

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載  
 【部門区分】第3部門第2区分  
 【発行日】令和6年12月2日(2024.12.2)

【国際公開番号】WO2023/181867  
 【出願番号】特願2024-509927(P2024-509927)

【国際特許分類】

C 0 7 F 7/18(2006.01)

C 0 9 K 3/18(2006.01)

G 0 2 B 1/10(2015.01)

10

【F I】

C 0 7 F 7/18 B C S P

C 0 7 F 7/18 L

C 0 7 F 7/18 W

C 0 9 K 3/18 1 0 4

G 0 2 B 1/10

【手続補正書】

【提出日】令和6年9月20日(2024.9.20)

【手続補正1】

20

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

少なくとも2つの直鎖アルキレン基と、前記少なくとも2つの直鎖アルキレン基がそれぞれ結合する3価以上の連結基と、前記3価以上の連結基に結合する反応性シリル基と、を含む化合物。

【請求項2】

30

少なくとも2つの直鎖アルキレン基のうち少なくとも1つの直鎖アルキレン基の炭素数が10以上である、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

前記3価以上の連結基は、炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、及び環状基からなる群より選択される少なくとも1つの分岐部を有する基である、請求項1に記載の化合物。

【請求項4】

下記式(1)で表される化合物：

$[CH_3(CH_2)_{m_1}]_j Y^1 [-Si(R)_n L_{3-n}]_g \dots (1)$

式(1)中、

$Y^1$  は  $(j + g)$  価の連結基であり、

40

R はそれぞれ独立に1価の炭化水素基であり、

L はそれぞれ独立に加水分解性基又は水酸基であり、

n は0～2の整数であり、

j は2以上の整数であり、

g は1以上の整数であり、

$m_1$  は0以上の整数である。

【請求項5】

前記式(1)において、gが1である、請求項4に記載の化合物。

【請求項6】

前記式(1)において、 $m_1$ が9以上の整数である、請求項4に記載の化合物。

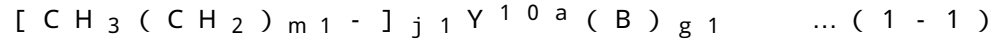
50

## 【請求項 7】

前記式(1)において、 $Y^1$ が炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、及び環状基からなる群より選択される少なくとも1つの分岐部を有する基である、請求項4に記載の化合物。

## 【請求項 8】

下記式(1-1)で表される化合物：



式(1-1)中、

$Y^{10a}$ は( $j_1 + g_1$ )価の連結基であり、

Bはそれぞれ独立に、 $-Q^L-CH=CH_2$ であり、ここで $Q^L$ は単結合又は2価の連結基であり、

$j_1$ は2以上の整数であり、

$g_1$ は1以上の整数であり、

$m_1$ は0以上の整数である。

10

## 【請求項 9】

請求項1~7のいずれか1項に記載の化合物と、液状媒体と、を含む組成物。

## 【請求項 10】

請求項1~7のいずれか1項に記載の化合物を含む、表面処理剤。

## 【請求項 11】

さらに液状媒体を含む、請求項10に記載の表面処理剤。

## 【請求項 12】

基材に対して、請求項10に記載の表面処理剤を用いて表面処理を行い、基材上に表面処理層が形成された物品を製造する、物品の製造方法。

20

## 【請求項 13】

基材と、前記基材上に配置され、請求項10に記載の表面処理剤で表面処理された表面処理層と、を含む物品。

## 【請求項 14】

前記物品が光学部材である、請求項13に記載の物品。

## 【請求項 15】

前記物品がディスプレイ又はタッチパネルである、請求項13に記載の物品。

## 【手続補正 2】

30

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0005

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0005】

上記課題を解決するための手段は、以下の態様を含む。

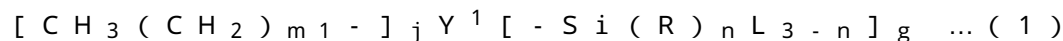
<1> 少なくとも2つの直鎖アルキレン基と、前記少なくとも2つの直鎖アルキレン基がそれぞれ結合する3価以上の連結基と、前記3価以上の連結基に結合する反応性シリル基と、を含む化合物。

