



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2017-0088891  
(43) 공개일자 2017년08월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C08L 83/04 (2006.01) C08K 3/00 (2006.01)  
C08K 5/09 (2006.01) C08K 5/17 (2006.01)  
C08K 5/5415 (2006.01)

(52) CPC특허분류  
C08L 83/04 (2013.01)  
C08K 3/0033 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2017-7016365  
(22) 출원일자(국제) 2015년11월20일  
심사청구일자 없음

(85) 번역문제출일자 2017년06월14일  
(86) 국제출원번호 PCT/US2015/061739  
(87) 국제공개번호 WO 2016/081790  
국제공개일자 2016년05월26일

(30) 우선권주장  
62/082,406 2014년11월20일 미국(US)

(71) 출원인  
**모멘티브 퍼포먼스 머티리얼즈 인크.**  
미합중국, 뉴욕 12188, 워터포드 허드슨 리버 로드 260

(72) 발명자  
**무투사미, 라메쉬**  
인도, 방갈로르 560100, 일렉트로닉시티 (웨스트), 닐라드리 나가르, 13티에이치 크로스, 사이프리아닐라, G1

**당카르, 수미**  
인도, 방갈로르 560066, 바더 메인 로드, 니어 쿤다나할리 게이트. 투바라할리, 스리람 삼루디 아파트, 피 302

**다나발란, 아난사라만**  
인도, 방갈로르 560 075, 뉴 티파산드라 포스트, 말레쉬파라야 익스텐션, 비그난 나가르, 5티에이치 크로스, 넘버 7

(74) 대리인  
**특허법인 동원**

전체 청구항 수 : 총 35 항

(54) 발명의 명칭 **수분 경화성 조성물**

**(57) 요약**

본 발명은 유기주석 촉매의 대체제로서 아미노 에스테르 촉매를 포함하여 구성되는 수분-경화성 조성물을 제공한다. 구체적으로, 본 발명은 이차 아민, 삼차 아민, 치환된 아민 (e.g., 아미노 에스테르 화합물), 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하여 구성되는 촉합 촉매와, 임의선택적으로 하나 이상의 아미노실란 또는 실록산을 제공한다. 또한, 아미노 에스테르를 사용하는 본 발명의 조성물은 접착 촉진제 또는 산성 화합물과 같은 다른 성분의 첨가에 의해 조성물의 특성들을 조정 또는 조절하는 것을 허용하고, 양호한 접착성 및 저장 안정성을 제공한다.

(52) CPC특허분류

*C08K 5/09* (2013.01)

*C08K 5/17* (2013.01)

*C08K 5/175* (2013.01)

*C08K 5/5415* (2013.01)

---

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

- (A) 적어도 하나의 반응성 실릴기를 가지는 폴리머;
  - (B) 크로스링커 또는 체인 익스텐더;
  - (C) 이차 아민, 삼차 아민, 치환된 아민, 또는 이들의 조합으로부터 선택되는 아민 화합물을 포함하여 구성되는 촉매;
  - (D) 임의선택적인 적어도 하나의 아미노-함유 접착 촉진제;
  - (E) 임의선택적인 필러 성분;
  - (F) 임의선택적인 산성 성분; 및
  - (G) 유기-관능성 규소 화합물, 저분자량 유기 폴리머, 및 고비점 용매로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 하나를 포함하는 임의선택적인 보조 성분;
- 을 포함하여 구성되는, 경화성 폴리머 조성물 형성용 조성물.

#### 청구항 2

제1항에 있어서, 상기 조성물이

- (i) 폴리머 (A), 임의선택적으로 필러 성분(E), 및 임의선택적으로 산성 화합물 (F)을 포함하여 구성되는 제1 부분과,
- (ii) 크로스링커 (B), 촉매 (C), 임의선택적으로 접착 촉진제 (D), 및 임의선택적으로 유기-관능성 규소 화합물 및/또는 저분자량 유기 폴리머 또는 고비점 용매 (G)를 포함하여 구성되는 제2 부분을 포함하여 구성되는 2-파트 조성물이며,

상기 제1 부분(i)과 상기 제2 부분(ii)은 이들을 혼합하여 경화를 위해 도포될 때까지 분리 저장되는, 조성물.

#### 청구항 3

제1항에 있어서, 상기 조성물이

- (i) 폴리머 (A), 크로스링커 (B), 임의선택적으로 필러 성분(E), 및 임의선택적으로 산성 화합물 (F)을 포함하여 구성되는 제 1 부분과,
- (ii) 촉매 (C), 임의선택적으로 유기-관능성 규소 화합물 및/또는 저분자량 유기 폴리머 또는 고비점 용매 (G)를 포함하여 구성되는 제2 부분을 포함하여 구성되는 2-파트 조성물이며,

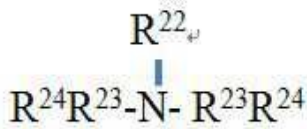
상기 제1 부분(i)과 상기 제2 부분(ii)은 이들을 혼합하여 경화를 위해 도포될 때 까지 분리 저장되는, 상기 제 1 부분(i)과 상기 제2 부분(ii)은 이들을 혼합하여 경화를 위해 도포될 때까지 분리 저장되는, 조성물. .

#### 청구항 4

제1항에 있어서, 상기 촉매가, 복수의 아민 관능기를 포함하여 구성되는, 조성물.

#### 청구항 5

제1항 내지 4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 아민 화합물이 하기 식의 아민 관능기를 1 개 또는 복수 개를 포함하여 구성되는, 조성물:



{위 식에서, R<sup>22</sup> 는 수소; C<sub>1</sub>-C<sub>15</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>15</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 선형 또는 가지형 알킬아릴 기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 또는 선형 또는 가지형 C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 헤테로아르알킬, 헤테로알킬, 헤테로사이클로알킬, 또는 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택되고,

R<sup>23</sup> 및 R<sup>24</sup> 는 C<sub>1</sub>-C<sub>15</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>15</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 선형 또는 가지형 알킬아릴 기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 선형 또는 가지형 C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 헤테로아르알킬; 헤테로알킬, 헤테로사이클로알킬, 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택되되, 상기 N 원자는 그 화합물에서 R<sup>23</sup>, R<sup>24</sup>, R<sup>23</sup> 및 R<sup>24</sup> 중의 어느 하나로 또는 조합된 R<sup>23</sup>, R<sup>24</sup> 로 bi-치환되는 것을 전제로 함}.

**청구항 6**

제1항 내지 4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매가, 디알킬 및 치환된 디알킬 아민, 디메틸아민, 디이소프로필아민, 디부틸아민, N-메틸부틸아민, N,N-디알릴 트리메틸렌디아민, 디아밀아민, 디헥실아민, 디옥틸아민, N-에틸세틸아민, 디도데실아민, 디테트라데실아민, 디리시놀레일아민, N-이소프로필스테아릴아민, N-이소아밀헥실아민, N-에틸옥틸아민, 디옥타데실아민, 이들의 호몰로그(homologs) 및 아날로그(analogs), 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 이차 아민을 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 7**

제1항 내지 4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매가, 디사이클로헥실아민, N-메틸사이클로헥실아민, 디사이클로펜틸아민, N-옥틸사이클로헥실아민, N-옥틸-3,5,5-트리메틸사이클로헥실아민, 디알릴아민, N-에틸알릴아민, N-옥틸알릴아민, 디올레일아민, N-이소프로필올레일아민, N-메틸-3,3,5-트리메틸-5-사이클로헥센일아민, N-아릴-리놀레일아민, N-메틸-프로파길아민, 디페닐아민, 이들의 아날로그 및 호몰로그, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 이차 사이클로알킬아민을 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 8**

