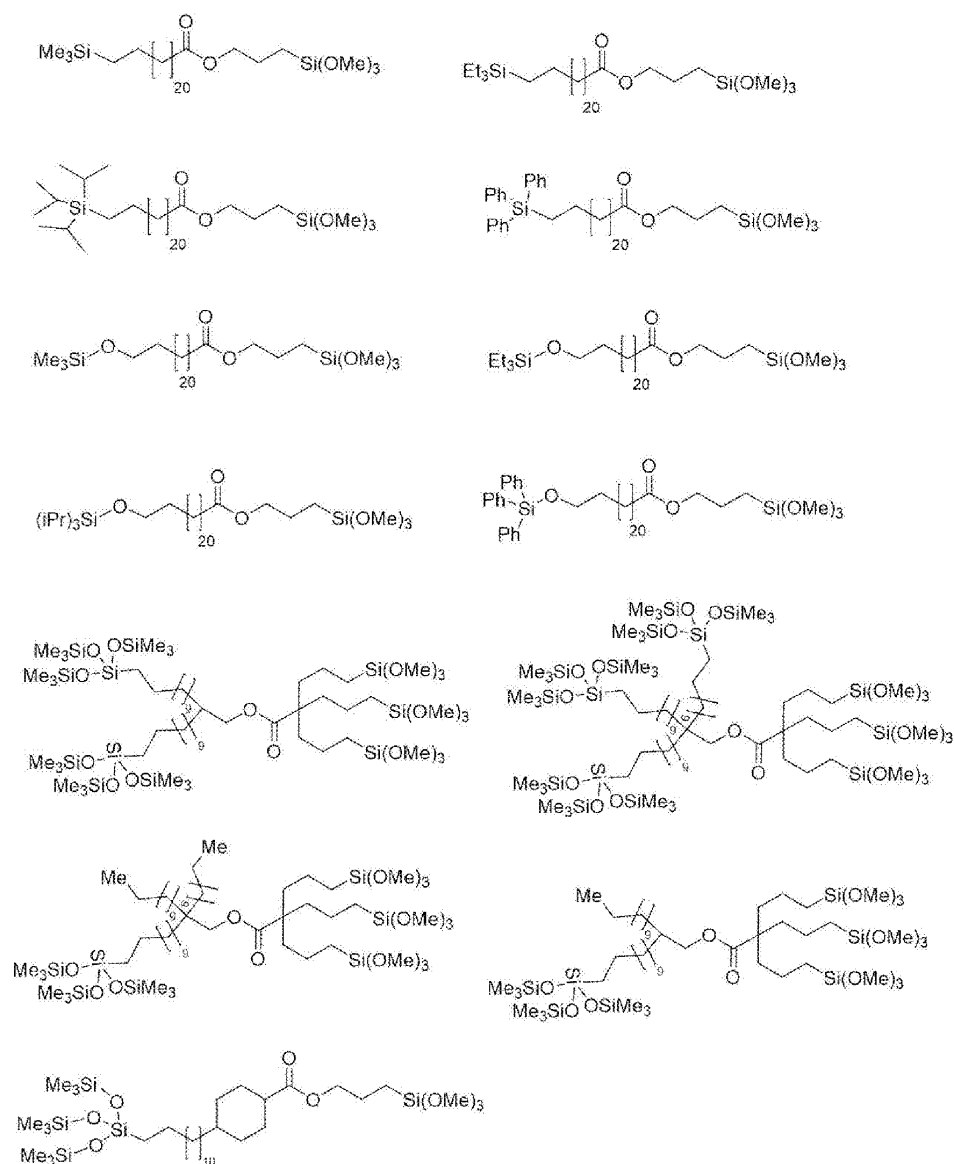
[0530] 식 4A 및 식 4B 중, R^5 는, 식 B 에 있어서의 R^5 와 동일하다. $k4$ 는, 식 C3 에 있어서의 $k4$ 와 동일하다.

[0531] $A(Si(R^2)_nL_{3-n})_q$ 로 나타내는 기는, 식 1 에 있어서의 $A(Si(R^2)_nL_{3-n})_q$ 로 나타내는 기와 동일하다.

[0532] Ak^4 는, 식 C3 에 있어서의 Ak^4 와 동일하다.

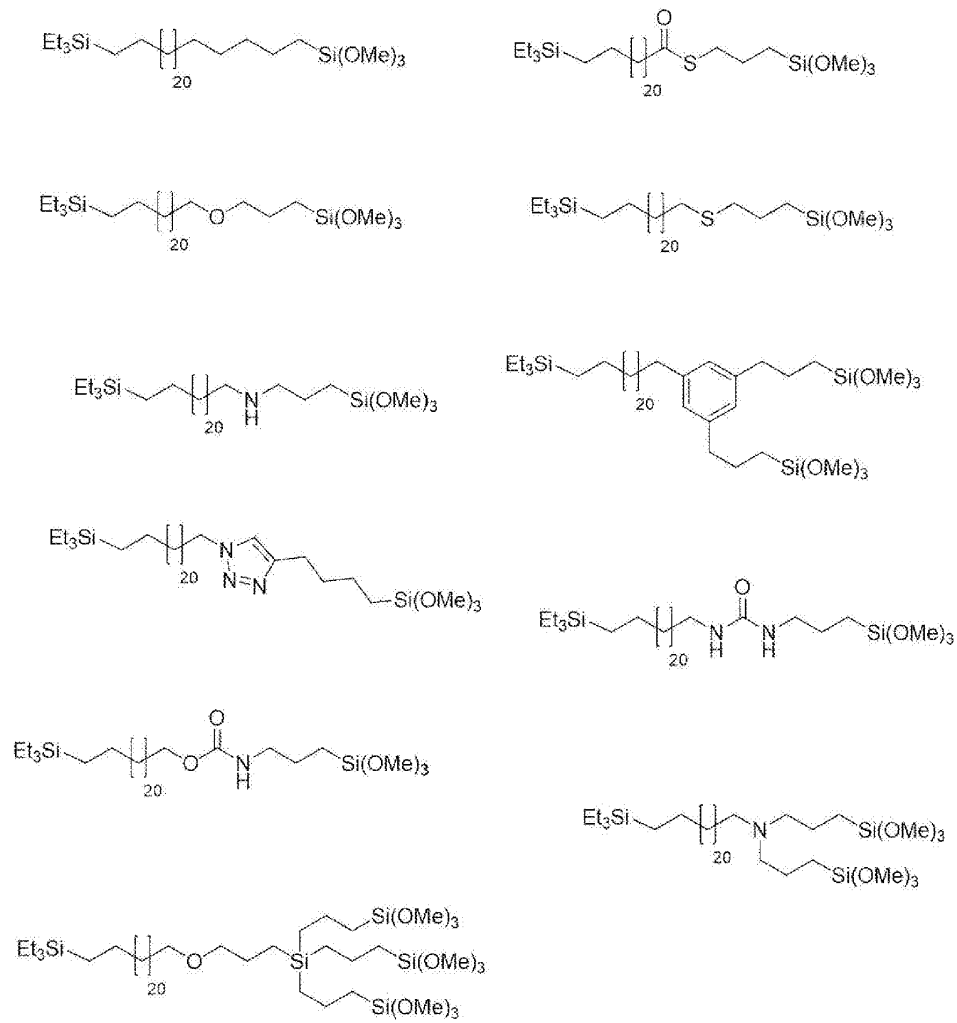
[0533] 본 개시의 화합물로는, 예를 들어, 이하의 화합물을 들 수 있다.

[0534] [화학식 51]



[0535]

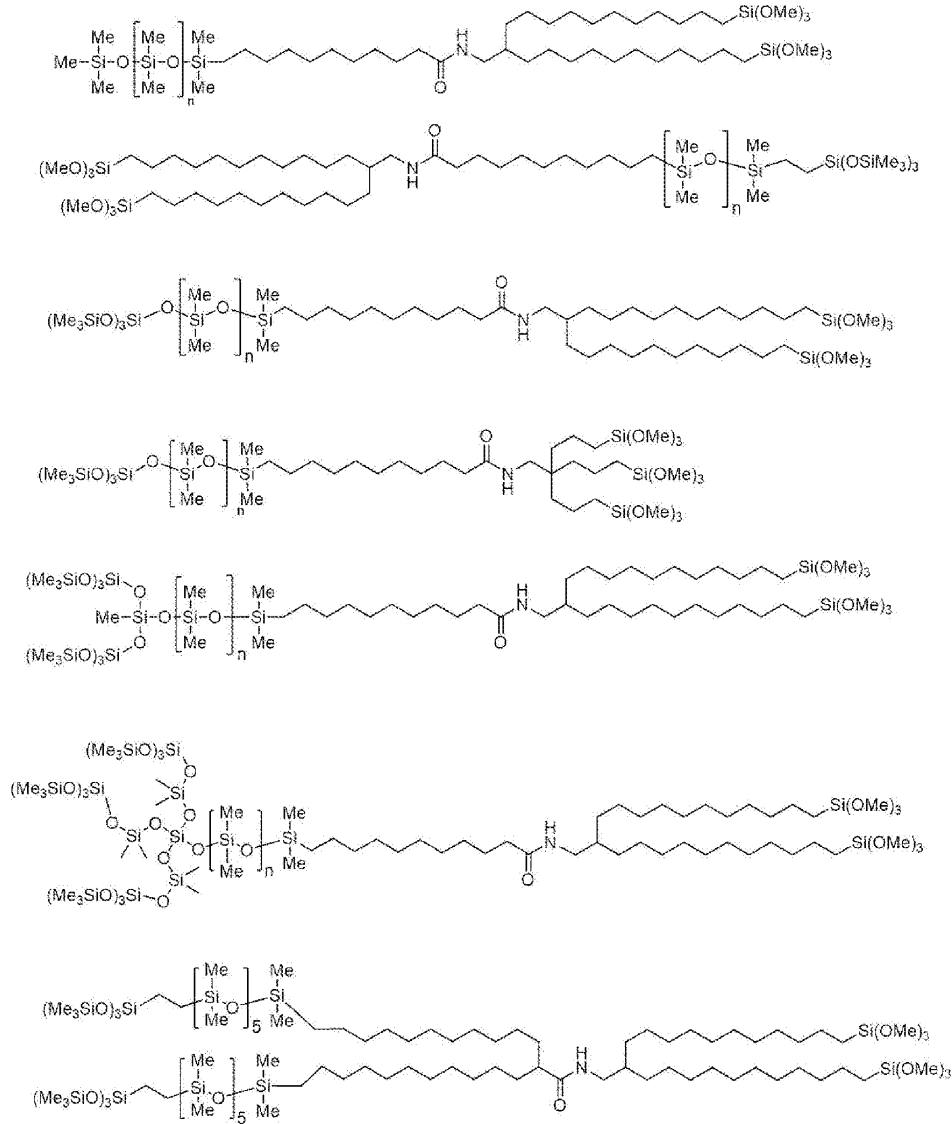
[0536] [화학식 52]



[0537]

[0538] 하기 식 중, n 은 9 ~ 50 이 바람직하고, 11 ~ 30 이 보다 바람직하고, 11 ~ 25 가 특히 바람직하다.

[0539] [화학식 53]

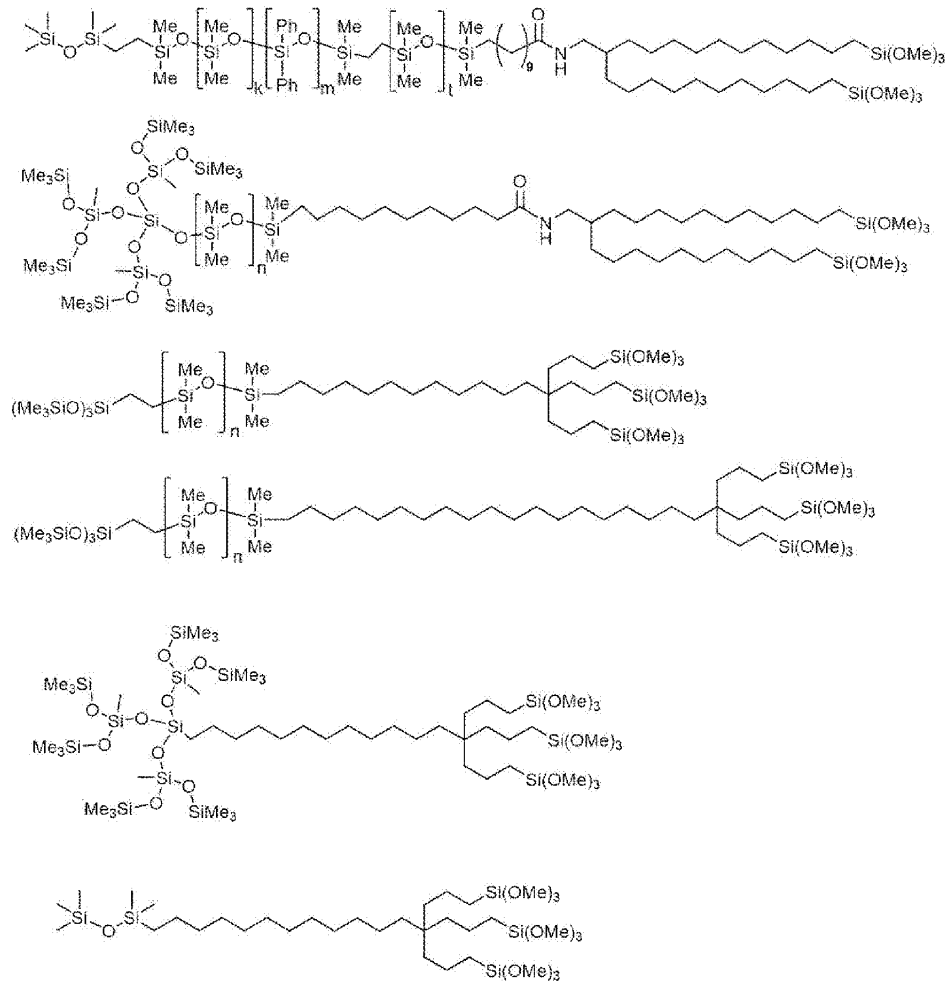


[0540]

[0541] 하기 식 중, k 는 1 ~ 80 이 바람직하고, 3 ~ 50 이 보다 바람직하고, 3 ~ 30 이 더욱 바람직하다. m 은 1 ~ 30 이 바람직하고, 3 ~ 20 이 보다 바람직하고, 3 ~ 10 이 더욱 바람직하다. t 는 1 ~ 30 이 바람직하고, 3 ~ 20 이 보다 바람직하고, 3 ~ 10 이 더욱 바람직하다.