<2> 少なくとも2つの直鎖アルキレン基のうち少なくとも1つの直鎖アルキレン基の炭素数が10以上である、<1>に記載の化合物。

40

<3> 前記3価以上の連結基は、炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、及び環状基からなる群より選択される少なくとも1つの分岐部を有する基である、<1>又は<2>に記載の化合物。

<4> 下記式(1)で表される化合物：



式(1)中、

$Y^1$ は( $j + g$ )価の連結基であり、

Rはそれぞれ独立に1価の炭化水素基であり、

Lはそれぞれ独立に加水分解性基又は水酸基であり、

50

n は 0 ~ 2 の整数であり、  
 j は 2 以上の整数であり、  
 g は 1 以上の整数であり、  
 m<sub>1</sub> は 0 以上の整数である。

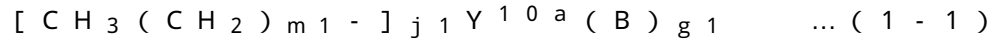
< 5 > 前記式 ( 1 ) において、g が 1 である、< 4 > に記載の化合物。

< 6 > 前記式 ( 1 ) において、m<sub>1</sub> が 9 以上の整数である、< 4 > 又は < 5 > に記載の化合物。

< 7 > 前記式 ( 1 ) において、Y<sup>1</sup> が炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、及び環状基からなる群より選択される少なくとも 1 つの分岐部を有する基である、< 4 > ~ < 6 > のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

< 8 > 下記式 ( 1 - 1 ) で表される化合物：



式 ( 1 - 1 ) 中、

Y<sup>10a</sup> は ( j<sub>1</sub> + g<sub>1</sub> ) 価の連結基であり、

B はそれぞれ独立に、- Q<sup>L</sup> - CH = CH<sub>2</sub> であり、ここで Q<sup>L</sup> は単結合又は 2 価の連結基であり、

j<sub>1</sub> は 2 以上の整数であり、

g<sub>1</sub> は 1 以上の整数であり、

m<sub>1</sub> は 0 以上の整数である。

< 9 > < 1 > ~ < 7 > のいずれか 1 項に記載の化合物と、液状媒体と、を含む組成物。

20

< 10 > < 1 > ~ < 7 > のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、表面処理剤。

< 11 > さらに液状媒体を含む、< 10 > に記載の表面処理剤。

< 12 > 基材に対して、< 10 > 又は < 11 > に記載の表面処理剤を用いて表面処理を行い、基材上に表面処理層が形成された物品を製造する、物品の製造方法。

< 13 > 基材と、前記基材上に配置され、< 10 > に記載の表面処理剤で表面処理された表面処理層と、を含む物品。

< 14 > 前記物品が光学部材である、< 13 > に記載の物品。

< 15 > 前記物品がディスプレイ又はタッチパネルである、< 13 > に記載の物品。

#### 【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

30

【補正対象項目名】0105

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0105】

基 ( 3 - 1 A - 6 ) の具体例としては、以下の基が挙げられる。下記式中、\* は、式 ( 2 ) 中の Y<sup>1a</sup> との結合位置を表す。

#### 【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0114

【補正方法】変更

40

【補正の内容】

【0114】

ただし、式 ( g<sub>2</sub> - 1 ) ~ ( g<sub>2</sub> - 7 ) においては、A<sup>1</sup> 側が [ CH<sub>3</sub> ( CH<sub>2</sub> )<sub>m<sub>1</sub></sub> - ] ( A<sup>1</sup> が複数の場合 ) 又は [ CH<sub>3</sub> ( CH<sub>2</sub> )<sub>m<sub>1</sub></sub> - ]<sub>j</sub> Y<sup>1a</sup> - ( A<sup>1</sup> が 1 つの場合 ) に接続し、Q<sup>22</sup>、Q<sup>23</sup>、Q<sup>24</sup>、Q<sup>25</sup> 又は Q<sup>26</sup> 側が [ - Si ( R )<sub>n</sub> L<sub>3-n</sub> ] に接続する。