제1항 내지 4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매가, 트리에틸아민, 트리-이소프로필아민, 트리부틸아민, N-에틸디부틸아민, N-에틸-N-부틸아밀아민, N,N-디에틸 아닐린, 트리알릴아민, N,N-디프로필사이클로헥실아민, N,N-디프로필올레일-아민, 트리메틸아민, N-옥틸디알릴아민, N,N-디프로필사이클로헥실아민, 디메틸아미노프로필아민, 디메틸아미노에톡시프로필아민, 펜타메틸디에틸렌트리아민, 트리메틸아민, 트리에틸아민, N-메틸모폴린, N-에틸모폴린, N,N-디메틸벤질아민, N,N-디메틸에탄올아민, N,N,N',N'-테트라메틸-1,4-부탄디아민, N,N-디메틸피페라진, 비스(2-디메틸아미노에틸)에테르, 모폴린, N-치환된 모폴린, 예를 들어 N-메틸 또는 N-에틸 모폴린, 4,4'-(옥시디-2,1-에탄디일)비스, 트리에틸렌디아민, 펜타메틸 디에틸렌 트리아민, 디메틸 사이클로헥실 아민, N-세틸 N,N-디메틸 아민, N-코코-모폴린, N,N-디메틸 아미노메틸 N-메틸 에탄올 아민, N,N,N'-트리메틸-N'-하이드록시에틸 비스(아미노에틸)에테르, N,N-비스(3-디메틸아미노프로필)N-이소프로판올아민, (N,N-디메틸)아미노-에톡시 에탄올, N,N,N',N'-테트라메틸 헥산 디아민, N,N-디모폴리노디에틸 에테르, N-메틸 이미다졸, 디메틸 아미노프로필 디프로판올아민, 비스(디메틸아미노프로필)아미노-2-프로판올, 테트라메틸아미노 비스 (프로필아민), (디메틸(아미노에톡시에틸))((디메틸 아민)에틸)에테르, 트리스(디메틸아미노 프로필)아민, 디사이클로헥실 메틸 아민, 비스(N,N-디메틸-3 -아미노프로필) 아민, N,N-비스 (3-디메틸아미노프로필)-N-이소프로판올아민, 1,3 -프로판디아민, 1,2-에틸렌 피페리딘, 메틸-하이드록시에틸 피페라진, 디메틸아미노프로필-S-트리아진, 비스디메틸아미노프로필우레아, 이들의 아날로그 및 호몰로그, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택된 삼차 아민을 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 9**

제1항 내지 4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매가, 피페리딘, 피리딘, 메틸피페라진, 2,2,4,6-테트라메틸피페리딘, 2,2,4,6-테트라메틸-테트라하이드로피리딘, N-에틸 2,2,4,6 테트라메틸피페리딘, 2-아미노피리미딘, 2-아미노피리딘, 2-(디메틸아미노)피리딘, 4-(디메틸아미노)피리딘, 2-하이드록시피리딘, 이미다졸, 2-에틸-4-메틸이미다졸, 모폴린, N-메틸모폴린, 2-피페리딘메탄올, 2-(2-피페리디노)에탄올, 피페리돈, 1,2-디메틸-1,4,5,6-테트라하이드로피리미딘, 아지리딘, 메톡시메틸디페닐아민, 니코틴, 펜토바르비탈, 메타돈, 코카인, 및 트리페닐아민, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 헤테로사이클릭 아민을 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 10**

제1항 내지 4항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매가 아미노 에스테르 화합물로부터 선택되는 치환된 아민을 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 11**

제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르 화합물이 적어도 하나의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 12**

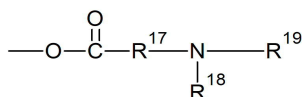
제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르 화합물이 1-10의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 13**

제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르 화합물이 1-4의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 조성물.

**청구항 14**

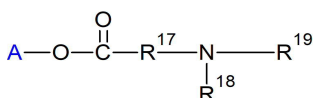
제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르 화합물이, 하기 식의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 조성물:



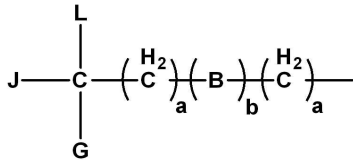
{위 식에서, R<sup>17</sup> 은 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub> 알킬기이고, R<sup>18</sup> 및 R<sup>19</sup> 는 수소; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬아릴 기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬 기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 치환된 규소, 치환된 실록산, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 독립적으로 선택됨}.

**청구항 15**

제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르 화합물이 하기 식을 갖는, 조성물:



{위 식에서, A는 수소; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬아릴 기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬 기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 치환된 규소, 치환된 실록산, 또는



로부터 선택되고;

여기서 B는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; 또는 식

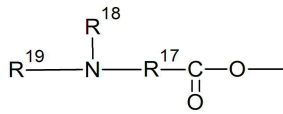
$[\text{R}^1_c \text{R}^2_{3-c} \text{Si}-\text{Z}]_n - \text{X}-\text{Z}-\text{SiR}^1_c \text{R}^2_{3-c}$ 의 규소 화합물로부터 선택되며,

여기서 R<sup>1</sup>은 선형 또는 가지형 알킬, 선형 또는 가지형 헤테로알킬, 사이클로알킬, 헤테로사이클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 선형 또는 가지형 아르알킬, 선형 또는 가지형 헤테로아르알킬, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되고;

Z는 결합, -O-, 선택적으로 O, S, 또는 N 원자를 함유하는 탄화수소, 구아니딘-함유(guanidine-containing), 우레탄, 에테르, 에스테르, 우레아 단위 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 2개의 연결기로부터 선택되고;

X는 폴리우레탄; 폴리에스테르; 폴리에테르; 폴리카보네이트; 폴리올레핀; 폴리에스테르에테르; 및 R<sup>1</sup><sub>3</sub>SiO<sub>1/2</sub>, R<sup>1</sup><sub>2</sub>SiO, R<sup>1</sup>SiO<sub>3/2</sub>, 및/또는 SiO<sub>2</sub>의 단위를 가지는 폴리오가노실록산으로부터 선택되고;

G, J, 및 L은 수소, 식



의 아미노 에스테르 기로부터 독립적으로 선택되고, 여기서 R<sup>17</sup>은 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub> 알킬기이고, R<sup>18</sup> 및 R<sup>19</sup>는 수소; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 치환된 규소, 치환된 실록산, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 독립적으로 선택되고,

a는 1 내지 10이며; b는 0 내지 10임}.

#### 청구항 16

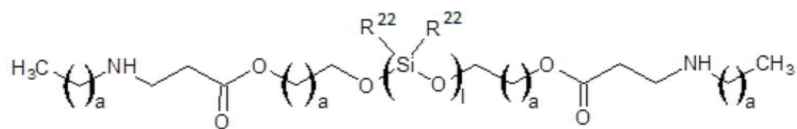
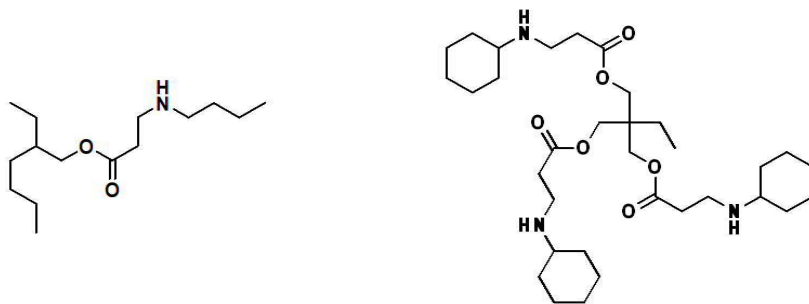
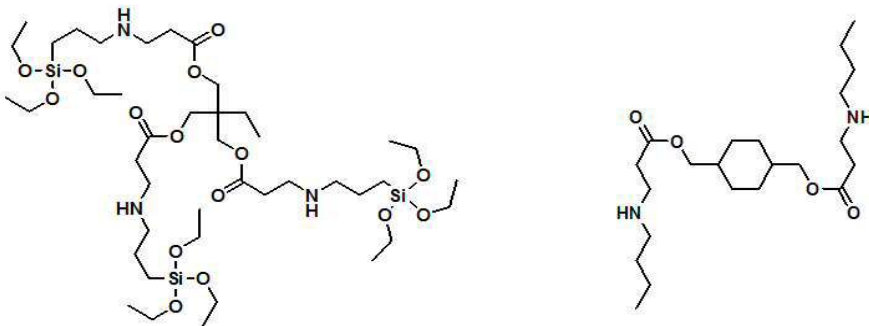
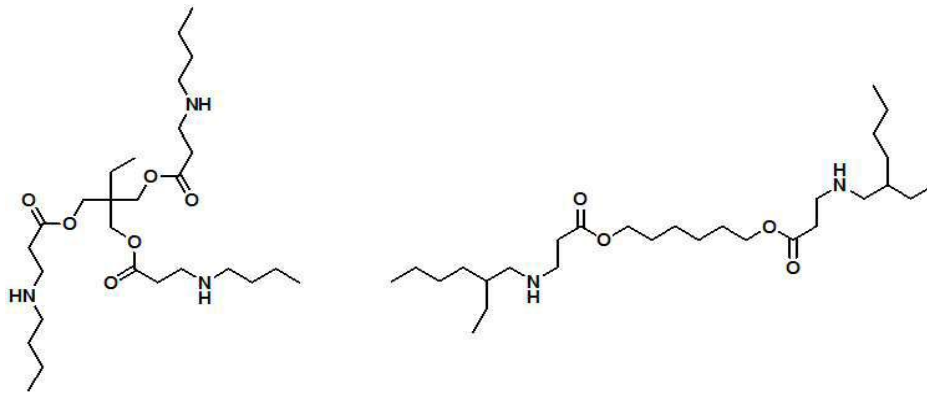
제15항에 있어서, B가 알킬 실록산 단위인, 조성물.