[0542] 하기 식 중, n 은 9 ~ 50 이 바람직하고, 11 ~ 30 이 보다 바람직하고, 11 ~ 25 가 특히 바람직하다.

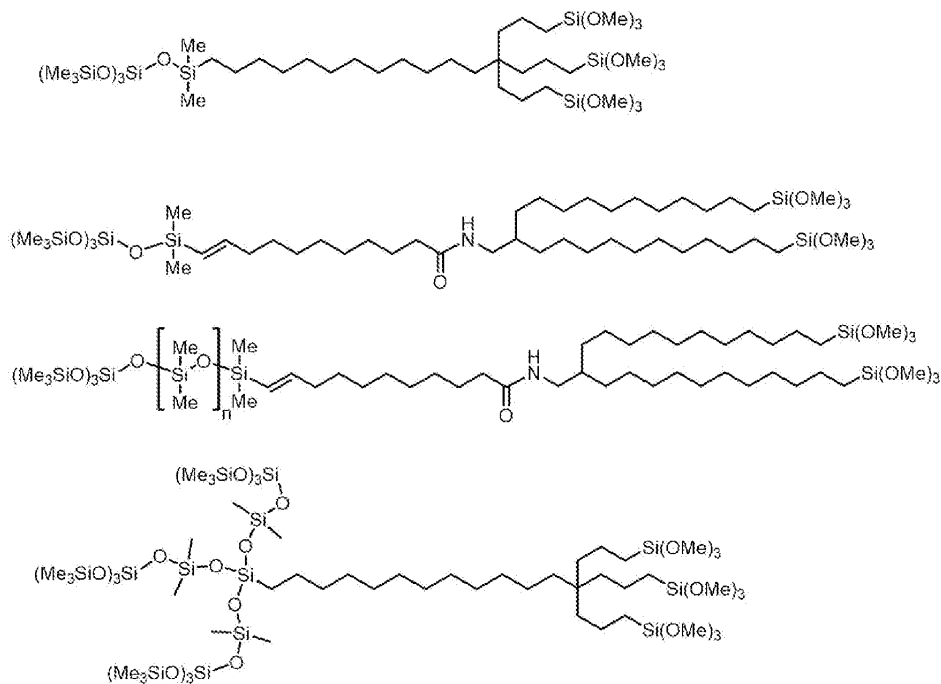
[0543] [화학식 54]



[0544]

[0545] 하기 식 중, n 은 9 ~ 50 이 바람직하고, 11 ~ 30 이 보다 바람직하고, 11 ~ 25 가 특히 바람직하다.

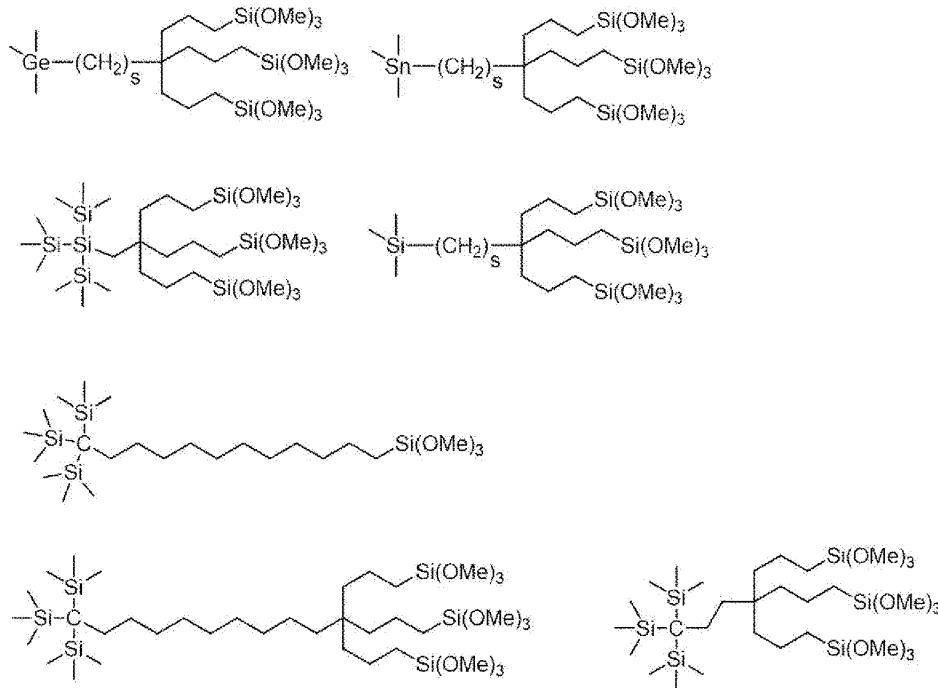
[0546] [화학식 55]



[0547]

[0548] 하기 식 중, s 는 1 ~ 30 이 바람직하고, 4 ~ 20 이 보다 바람직하고, 5 ~ 15 가 더욱 바람직하다.

[0549] [화학식 56]



[0550]

[0551] 본 개시의 화합물의 수평균 분자량 (Mn) 은, 500 ~ 20,000 인 것이 바람직하고, 600 ~ 18,000 인 것이 보다 바람직하고, 700 ~ 15,000 인 것이 더욱 바람직하다.

[0552] Mn 이 500 이상이면, 표면 처리층의 내마모성이 보다 우수하다. Mn 이 20,000 이하이면, 점성을 적절한 범위 내로 조절하기 쉽고, 또 용해성이 향상되므로, 성막시의 핸들링성이 우수하다.

[0553] [조성물]

[0554] 본 개시의 조성물은, 본 개시의 화합물을 포함하고 있으면 되고, 본 개시의 화합물 이외의 성분은 특별히 한정되지 않는다. 본 개시의 조성물은, 본 개시의 화합물과, 액상 매체를 포함하는 것이 바람직하다. 액상 매체를 포함하는 경우, 본 개시의 조성물은, 액상이면 되고, 용액이어도 되고, 분산액이어도 된다.

[0555] 본 개시의 조성물은, 본 개시의 화합물을 포함하고 있으면 되고, 본 개시의 화합물의 제조 과정에서 생성된 부산물 등의 불순물을 포함해도 된다.

[0556] 본 개시의 화합물의 함유량은, 본 개시의 조성물의 전체량에 대해, 0.001 ~ 40 질량% 가 바람직하고, 0.01 ~ 20 질량% 가 보다 바람직하고, 0.1 ~ 10 질량% 가 더욱 바람직하다. 웨트 코팅법에 사용하는 본 개시의 조성물의 경우에는, 본 개시의 화합물의 함유량은, 본 개시의 조성물의 전체량에 대해, 0.01 ~ 10 질량% 여도 되고, 0.02 ~ 5 질량% 여도 되고, 0.03 ~ 3 질량% 여도 되고, 0.05 ~ 2 질량% 여도 된다.

[0557] 본 개시의 조성물에 포함되는 액상 매체는 1 종만이어도 되고, 2 종 이상이어도 된다.

[0558] 액상 매체는, 유기 용매가 바람직하다.

[0559] 유기 용매로는, 수소 원자 및 탄소 원자만으로 이루어지는 화합물, 그리고, 수소 원자, 탄소 원자 및 산소 원자만으로 이루어지는 화합물을 들 수 있고, 구체적으로는, 탄화수소계 유기 용매, 케톤계 유기 용매, 에테르계 유기 용매, 에스테르계 유기 용매, 글리콜계 유기 용매, 및 알코올계 유기 용매를 들 수 있다.

[0560] 탄화수소계 유기 용매의 구체예로는, 펜탄, 헥산, 헵탄, 옥탄, 헥사데칸, 이소헥산, 이소옥탄, 이소노난, 시클로헵탄, 시클로헥산, 비시클로헥실, 벤젠, 톨루엔, 에틸벤젠, o-자일렌, m-자일렌, p-자일렌, o-디에틸벤젠, m-디에틸벤젠, p-디에틸벤젠, n-부틸벤젠, sec-부틸벤젠, tert-부틸벤젠을 들 수 있다.

[0561] 케톤계 유기 용매의 구체예로는, 아세톤, 메틸에틸케톤, 메틸이소부틸케톤, 디이소부틸케톤, 시클로헥사논, 2-헵타논, 4-헵타논, 3,5,5-트리메틸-2-시클로헥센-1-온, 및 3,3,5-트리메틸시클로헥사논, 이소포론을 들 수

있다.

- [0562] 에테르계 유기 용매의 구체예로는, 디에틸에테르, 시클로펜틸메틸에테르, 테트라하이드로푸란, 1,4-디옥산을 들 수 있다.
- [0563] 에스테르계 유기 용매의 구체예로는, 아세트산메틸, 아세트산에틸, 아세트산프로필, 아세트산이소프로필, 아세트산부틸, 아세트산이소부틸, 아세트산tert-부틸, 아세트산아밀, 아세트산이소아밀, 3-에톡시프로피온산에틸, 락트산에틸에틸렌글리콜모노부틸에테르아세테이트, 디에틸렌글리콜모노부틸에테르아세테이트, 프로필렌글리콜모노메틸에테르아세테이트, 디프로필렌글리콜메틸에테르아세테이트, 3-메톡시-3-메틸부틸아세테이트, 3-메톡시부틸아세테이트, 프로필렌글리콜모노메틸아세테이트, 프로필렌글리콜디메틸아세테이트, 에틸렌글리콜모노에틸에테르아세테이트, 에틸렌글리콜모노메틸에테르아세테이트, 디에틸렌글리콜모노에틸에테르아세테이트, 시클로헥산올아세테이트, 프로필렌글리콜디아세테이트, 프로필렌글리콜모노메틸에테르아세테이트, 프로필렌글리콜모노메틸에테르프로피오네이트, 프로필렌글리콜모노에틸에테르아세테이트, 프로필렌글리콜모노부틸에테르아세테이트, 프로필렌글리콜모노프로필에테르아세테이트, 프로필렌글리콜디아세테이트, 디프로필렌글리콜메틸에테르아세테이트, 1,3-부틸렌글리콜디아세테이트, 1,4-부탄디올디아세테이트, 1,3-부틸렌글리콜디아세테이트, 1,6-헥산디올디아세테이트, γ-부티로락톤, 트리아세틴, 2,2,4-트리메틸-1,3-펜탄디올모노이소부티레이트를 들 수 있다.
- [0564] 글리콜계 유기 용매의 구체예로는, 에틸렌글리콜, 에틸렌글리콜모노부틸에테르, 디에틸렌글리콜모노부틸에테르, 트리에틸렌글리콜모노부틸에테르, 테트라에틸렌글리콜모노부틸에테르, 에틸렌글리콜모노헥실에테르, 디에틸렌글리콜모노헥실에테르, 에틸렌글리콜모노-2-에틸헥실에테르, 디에틸렌글리콜모노-2-에틸헥실에테르, 프로필렌글리콜모노메틸에테르, 프로필렌글리콜모노에틸에테르, 프로필렌글리콜모노부틸에테르, 프로필렌글리콜모노프로필에테르, 에틸렌글리콜모노이소프로필에테르, 에틸렌글리콜모노에틸에테르, 에틸렌글리콜모노tert-부틸에테르, 에틸렌글리콜모노프로필에테르, 에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디에틸렌글리콜모노이소프로필에테르, 디에틸렌글리콜모노메틸에테르, 디프로필렌글리콜모노에틸에테르, 디프로필렌글리콜모노부틸에테르, 디프로필렌글리콜모노프로필에테르, 디프로필렌글리콜모노메틸에테르, 트리프로필렌글리콜모노부틸에테르, 트리프로필렌글리콜모노메틸에테르, 프로필렌글리콜모노페닐에테르, 1,3-부틸렌글리콜, 프로필렌글리콜n-프로필에테르, 프로필렌글리콜n-부틸에테르, 디에틸렌글리콜모노에틸에테르, 디프로필렌글리콜n-프로필에테르, 디프로필렌글리콜n-부틸에테르, 트리프로필렌글리콜메틸에테르, 트리프로필렌글리콜n-부틸에테르, 에틸렌글리콜디메틸에테르, 에틸렌글리콜디에틸에테르, 에틸렌글리콜디부틸에테르, 디에틸렌글리콜디에틸에테르, 디에틸렌글리콜디메틸에테르, 디프로필렌글리콜디메틸에테르, 디에틸렌글리콜디부틸에테르, 테트라에틸렌글리콜디메틸에테르, 디프로필렌글리콜디메틸에테르, 펜탄, 트리에틸렌글리콜디메틸에테르, 폴리에틸렌글리콜디메틸에테르를 들 수 있다.
- [0565] 알코올계 유기 용매의 구체예로는, 메탄올, 에탄올, 1-프로판올, 이소프로필알코올, n-부탄올, 디아세톤알코올, 이소부탄올, sec-부탄올, tert-부탄올, 펜탄올, 3-메틸-1,3-부탄디올, 1,3-부탄디올, 1,3-부틸렌글리콜, 옥탄디올, 2,4-디에틸펜탄디올, 부틸에틸프로판디올, 2-메틸-1,3-프로판디올, 4-하이드록시-4-메틸-2-펜타논, 2-에틸-1-헥산올, 3,5,5-트리메틸-1-헥산올, 이소데칸올, 이소트리데칸올, 3-메톡시-3-메틸-1-부탄올, 2-메톡시부탄올, 3-메톡시부탄올, 시클로헥산올, 푸르푸릴알코올, 테트라하이드로푸르푸릴알코올, 벤질알코올, 및 메틸시클로헥산올을 들 수 있다.
- [0566] 또, 유기 용매로는, 할로젠계 유기 용매, 함질소 화합물, 함황 화합물, 실록산 화합물을 들 수 있다.
- [0567] 할로젠계 유기 용매의 구체예로는, 디클로로메탄, 클로로포름, 사염화탄소, 디클로로에탄, 클로로벤젠, o-클로로톨루엔, m-클로로톨루엔, p-클로로톨루엔, m-디클로로벤젠, 1,2,3-트리클로로프로판올을 들 수 있다.
- [0568] 함질소 화합물로는, 니트로벤젠, 아세토니트릴, 벤조니트릴, N,N-디메틸포름아미드, N,N-디메틸아세트아미드, N-메틸피롤리돈, 1,3-디메틸-2-이미다졸리디논을 들 수 있다.
- [0569] 함황 화합물로는, 이황화탄소, 디메틸술폰을 들 수 있다.
- [0570] 실록산 화합물로는, 헥사메틸디실록산, 옥타메틸트리실록산, 데카메틸테트라실록산을 들 수 있다.
- [0571] 액상 매체의 함유량은, 본 개시의 조성물의 전체량에 대해, 60 ~ 99.999 질량% 가 바람직하고, 80 ~ 99.99 질량% 가 보다 바람직하고, 90 ~ 99.9 질량% 가 더욱 바람직하다. 웨트 코팅법에 사용하는 본 개시의 조성물의 경우에는, 액상 매체의 함유량은, 본 개시의 조성물의 전체량에 대해, 90 ~ 99.99 질량% 여도 되고, 95 ~ 99.98 질량% 여도 되고, 97 ~ 99.97 질량% 여도 되고, 98 ~ 99.95 질량% 여도 된다.
- [0572] 본 개시의 조성물은, 본 개시의 화합물 및 액상 매체 이외에, 본 개시의 효과를 저해하지 않는 범위에서, 다른