A<sup>1</sup> は、単結合、- C ( O ) NR<sup>6</sup> -、- C ( O ) -、- OC ( O ) O -、- NHC ( O ) O -、- NHC ( O ) NR<sup>6</sup> -、- O -、- NR<sup>6</sup> -、又は - SO<sub>2</sub> NR<sup>6</sup> - である。

Q<sup>11</sup> は、単結合、- O -、アルキレン基、又は炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 -

50

炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基である。

$Q^{12}$  は、単結合、アルキレン基、又は炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基であり、 $Y^1$  又は  $Y^{1b}$  が  $Q^{12}$  を 2 以上有する場合、2 以上の  $Q^{12}$  は同一であっても異なってもよい。

$Q^{13}$  は、単結合、アルキレン基、炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基、又はアルキレン基の N 側の末端に  $-C(O)-$  を有する基である。

$Q^{14}$  は、 $Q^{14}$  が結合する  $Z^1$  における原子が炭素原子の場合、 $Q^{12}$  であり、 $Q^{14}$  が結合する  $Z^1$  における原子が窒素原子の場合、 $Q^{13}$  であり、 $Y^1$  又は  $Y^{1b}$  が  $Q^{14}$  を 2 以上有する場合、2 以上の  $Q^{14}$  は同一であっても異なってもよい。

$Q^{15}$  は、単結合、アルキレン基、又は炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基であり、 $Y^1$  又は  $Y^{1b}$  が  $Q^{15}$  を 2 以上有する場合、2 以上の  $Q^{15}$  は同一であっても異なってもよい。

$Q^{22}$  は、アルキレン基、炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基、アルキレン基の  $S_i$  に接続しない側の末端に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基、又は炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有しかつ  $S_i$  に接続しない側の末端に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基であり、 $Y^1$  又は  $Y^{1b}$  が  $Q^{22}$  を 2 以上有する場合、2 以上の  $Q^{22}$  は同一であっても異なってもよい。

$Q^{23}$  は、アルキレン基、又は炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基であり、2 個の  $Q^{23}$  は同一であっても異なってもよい。

$Q^{24}$  は、 $Q^{24}$  が結合する  $Z^1$  における原子が炭素原子の場合、 $Q^{22}$  であり、 $Q^{24}$  が結合する  $Z^1$  における原子が窒素原子の場合、 $Q^{23}$  であり、 $Y^1$  又は  $Y^{1b}$  が  $Q^{24}$  を 2 以上有する場合、2 以上の  $Q^{24}$  は同一であっても異なってもよい。

$Q^{25}$  は、アルキレン基、又は炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基であり、 $Y^1$  又は  $Y^{1b}$  が  $Q^{25}$  を 2 以上有する場合、2 以上の  $Q^{25}$  は同一であっても異なってもよい。

$Q^{26}$  は、単結合、アルキレン基、又は炭素数 2 以上のアルキレン基の炭素 - 炭素原子間に  $-C(O)NR^6-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-NR^6-$  又は  $-O-$  を有する基である。

$Z^1$  は、 $Q^{14}$  が直接結合する炭素原子又は窒素原子を有しかつ  $Q^{24}$  が直接結合する炭素原子又は窒素原子を有する  $(h_1 + h_2)$  価の環構造を有する基である。

$R^{e1}$  は、水素原子又はアルキル基であり、 $Y^1$  又は  $Y^{1b}$  が  $R^{e1}$  を 2 以上有する場合、2 以上の  $R^{e1}$  は同一であっても異なってもよい。

$R^{e2}$  は、水素原子、水酸基、アルキル基又はアシルオキシ基である。

$R^{e3}$  は、アルキル基である。

$R^6$  は、水素原子、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基又はフェニル基である。

#### 【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0159

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0159】

本開示の化合物の数平均分子量 ( $M_n$ ) は、 $400 \sim 20,000$  であることが好ましく、 $500 \sim 18,000$  であることがより好ましく、 $600 \sim 15,000$  であることがさらに好ましい。 $M_n$  が 400 以上であれば、撥水性かつ耐摩耗性に優れる。 $M_n$  が 2