#### 청구항 17

제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르가 복수의 아미노 에스테르 단위를 포함하여 구성되는 폴리 아미노 에스테르인, 조성물.

#### 청구항 18

제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르가 하기 식의 화합물들 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 조성물:



**청구항 19**

제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르가 약 50 g/mol 내지 약 10000 g/mol의 분자량을 가지는, 경화성 조성물.

**청구항 20**

제10항에 있어서, 상기 아미노 에스테르가 약 3.0 내지 약 9.0의 pKa를 가지는, 경화성 조성물.

**청구항 21**

제10항에 있어서, 상기 촉매 성분(C)이 100중량부의 폴리머 성분(A) 기준 약 0.0001 내지 약 10.0 중량부의 양으로 존재하는, 경화성 조성물.

**청구항 22**

제10항에 있어서, 상기 촉매 성분(C)이 100중량부의 폴리머 성분(A) 기준 약 0.15 내지 약 2.0 중량부의 양으로

존재하는, 경화성 조성물.

**청구항 23**

제1 내지 21항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 촉매 성분(C) 이 폴리머 성분 (A)의 약 0.5 내지 약 1.5 중량부의 양으로 존재하는, 경화성 조성물,

**청구항 24**

제1 내지 21항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 접착 촉진제 성분(D)이 존재하며, (아미노알킬)트리알콕시실란, (아미노알킬)알킬디알콕시실란, 비스(트리알콕시실릴알킬)아민, 트리스(트리알콕시실릴알킬)아민, 트리스(트리알콕시실릴알킬)시아누레이트, 트리스(트리알콕시실릴알킬)이소시아누레이트, (에폭시알킬)트리알콕시실란, (에폭시알킬에테르)트리알콕시실란, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 경화성 조성물,

**청구항 25**

제1 내지 24항 중 어느 한 항에 있어서, 폴리머 (A) 100중량부 당 약 0.1 내지 약 5 중량부의 접착 촉진제 (D)를 포함하여 구성되는, 경화성 조성물.

**청구항 26**

제1 내지 24항 중 어느 한 항에 있어서, 약 0.01 내지 약 5 중량부의 산성 성분(F)를 포함하여 구성되는, 경화성 조성물.

**청구항 27**

제26항에 있어서, 상기 산성 성분(F)이 카복실산인, 경화성 조성물.

**청구항 28**

제27항에 있어서, 상기 카복실산이 C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 카복실산, C<sub>4</sub>-C<sub>30</sub> 가지형 카복실산, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 경화성 조성물.

**청구항 29**

제1 내지 28항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 필러 성분이 탄산칼슘 필러; 실리카 필러; 폼드 또는 침강; 분쇄된 실리카(Celite®); 침강 및 콜로이드 탄산칼슘; 실리카겔; 소수화된 실리카; 파쇄 및 분쇄된 석영; 크리스토타발라이트; 알루미늄, 수산화 알루미늄, 이산화티탄, 산화아연, 규조토, 산화철, 카본블랙, 분쇄된 열가소성 수지, 또는 점토인, 경화성 조성물,

**청구항 30**

제1 내지 28항 중 어느 한 항의 조성물로 형성된 경화된 폴리머.

**청구항 31**

제30항에 있어서, 상기 폴리머가 축합 반응 및/또는 탈수소 축합 반응을 통한 가교에 의해 형성되는, 경화된 폴리머.

**청구항 32**

약 20 내지 약 70℃의 온도에서 (메트)아크릴레이트와 아민을 반응시키는 단계를 포함하여 구성되는, 아미노 에스테르 제조 방법,

**청구항 33**

제32항에 있어서, 상기 반응이, (i) 30℃ 아래의 온도에서 아크릴레이트에 아민을 첨가하여 혼합물을 형성하는 단계, 및 (ii) 상기 혼합물을 약 20℃ 내지 약 70℃의 온도에서 반응하게 하여 아미노 에스테르를 형성하는 단계를 포함하여 구성되는, 아미노 에스테르 제조 방법,

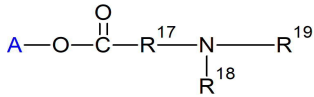


**청구항 34**

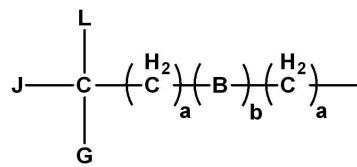
제33항에 있어서, 상기 반응이 촉매의 부재하에 수행되는, 아미노 에스테르 제조 방법,

**청구항 35**

제32항 내지 34항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 아미노 에스테르 화합물이 하기 식을 가지는, 아미노 에스테르 제조 방법:

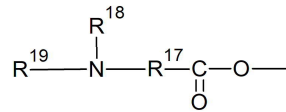


{위 식에서, A는 수소; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬 아릴 기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬 기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 치환된 규소, 치환된 실록산, 또는:



로부터 선택되고,

여기서 B는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; 또는 디알킬 실록산 기



로부터 선택되고; G, J, 및 L은 수소 및 식 의 아미노 에스테르 기로부터 독립적으로 선택되며, a는 1 내지 10이고, b는 0 내지 10임}.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 관련출원의 상호 참조

[0002] 본 출원은 발명의 명칭이 "수분 경화성 조성물"인 2014년 11월 24일자 미국 가특허 출원 제62/082,406호의 이익 및 이에 대한 우선권을 주장하며, 그 전체 개시내용은 본 출원에 참조 문헌으로 통합된다.

[0003] 기술분야

[0004] 본 발명은 촉매로서 아민 화합물을 포함하여 구성되는 수분-경화성 조성물에 관한 것이다. 구체적으로, 본 발명은 유기주석 촉매의 대체재로서 이차 아민, 삼차 아민 또는 치환된 아민 촉매를 포함하여 구성되는 수분-경화성 조성물을 제공한다. 본 발명의 촉매는 예를 들어 선형 또는 사이클릭 지방족 아민, 방향족 아민, 헤테로사이클릭 아민, 아미노 에스테르 등일 수 있다.

**배경 기술**

[0005] 반응성 실릴기를 가지는 폴리머 또는 이러한 폴리머를 포함하여 구성되는 조성물은 물과 금속 촉매의 존재하에 가수분해되고 축합될 수 있다. 경화성 조성물에 적합한 공지의 촉매는 Sn, Ti, Zn, 또는 Ca와 같은 금속을 사용하는 화합물을 포함한다. 예를 들어 디부틸주석 디라우레이트 (DBTDL)와 같은 유기주석 화합물이 RTV-1 및 RTV-2를 포함하는 실온 가황(room temperature vulcanizing: RTV) 제제와 같은 반응성 말단 실릴 기를 가지는 수많은 다양한 폴리오가노실록산 및 비-실리온 폴리머의 수분-지원 경화를 촉진하기 위하여 축합 경화 촉매로서 널리 사용되고 있다. 그러나 환경규제 기관 및 법령은 조제 제품에 유기주석 화합물의 사용에 관한 제한을 강화하고 있거나 강화할 것으로 예상된다. 예를 들어, 디부틸주석을 0.5 중량% 보다 많이 함유하는 제제는 생식 1B 분

류로 독성으로 표시할 것을 요구하는 한편, 디부틸주석-함유 제제는 차후 2 내지 3년안에 소비용품에서 완전히 추방할 것을 제기하고 있다.

[0006] 디옥틸주석 화합물 및 디메틸주석 화합물과 같은 대체 유기주석 화합물의 사용은 단기 대안으로만 고려될 수 있으며, 이러한 유기주석 화합물도 장차 규제될 수 있다. 따라서, 수분-경화성 실리콘 및 비-실리콘의 촉합 경화를 촉진하는 비-주석계 촉매를 찾아내는 것이 유리할 것이다.