성분을 포함하고 있어도 된다.

- [0573] 다른 성분으로는, 예를 들어, 반응성 실릴기의 가수분해와 축합 반응을 촉진시키는 산 촉매, 염기성 촉매 등의 공지된 첨가제를 들 수 있다.
- [0574] 또, 다른 성분으로는, 가수분해성기를 갖는 금속 화합물 (이하, 가수분해성기를 갖는 금속 화합물을 「특정 금속 화합물」이라고도 기재한다) 도 들 수 있다. 본 개시의 조성물이 특정 금속 화합물을 포함하면, 표면 처리층의 미끄러짐성 및 방오성을 보다 향상시킬 수 있다. 특정 금속 화합물로는, 하기 식 (M1) ~ (M3) 을 들 수 있다.
- [0575] $M(X^{b1})_{m1}(X^{b2})_{m2}(X^{b3})_{m3} \cdots (M1)$
- [0576] $Si(X^{b4})(X^{b5})_3 \cdots (M2)$
- [0577] $(X^{b6})_3Si-(Y^{b1})-Si(X^{b7})_3 \cdots (M3)$
- [0578] 식 (M1) 중,
- [0579] M 은, 3 가 또는 4 가의 금속 원자를 나타낸다.
- [0580] X^{b1} 은 각각 독립적으로, 가수분해성기를 나타낸다.
- [0581] X^{b2} 는 각각 독립적으로, 실록산 골격 함유기를 나타낸다.
- [0582] X^{b3} 은 각각 독립적으로, 탄화수소 사슬 함유기를 나타낸다.
- [0583] m1 은 2 ~ 4 의 정수이고,
- [0584] m2 및 m3 은 각각 독립적으로, 0 ~ 2 의 정수이고,
- [0585] M 이 3 가의 금속 원자인 경우, m1+m2+m3 은 3 이고, M 이 4 가의 금속 원자인 경우, m1+m2+m3 은 4 이다.
- [0586] 식 (M2) 중,
- [0587] X^{b4} 는, 가수분해성 실란 올리고머 잔기를 나타낸다.
- [0588] X^{b5} 는, 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 탄소수 1 ~ 4 의 알킬기를 나타낸다.
- [0589] 식 (M3) 중,
- [0590] X^{b6} 및 X^{b7} 은, 각각 독립적으로, 가수분해성기 또는 수산기를 나타낸다.
- [0591] Y^{b1} 은, 2 가의 유기기를 나타낸다.
- [0592] 식 (M1) 중, M 으로 나타내는 금속에는, Si, Ge 등의 반금속도 포함된다. M 으로는, 3 가 금속 및 4 가 금속이 바람직하고, Al, Fe, In, Hf, Si, Ti, Sn, 및 Zr 이 보다 바람직하고, Al, Si, Ti, 및 Zr 이 더욱 바람직하고, Si 가 특히 바람직하다.
- [0593] 식 (M1) 중, X^{b1} 로 나타내는 가수분해성기로는, 상기 반응성 실릴기에 있어서의 $[-Si(R^2)_nL_{3-n}]$ 중의 L 로 나타내는 가수 분해성기와 동일한 것을 들 수 있다.
- [0594] X^{b2} 로 나타내는 실록산 골격 함유기는, 실록산 단위 ($-Si-O-$) 를 갖고, 직사슬형이어도 되고 분기 사슬형이어도 된다. 실록산 단위로는, 디알킬실릴옥시기가 바람직하고, 디메틸실릴옥시기, 디에틸실릴옥시기 등을 들 수 있다. 실록산 골격 함유기에 있어서의 실록산 단위의 반복수는 1 이상이며, 1 ~ 5 가 바람직하고, 1 ~ 4 가 보다 바람직하고, 1 ~ 3 이 더욱 바람직하다.
- [0595] 실록산 골격 함유기는, 실록산 골격의 일부에 2 가의 탄화수소기를 포함하고 있어도 된다. 구체적으로는, 실록산 골격의 일부의 산소 원자가 2 가의 탄화수소기로 치환되어 있어도 된다. 상기 2 가의 탄화수소기로

는, 메틸렌기, 에틸렌기, 프로필렌기, 부틸렌기 등의 알킬렌기를 들 수 있다.

- [0596] 실록산 골격 함유기의 말단의 규소 원자에는, 가수분해성기, 탄화수소기 (바람직하게는 알킬기) 등이 결합하고 있어도 된다.
- [0597] 실록산 골격 함유기의 원소수는, 100 이하가 바람직하고, 50 이하가 보다 바람직하며, 30 이하가 더 바람직하다. 상기 원소수는 10 이상이 바람직하다.
- [0598] 실록산 골격 함유기로는, $^{*}-(O-Si(CH_3)_2)_nCH_3$ 으로 나타내는 기가 바람직하고, 여기서, n 은 1 ~ 5 의 정수이고, * 는 인접 원자와의 결합 부위를 나타낸다.
- [0599] X^{b3} 으로 나타내는 탄화수소 사슬 함유기는, 탄화수소 사슬만으로 이루어지는 기여도 되고, 탄화수소 사슬의 탄소 원자-탄소 원자간에 에테르성 산소 원자를 갖는 기여도 된다. 탄화수소 사슬은 직사슬이어도 되고 분기 사슬이어도 되며, 직사슬이 바람직하다. 탄화수소 사슬은 포화 탄화수소 사슬이어도 되고 불포화 탄화수소 사슬이어도 되며, 포화 탄화수소 사슬이 바람직하다. 탄화수소 사슬 함유기의 탄소수는, 1 ~ 3 이 바람직하고, 1 ~ 2 가 보다 바람직하며, 1 이 더 바람직하다. 탄화수소 사슬 함유기로는, 알킬기가 바람직하고, 메틸기, 에틸기, 또는 프로필기가 보다 바람직하다.
- [0600] m1 은 3 또는 4 인 것이 바람직하다.
- [0601] 식 (M1) 로 나타내는 화합물로는, M 이 Si 인 하기 식 (M1-1) ~ (M1-5) 로 나타내는 화합물이 바람직하고, 식 (M1-1) 로 나타내는 화합물이 보다 바람직하다. 식 (M1-1) 로 나타내는 화합물로는, 테트라에톡시실란, 테트라메톡시실란, 트리에톡시메틸실란이 바람직하다.
- [0602] $Si(X^{b1})_4 \cdots (M1-1)$
- [0603] $CH_3-Si(X^{b1})_3 \cdots (M1-2)$
- [0604] $C_2H_5-Si(X^{b1})_3 \cdots (M1-3)$
- [0605] $n-C_3H_7-Si(X^{b1})_3 \cdots (M1-4)$
- [0606] $(CH_3)_2CH-Si(X^{b1})_3 \cdots (M1-5)$
- [0607] 식 (M2) 중, X^{b4} 로 나타내는 가수분해성 실란 올리고머 잔기에 포함되는 규소 원자의 수는, 3 이상이 바람직하고, 5 이상이 보다 바람직하고, 7 이상이 더욱 바람직하다. 상기 규소 원자의 수는, 15 이하가 바람직하고, 13 이하가 보다 바람직하고, 10 이하가 더욱 바람직하다.
- [0608] 가수분해성 실란 올리고머 잔기는, 규소 원자에 결합하는 알콕시기를 갖고 있어도 된다. 상기 알콕시기로는, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기 등을 들 수 있고, 메톡시기 및 에톡시기가 바람직하다. 가수분해성 실란 올리고머 잔기는, 이들 알콕시기의 1 종 또는 2 종 이상을 가져도 되고, 1 종을 갖는 것이 바람직하다.
- [0609] 가수분해성 실란 올리고머 잔기로는, $(C_2H_5O)_3Si-(OSi(OC_2H_5)_2)_4O^{*-}$ 등을 들 수 있다. 여기서, * 는 인접 원자와의 결합 부위를 나타낸다.
- [0610] 식 (M2) 중, X^{b5} 로 나타내는 가수분해성기로는, 상기 반응성 실릴기에 있어서의 $[-Si(R^2)_nL_{3-n}]$ 중의 L 로 나타내는 가수분해성기와 동일한 것, 시아노기, 수소 원자, 알릴기를 들 수 있으며, 알콕시기 또는 이소시아나토기가 바람직하다. 알콕시기로는, 탄소수 1 ~ 4 의 알콕시기가 바람직하다.
- [0611] X^{b5} 로는, 가수분해성기가 바람직하다.
- [0612] 식 (M2) 로 나타내는 화합물로는, $(H_5C_2O)_3-Si-(OSi(OC_2H_5)_2)_4OC_2H_5$ 등을 들 수 있다.
- [0613] 식 (M3) 으로 나타내는 화합물은, 2 개의 유기기의 양 말단에 반응성 실릴기를 가지는 화합물, 즉, 비스실란이

다.

- [0614] 식 (M3) 중, X^{b6} 및 X^{b7} 로 나타내는 가수분해성기로는, 알콕시기, 아실옥시기, 케토옥심기, 알케닐옥시기, 아미노기, 아미녹시기, 아미드기, 이소시아나토기, 할로젠 원자를 들 수 있고, 알콕시기, 이소시아나토기가 바람직하다. 알콕시기로는, 탄소수 1 ~ 4 의 알콕시기가 바람직하고, 메톡시기, 에톡시기가 보다 바람직하다.
- [0615] 식 (M3) 에 있어서, X^{b6} 및 X^{b7} 은 서로 동일한 기여도 되고, 서로 상이한 기여도 된다. 입수하기 용이한 점에서, X^{b6} 및 X^{b7} 은 서로 동일한 기인 것이 바람직하다.
- [0616] 식 (M3) 중, Y^{b1} 은, 양 말단의 반응성 실릴기를 연결하는 2 개의 유기기이다. 2 개의 유기기의 Y^{b1} 의 탄소수는 1 ~ 8 이 바람직하고, 1 ~ 3 이 보다 바람직하다.
- [0617] Y^{b1} 로는, 알킬렌기, 페닐렌기, 탄소 원자간에 에테르성 산소 원자를 갖는 알킬렌기를 들 수 있다. 예를 들면, $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2-$, $-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, $-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)-$, $-\text{C}_6\text{H}_4-$ 를 들 수 있다.
- [0618] 식 (M3) 으로 나타내는 화합물로는, $(\text{CH}_3\text{O})_3\text{Si}(\text{CH}_2)_2\text{Si}(\text{OCH}_3)_3$, $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{Si}(\text{CH}_2)_2\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$, $(\text{OCN})_3\text{Si}(\text{CH}_2)_2\text{Si}(\text{NCO})_3$, $\text{Cl}_3\text{Si}(\text{CH}_2)_2\text{SiCl}_3$, $(\text{CH}_3\text{O})_3\text{Si}(\text{CH}_2)_6\text{Si}(\text{OCH}_3)_3$, $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{Si}(\text{CH}_2)_6\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$ 을 들 수 있다.
- [0619] 본 개시의 조성물에 포함되어도 되는 다른 성분의 함유량은, 본 개시의 조성물의 전체량에 대해, 10 질량% 이하가 바람직하고, 1 질량% 이하가 보다 바람직하다. 본 개시의 조성물이 특정 금속 화합물을 포함하는 경우, 특정 금속 화합물의 함유량은 본 개시의 조성물의 전체량에 대해 0.01 ~ 30 질량% 가 바람직하고, 0.01 ~ 10 질량% 가 보다 바람직하고, 0.05 ~ 5 질량% 가 더욱 바람직하다.
- [0620] 본 개시의 화합물과 다른 성분의 합계 함유량 (이하, 「고형분 농도」라고도 한다) 은, 본 개시의 조성물의 전체량에 대해, 0.001 ~ 40 질량% 가 바람직하고, 0.01 ~ 20 질량% 가 보다 바람직하고, 0.1 ~ 10 질량% 가 더욱 바람직하다. 본 개시의 조성물의 고형분 농도는, 가열 전의 조성물의 질량과 120 °C 의 대류식 건조기로 4 시간 가열한 후의 질량으로부터 산출되는 값이다.
- [0621] 본 개시의 조성물은, 액상 매체를 포함하는 점에서, 코팅 용도로서 유용하여, 코팅액으로서 사용할 수 있다.
- [0622] [표면 처리제]
- [0623] 일 양태에 있어서, 본 개시의 표면 처리제는, 본 개시의 화합물을 포함한다. 또, 본 개시의 표면 처리제는, 본 개시의 화합물과, 액상 매체를 포함하고 있어도 된다. 본 개시의 표면 처리제는, 본 개시의 조성물이어도 된다. 본 개시의 표면 처리제에 포함되는 액상 매체의 바람직한 양태는, 본 개시의 조성물에 포함되는 액상 매체의 바람직한 양태와 동일하다.
- [0624] 본 개시의 화합물은, 상기 기 1 과, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 상기 기 2 를 포함한다. 그 때문에, 본 개시의 화합물을 포함하는 표면 처리제를 사용함으로써, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 형성할 수 있다.
- [0625] [물품]
- [0626] 일 양태에 있어서, 본 개시의 물품은, 기재와, 기재 상에 배치되고, 본 개시의 표면 처리제로 표면 처리된 표면 처리층을 포함한다.
- [0627] 표면 처리층은, 기재의 표면의 일부에 형성되어도 되고, 기재의 표면 전체에 형성되어도 된다. 표면 처리층은, 기재의 표면에 막상으로 퍼져 있어도 되고, 도트상으로 점재되어 있어도 된다.
- [0628] 표면 처리층에 있어서, 본 개시의 화합물은, 반응성 실릴기의 일부 또는 전부의 가수분해가 진행되고, 또한, 실란올기의 탈수 축합 반응이 진행된 상태로 포함된다.
- [0629] 표면 처리층의 두께는 1 ~ 100 nm 가 바람직하고, 1 ~ 50 nm 가 보다 바람직하다. 표면 처리층의 두께가 1 nm 이상이면, 표면 처리에 의한 효과가 충분히 얻어지기 쉽다. 표면 처리층의 두께가 100 nm 이하이면, 이용 효율이 높다. 표면 처리층의 두께는, 박막 해석용 X 선 회절계 (제품명 「ATX-G」, RIGAKU 사 제조) 를 사용하여, X 선 반사율법에 의해 반사 X 선의 간섭 패턴을 얻어, 간섭 패턴의 진동 주기로부터 산출할 수 있