10

20

30

40

50

0, 000以下であれば、粘性を適切な範囲内に調節しやすく、また溶解性が向上するので、成膜時のハンドリング性が優れる。

【手続補正6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0174

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0174】

有機溶媒としては、水素原子及び炭素原子のみからなる化合物、並びに、水素原子、炭素原子及び酸素原子のみからなる化合物が挙げられ、具体的には、炭化水素系有機溶媒、ケトン系有機溶媒、エーテル系有機溶媒、エステル系有機溶媒、グリコール系有機溶媒、及びアルコール系有機溶媒が挙げられる。

10

炭化水素系有機溶媒の具体例としては、ペンタン、ヘキサン、ヘプタン、オクタン、ヘキサデカン、イソヘキサン、イソオクタン、イソノナン、シクロヘプタン、シクロヘキサン、ビシクロヘキシル、ベンゼン、トルエン、エチルベンゼン、o-キシレン、m-キシレン、p-キシレン、o-ジエチルベンゼン、m-ジエチルベンゼン、p-ジエチルベンゼン、n-ブチルベンゼン、sec-ブチルベンゼン、tert-ブチルベンゼンが挙げられる。

ケトン系有機溶媒の具体例としては、アセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、ジイソブチルケトン、シクロヘキサノン、2-ヘプタノン、4-ヘプタノン、3,5,5-トリメチル-2-シクロヘキセン-1-オン、及び3,3,5-トリメチルシクロヘキサノン、イソホロンが挙げられる。

20

エーテル系有機溶媒の具体例としては、ジエチルエーテル、シクロペンチルメチルエーテル、テトラヒドロフラン、1,4-ジオキサンが挙げられる。

エステル系有機溶媒の具体例としては、酢酸メチル、酢酸エチル、酢酸プロピル、酢酸イソプロピル、酢酸ブチル、酢酸イソブチル、酢酸tert-ブチル、酢酸アミル、酢酸イソアミル、3-エトキシプロピオン酸エチル、乳酸エチルエチレングリコールモノブチルエーテルアセテート、ジエチレングリコールモノブチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート、ジプロピレングリコールメチルエーテルアセテート、3-メトキシ-3-メチルブチルアセテート、3-メトキシブチルアセテート、プロピレングリコールモノメチルアセテート、プロピレングリコールジメチルアセテート、エチレングリコールモノエチルエーテルアセテート、エチレングリコールモノメチルエーテルアセテート、ジエチレングリコールモノエチルエーテルアセテート、シクロヘキサノールアセテート、プロピレングリコールジアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノメチルエーテルプロピオネート、プロピレングリコールモノエチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノブチルエーテルアセテート、プロピレングリコールモノプロピルエーテルアセテート、ジプロピレングリコールメチルエーテルアセテート、1,3-ブチレングリコールジアセテート、1,4-ブタンジオールジアセテート、1,3-ブチレングリコールジアセテート、1,6-ヘキサジオールジアセテート、 $\gamma$ -ブチロラクトン、トリアセチン、2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオールモノイソブチレートが挙げられる。

30

40

グリコール系有機溶媒の具体例としては、エチレングリコール、エチレングリコールモノブチルエーテル、ジエチレングリコールモノブチルエーテル、トリエチレングリコールモノブチルエーテル、テトラエチレングリコールモノブチルエーテル、エチレングリコールモノヘキシルエーテル、ジエチレングリコールモノヘキシルエーテル、エチレングリコールモノ-2-エチルヘキシルエーテル、ジエチレングリコールモノ-2-エチルヘキシルエーテル、プロピレングリコールモノメチルエーテル、プロピレングリコールモノエチルエーテル、プロピレングリコールモノブチルエーテル、プロピレングリコールモノプロピルエーテル、エチレングリコールモノイソプロピルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノtert-ブチルエーテル、エチレングリコー