[0007] 유기주석 촉매의 대체제는 경화, 저장 및 외관의 관점에서 유기주석 화합물과 대등한 특성들을 나타내어다 한다. 또한 비-주석 촉매는 바람직하게 선택된 폴리머의 촉합반응을 개시하고 이 반응을 표면에서 완료하며, 소정의 시간 내에 벌크(bulk) 내에서 완료할 수 있어야 한다. 따라서 다른 금속-계 및 비-금속-계 화합물로 유기 금속 주석 화합물을 대체하는 것에 대하여 많이 제안되고 있다. 이러한 새로운 촉매들은 주석 화합물을 완전한 대체의 관점에서 특별한 장점 및 단점이 있다. 따라서, 촉합 경화 반응에 적합한 촉매로서 가능한 비-주석 촉매의 약점들을 해결하는 것이 아직 필요하다. 또한, 미경화 및 경화 조성물의 물성들이 시험되며, 특히 다양한 기재들의 표면에 부착하는 능력을 유지하는지에 대한 검사를 거친다.

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

[0008] 유기주석 화합물을 대체하기 위한 기존의 촉매는 일반적으로 밀봉된 카트리지 내에서 수개월에 걸친 저장 후 습기 또는 주위 공기에 노출될 때 경화하는 능력을 유지할 수 없다. 수분 경화성 조성물에 대하여 항상 요구하는 것은, RTV-1 조성물 및 RTV-2 조성물에 대하여 택-프리 표면을 나타낼 뿐만 아니라 두께부에서 완전한 벌크를 통해 경화하면서, 가능한 한 짧은 경화시간을 달성하는 것이다. 게다가, 이러한 조성물들은 다양한 기재 상에서 경화후에 적절한 접착력을 제공하여야 한다.

#### 과제의 해결 수단

[0009] 본 발명은 실릴-말단 폴리머와, 이차 아민, 삼차 아민 또는 치환된 아민 화합물로부터 선택되는 아민 화합물을 포함하여 구성되는 촉매를 포함하여 구성되는 주석-없는 경화성 조성물을 제공한다. 구체예들에서, 상기 아민 촉매는 선형 또는사이클릭 지방족 아민, 방향족 아민, 헤테로사이클릭 아민, 아미노 에스테르, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수 있다. 하나의 구체예에서, 본 발명은 수분 경화성 조성물 내의 촉매로서 아미노 에스테르 화합물을 사용하는 경화성 조성물을 제공한다.

[0010] 하나의 구체예에서, 본 발명의 경화성 조성물은, (A) 반응성 규소-함유 기를 가지는 폴리머, (B) 크로스링커 및/또는 체인 익스텐더, (C) 선형 또는사이클릭 지방족 아민, 방향족 아민, 헤테로사이클릭 아민, 아미노 에스테르 화합물, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하여 구성되는 촉매, (D) 임의선택적으로 접착 촉진제, (E) 임의선택적으로 필러, 및 (F) 임의선택적으로 경화촉진제(cure accelerator), 및 (G) 임의선택적으로 보조 성분을 포함하여 구성된다.

[0011] 하나의 측면에서, 본 발명은 상대적으로 짧은 택-프리 시간, 벌크를 통한 경화뿐만 아니라 카트리지 내에서, 즉 습기의 부재하에, 장기 저장안정성을 나타내는 경화성 조성물을 제공한다. 아미노 에스테르 관능성을 갖는 화합물은 양호한 택-프리 시간 및/또는 벌크 경화를 포함하는, 양호한 경화 거동을 나타내는 것으로 판명되었다. 접착 촉진제와 아미노 에스테르 화합물의 사용은 조성물의 경화특성을 조정(tuning)을 가능하게 할 수 있다. 즉, 아미노 에스테르는 촉합반응할 수 있는 반응성, 실릴-말단 폴리머를 가지는 조성물(예를 들어 RTV-1 및 RTV-2 제제)에서 유기주석 촉매의 대체재로 적합할 수 있다.

[0012] 선형 또는사이클릭 지방족 아민, 방향족 아민, 헤테로사이클릭 아민, 및/또는 아미노 에스테르를 사용하는 경화성 조성물은 카트리지 내의 미경화 조성물의 확실한 저장안정성, 다양한 표면에 대한 접착성, 및 예측가능한 계획된 시간의 경화속도를 나타낼 수 있다.

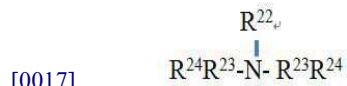
[0013] 하나의 측면에서, 본 발명은, (A) 적어도 하나의 반응성 실릴 기를 가지는 폴리머; (B) 알콕시실란, 알콕시실록산, 옥시모실란, 옥시모실록산, 에녹시실란, 에녹시실록산, 아미노실란, 아미노실록산, 카복시실란, 카복시실록산, 알킬아미노실란, 알킬아미노실록산, 아릴아미노실란, 아릴아미노실록산, 알콕시아미노실란, 알콕시아미노실록산, 알콕시카바메이토실란, 알콕시카바메이토실록산, 및 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 크로스링커 또는 체인 익스텐더; (C) 선형 또는사이클릭 지방족 아민, 방향족 아민, 헤테로사이클릭 아민, 아미노 에스테르 화합물과 같은 이차 아민, 삼차 아민 또는 치환된 아민, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는

축매; (D) 상기 (B)에 열거된 화합물 이외의 실란 또는 실록산으로부터 선택되는, 임의선택적인 적어도 하나의 접착 촉진제; (E) 임의선택적으로 필러 성분; (F) 임의선택적으로 산성 성분; 및 (G) 유기-관능성 규소 화합물 및/또는 저분자량 유기 폴리머 및/또는 고비점 용매를 포함하여 구성되는, 임의선택적인 보조 성분을 포함하여 구성되는 경화된 폴리머 조성물을 형성하기 위한 조성물을 제공한다. .

[0014] 하나의 구체예에서, 본 발명은 실질적으로 주석이 없는 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0015] 하나의 구체예에서, 본 발명은 축매가 복수의 아민 관능기를 가지는 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0016] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 아민 화합물이 하나 또는 복수의 하기 식의 아민 관능기를 포함하여 구성되는 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다:



[0018] 위 식에서,  $R^{22}$  는 수소;  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기;  $C_6-C_{10}$  아릴기;  $C_7-C_{16}$  선형 또는 가지형 알킬아릴 기;  $C_2-C_4$  폴리알킬렌 에테르; 또는 선형 또는 가지형  $C_7-C_{16}$  헤테로아르알킬, 헤테로알킬, 헤테로사이클로알킬, 또는 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택되고;  $R^{23}$  및  $R^{24}$  는  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기;  $C_6-C_{10}$  아릴기;  $C_7-C_{16}$  선형 또는 가지형 알킬아릴 기;  $C_2-C_4$  폴리알킬렌 에테르; 선형 또는 가지형  $C_7-C_{16}$  헤테로아르알킬; 헤테로알킬, 헤테로사이클로알킬, 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택되되, N 원자는 그 화합물 내에서  $R^{23}$ ,  $R^{24}$ ,  $R^{23}$  및  $R^{24}$  중의 어느 하나로, 또는 조합된  $R^{23}$ ,  $R^{24}$  로 bi-치환된 (bi-substituted) 것을 전제로 한다.