다.

- [0630] 기재의 종류는 특별히 한정되지 않고, 예를 들어, 발수성의 부여가 요구되고 있는 기재를 들 수 있다. 기재로는, 예를 들어, 다른 물품 (예를 들어, 스타일러스) 또는 사람의 손가락을 접촉시켜 사용하는 경우가 있는 기재 ; 조작시에 사람의 손가락으로 잡는 경우가 있는 기재 ; 및, 다른 물품 (예를 들어, 재치대) 상에 두는 경우가 있는 기재를 들 수 있다.
- [0631] 기재의 재질로는, 금속, 수지, 유리, 사파이어, 세라믹, 돌, 섬유, 부직포, 종이, 나무, 천연 피혁, 인공 피혁, 및 이들의 복합 재료를 들 수 있다. 유리는 화학 강화되어 있어도 된다.
- [0632] 기재로는, 건재, 장식 건재, 인테리어 용품, 수송 기기 (예를 들어, 자동차), 간판, 게시판, 음용기, 식기, 수조, 관상용 기구 (예를 들어, 액자, 상자), 실험 기구, 가구, 섬유 제품, 포장 용기 ; 아트, 스포츠, 게임 등에 사용하는, 유리 또는 수지 ; 휴대 전화 (예를 들어, 스마트폰), 휴대 정보 단말, 게임기, 리모컨 등의 기기에 있어서의 외장 부분 (표시부를 제외한다) 에 사용하는, 유리 또는 수지를 들 수 있다. 기재의 형상은, 관상이어도 되고, 필름상이어도 된다.
- [0633] 기재로는, 터치 패널용 기재, 디스플레이용 기재, 안경 렌즈가 바람직하고, 터치 패널용 기재가 특히 바람직하다. 터치 패널용 기재의 재료로는, 유리 또는 투명 수지가 바람직하다.
- [0634] 기재는, 일방의 표면 또는 양면이, 코로나 방전 처리, 플라즈마 처리, 플라즈마 그래프트 중합 처리 등의 표면 처리가 실시된 기재여도 된다. 표면 처리가 실시된 기재는, 표면 처리층과의 밀착성이 보다 우수하여, 표면 처리층의 내마모성이 보다 향상된다. 그 때문에, 기재의 표면 처리층과 접하는 측의 표면에 표면 처리를 실시하는 것이 바람직하다. 또한, 표면 처리가 실시된 기재는, 후술하는 하지층이 형성되는 경우에는, 하지층과의 밀착성이 보다 우수하고, 표면 처리층의 내마모성이 보다 향상된다. 그 때문에, 하지층이 형성되는 경우에는, 기재의 하지층과 접하는 측의 표면에 표면 처리를 실시하는 것이 바람직하다.
- [0635] 표면 처리층은, 기재의 표면 상에 직접 형성되어 있어도 되고, 기재와 표면 처리층 사이에 하지층이 형성되어 있어도 된다. 표면 처리층의 발수성 및 내마모성을 보다 향상시키는 관점에서, 본 개시의 물품은, 기재와, 기재 상에 배치된 하지층과, 하지층 상에 배치된 본 개시의 표면 처리제로 표면 처리된 표면 처리층을 포함하는 것이 바람직하다.
- [0636] 하지층은, 규소와, 주기표의 제 1 족 원소, 제 2 족 원소, 제 4 족 원소, 제 5 족 원소, 제 13 족 원소, 및 제 15 족 원소로 이루어지는 군에서 선택되는 적어도 1 개의 특정 원소를 포함하는 산화물을 포함하는 층이 바람직하다.
- [0637] 주기표의 제 1 족 원소 (이하, 「제 1 족 원소」라고도 한다) 란, 리튬, 나트륨, 칼륨, 루비듐 및 세슘을 의미한다. 제 1 족 원소로는, 하지층 상에 표면 처리층을 결합없이 보다 균일하게 형성할 수 있는 점, 또는, 샘플 사이에서의 하지층의 조성의 편차가 보다 억제되는 관점에서, 리튬, 나트륨, 칼륨이 바람직하고, 나트륨, 칼륨이 보다 바람직하다. 하지층에는, 제 1 족 원소가 2 종 이상 포함되어 있어도 된다.
- [0638] 주기표의 제 2 족 원소 (이하, 「제 2 족 원소」라고도 한다) 란, 베릴륨, 마그네슘, 칼슘, 스트론튬 및 바륨을 의미한다. 제 2 족 원소로는, 하지층 상에 표면 처리층을 결합없이 보다 균일하게 형성할 수 있는 점, 또는, 샘플 사이에서의 하지층의 조성의 편차가 보다 억제되는 관점에서, 마그네슘, 칼슘, 바륨이 바람직하고, 마그네슘, 칼슘이 보다 바람직하다. 하지층에는, 제 2 족 원소가 2 종 이상 포함되어 있어도 된다.
- [0639] 주기표의 제 4 족 원소 (이하, 「제 4 족 원소」라고도 한다) 란, 티탄, 지르코늄, 및 하프늄을 의미한다. 제 4 족 원소로는, 하지층 상에 표면 처리층을 결합없이 보다 균일하게 형성할 수 있는 관점, 또는, 샘플 사이에서의 하지층의 조성의 편차가 보다 억제되는 관점에서, 티탄, 지르코늄이 바람직하고, 티탄이 보다 바람직하다. 하지층에는, 제 4 족 원소가 2 종 이상 포함되어 있어도 된다.
- [0640] 주기표의 제 5 족 원소 (이하, 「제 5 족 원소」라고도 한다) 란, 바나듐, 니오브 및 탄탈을 의미한다. 제 5 족 원소로는, 표면 처리층의 내마모성이 보다 우수한 관점에서, 바나듐이 특히 바람직하다. 하지층에는, 제 5 족 원소가 2 종 이상 포함되어 있어도 된다.
- [0641] 주기표의 제 13 족 원소 (이하, 「제 13 족 원소」라고도 한다) 란, 붕소, 알루미늄, 갈륨 및 인듐을 의미한다. 제 13 족 원소로는, 하지층 상에 표면 처리층을 결합없이 보다 균일하게 형성할 수 있는 점, 또는, 샘플 사이에서의 하지층의 조성의 편차가 보다 억제되는 관점에서, 붕소, 알루미늄, 갈륨이 바람직하고, 붕소, 알루미늄

높이 보다 바람직하다. 하지층에는, 제 13 족 원소가 2 종 이상 포함되어 있어도 된다.

- [0642] 주기표의 제 15 족 원소 (이하, 「제 15 족 원소」라고도 한다) 란, 질소, 인, 비소, 안티몬 및 비스무트를 의미한다. 제 15 족 원소로는, 하지층 상에 표면 처리층을 결합없이 보다 균일하게 형성할 수 있는 관점, 또는, 샘플 사이에서의 하지층의 조성의 편차가 보다 억제되는 관점에서, 인, 안티몬, 비스무트가 바람직하고, 인, 비스무트가 보다 바람직하다. 하지층에는, 제 15 족 원소가 2 종 이상 포함되어 있어도 된다.
- [0643] 하지층에 포함되는 특정 원소로는, 제 1 족 원소, 제 2 족 원소, 제 13 족 원소가 표면 처리층의 내마모성이 보다 우수하기 때문에 바람직하고, 제 1 족 원소, 제 2 족 원소가 보다 바람직하고, 제 1 족 원소가 더욱 바람직하다.
- [0644] 특정 원소로서, 1 종만의 원소가 포함되어 있어도 되고 2 종 이상의 원소가 포함되어 있어도 된다.
- [0645] 하지층에 포함되는 산화물은, 상기 원소 (규소 및 특정 원소) 단독의 산화물의 혼합물 (예를 들어, 산화규소와 특정 원소의 산화물의 혼합물) 이어도 되고, 상기 원소를 2 종 이상 포함하는 복합 산화물이어도 되고, 상기 원소 단독의 산화물과 복합 산화물의 혼합물이어도 된다.
- [0646] 하지층 중의 규소의 몰 농도에 대한, 하지층 중의 특정 원소의 합계 몰 농도의 비 (특정 원소/규소) 는, 표면 처리층의 내마모성이 보다 우수한 관점에서, 0.02 ~ 2.90 인 것이 바람직하고, 0.10 ~ 2.00 인 것이 보다 바람직하고, 0.20 ~ 1.80 인 것이 더욱 바람직하다.
- [0647] 하지층 중의 각 원소의 몰 농도 (몰%) 는, 예를 들어, 이온 스퍼터링을 사용한 X 선 광 전자 분광법 (XPS) 에 의한 깊이 방향 분석에 의해 측정할 수 있다.
- [0648] 하지층은, 단층이어도 되고 복층이어도 된다. 하지층은, 표면에 요철을 갖고 있어도 된다.
- [0649] 하지층의 두께는, 1 ~ 100 nm 가 바람직하고, 1 ~ 50 nm 가 보다 바람직하고, 2 ~ 20 nm 가 더욱 바람직하다. 하지층의 두께가 상기 하한값 이상이면, 하지층에 의한 표면 처리층의 밀착성이 보다 향상되어, 표면 처리층의 내마모성이 보다 우수하다. 하지층의 두께가 상기 상한값 이하이면, 하지층 자체의 내마모성이 우수하다.
- [0650] 하지층의 두께는, 투과 전자 현미경 (TEM) 에 의한 하지층의 단면 관찰에 의해 측정된다.
- [0651] 하지층은, 예를 들어, 증착 재료를 사용한 증착법, 또는, 웨트 코팅법에 의해 형성할 수 있다.
- [0652] 증착법에서 사용하는 증착 재료는, 규소 및 특정 원소를 포함하는 산화물을 함유하는 것이 바람직하다.
- [0653] 증착 재료의 형태의 구체예로는, 분체, 용융체, 소결체, 조립체, 파쇄체를 들 수 있고, 취급성의 관점에서, 용융체, 소결체, 조립체가 바람직하다.
- [0654] 여기서, 용융체란, 증착 재료의 분체를 고온에서 용융시킨 후, 냉각 고화하여 얻어진 고형물을 의미한다. 소결체란, 증착 재료의 분체를 소성하여 얻어진 고형물을 의미하고, 필요에 따라, 증착 재료의 분체 대신에, 분체를 프레스 형성하여 성형체를 사용해도 된다. 조립체란, 증착 재료의 분체와 액상 매체 (예를 들어, 물, 유기 용매) 를 혼련하여 입자를 얻은 후, 입자를 건조시켜 얻어진 고형물을 의미한다.
- [0655] 증착 재료는, 예를 들어, 이하의 방법으로 제조할 수 있다.
- [0656] · 산화규소의 분체와, 특정 원소의 산화물의 분체를 혼합하여, 증착 재료의 분체를 얻는 방법.
- [0657] · 상기 증착 재료의 분체 및 물을 혼련하여 입자를 얻은 후, 입자를 건조시켜, 증착 재료의 조립체를 얻는 방법.
- [0658] · 규소를 포함하는 분체 (예를 들어, 산화규소로 이루어지는 분체, 규사, 실리카 겔) 와, 특정 원소를 포함하는 분체 (예를 들어, 특정 원소의 산화물의 분체, 탄산염, 황산염, 질산염, 옥살산염, 수산화물) 와, 물을 혼합한 혼합물을 건조시킨 후, 건조 후의 혼합물 또는 이것을 프레스 성형한 성형체를 소성하여, 소결체를 얻는 방법.
- [0659] · 규소를 포함하는 분체 (예를 들어, 산화규소로 이루어지는 분체, 규사, 실리카 겔) 와, 특정 원소를 포함하는 분체 (예를 들어, 특정 원소의 산화물의 분체, 탄산염, 황산염, 질산염, 옥살산염, 수산화물) 를 고온에서 용융시킨 후, 용융물을 냉각 고화시켜, 용융체를 얻는 방법.
- [0660] 증착 재료를 사용한 증착법의 구체예로는, 진공 증착법을 들 수 있다. 진공 증착법은, 증착 재료를 진공조 내에서 증발시켜, 기재의 표면에 부착시키는 방법이다.