50

ルモノプロピルエーテル、エチレングリコールモノメチルエーテル、ジエチレングリコールモノイソプロピルエーテル、ジエチレングリコールモノメチルエーテル、ジプロピレングリコールモノエチルエーテル、ジプロピレングリコールモノブチルエーテル、ジプロピレングリコールモノプロピルエーテル、ジプロピレングリコールモノメチルエーテル、トリプロピレングリコールモノブチルエーテル、トリプロピレングリコールモノメチルエーテル、プロピレングリコールモノフェニルエーテル、1,3-ブチレングリコール、プロピレングリコールn-プロピルエーテル、プロピレングリコールn-ブチルエーテル、ジエチレングリコールモノエチルエーテル、ジプロピレングリコールn-プロピルエーテル、ジプロピレングリコールn-ブチルエーテル、トリプロピレングリコールメチルエーテル、トリプロピレングリコールn-ブチルエーテル、エチレングリコールジメチルエーテル、エチレングリコールジエチルエーテル、エチレングリコールジブチルエーテル、ジエチレングリコールジエチルエーテル、ジエチレングリコールジメチルエーテル、ジプロピレングリコールジメチルエーテル、ジエチレングリコールジブチルエーテル、テトラエチレングリコールジメチルエーテル、ジプロピレングリコールジメチルエーテルペンタン、トリエチレングリコールジメチルエーテル、ポリエチレングリコールジメチルエーテルが挙げられる。

10

アルコール系有機溶媒の具体例としては、メタノール、エタノール、1-プロパノール、イソプロピルアルコール、n-ブタノール、ジアセトンアルコール、イソブタノール、sec-ブタノール、tert-ブタノール、ペンタノール、3-メチル-1,3-ブタンジオール、1,3-ブタンジオール、1,3-ブチレングリコール、オクタジオール、2,4-ジエチルペンタンジオール、ブチルエチルプロパンジオール、2-メチル-1,3-プロパンジオール、4-ヒドロキシ-4-メチル-2-ペンタノン、2-エチル-1-ヘキサノール、3,5,5-トリメチル-1-ヘキサノール、イソデカノール、イソトリデカノール、3-メトキシ-3-メチル-1-ブタノール、2-メトキシブタノール、3-メトキシブタノール、シクロヘキサノール、フルフリルアルコール、テトラヒドロフルフリルアルコール、ベンジルアルコール、及びメチルシクロヘキサノールが挙げられる。

20

【手続補正7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0229

30

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0229】

ケイ素を含む化合物の具体例としては、酸化ケイ素、ケイ酸、ケイ酸の部分縮合物、アルコキシシラン、アルコキシシランの部分加水分解縮合物が挙げられる。

【手続補正8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0247

【補正方法】変更

【補正の内容】

40

【0247】

[合成例3：化合物(3)の合成]

上記化合物(2.2)(10g)にテトラヒドロフラン(THF)(20g)、及び水素化リチウムアルミニウム(4.0g)を加え、室温(約25)で16時間攪拌した。酒石酸カリウムナトリウムの飽和水溶液、及び酢酸エチルを加え、抽出したのち、溶媒を除去し、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィー(展開溶媒：酢酸エチル/ヘキサン)を行うことで、化合物(3)を7.5g得た。

【手続補正9】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0268

50

## 【補正方法】変更

## 【補正の内容】

## 【0268】

## [合成例10：化合物(10)の合成]

上記化合物(9)(3.0g)にTHF(8g)を加え、撹拌したのち、削り状のマグネシウム(0.15g)を加え、60℃で24時間加熱撹拌した。その後、アリルブロミド(1.0g)、及び塩化銅(0.03g)を加え、60℃で24時間加熱撹拌した。塩酸、及び酢酸エチルを加え抽出し、溶媒を減圧留去し、シリカゲルを用いたフラッシュカラムクロマトグラフィー(展開溶媒：酢酸エチル/ヘキサン)を行うことで、化合物(10)を2.3g得た。

10

20

30

40

50