[0019] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 축매가 디알킬 아민 및 치환된 디알킬 아민, 디메틸아민, 디이소프로필아민, 디부틸아민, N-메틸부틸아민, N,N-디알릴 트리메틸렌디아민, 디아밀아민, 디헥실아민, 디옥틸아민, N-에틸세틸아민, 디도데실아민, 디테트라데실아민, 디리시놀레일아민, N-이소프로필스테아릴아민, N-이소아밀헥실아민, N-에틸옥틸아민, 디옥타데실아민, 이들의 호몰로그(homolog) 및 아날로그(analog), 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택된 이차 아민을 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예들에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0020] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 축매가 디사이클로헥실아민, N-메틸사이클로헥실아민, 디사이클로펜틸아민, N-옥틸사이클로헥실아민, N-옥틸-3,5,5-트리메틸사이클로헥실아민, 디알릴아민, N-에틸알릴아민, N-옥틸알릴아민, 디올레일아민, N-이소프로필올레일아민, N-메틸-3,3,5-트리메틸-5-사이클로헥센일아민, N-아릴-리놀레일아민, N-메틸-프로파길아민, 디페닐아민, 이들의 아날로그 및 호몰로그, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 이차 사이클로알킬아민을 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예들에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0021] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 축매가 트리에틸아민, 트리-이소프로필아민, 트리부틸아민, N-에틸디부틸아민, N-에틸-N-부틸아밀아민, N,N-디에틸 아닐린, 트리알릴아민, N,N-디프로필사이클로헥실아민, N,N-디프로필올레일-아민, 트리메틸아민, N-옥틸디알릴아민, N,N-디프로필사이클로헥실아민, 디메틸아미노프로필아민, 디메틸아미노에톡시프로필아민, 펜타메틸디에틸렌트리아민, 트리메틸아민, 트리에틸아민, N-메틸모폴린, N-에틸모폴린, N,N-디메틸벤질아민, N,N-디메틸에탄올아민, N,N,N',N'-테트라메틸-1,4-부탄디아민, N,N-디메틸피페라진, 비스(2-디메틸아미노에틸)에테르, 모폴린, N-메틸 또는 N-에틸 모폴린과 같은 N-치환된 모폴린, 4,4'-(옥시디-2,1-에탄디일)비스, 트리에틸렌디아민, 펜타메틸 디에틸렌 트리아민, 디메틸 사이클로헥실 아민, N-세틸 N,N-디메틸 아민, N-코코-모폴린, N,N-디메틸 아미노메틸 N-메틸 에탄올 아민, N,N,N'-트리메틸-N'-하이드록시에틸 비스(아미노에틸)에테르, N,N-비스(3-디메틸아미노프로필)N-이소프로판올아민, (N,N-디메틸)아미노-에톡시 에탄올, N,N,N',N'-테트라메틸 헥산 디아민, N,N-디모폴리노디에틸 에테르, N-메틸 이미다졸, 디메틸 아미노프로필 디프로판올아민, 비스(디메틸아미노프로필)아미노-2-프로판올, 테트라메틸아미노 비스 (프로필아민), (디메틸(아미노에톡시에틸))(디메틸 아민)에틸)에테르, 트리스(디메틸아미노 프로필) 아민, 디사이클로헥실 메틸 아민, 비스(N,N-디메틸-3 -아미노프로필) 아민, N,N-비스 (3-디메틸아미노프로필)-N-이소프로판올아민, 1,3 -프

로판디아민, 1,2-에틸렌 피페리딘, 메틸-하이드록시에틸 피페라진, 디메틸아미노프로필-S-트리아진, 비스디메틸아미노프로필우레아, 이들의 아날로그 및 호몰로그, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 삼차 아민을 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예들에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0022] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 촉매가 피페리딘, 피리딘, 메틸피페라진, 2,2,4,6-테트라메틸피페리딘, 2,2,4,6-테트라메틸-테트라하이드로피리딘, N-에틸 2,2,4,6 테트라메틸피페리딘, 2-아미노피리미딘, 2-아미노피리딘, 2-(디메틸아미노)피리딘, 4-(디메틸아미노)피리딘, 2-하이드록시피리딘, 이미다졸, 2-에틸-4-메틸이미다졸, 모폴린, N-메틸모폴린, 2-피페리딘메탄올, 2-(2-피페리디노)에탄올, 피페리돈, 1,2-디메틸-1,4,5,6-테트라하이드로피리미딘, 아지리딘, 메톡시메틸디페닐아민, 니코틴, 펜토바르비탈, 메타돈, 코카인, 및 트리페닐아민, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 헤테로사이클릭 아민을 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

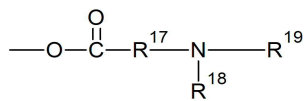
[0023] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 촉매가 아미노 에스테르 화합물로부터 선택되는 치환된 아민을 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0024] 하나의 구체예에서, 본 발명은 상기 아미노 에스테르 화합물이 적어도 하나의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0025] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 상기 아미노 에스테르 화합물이 1-10개의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0026] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 상기 아미노 에스테르 화합물이 1-4개의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0027] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 상기 아미노 에스테르 화합물이 하기 식의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다:



[0028] 위 식에서, R<sup>17</sup> 은 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub> 알킬기이고, R<sup>18</sup> 및 R<sup>19</sup> 는 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기, 할라이드, N, O, 또는 S로 선택된 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬아릴 기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬 기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 치환된 규소, 치환된 실록산, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 독립적으로 선택된다.

[0030] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 상기 아미노 에스테르가 약 50 g/mol 내지 약 10000 g/mol의 분자량을 가지는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0031] 하나의 구체예에서, 본 발명은 상기 아미노 에스테르가 약 3.0 내지 약 9.0의 pKa를 가지는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0032] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 경화성 조성물이 폴리머 (A) 100중량부당 약 0.0001 내지 약 10 중량부의 촉매 (C)를 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다. 또 하나의 구체예에서, 경화성 조성물은 폴리머 (A) 100중량부당 약 0.005 내지 약 0.05 중량부의 촉매 (C)를 포함하여 구성된다. 또 하나의 구체예에서, 촉매 성분(C)은 폴리머 성분(A) 100중량부 기준 약 0.15 내지 약 2.0 중량부의 양으로 존재한다.

[0033] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 폴리머 (A)가 식: [R<sup>1</sup><sub>a</sub>R<sup>2</sup><sub>3-a</sub>Si-Z]<sub>n</sub>-X-Z-SiR<sup>1</sup><sub>a</sub>R<sup>2</sup><sub>3-a</sub> 을 가지는 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다. 또 하나의 구체예에서, X는 폴리우레탄; 폴리에스테르; 폴리에테르; 폴리 카보네이트; 폴리올레핀; 폴리에스테르에테르; 및 R<sub>3</sub>SiO<sub>1/2</sub>, R<sub>2</sub>SiO, RSiO<sub>3/2</sub>, 및/또는 SiO<sub>2</sub> 의 단위를 가지는 폴리 오가노실록산으로부터 선택되고, n은 0 내지 100이고, a는 0 내지 2이고, R, R<sup>1</sup>, 및 R<sup>2</sup> 는 동일한 규소 원자에서 같거나 다를 수 있고 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 알킬; 하나 이상의 Cl, F, N, O, 또는 S로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 알킬; 페닐; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬아릴; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬; C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>-폴리알킬렌 에테르; 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수 있다. 다른 또

하나의 측면에서,  $R^2$  는 OH,  $C_1-C_8$  알콕시,  $C_2-C_{18}$  알콕시알킬, 알콕시아릴, 옥시모알킬, 옥시모아릴, 에녹시알킬, 에녹시아릴, 아미노알킬, 아미노아릴, 카복시알킬, 카복시아릴, 아미도알킬, 아미도아릴, 카바메이토알킬, 카바메이토아릴, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되고, Z는 결합(bond),  $C_1-C_{14}$  알킬렌의 군에서 선택되는 2가의 단위, 또는 0이다..

[0034] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 크로스링커 성분(B)이 테트라에틸오르쏘실리케이트 (TEOS); 메틸트리메톡시실란 (MTMS); 비닐트리메톡시실란; 메틸비닐디메톡시실란; 디메틸디메톡시실란; 디메틸디에톡시실란; 비닐트리에톡시실란; 테트라(*n*-프로필)오르쏘실리케이트; 트리스(메틸에틸케톡시모)비닐실란; 트리스(메틸에틸케톡시모)메틸실란; 트리스(아세트아미도)메틸실란; 비스(아세트아미도)디메틸실란; 트리스(*N*-메틸아세트아미도)메틸실란; 비스(*N*-메틸아세트아미도)디메틸실란; (*N*-메틸아세트아미도)메틸디알콕시실란; 트리스(벤즈아미도)메틸실란; 트리스(프로펜옥시)메틸실란; 알킬디알콕시아미도실란; 알킬알콕시비스아미도실란; 메틸에톡시비스(*N*-메틸벤즈아미도)실란; 메틸에톡시디벤즈아미도실란; 메틸디메톡시(에틸메틸케톡시모)실란; 비스(에틸메틸케톡시모)메틸메톡시실란; (아세탈독시모)메틸디메톡시실란; (*N*-메틸카바메이토)메틸디메톡시실란; (*N*-메틸카바메이토) 에틸디메톡시 실란; (이소프로펜옥시)메틸디메톡시실란; (이소프로펜옥시)트리메톡시실란; 트리스(이소프로펜옥시)메틸실란; (but-2-en-2-옥시)메틸디메톡시실란; (1-페닐에텐옥시)메틸디메톡시실란; 2-((1-카보에톡시)프로펜옥시)메틸디메톡시실란; 비스(*N*-메틸아미노)메틸메톡시실란; (*N*-메틸아미노)비닐디메톡시실란; 테트라키스(*N,N*-디에틸아미노)실란; 메틸디메톡시(*N*-메틸아미노)실란; 메틸트리스(사이클로헥실아미노)실란; 메틸디메톡시(*N*-에틸아미노)실란; 디메틸비스(*N,N*-디메틸아미노)실란; 메틸디메톡시(*N*-이소프로필아미노)실란 디메틸비스(*N,N*-디에틸아미노)실란; 에틸디메톡시(*N*-에틸프로피온아미도)실란; 메틸디메톡시(*N*-메틸아세트아미도)실란; 메틸트리스(*N*-메틸아세트아미도)실란; 에틸디메톡시(*N*-메틸아세트아미도)실란; 메틸트리스(*N*-메틸벤즈아미도)실란; 메틸메톡시비스(*N*-메틸아세트아미도)실란; 메틸디메톡시(*e*-카프로락타모)실란; 트리메톡시(*N*-메틸아세트아미도)실란; 메틸디메톡시(0-에틸아세트이미데이토)실란; 메틸디메톡시(0-프로필아세트이미데이토)실란; 메틸디메톡시(*N,N',N'*-트리메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시(*N*-알릴-*N',N'*-디메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시(*N*-페닐-*N',N'*-디메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시(이소시아네이토)실란; 디메톡시디이소시아네이토실란; 메틸디메톡시-이소티오시아네이토실란; 메틸메톡시디이소티오시아네이토실란; 메틸트리아세톡시실란; 메틸메톡시디아세톡시실란; 메틸에톡시디아세톡시실란; 메틸이소프로폭시디아세톡시실란; 메틸(*n*-프로폭시)디아세톡시실란; 메틸디메톡시아세톡시실란; 메틸디에톡시아세톡시실란; 메틸디이소프로폭시아세톡시실란; 메틸디(*n*-프로폭시)아세톡시실란; 또는 이들의 축합물들(condensates); 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0035] 하나의 구체예에서, 경화성 조성물은 어떠한 접착 촉진제도 함유하지 않는다. 또 하나의 구체예에서, 경화성 조성물은 접착 촉진제를 포함하여 구성된다.