- [0661] 증착시의 온도 (예를 들어, 진공 증착 장치를 사용할 때에는, 증착 재료를 배치하는 보트의 온도) 로는, 100 ~ 3,000 °C 가 바람직하고, 500 ~ 3,000 °C 가 보다 바람직하다.
- [0662] 증착시의 압력 (예를 들어, 진공 증착 장치를 사용할 때에는, 증착 재료를 배치하는 조 내의 압력) 으로는, 1 Pa 이하가 바람직하고, 0.1 Pa 이하가 보다 바람직하다.
- [0663] 증착 재료를 사용하여 하지층을 형성하는 경우, 1 개의 증착 재료를 사용해도 되고, 상이한 원소를 포함하는 2 개 이상의 증착 재료를 사용해도 된다.
- [0664] 증착 재료의 증발 방법의 구체예로는, 고용점 금속제 저항 가열용 보트 상에서 증착 재료를 용융시켜, 증발시키는 저항 가열법, 전자빔을 증착 재료에 조사하고, 증착 재료를 직접 가열하여 표면을 용융시키고, 증발시키는 전자총법을 들 수 있다. 증착 재료의 증발 방법으로는, 국소적으로 가열할 수 있기 때문에 고용점 물질도 증발할 수 있는 점, 전자빔이 닿지 않은 곳은 저온이기 때문에 용기와의 반응이나 불순물 혼입의 우려가 없는 관점에서, 전자총법이 바람직하다.
- [0665] 증착 재료의 증발 방법으로는, 복수의 보트를 사용해도 되고, 단독의 보트에 모든 증착 재료를 넣어 사용해도 된다. 증착 방법은, 공증착이어도 되고, 교호 증착 등이어도 된다. 구체적으로는, 실리카와 특정원을 동일한 보트에 혼합하여 사용하는 예, 실리카와 특정 원소원을 별개의 보트에 넣어 공증착하는 예, 동일하게 별개의 보트에 넣어 교호 증착하는 예를 들 수 있다. 증착의 조건, 순번 등은 하지층의 구성에 따라 적절히 선택된다.
- [0666] 웨트 코팅법에서는, 규소를 포함하는 화합물과, 특정 원소를 포함하는 화합물과, 액상 매체를 포함하는 코팅액을 사용한 웨트 코팅법에 의해, 기재 상에 하지층을 형성하는 것이 바람직하다.
- [0667] 규소 화합물의 구체예로는, 산화규소, 규산, 규산의 부분 축합물, 알콕시실란, 알콕시실란의 부분 가수분해 축합물을 들 수 있다.
- [0668] 특정 원소를 포함하는 화합물의 구체예로는, 특정 원소의 산화물, 특정 원소의 알콕시드, 특정 원소의 탄산염, 특정 원소의 황산염, 특정 원소의 질산염, 특정 원소의 옥살산염, 특정 원소의 수산화물을 들 수 있다.
- [0669] 액상 매체로는, 본 개시의 조성물에 포함되는 액상 매체와 동일한 것을 들 수 있다.
- [0670] 액상 매체의 함유량은, 하지층의 형성에 사용하는 코팅액의 전체량에 대해, 0.01 ~ 20 질량% 가 바람직하고, 0.1 ~ 10 질량% 가 보다 바람직하다.
- [0671] 하지층을 형성하기 위한 웨트 코팅법의 구체예로는, 스핀 코팅법, 와이프 코팅법, 스프레이 코팅법, 스퀴지 코팅법, 딥 코팅법, 다이 코팅법, 잉크젯법, 플로 코팅법, 롤 코팅법, 캐스트법, 랭뮤어·블로젯법, 그라비아 코팅법을 들 수 있다.
- [0672] 코팅액을 웨트 코팅한 후, 도막을 건조시키는 것이 바람직하다. 도막의 건조 온도로는, 20 ~ 200 °C 가 바람직하고, 80 ~ 160 °C 가 보다 바람직하다.
- [0673] 본 개시의 물품은, 광학 부재인 것이 바람직하다. 광학 부재로는, 예를 들어, 카 내비게이션, 휴대 전화, 스마트폰, 디지털 카메라, 디지털 비디오 카메라, PDA, 포터블 오디오 플레이어, 카 오디오, 게임 기기, 안경 렌즈, 카메라 렌즈, 렌즈 필터, 선글라스, 위 카메라 등의 의료용 기기, 복사기, PC, 디스플레이 (예를 들어, 액정 디스플레이, 유기 EL 디스플레이, 플라즈마 디스플레이, 터치 패널 디스플레이), 터치 패널, 보호 필름, 및 반사 방지 필름을 들 수 있다. 특히, 물품은, 디스플레이 또는 터치 패널인 것이 바람직하다.
- [0674] [물품의 제조 방법]
- [0675] 본 개시의 물품의 제조 방법은, 예를 들어, 기재에 대하여, 본 개시의 표면 처리제를 사용하여 표면 처리를 실시하여, 기재 상에 표면 처리층이 형성된 물품을 제조한다는 방법이다. 표면 처리로는, 드라이 코팅법 및 웨트 코팅법을 들 수 있다.
- [0676] 드라이 코팅법으로는, 진공 증착, CVD, 스퍼터링 등의 수법을 들 수 있다. 드라이 코팅법으로는, 화합물의 분해를 억제하는 점, 및 장치의 간편함의 관점에서, 진공 증착법이 바람직하다. 진공 증착시에는, 철, 강 등의 금속 다공체에, 본 개시의 화합물을 함침시킨 펠릿상 물질을 사용해도 된다. 본 개시의 화합물 및 액상 매체를 포함하는 조성물을, 철, 강 등의 금속 다공체에 함침시키고, 액상 매체를 건조시켜, 본 개시의 화합물을 함침시킨 펠릿상 물질을 사용해도 된다.

[0677] 웨트 코팅법으로는, 예를 들어, 스핀 코팅법, 와이프 코팅법, 스프레이 코팅법, 스퀴지 코팅법, 딥 코팅법, 다이 코팅법, 잉크젯법, 플로 코팅법, 롤 코팅법, 캐스트법, 랭뮤어·블로젯법, 그라비아 코팅법을 들 수 있다.

[0678] 표면 처리층의 내마모성을 향상시키기 위해서, 필요에 따라, 본 개시의 화합물과 기재의 반응을 촉진시키기 위한 조작을 실시해도 된다. 그 조작으로는, 가열, 가습, 광 조사 등을 들 수 있다.

[0679] 예를 들어, 수분을 갖는 대기 중에서 표면 처리층이 형성된 기재를 가열하고, 가수분해성기의 가수분해 반응, 기재의 표면의 수산기 등과 실란올기의 반응, 실란올기의 축합 반응에 의한 실록산 결합의 생성 등의 반응을 촉진시킬 수 있다.

[0680] 표면 처리 후, 표면 처리층 중의 화합물로서, 다른 화합물 또는 기재와 화학 결합하고 있지 않은 화합물은, 필요에 따라 제거해도 된다. 제거하는 방법으로는, 예를 들어, 표면 처리층에 용매를 흘려 보내는 방법, 용매를 스며들게 한 천으로 닦아내는 방법 등을 들 수 있다.

[0681] 실시예

[0682] 이하에 실시예를 사용하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명하지만, 본 발명은 이들 실시예에 한정되는 것은 아니다.

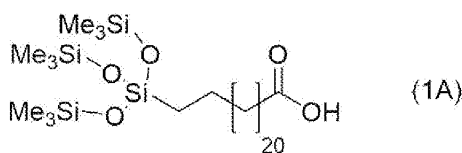
[0683] [화합물 1C 의 합성]

[0684] 22-트리코세산 (2.0 g), 트리스(트리메틸실릴옥시)실란 (1.7 g), 및 1,3-비스트리플루오로메틸벤젠 (10 g) 을 첨가하고 교반하였다. 그 후, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 착물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 3 %, 0.1 g) 및 아닐린 (0.1 g) 을 첨가하고 85 ℃ 에서 24 시간 교반하였다. 25 ℃ 까지 냉각시킨 후, 용매를 증류 제거하고, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 아세트산에틸/헥산) 를 실시함으로써, 화합물 1A 를 3.0 g 얻었다. 화합물 1A 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) : δ 2.31 (t, J = 7.1 Hz, 2H), 1.60 (p, J = 7.1 Hz, 2H), 1.40 (pd, J = 7.0, 0.8 Hz, 2H), 1.33 - 1.20 (m, 36H), 0.36 (t, J = 7.0 Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[0685]

[0686] [화학식 57]



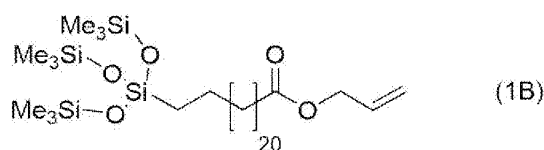
[0687]

[0688] 화합물 1A (3.0 g) 에 알릴알코올 (30 g) 을 첨가하고 교반한 후, N-메틸모르폴린 (1.0 g), 4-(4,6-디메톡시-1,3,5-트리아진-2-일)-4-메틸모르폴리늄클로라이드 (3.0 g) 를 첨가하였다. 50 ℃ 로 승온시키고, 24 시간 가열 교반하였다. 25 ℃ 까지 냉각시킨 후, 용매를 증류 제거하고, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 아세트산에틸/헥산) 를 실시함으로써, 화합물 1B 를 2.1 g 얻었다. 화합물 1B 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 6.03 - 5.82 (m, 1H), 5.31 (dt, $J = 13.3, 1.0$ Hz, 2H), 4.57 (dt, $J = 6.2, 1.0$ Hz, 2H), 1.69 - 1.62 (m, 2H), 1.62 - 1.53 (m, 2H), 1.40 (pd, $J = 7.0, 0.8$ Hz, 2H), 1.36 - 1.14 (m, 36H), 0.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[0689]

[0690] [화학식 58]



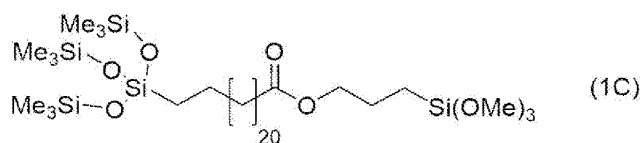
[0691]

[0692] 화합물 1B (2.1 g) 에 1,3-비스트리플루오로메틸벤젠 (10 g) 을 첨가하고 교반하였다. 그 후, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 촉물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 3 %, 0.1 g), 아닐린 (0.1 g), 트리메톡시실란 (0.5 g) 을 첨가하고 40 °C 에서 교반하였다. 용매를 감압 증류 제거함으로써, 화합물 1C 를 2.4 g 얻었다. 화합물 1C 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 4.09 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 3.58 (s, 9H), 2.31 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.80 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.58 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.40 (pd, $J = 7.0, 0.8$ Hz, 2H), 1.35 - 1.14 (m, 36H), 0.66 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 0.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[0693]

[0694] [화학식 59]

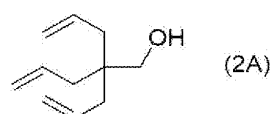


[0695]

[0696] [화합물 2C 의 합성]

[0697] 국제 공개 제2021/054413호의 합성에 3 ~ 5 에 기재된 방법에 따라, 화합물 2A 를 얻었다.