[0036] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 접착 촉진제 성분(D)이 (아미노알킬)트리알콕시실란, (아미노알킬)알킬디알콕시실란, 비스(트리알콕시실릴알킬)아민, 트리스(트리알콕시실릴알킬)아민, 트리스(트리알콕시실릴알킬)시아누레이드, 트리스(트리알콕시실릴알킬)이소시아누레이드, (에폭시알킬)트리알콕시실란, (에폭시알킬에테르)트리알콕시실란, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0037] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 경화성 조성물이 폴리머 성분(A) 100 중량% 기준 .약 1 내지 약 10 중량%의 크로스링커 성분(B)을 포함하여 구성되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0038] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 크로스링커 성분(B)이 실란 또는 실록산으로부터 선택되고, 상기 실란 또는 실록산이 물 및 성분(F)의 존재하에 폴리머 (A)와 또는 그 자체에서 가수분해 및/또는 축합 반응을 수행할 수 있는 둘 이상의 반응성기를 가지는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0039] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 폴리머 성분(A)이 백본에 식  $[R_2SiO]$ 을 가지는 2가의 단위를 포함하여 구성되는 폴리오가노실록산으로부터 선택되고, 이 식에서 R이  $C_1-C_{10}$  알킬; 하나 이상의 Cl, F, N, O, 또는 S로 치환된  $C_1-C_{10}$  알킬; 페닐;  $C_7-C_{16}$  알킬아릴;  $C_7-C_{16}$  아릴알킬;  $C_2-C_{20}$  폴리알킬렌 에테르; 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.

[0040] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 촉매 (C)가 성분(A) 100중량부당 약 0.1 내지 약 7 중량부의 양으로 존재하는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.



- [0041] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 경화성 조성물이 1-파트 조성물로 제공되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.
- [0042] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 경화성 조성물이 100 중량%의 성분(A), 0.1 내지 약 10 중량%의 적어도 하나의 크로스링커 (B), 0.01 내지 약 7 중량%의 촉매 (C), 0 내지 약 5 중량%의 접착 촉진제 (D), 0 내지 약 70 중량%의 성분(E), 0.01 내지 약 8 중량%의 성분(F)을 포함하여 구성되는 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공하며, 이 조성물은 습기의 부재하에 저장될 수 있고, 주위 공기에 노출시 습기의 존재하에 경화할 수 있다.
- [0043] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 경화성 조성물이 : (i) 상기 폴리머 성분(A), 임의선택적으로 상기 필러 성분(E), 임의선택적으로 상기 촉진제 (F)를 포함하여 구성되는 제1 부분; 및 (ii) 상기 크로스링커 (B), 상기 촉매 (C), 임의선택적으로, 상기 접착 촉진제 (D), 임의선택적으로 유기-관능성 규소 화합물 및/또는 저분자량 유기 폴리머 또는 고비점 용매를 포함하는 보조 성분(G)을 포함하여 구성되는 제2 부분을 포함하여 구성되는 2-파트 조성물이고, 상기 제1 부분 (i)과 제2 부분 (ii)은 이들을 혼합하여 경화를 위해 도포될 때까지 분리 저장되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.
- [0044] 하나의 구체예에서, 본 발명은, 경화성 조성물이 (i) 상기 폴리머 (A), 상기 크로스링커 (B), 임의선택적으로 상기 필러 성분(E), 및 임의선택적으로 상기 산성 화합물 (F)을 포함하여 구성되는 제1 부분; 및 (ii) 상기 촉매 (C), 임의선택적으로 유기-관능성 규소 화합물 및/또는 저분자량 유기 폴리머 또는 고비점 용매 (G)를 포함하여 구성되는 제2 부분을 포함하여 구성되는 2-파트 조성물이고, 상기 제1 부분 (i)과 제2 부분 (ii)은 이들을 혼합하여 경화를 위해 도포될 때까지 분리 저장되는, 전술한 임의의 구체예에 의한 경화성 조성물을 제공한다.
- [0045] 또 하나의 측면에서, 본 발명은, (A) 실록산 결합이 없고 적어도 하나의 반응성 실릴기를 가지는 폴리머; (B) 알콕시실란, 알콕시실록산, 옥시모실란, 옥시모실록산, 에녹시실란, 에녹시실록산, 아미노실란, 아미노실록산, 카복시실란, 카복시실록산, 알킬아미도실란, 알킬아미도실록산, 아릴아미도실란, 아릴아미도실록산, 알콕시아미노실란, 알크아릴아미노실록산, 알콕시카바메이트실란, 알콕시카바메이트실록산, 이들의 축합물들, 및 이들 중 둘 이상의 조합들로부터 선택되는 크로스링커 또는 체인 익스텐더; 및 (C) 아미노 에스테르를 포함하여 구성되는 촉매를 포함하여 구성되는 경화된 폴리머 조성물을 형성하기 위한 조성물을 제공한다.
- [0046] 수분-경화성 조성물의 경화 화학작용은 폴리머 및 그 수분 경화성 기의 성질에 기초하여 변화할 수 있다. 예를 들어, 알콕시실릴 기는 먼저 가수분해하여 실란을 관능기를 형성한 다음, 물이 빠지면서 축합하여 실록산 네트워킹을 형성한다. 이러한 조성물은 전형적으로 알콕시실릴-또는 실란올-관능 폴리머 및 가교제를 포함하여 구성된다. 트리- 및 테트라-알콕시실란이 통상적으로 가교제로 사용되어, 물과 반응하거나 또는 실란올과 직접반응하여 계(system)를 가교한다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0047] 본 발명은 축합 촉매로서 아미노 에스테르를 사용하는 경화성 조성물을 제공한다. 이러한 아미노 에스테르 촉매를 포함하여 구성되는 조성물은, 실란트 및 RTV (실온 가황 리버)로 사용될 수 있는 가교 실리콘을 산출하기 위하여 실리콘의 수분-지원 축합 경화 촉진의 관점에서, 양호한 경화특성을 나타내며, 심지어 DBTDL과 같은 유기 주석 화합물을 사용하는 조성물에 비해 대등하거나 우수한 경화특성을 나타낼 수 있다. 또한 이러한 아미노 에스테르 촉매를 포함하여 구성되는 조성물은 또한 향상된 저장 안정성을 나타낸다.
- [0048] 본 명세서에서 사용되는 "알킬"은 선형, 가지형, 및 사이클릭 알킬기를 포함한다. 알킬의 구체적인 비한정적인 예는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, 에틸-헥실 등을 포함하며, 이에 제한되지 않는다.
- [0049] 본 명세서 사용되는 "치환된 알킬"은 하나 이상의 치환기를 함유하는 알킬기를 포함하며, 상기 치환기는 이를 함유하는 화합물이 겪게되는 프로세스 조건하에서 불활성이다. 상기 치환기는 또한 프로세스를 실질적으로 방해하지 않는다. 본 명세서에서 사용되는 "치환안된"은 특정 모이어티(moiety)가 구성 원자 상에 수소 원자를 수반하는 것을 의미하는 것으로, 예를 들어 치환 안된 메틸은 CH<sub>3</sub> 이다. 치환되는 유기 화학에서 알려진 전형적인 관능기를 수반할 수 있다는 것을 의미한다.
- [0050] 본 명세서에서 사용되는 "아릴"은 하나의 수소 원자가 제거된 임의의 방향족 탄화수소의 비한정적인 군을 포함한다. 아릴은 하나 이상의 방향족 고리를 가질 수 있으며, 상기 고리들은 축환될 수도 있고, 단일 결합 또는 다른 기에 의해 연결될 수도 있다. 아릴의 구체적인 비한정적인 예는 톨릴, 크실릴, 페닐, 나프탈레닐 등을 포함하나, 이에 제한되는 것은 아니다.

- [0051] 본 명세서에서 사용되는 "치환된 아릴"은 상기 "치환된 알킬"의 정의에서 제시된 바와 같이 치환된 방향족 기를 포함한다. 아릴과 마찬가지로, 치환된 아릴은 하나 이상의 방향족 고리를 가질 수도 있으며, 상기 고리들은 축환되거나 단일 결합 또는 다른 기에 의해 연결될 수도 있으나; 치환된 아릴이 헤테로방향족 고리를 가지는 경우, 치환된 아릴 기에서 자유원자가(free valence)는 탄소 대신에 헤테로방향족 고리의 헤테로원자(예를 들어, 질소)일 수 있다. 하나의 구체예에서, 치환된 아릴기는 1 내지 약 30 개의 탄소원자를 함유한다.
- [0052] 본 명세서에서 사용되는 "아르알킬"은 아릴기로 치환된 알킬기를 포함한다.
- [0053] 본 명세서에서 사용되는 "알케닐"은 하나 이상의 탄소-탄소 이중결합을 함유하는 임의의 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알케닐 기를 포함하며, 치환 포인트는 탄소-탄소 이중결합이거나 또는 그 기의 다른 곳일 수 있다. 알케닐의 구체적인 비한정적인 예는 비닐, 프로펜일, 알릴, 메트알릴, 에틸리데닐 노르보난 등을 포함하나, 이에 제한되지 않는다.
- [0054] 본 명세서에 사용되는 "알킬닐"은 하나 이상의 삼중결합을 함유하는 임의의 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬닐 기를 포함하며, 치환 포인트는 탄소-탄소 삼중결합이거나 그 기의 다른 곳일 수 있다.
- [0055] 본 명세서에서 사용되는 "불포화"는 하나 이상의 이중결합 또는 삼중결합을 가리킨다. 하나의 구체예에서, 불포화는 탄소-탄소 이중 또는 삼중 결합을 가리킨다.
- [0056] 본 명세서에서 단독으로 또는 다른 치환기의 일부로서 사용되는 용어 "알킬렌", "사이클로알킬렌", "알킬닐렌", "알케닐렌", 및 "아릴렌"은 알킬, 사이클로알킬, 헤테로알킬, 알킬닐, 알케닐, 또는 아릴기로부터 각각 유도된 2개의 라디칼을 가리킨다. 상기한 라디칼 각각 치환된 또는 치환안된 선형 또는 가지형일 수 있다.
- [0057] 본 명세서에서 사용되는 "규소-함유 알킬," "규소-함유 아릴," 등은, 기 -SiR<sub>3</sub>(여기서, R은 같거나 다르며, 알킬, 사이클로알킬, 헤테로알킬, 헤테로사이클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 알콕시, 또는 하이드록시를 포함하는 군에서 선택됨)를 포함하여 구성되는 화합물을 포함한다.
- [0058] 본 명세서에서 사용되는 "헤테로알킬," "헤테로아릴" 등은 O, N, P, S 등과 같은 헤테로 원자를 포함하여 구성되는 화합물을 포함한다.
- [0059] 하나의 구체예에서, 본 발명은 반응성 말단 실릴 기를 포함하여 구성되는 폴리머 성분(A); 크로스링커 성분(B); 아미노 에스테르를 포함하여 구성되는 촉매 성분(C); 임의선택적으로 접착 촉진제 성분(D); 임의선택적인 필러 성분(E); 임의선택적으로 산성 화합물 (F), 및 유기-관능성 규소 화합물 및/또는 저분자량 유기 폴리머 또는 고비점 용매를 포함하여 구성되는 임의선택적인 보조 성분(G)을 포함하여 구성되는 경화성 조성물을 제공한다.
- [0060] 또 하나의 구체예에서, 본 발명은 하이드리도실릴 기를 포함하여 구성되는 폴리머 성분(A); 아미노 에스테르를 포함하여 구성되는 촉매 성분(C); 및 임의선택적으로 보조 성분(G)을 포함하여 구성되는 경화성 조성물을 제공한다.
- [0061] 폴리머 성분(A)은 반응성 말단 실릴 기를 가지는 액체-계 또는 고체-계 폴리머일 수 있다. 폴리머 성분(A)은 특별히 제한되지 않으며, 특정 목적 또는 의도된 용도에 바람직할 수 있는 임의의 가교성 폴리머로부터 선택될 수도 있다. 폴리머 성분(A)에 적합한 폴리머의 비한정적인 예는 폴리오가노실록산 (A1) 또는 실록산 결합이 없는 유기 폴리머 (A2)를 포함하여, 상기 폴리머 (A1) 및 (A2)는 반응성 말단 실릴 기를 포함하여 구성된다. 하나의 구체예에서, 폴리머 성분(A)은 경화성 조성물의 약 10 내지 약 90 중량%의 양으로 존재할 수도 있다. 하나의 구체예에서, 경화성 조성물은 약 100중량부의 폴리머 성분(A)을 포함하여 구성된다.
- [0062] 위에서 설명한 바와 같이, 폴리머 성분(A)은 광범위의 폴리오가노실록산을 포함할 수도 있다. 하나의 구체예에서, 상기 폴리머 성분은 하나 이상의 폴리실록산 및 식(1)의 코폴리머를 포함하여 구성될 수도 있다:
- [0063]  $[R^1R^2Si-Z]_n-X-Z-SiR^1R^2(1)$
- [0064] R<sup>1</sup>은 선형 또는 가지형 알킬, 선형 또는 가지형 헤테로알킬, 사이클로알킬, 헤테로사이클로알킬, 아릴, 헤테로아릴, 선형 또는 가지형 아르알킬, 선형 또는 가지형 헤테로아르알킬, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수도 있다. 하나의 구체예에서, R<sup>1</sup>은 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 알킬; 하나 이상의 Cl, F, N, O, 또는 S로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 알킬; 페닐; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬아릴; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬; C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub> 폴리알킬렌 에테르; 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수도 있다. 그 대표적인 기는 메틸, 트리플루오로프로필, 및/또는 페닐 기이다.