[0698] [화학식 60]



[0699]

[0700] 화합물 1A (3.0 g) 에 화합물 2A (5.0 g) 를 첨가하고 교반한 후, N-메틸모르폴린 (1.0 g), 4-(4,6-디메톡시-1,3,5-트리아진-2-일)-4-메틸모르폴리늄클로라이드 (3.0 g) 를 첨가하였다. 50 °C 로 승온시키고, 24 시간 교반하였다. 25 °C 까지 냉각시킨 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 아세

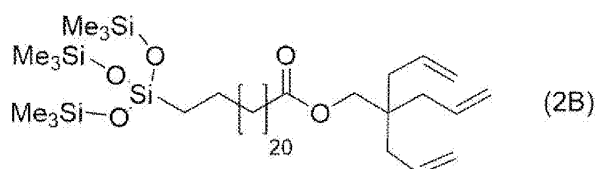
트산에틸/헥산)를 실시함으로써, 화합물 2B를 2.4 g 얻었다. 화합물 2B의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 5.66 (ddt, $J = 13.7, 12.6, 6.2$ Hz, 3H), 5.13 (dt, $J = 13.4, 1.1$ Hz, 6H), 3.98 (s, 2H), 2.37 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.91 (dt, $J = 6.2, 1.0$ Hz, 6H), 1.58 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.40 (pd, $J = 7.0, 0.8$ Hz, 2H), 1.35 - 1.14 (m, 36H), 0.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[0701]

[0702]

[화학식 61]



[0703]

[0704]

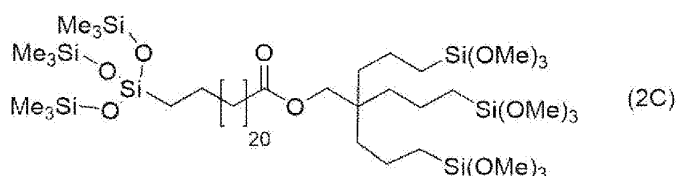
화합물 2B (2.4 g)에 1,3-비스트리플루오로메틸벤젠 (10 g)을 첨가하고 교반하였다. 그 후, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 촉물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 3%, 0.1 g), 아닐린 (0.1 g), 트리메톡시실란 (1.5 g)을 첨가하고 40 °C에서 교반하였다. 용매를 감압 증류 제거함으로써, 화합물 2C를 2.9 g 얻었다. 화합물 2C의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 4.02 (s, 2H), 3.58 (s, 27H), 2.37 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.58 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.42 (dpd, $J = 17.4, 7.0, 0.8$ Hz, 8H), 1.34 - 1.18 (m, 42H), 0.69 (t, $J = 7.0$ Hz, 6H), 0.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[0705]

[0706]

[화학식 62]



[0707]

[0708]

[화합물 3B의 합성]

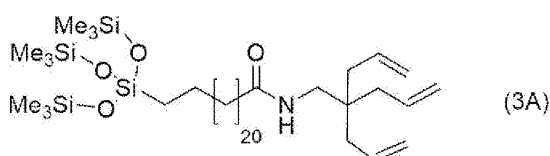
[0709]

화합물 1A (3.0 g)에 $\text{H}_2\text{N-CH}_2\text{-C}(\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2)_3$ (1.5 g), 메탄올 (10 g)을 첨가하고 교반한 후, N-메틸모르폴린 (1.0 g), 4-(4,6-디메톡시-1,3,5-트리아진-2-일)-4-메틸모르폴리늄클로라이드 (3.0 g)를 첨가하였다. 50 °C로 승온시키고, 24시간 교반하였다. 25 °C까지 냉각시킨 후, 용매를 증류 제거하고, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 아세트산에틸/헥산)를 실시함으로써, 화합물 3A를 2.2 g

얻었다. 화합물 3A 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 6.67 (t, $J = 8.0$ Hz, 1H), 5.74-5.52 (m, 3H), 5.13 (dt, $J = 13.4, 1.1$ Hz, 6H), 3.25 (d, $J = 8.1$ Hz, 2H), 2.20 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.86 (dt, $J = 6.1, 0.9$ Hz, 6H), 1.63 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.40 (pd, $J = 7.0, 0.8$ Hz, 2H), 1.35-1.17 (m, 36H), 0.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

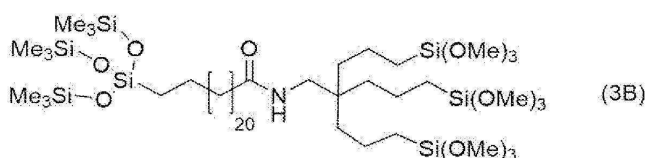
[화학식 63]



화합물 3A (2.2 g) 에 1,3-비스트리플루오로메틸벤젠 (10 g) 을 첨가하고 교반하였다. 그 후, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 촉물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 3 %, 0.1 g), 아닐린 (0.1 g), 트리메톡시실란 (1.5 g) 을 첨가하고 40 °C 에서 교반하였다. 용매를 감압 증류 제거함으로써, 화합물 3B 를 2.7 g 얻었다. 화합물 3B 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 6.81 (t, $J = 7.2$ Hz, 1H), 3.58 (s, 27H), 3.29 (d, $J = 7.1$ Hz, 2H), 2.20 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.63 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.41 (pdd, $J = 7.0, 4.7, 0.8$ Hz, 8H), 1.34-1.17 (m, 35H), 0.69 (t, $J = 7.0$ Hz, 6H), 0.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[화학식 64]

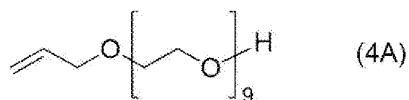


[화합물 4F 의 합성]

평균 분자량 400 의 폴리에틸렌글리콜 (8.0 g) 을 테트라하이드로푸란에 용해시키고 (이하, 「THF」 라고도 기재한다. 20 mL), 탄산세슘 (8.0 g), 알릴브로마이드 (2.4 g) 를 첨가하고 50 °C 에서 24 시간 교반하였다. 그 후, 용매를 증류 제거하고, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 메탄올/디클로로메탄) 를 실시함으로써, 화합물 4A 를 3.1 g 얻었다. 화합물 4A 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 5.85 (tt, $J = 13.7, 6.2$ Hz, 1H), 5.22 (dt, $J = 13.5, 1.1$ Hz, 2H), 4.02 - 3.80 (m, 4H), 3.80 - 3.46 (m, 34H).

[화학식 65]

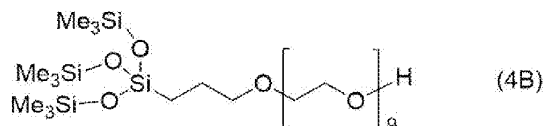


화합물 4A (3.0 g), 트리스(트리메틸실릴옥시)실란 (2.2 g), 1,3-비스트리플루오로메틸벤젠 (10 g) 을 첨가하고 교반하였다. 그 후, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 착물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 3 %, 0.1 g), 아닐린 (0.1 g) 을 첨가하고 85 $^{\circ}\text{C}$ 에서 24 시간 교반하였다. 25 $^{\circ}\text{C}$ 까지 냉각시킨 후, 용매를 증류 제거하고, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 아세트산에틸/헥산) 를 실시함으로써, 화합물 4B 를 4.1 g 얻었다. 화합물 4B 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 3.79 - 3.53 (m, 36H), 3.42 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.68 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 0.43 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H)

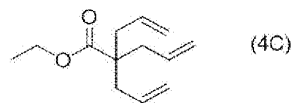
.

[화학식 66]



국제 공개 제2021/054413호의 합성에 3 ~ 4 에 기재된 방법에 따라, 화합물 4C 를 얻었다.

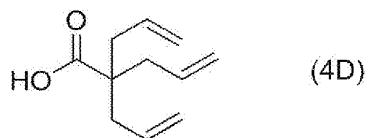
[화학식 67]



화합물 4C (10 g) 에 메탄올 (50 g), 수산화칼륨 (5 g) 을 첨가하고 24 시간 가열 환류하였다. 25 $^{\circ}\text{C}$ 까지 냉각시킨 후, 염산, 디클로로메탄을 첨가하여 추출하고, 용매를 증류 제거한 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 메탄올/디클로로메탄) 를 실시함으로써, 화합물 4D 를 8.3 g 얻었다. 화합물 4D 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 5.71 (ddt, $J = 13.7, 12.6, 6.2$ Hz, 3H), 5.16 (dt, $J = 13.4, 1.1$ Hz, 6H), 2.20 (dt, $J = 6.2, 0.9$ Hz, 6H).

[0731] [화학식 68]



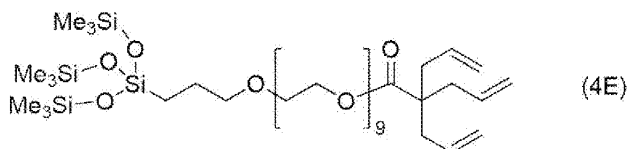
[0732]

[0733] 화합물 4B (4.0 g) 에 화합물 4D (1.5 g), THF (10 mL) 를 첨가하고 교반한 후, N-메틸모르폴린 (1.0 g), 4-(4,6-디메톡시-1,3,5-트리아진-2-일)-4-메틸모르폴리늄클로라이드 (3.0 g) 를 첨가하였다. 50 °C 로 승온시키고, 50 °C 에서 24 시간 교반하였다. 25 °C 까지 냉각시킨 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 아세트산에틸/헥산) 를 실시함으로써, 화합물 4E 를 3.5 g 얻었다. 화합물 4E 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 5.71 (ddt, $J = 13.6, 12.6, 6.2$ Hz, 3H), 5.16 (dt, $J = 13.4, 1.1$ Hz, 6H), 4.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 3.84 - 3.59 (m, 34H), 3.42 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 2.22 (dt, $J = 6.2, 1.0$ Hz, 6H), 1.68 (p, $J = 7.1$ Hz, 2H), 0.43 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[0734]

[0735] [화학식 69]



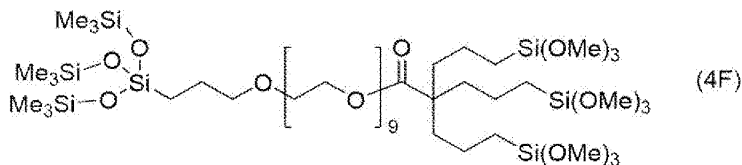
[0736]

[0737] 화합물 4E (3.0 g) 에 1,3-비스트리플루오로메틸벤젠 (10 g) 을 첨가하고 교반하였다. 그 후, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 착물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 3 %, 0.1 g), 아닐린 (0.1 g), 트리메톡시실란 (1.5 g) 을 첨가하고 40 °C 에서 교반한 후, 용매를 감압 증류 제거함으로써, 화합물 4F 를 3.3 g 얻었다. 화합물 4F 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ 4.36 (t, $J = 7.0$ Hz, 2H), 3.85 - 3.53 (m, 61H), 3.42 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 1.74 - 1.59 (m, 8H), 1.59 - 1.43 (m, 6H), 0.72 (t, $J = 7.0$ Hz, 6H), 0.43 (t, $J = 7.1$ Hz, 2H), 0.10 (s, 27H).

[0738]

[0739] [화학식 70]

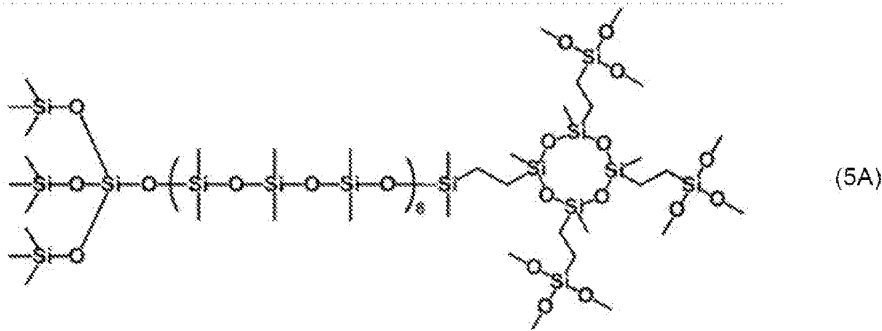


[0740]

[0741] [화합물 5A 의 합성]

[0742] 일본 공개특허공보 2017-119849호의 실시예 1 에 기재된 방법에 따라, 화합물 5A 를 얻었다.

[0743] [화합식 71]



[0744]

[0745] [화합물 6A 의 준비]

[0746] 화합물 6A 로서, 옥타데실트리메톡시실란 (도쿄 화학 공업사 제조) 을, 준비하였다.

[0747] 다음으로, 상기 화합물 1C, 2C, 3B, 4F, 5A, 6A 를 사용하여, 기재에 대해 표면 처리를 실시하였다. 표면 처리 방법으로서, 드라이 코팅법을 사용하였다. 기재로서, 화학 강화 유리를 사용하였다.

[0748] <드라이 코팅법>

[0749] 드라이 코팅은, 진공 증착 장치 (제품명 「VTR-350M」, ULVAC 사 제조) 를 사용하여 실시하였다. 각 화합물의 20 질량% 아세트산에틸 용액 (0.5 g) 을, 진공 증착 장치 내의 폴리브텐제 보트에 충전하고, 진공 증착 장치 내의 압력이 1×10^{-3} Pa 이하가 되도록 배기하였다. 보트를 승온 속도 10 °C/분 이하의 속도로 가열하고, 수정 발진식 막후계에 의한 증착 속도가 1 nm/초를 초과한 시점에서 셔터를 열어 기재의 표면에 대한 성막을 개시시켰다. 막두께가 약 50 nm 가 된 시점에서 셔터를 닫아 기재의 표면에 대한 성막을 종료시켰다. 화합물이 퇴적된 기재를, 200 °C 에서 30 분간 가열 처리하고, 기재의 표면에 표면 처리층을 갖는 물품을 얻었다.

[0750] 드라이 코팅법에 의해 얻어진 물품에 대하여, 발수성 및 내마모성의 평가를 실시하였다. 평가 방법은, 이하와 같다.

[0751] <발수성>

[0752] 물품의 표면 처리층 상에, 약 2 μ l 의 증류수를 떨어뜨리고, 접촉각 측정 장치 (제품명 「DM-500」, 교와 계면과학사 제조) 를 사용하여, 초기의 물 접촉각을 측정하였다. 표면 처리층 상의 5 개 지점에서 측정을 실시하고, 평균값을 산출하였다. 또한, 물 접촉각의 산출에는 2 θ 법을 사용하였다. 평가 기준은 이하와 같다. A 는, 실용상 문제 없는 레벨이다.

[0753] A : 물 접촉각이 108° 이상이다.

[0754] B : 물 접촉각이 108° 미만이다.

[0755] <내마모성>

[0756] 물품의 표면 처리층에 대하여, JIS L0849 : 2013 (대응 ISO : 105-X12 : 2001) 에 준거하여, 왕복식 트래버스 시험기 (케이엔티사 제조) 를 이용하여, 스틸울 본스타 (#0000) 를 압력 98.07 kPa, 속도 320 cm/분으로 1 만회 왕복시킨 후에, 마찰 시험 후의 물 접촉각을 측정하였다. 마찰 시험 후의 물 접촉각의 측정 방법은, 상기 발수성의 평가 방법에 있어서의, 초기의 물 접촉각의 측정 방법과 동일하다. 마찰 시험에 의한 물 접촉각의 저하도에 기초하여, 내마모성의 평가를 실시하였다. 물 접촉각의 저하도가 작을수록, 내마모성이 우수하다고 말할 수 있다. 평가 기준은 이하와 같다. A 및 B 는, 실용상 문제 없는 레벨이다.

[0757] 물 접촉각의 저하도 = (초기의 물 접촉각) - (마찰 시험 후의 물 접촉각)

[0758] A : 물 접촉각의 저하도가 5° 이하였다.

[0759] B : 물 접촉각의 저하도가 5° 초과 10° 이하였다.

[0760] C : 물 접촉각의 저하도가 10° 초과였다.

[0761] 평가 결과를 표 1 에 나타낸다. 표 1 중, 화합물이, 기 1, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조, 또는 기 2 를 포함하는 경우에는 「Y」, 포함하지 않는 경우에는 「N」 으로 기재하였다.

[0762] 예 1 ~ 4 는, 실시예이고, 예 5 및 예 6 은, 비교예이다.

표 1

	화합물				평가	
	종류	기1	부분 구조	기2	발수성	내마모성
예 1	화합물 1C	Y	Y	Y	A	B
예 2	화합물 2C	Y	Y	Y	A	A
예 3	화합물 3B	Y	Y	Y	A	A
예 4	화합물 4F	Y	Y	Y	A	A
예 5	화합물 5A	Y	N	Y	A	C
예 6	화합물 6A	N	Y	Y	B	B

[0763]

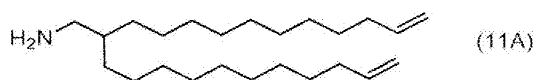
[0764] 표 1 에 나타내는 바와 같이, 예 1 ~ 4 의 화합물은, 기 1 과, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 기 2 를 포함하기 때문에, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 형성할 수 있는 것을 알 수 있었다.

[0765] 한편, 예 5 의 화합물은, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조를 포함하지 않으며, 내마모성이 떨어지는 것을 알 수 있었다. 예 6 의 화합물은, 기 1 을 포함하지 않으며, 발수성이 떨어지는 것을 알 수 있었다.

[0766] [화합물 11F 의 합성]

[0767] 국제 공개 제2021/054413 에 기재된 방법에 따라, 화합물 11A 를 얻었다.

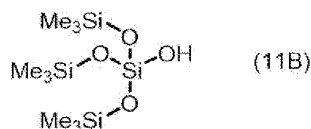
[0768] [화학식 72]



[0769]

[0770] 일본 공개특허공보 2017-119849호에 기재된 방법에 따라, 화합물 11B 를 얻었다.

[0771] [화학식 73]



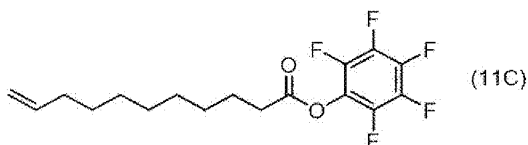
[0772]

[0773] 질소 분위기하, 100 mL 플라스크에 2,3,4,5,6-펜타플루오로페놀 (6.8 g), THF (42 mL), 트리에틸아민 (5.1 g) 을 첨가하고 25 °C 에서 교반하였다. 반응 혼합물에 10-운데세노일클로라이드 (5.0 g) 를 적하하고, 1 시간 교반하였다. 반응액을 여과하고, 용매와 저비점 성분을 감압 증류 제거하고, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 헥산/아세트산에틸) 를 실시함으로써, 화합물 11C 를 7.9 g 얻었다. 화합물 11C 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.74 (ddt, J = 16.9, 10.2, 6.6 Hz, 1H), 5.05 – 4.77 (m, 2H), 2.59 (t, J = 7.4 Hz, 2H), 1.97 (q, J = 7.1 Hz, 2H), 1.70 (p, J = 7.4 Hz, 2H), 1.42 – 1.08 (m, 10H).

[0774]

[0775] [화합식 74]



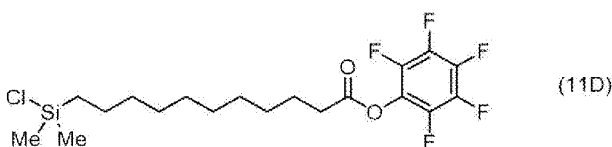
[0776]

[0777] 질소 분위기하, 200 mL 플라스크에 화합물 11C (5.6 g), THF (5.0 mL), 클로로디메틸실란 (2.3 g) 의 혼합물에, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 착물의 자일렌 용액 (백금 함유량 : 3 질량%, 0.10 mL) 을 첨가하고 2 시간 교반하였다. 용매와 저비점 성분을 감압 증류 제거함으로써, 화합물 11D 를 7.2 g 얻었다. 화합물 11D 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 2.63 (t, J = 7.4 Hz, 2H), 1.74 (p, J = 7.4 Hz, 2H), 1.46 – 1.17 (m, 14H), 0.90 – 0.69 (m, 2H), 0.37 (s, 6H).

[0778]

[0779] [화합식 75]



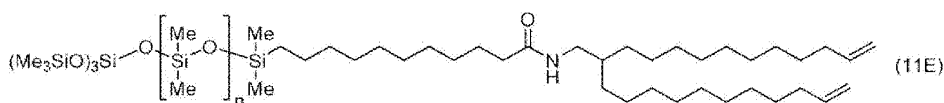
[0780]

[0781] 질소 분위기하, 3 구 플라스크에 트리스(트리메틸실록시)실란올 (2.5 g), THF (20 mL) 를 첨가하고 교반하였다. 0 °C 로 냉각시키고, n-BuLi 의 헥산 용액 (1.6 M, 5.0 mL) 을 적하하였다. 헥사메틸시클로트리실록산의 THF 용액 (1.0 M, 8.8 mL) 을 적하하고, 추가로 헥사메틸시클로트리실록산의 THF 용액 (1.0 M, 24 mL) 을 적하하고, 2 시간 교반하였다. 그 후, 화합물 11D (3.6 g) 를 첨가하고 1 시간 교반한 후, 화합물 11A (3.2 g) 를 첨가하고 1 시간 교반하였다. 반응액에 헥산, 이온 교환수를 순차 첨가하고 분액하여, 유기층을 분리하였다. 용매와 저비점 성분을 감압 증류 제거한 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 헥산/아세트산에틸) 를 실시함으로써, 화합물 11E 를 0.19 g 얻었다. 화합물 11E 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 11E 중, n 의 평균값은 8 이었다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.71 (ddt, $J = 16.9, 10.2, 6.7$ Hz, 2H), 5.24 (t, $J = 5.7$ Hz, 1H), 4.95 – 4.78 (m, 4H), 3.08 (t, $J = 5.9$ Hz, 2H), 2.06 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 1.94 (q, $J = 6.9$ Hz, 4H), 1.46 – 0.98 (m, 49H), 0.42 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), –0.06 (s, 79H)

[0782]

[0783] [화합식 76]



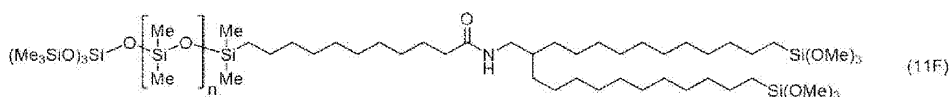
[0784]

[0785] 화합물 11E (0.19 g) 를 사용하여, 후술하는 화합물 13B 의 합성과 동일한 방법으로, 화합물 11F 를 0.21 g 얻었다. 화합물 11F 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 11F 중, n 의 평균값은 8 이었다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.26 – 5.17 (m, 1H), 3.47 (s, 18H), 3.08 (t, $J = 6.0$ Hz, 2H), 2.12 – 1.98 (m, 2H), 1.46 – 0.98 (m, 57H), 0.63 – 0.46 (m, 4H), 0.45 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), –0.06 (s, 81H).

[0786]

[0787] [화합식 77]



[0788]

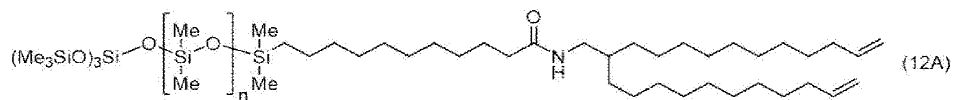
[0789] [화합물 12B 의 합성]

[0790] 화합물 11E 의 합성과 동일하게 하여, 반응을 실시하고, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 헥산/아세트산에틸) 를 실시함으로써, 화합물 12A 를 0.86 g 얻었다. 화합물 12A 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 12A 중, n 의 평균값은 14 였다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.74 (ddt, $J = 16.9, 10.1, 6.7$ Hz, 2H), 5.25 (q, $J = 5.5$ Hz, 1H), 5.13 – 4.75 (m, 4H), 3.11 (t, $J = 5.9$ Hz, 2H), 2.09 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 1.96 (q, $J = 7.0$ Hz, 4H), 1.46 – 0.98 (m, 49H), 0.45 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 0.05 (s, 117H).

[0791]

[0792] [화학식 78]

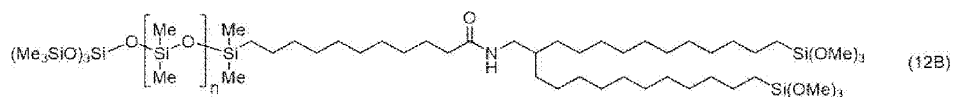


[0793]

[0794] 화합물 12A (0.86 g) 를 사용하여, 후술하는 화합물 13B 와 동일한 방법으로, 화합물 12B 를 0.88 g 얻었다. 화합물 12B 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 12B 중, n 의 평균값 14 였다.

[0795]

[0796] [화학식 79]



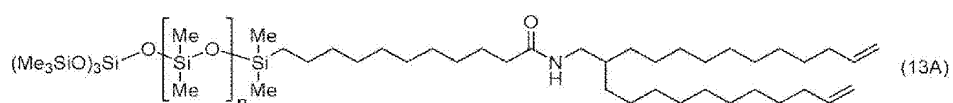
[0797]

[0798] [화합물 13B 의 합성]

[0799] 질소 분위기하, 3 구 플라스크에 트리스(트리메틸실록시)실란올 (1.3 g), THF (20 mL) 를 첨가하고 교반하였다. 0 °C 로 냉각시키고, n-BuLi 의 헥산 용액 (1.6 M, 2.4 mL) 을 적하하였다. 헥사메틸시클로트리실록산의 THF 용액 (1.1 M, 4.0 mL) 을 적하하고, 추가로 헥사메틸시클로트리실록산의 THF 용액 (1.1 M, 22 mL) 을 적하하고, 7 시간 교반하였다. 그 후, 화합물 11D (3.6 g) 를 첨가하고 1 시간 교반한 후, 화합물 11A (3.2 g) 를 첨가하고 1 시간 교반하였다. 반응액에 헥산, 이온 교환수를 순차 첨가하고 분액하여, 유기층을 분리하였다. 용매와 저비점 성분을 감압 증류 제거한 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 헥산/아세트산에틸) 를 실시함으로써, 화합물 13A 를 0.98 g 얻었다. 화합물 13A 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 13A 중, n 의 평균값은 21 이었다.

[0800]

[0801] [화학식 80]



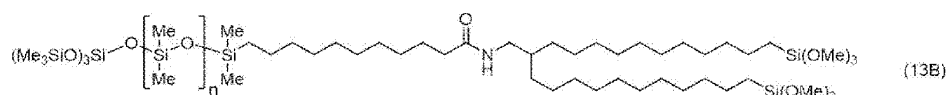
[0802]

[0803] 디클로로메탄 (10 g) 에 용해한 화합물 13A (0.80 g) 에, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 착물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 : 3 질량%, 4.1 mg), 아닐린 (2.6 mg), 트리메톡시실란 (0.40 g) 을 첨가하고 25

℃ 에서 2 시간 교반하였다. 용매를 감압 증류 제거함으로써, 화합물 13B 를 0.69 g 얻었다. 화합물 13B 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 13B 중, n 의 평균값은 21 이었다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.31 (d, $J = 4.8$ Hz, 1H), 3.57 (s, 18H), 3.18 (t, $J = 6.0$ Hz, 2H), 2.31 – 2.11 (m, 2H), 1.64 – 1.25 (m, 57H), 0.64 (m, 4H), 0.52 (t, $J = 7.7$ Hz, 2H), 0.09 (s, 159H).

[화합식 81]

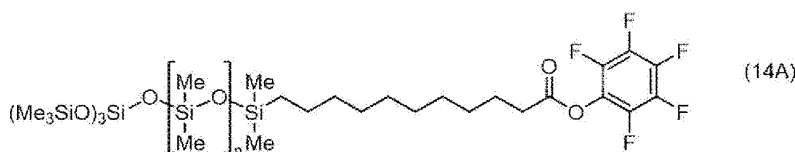


[화합물 14C 의 합성]

질소 분위기하, 3 구 플라스크에 트리스(트리메틸실록시)실란올 (1.3 g), THF (20 mL) 를 첨가하고 교반하였다. 0 ℃ 로 냉각시키고, n-BuLi 의 헥산 용액 (1.6 M, 2.4 mL) 을 적하하였다. 헥사메틸시클로트리실록산의 THF 용액 (1.0 M, 4.4 mL) 을 적하하고, 추가로 헥사메틸시클로트리실록산의 THF 용액 (1.0 M, 22 mL) 을 적하하고, 6 시간 교반하였다. 그 후, 화합물 11D (3.6 g) 를 첨가하고 24 시간 교반하였다. 반응액에 헥산, 이온 교환수를 순차 첨가하고 분액하여, 유기층을 분리하였다. 용매와 저비점 성분을 감압 증류 제거한 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 헥산/아세트산에틸) 를 실시함으로써, 화합물 14A 를 5.5 g 얻었다. 화합물 14A 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 14A 중, n 의 평균값은 23 이었다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 2.58 (t, $J = 7.4$ Hz, 2H), 1.70 (p, $J = 7.4$ Hz, 2H), 1.41 – 1.07 (m, 14H), 0.45 (t, $J = 7.4$ Hz, 2H), 0.10 (s, 171H).

[화합식 82]



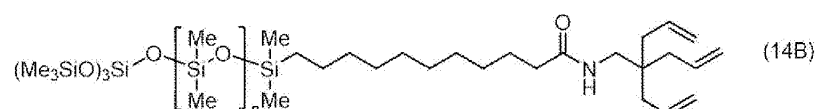
200 mL 플라스크에 화합물 14A (1.0 g), 1,3-비스(트리플루오로메틸)벤젠 (1.5 g) 의 혼합물에, 2,2-디알릴펜타-4-엔-1-아민 (0.25 g) 을 첨가하고 3 시간 교반하였다. 반응액에 헥산, 이온 교환수를 순차 첨가하고 분액하여, 유기층을 분리하였다. 용매와 저비점 성분을 감압 증류 제거한 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 헥산/아세트산에틸) 를 실시함으로써, 화합물 14B 를 0.35 g 얻었다. 화합물 14B 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 14B 중, n 의 평균값은 23 이었다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.80 (ddt, J = 17.7, 10.6, 7.4 Hz, 3H), 5.15 – 4.90 (m, 6H), 3.12 (d, J = 6.3 Hz, 2H), 2.09 (t, J = 7.5 Hz, 2H), 1.96 (dd, J = 7.6, 1.3 Hz, 6H), 1.34 – 1.07 (m, 16H), 0.45 (t, J = 7.6 Hz, 2H), 0.06 – –0.10 (m, 171H).

[0813]

[0814]

[화학식 83]



[0815]

[0816]

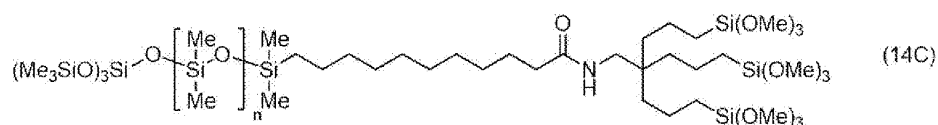
화합물 14B (0.33 g)로부터, 화합물 13B의 합성과 동일한 방법으로, 화합물 14C를 0.38 g 얻었다. 화합물 14C의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 14C 중, n 의 평균값은 23이었다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.66 (d, J = 6.4 Hz, 1H), 3.46 (d, J = 29.0 Hz, 2H), 2.12 (t, J = 7.5 Hz, 2H), 1.61 – 1.42 (m, 2H), 1.32 – 1.02 (m, 26H), 0.53 (t, J = 7.7 Hz, 6H), 0.45 (t, J = 7.0 Hz, 2H), 0.22 – –0.24 (m, 171H).

[0817]

[0818]

[화학식 84]



[0819]

[0820]

[화합물 15B의 합성]

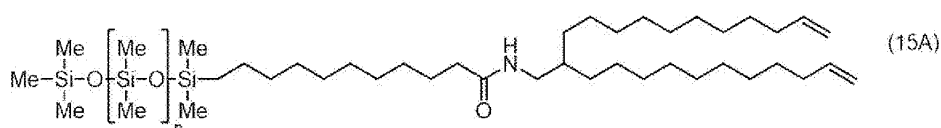
[0821]

질소 분위기하, 3구 플라스크에 트리메틸실란올 (0.15 g), 테트라하이드로푸란 (10 mL)을 첨가하고 교반하였다. 0 °C로 냉각시키고, $n\text{-BuLi}$ 의 헥산 용액 (1.6 M, 0.95 mL)을 적하하였다. 헥사메틸시클로트리실록산의 THF 용액 (1.0 M, 11 mL)을 적하하고, 18시간 교반하였다. 그 후, 화합물 11D (1.5 g)를 첨가하고 6시간 교반한 후, 화합물 11A (2.7 g)를 첨가하고 24시간 교반하였다. 반응액에 헥산, 이온교환수를 순차 첨가하고 분액하여, 유기층을 분리하였다. 용매와 저비점 성분을 감압 증류 제거한 후, 실리카 겔을 사용한 플래시 칼럼 크로마토그래피 (전개 용매 : 헥산/아세트산에틸)를 실시함으로써, 화합물 15A를 1.4 g 얻었다. 화합물 15A의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 15A 중, n 의 평균값은 22였다.

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.74 (ddt, $J = 16.9, 10.2, 6.7$ Hz, 2H), 5.28 (s, 1H), 5.01 – 4.71 (m, 4H), 3.11 (t, $J = 5.8$ Hz, 2H), 2.10 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 1.97 (q, $J = 6.9$ Hz, 4H), 1.69 – 0.97 (m, 48H), 0.45 (t, $J = 7.6$ Hz, 2H), 0.07 (s, 147H).

[0822]

[0823] [화학식 85]



[0824]

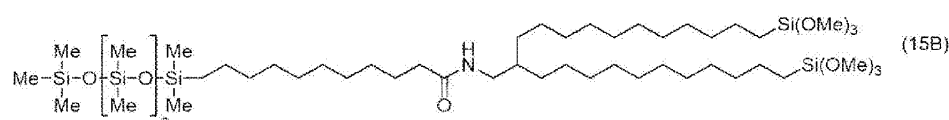
디클로로메탄 (0.63 g) 에 용해한 화합물 15A (0.51 g) 에, 백금/1,3-디비닐-1,1,3,3-테트라메틸디실록산 착물의 톨루엔 용액 (백금 함유량 : 3 질량%, 6.8 mg), 아닐린 (1.0 mg), 트리메톡시실란 (0.091 g) 을 첨가하고 25 °C 에서 2 시간 교반하였다. 용매를 감압 증류 제거함으로써, 화합물 15B 를 0.56 g 얻었다. 화합물 15B 의 구조는, 이하의 NMR 데이터로부터 확인하였다. 화합물 15B 중, n 의 평균값은 22 였다.

[0825]

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 5.31 (m, 1H), 3.57 (s, 18H), 3.18 (t, $J = 6.0$ Hz, 2H), 2.16 (t, $J = 7.5$ Hz, 2H), 1.64 – 1.25 (m, 57H), 0.64 (m, 4H), 0.52 (t, $J = 7.7$ Hz, 2H), 0.07 (m, 147H).

[0826]

[0827] [화학식 86]



[0828]

다음으로, 상기 화합물 11F, 12B, 13B, 14C, 15B, 및 화합물 5A, 6A 를 사용하여, 기재에 대해 표면 처리를 실시하였다. 표면 처리 방법으로서 웨트 코팅법을 사용하였다.

[0829]

[0830] <웨트 코팅법>

진공 증착 장치 (알박 기공사 제조 VTR-350M) 내의 구리제 하스에 증착원으로서 산화규소의 30 g 을 배치하였다. 진공 증착 장치 내에 유리 기재를 배치하고, 진공 증착 장치 내를 5×10^{-3} Pa 이하의 압력이 될 때까지 배기하였다. 상기 하스를 약 2,000 °C 가 될 때까지 가열하여, 기재의 표면에 산화규소를 진공 증착시켰다. 이로써, 기재 상에, 두께 약 20 nm 의 산화규소층이 형성되었다.

[0831]

산화규소층이 형성된 기재를 산화규소층이 표면이 되도록, 스프레이 코터 (주식회사 아피로스 제조 API-90RS) 의 샘플 스테이지 상에 설치하였다. 다음으로, 각 화합물의 0.2 질량% 헵탄 용액 13 g 을 스프레이 코터 내의 시린지에 투입하고, 무화압 130 kPa, 노즐-샘플 표면 간의 거리 50 mm, 주사 속도 300 mm/초로 스프레이 도포하였다. 그 후, 도포된 기재를 140 °C 에서 30 분간 가열 처리하였다. 이로써, 산화규소층의 표면에 표면 처리층을 갖는 물품을 얻었다.

[0832]

웨트 코팅법에 의해 얻어진 물품에 대하여, 발수성, 내마모성, 및 내지문성의 평가를 실시하였다. 발수성

[0833]

및 내마모성의 평가 방법은, 상기와 같다. 내지문성의 평가 방법은, 이하와 같다.

<내지문성>

지문 스탬프 부분이 되는 직경 2 cm 의 적색 고무 마개를 구비한 1 kg 분동을 준비하였다. 다음으로, 인공 지문액 (이세큐 주식회사 제조) 70 μ l 를 웨이스트 클로스에 적하하고, 지문 스탬프를 인공 지문액에 1 분간 부착시켰다. 지문 스탬프에 과잉으로 부착한 인공 지문액을 제거하기 위해서, 지문 스탬프를 새로운 웨이스트 클로스에 20 초간 부착시켰다. 그 후, 23 $^{\circ}$ C 로 온도가 조정된 핫 플레이트 상에, 표면 처리층이 형성된 물품을 설치하였다. 지문 스탬프를 표면 처리층에 대해 스탬프하였다.

인공 지문액이 부착한 물품을 슬라이딩 장치 (제품명 「HHS-2000」, 주식회사 신토 과학 제조) 에 설치하였다. 가로세로 1 cm 의 면적을 갖는 평면 압자에 양면 테이프를 사용하여 닦아내는 천 (KB 세이렌 주식회사 제조 사비나 미니맥스) 에 첨부하고, 슬라이딩 장치에 설치하였다. 하중 100 g 으로 표면 처리층에 대하여, 닦아내는 천으로 1 방향을 향하여, 부착된 인공 지문액을 닦아냈다. 닦아낸 지점을 헤이즈미터 (제품명 「NDH7000SP」, 주식회사 일본 전색 제조) 로 헤이즈를 측정하였다. 평가 기준은 이하와 같다.

A : 헤이즈값이 0.1 % 미만이다.

B : 헤이즈값이 0.1 % 이상 1 % 미만이다.

C : 헤이즈값이 1 % 이상이다.

평가 결과를 표 2 에 나타낸다. 표 2 중, 화합물이, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조, 또는 기 2 를 포함하는 경우에는 「Y」, 포함하지 않는 경우에는 「N」으로 기재하였다. 기 1 에 관해서는 구체적인 구조를 기재하였다. 또, n 은, 오르가노폴리실록산 잔기의 반복수 n 을 의미한다.

예 11 ~ 15 는, 실시예이고, 예 16 및 17 은 비교예이다.

표 2

	화합물					평가		
	종류	n	기 1	부분 구조	기 2	발수성	내마모성	내지문성
예11	화합물11F	8	$\sim\text{Si}(\text{OSiMe}_3)_3$	Y	Y	A	A	B
예12	화합물12B	14	$\sim\text{Si}(\text{OSiMe}_3)_3$	Y	Y	A	A	A
예13	화합물13B	21	$\sim\text{Si}(\text{OSiMe}_3)_3$	Y	Y	A	A	A
예14	화합물14C	23	$\sim\text{Si}(\text{OSiMe}_3)_3$	Y	Y	A	A	A
예15	화합물15B	22	$\sim\text{SiMe}_3$	Y	Y	A	A	A
예16	화합물5A		$\sim\text{Si}(\text{OSiMe}_3)_3$	N	Y	B	C	C
예17	화합물6A		N	Y	Y	B	B	C

표 2 에 나타내는 바와 같이, 예 11 ~ 15 의 화합물은, 기 1 과, 탄소수 3 이상의 알킬렌 사슬 또는 폴리알킬렌옥사이드 사슬인 부분 구조와, 기 2 를 포함하기 때문에, 발수성 및 내마모성이 우수한 표면 처리층을 형성할 수 있는 것을 알 수 있었다. 또, 예 11 ~ 15 의 화합물은, 내지문성도 우수한 것을 알 수 있었다.

산업상 이용가능성

본 개시의 화합물은, 표면 처리제로서 유용하다. 표면 처리제는, 예를 들어, 터치 패널 디스플레이 등의 표시 장치, 광학 소자, 반도체 소자, 건축 재료, 자동차 부품, 나노 임프린트 기술 등에 있어서의 기재에 대해 사용할 수 있다. 또, 표면 처리제는, 전자, 자동차, 선박, 항공기 등의 수송 기기에 있어서의 보디, 창유리 (프론트 유리, 사이드 유리, 리어 유리), 미러, 범퍼 등에 대해 사용할 수 있다. 또한, 표면 처리제는, 건축물 외벽, 텐트, 태양광 발전 모듈, 차음판, 콘크리트 등의 옥외 물품; 어망, 충취망, 수조에 대하여 사용할 수 있다. 또한, 표면 처리제는, 주방, 욕실, 세면대, 거울, 화장실 주변 부품; 샹들리에, 타일 등의 도자기; 인공 대리석, 에어컨 등의 각종 옥내 설비에 대하여 사용할 수 있다. 또한, 표면 처리제는, 공장 내의 지그, 내벽, 배관 등의 방오 처리로도 사용할 수 있다. 또, 표면 처리제는, 고글, 안경, 헬멧, 파칭코, 섬유, 우산, 놀이 도구, 축구볼에 대해 사용할 수 있다. 또, 표면 처리제는, 식품용 포재, 화장품용 포재, 포트의 내부 등의 각종 포재의 부착 방지제로도 사용할 수 있다. 또, 표면 처리제는, 카 내비게이션, 휴대 전

화, 스마트폰, 디지털 카메라, 디지털 비디오 카메라, PDA, 포터블 오디오 플레이어, 카 오디오, 게임 기기, 안경 렌즈, 카메라 렌즈, 렌즈 필터, 선글라스, 위 카메라 등의 의료용 기기, 복사기, PC, 디스플레이 (예를 들어, 액정 디스플레이, 유기 EL 디스플레이, 플라즈마 디스플레이, 터치 패널 디스플레이), 터치 패널, 보호 필름, 및 반사 방지 필름 등의 광학 부재에 대해 사용할 수 있다.

[0846] 또한, 2022년 3월 24일에 출원된 일본 특허출원 2022-049060호의 개시는, 그 전체가 참조에 의해 본 명세서에 받아들여진다. 또, 본 명세서에 기재된 모든 문헌, 특허 출원 및 기술 규격은, 개개의 문헌, 특허 출원 및 기술 규격이 참조에 의해 도입되는 것이 구체적이면서 또한 개별적으로 기재된 경우와 동일한 정도로, 본 명세서 중에 참조에 의해서 도입된다.