- [0065]  $R^2$  는 물과 같은 프로톤제(protic agent)에 반응성인 기일 수 있다.  $R^2$  의 대표적인 기는 OH, 알콕시, 알케닐옥시, 알킬옥시모, 알킬카복시, 아릴카복시, 알킬아미도, 아릴아미도, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함한다. 하나의 구체예에서,  $R^2$  는 OH, C<sub>1</sub>-C<sub>8</sub> 알콕시, C<sub>2</sub>-C<sub>18</sub> 알콕시알킬, 아미노, 알케닐옥시, 알킬옥시모, 알킬아미노, 아릴아미노, 알킬카복시, 아릴카복시, 알킬아미도, 아릴아미도, 알킬카바메이트, 아릴카바메이트, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택된다.
- [0066] Z는 결합, O, 하나 이상의 O, S, 또는 N 원자를 함유할 수 있는 탄화수소, 구아니딘-함유하는, 우레탄, 에테르, 에스테르, 우레아 단위 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 2가의 연결 단위(linking unit)일 수 있다. 상기 연결 기 Z가 탄화수소 기이면, Z는 규소-탄소 결합을 통해 규소 원자에 연결된다. 하나의 구체예에서, Z는 C<sub>1</sub>-C<sub>14</sub> 알킬렌으로부터 선택된다.
- [0067] X는 폴리우레탄; 폴리에스테르; 폴리에테르; 폴리카보네이트; 폴리올레핀; 폴리에스테르에테르; 및  $R^1_3SiO_{1/2}$ ,  $R^1_2SiO$ ,  $R^1SiO_{3/2}$ , 및/또는 SiO<sub>2</sub>단위를 가지는 폴리오가노실록산으로부터 선택되며, 여기서  $R^1$  은 위에서 정의한 바와 같다. X는 위에서 설명한 바와 같은 반응성 기  $R^2$  를 포함하여 구성되는 말단 실릴 기에 산소 또는 탄화수소 기를 통해 연결되는 실록시 단위들의 군에서 선택되는 2가 또는 다가의 폴리머 단위일 수도 있다. 상기 탄화수소 기 X는 구아니딘-함유(guanidine-containing) 에스테르, 에테르, 우레탄, 에스테르, 및/또는 우레아를 형성하는 N, S, O, 또는 P와 같은 하나 이상의 헤테로 원자를 함유할 수 있다. 하나의 구체예에서, X의 평균 중합도 ( $P_n$ )는 6 이상이어야 하며, 그 예는  $R^1_3SiO_{1/2}$ ,  $R^1_2SiO$ ,  $R^1SiO_{3/2}$ , 및/또는 SiO<sub>2</sub>의 폴리오가노실록산 단위이다. 식 (2)에서, n은 0 내지 100, 바람직하게 1이고, c는 0 내지 2, 바람직하게 0 내지 1이다.
- [0068] 단위 X를 위한 성분들의 비한정적인 예는, 폴리옥시에틸렌, 폴리옥시프로필렌, 폴리옥시부틸렌, 폴리옥시에틸렌-폴리옥시프로필렌 코폴리머, 폴리옥시테트라메틸렌, 또는 폴리옥시프로필렌-폴리옥시부틸렌 코폴리머와 같은 폴리옥시알킬렌 폴리머; 에틸렌-프로필렌 코폴리머, 폴리이소부틸렌, 폴리클로로프렌, 폴리이소프렌, 폴리부타디엔, 이소부틸렌과 이소프렌의 코폴리머, 이소프렌 또는 부타디엔과 아크릴로니트릴 및/또는 스티렌의 코폴리머, 또는 이러한 폴리올레핀 폴리머를 수소화하는 것에 의해 생성되는 수소화 폴리올레핀 폴리머와 같은 탄화수소 폴리머; 아디프산 또는 프탈산과 같은 이염기산과 글리콜의 축합 또는 락톤의 개환 중합에 의해 제조되는 폴리에스테르 폴리머; C<sub>2</sub>-C<sub>8</sub>-알킬 아크릴레이트와 같은 모노머의 라디칼 중합에 의해 생성되는 폴리아크릴산 에스테르, 비닐 폴리머, 예를 들어 에틸 아크릴레이트 또는 부틸 아크릴레이트와 같은 아크릴산 에스테르와 비닐 아세테이트, 아크릴로니트릴, 메틸 메타크릴레이트, 아크릴구아니딘-함유, 또는 스티렌의 아크릴산 에스테르 코폴리머; 상기한 유기 폴리머와 비닐 모노머를 중합하는 것에 의해 생성되는 그래프트 폴리머; 폴리카보네이트; 폴리설파이드 폴리머; 폴리구아니딘-함유 폴리머, 예를 들어  $\epsilon$ -카프로락탐의 개환중합에 의해 생성되는 나일론 6, 헥사메틸렌디아민과 아디프산 등의 중축합에 의해 생성되는 나일론 6-6,  $\epsilon$ -라우로락탐의 개환 중합에 의해 생성되는 나일론 12, 폴리구아니딘-함유 코폴리머, 폴리우레탄 또는 폴리우레아를 포함한다.
- [0069] 특히 적합한 폴리머는 폴리실록산, 폴리옥시알킬렌, 폴리이소부틸렌, 수소화 폴리부타디엔 및 수소화 폴리이소프렌과 같은 포화 탄화수소 폴리머, 또는 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 폴리에스테르, 폴리카보네이트, 폴리우레탄, 폴리우레아 폴리머 및 그 유사물을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 또한, 포화 탄화수소 폴리머, 폴리옥시알킬렌 폴리머, 및 비닐 코폴리머는 유리전이온도(glass transition temperature)가 낮아서, 낮은 온도, 즉 0 °C 아래에서 높은 유연성(flexibility)을 제공하기 때문에 특히 적합하다.
- [0070] 식(1)에서 반응성 실릴 기는 축합 또는 개환 반응을 통해 반응성 실릴 기에 연결될 프리폴리머 내의 SiOH, 아미노알킬 또는 -아릴, HOOC-알킬 또는 -아릴, HO-알킬 또는 -아릴, HS-알킬 또는 -아릴, Cl(O)C-알킬 또는 -아릴, 에폭시알킬 또는 에폭시사이클로알킬 기의 반응, 또는 하이드로실릴화를 통해 불포화 탄화수소와 공지의 방법으로 반응할 능력을 가진 관능기를 함유하는 실란을 사용하는 것에 의해 도입될 수 있다. 이러한 방법에 주로 이용되는 구체예는, (i) 이탈기(LG)와 수소의 첨가반응 생성물(LG-H)이 방출되는 동안 실록시 결합  $\equiv Si-O-SiR^1_cR^2_{3-c}$  이 형성되는, 실란 (LG)SiR<sup>1</sup><sub>c</sub>R<sup>2</sup><sub>3-c</sub> 과 축합반응할 수 있는 SiOH 기를 가지는 실록산 프리폴리머; (ii) SiH 기 또는 SiH와 같은 실란 또는 불포화기의 라디칼 활성화된 기와 하이드로실릴화 또는 라디칼 반응을 통해 반응할 수 있는 불포화기를 가지는 실란; 및 (iii) 에폭시, 이소시아네이트, OH, SH, 시아네이트, 카복실산 할로젠화물, 반응성 알킬할로젠화물, 락톤, 락탐, 또는 아민과 보충적으로(complementarily) 반응할 수 있는 OH,



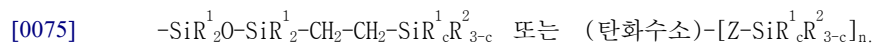
SH, 아미노, 에폭시, -COCl, -COOH 기를 가지는 유기 또는 무기 프리폴리머를 포함하는 실란 (상기 반응성 프리폴리머는 유기관능성 실란과 연결되어 실릴 관능성 폴리머를 산출함)을 포함한다.

[0071] 방법(i)에 적합한 실란은 알콕시실란, 특히 테트라알콕시실란, 디- 및 트리알콕시실란, 디- 및 트리아세톡시실란, 디- 및 트리케톡시모실란, 디- 및 트리아케닐옥시실란, 디- 및 트리카본아미도실란을 포함하여, 이러한 실란의 규소원자에서 잔기들은 치환된 또는 치환안된 탄화수소이다. 방법(i)을 위한 실란의 다른 비한정적인 예는, 알킬트리알콕시실란, 예를 들어 비닐트리메톡시실란, 메틸트리메톡시실란, 프로필트리메톡시실란, 아미노알킬트리메톡시실란, 에틸트리아세톡시실란, 메틸- 또는 프로필트리아세톡시실란, 메틸트리부타논옥시모실란, 메틸트리프로펜일옥시실란, 메틸트리벤즈아미도실란, 또는 메틸트리아세트아미도실란을 포함한다. 방법(i)의 반응에 적합한 프리폴리머는 규소원자에 부착된 가수분해성 기를 가지는 실란과 축합반응할 수 있는 SiOH-말단 폴리알킬실록산이다. 대표적인 SiOH-말단 폴리알킬디실록산의 예는 폴리디메틸실록산을 포함한다.

[0072] 방법(ii)에 적합한 실란은, 알콕시실란, 특히 트리메톡시실란, 트리에톡시실란, 메틸디에톡시실란, 메틸디메톡시실란, 및 페닐디메톡시실란과 같은 트리알콕시실란 (HSi(OR)<sub>3</sub>)을 포함한다. 수소클로로실란은 원칙적으로 가능하다. 알콕시, 아세톡시 기 등을 통해 추가적인 치환으로 인해 덜 바람직하다. 다른 적합한 실란은 비닐, 알릴, 머캅토알킬, 또는 아크릴 기와 같이, 라디칼로 활성화될 수 있는 불포화기를 가지는 유기관능성 실란을 포함한다. 그 비한정적인 예는 비닐트리메톡시실란, 머캅토프로필트리메톡시실란, 및 메타크릴옥시프로필트리메톡시실란을 포함한다. 방법(ii)의 방법에서 반응에 적합한 프리폴리머는, 비닐-말단 폴리알킬실록산, 바람직하게 폴리디메틸실록산, 예를 들어 불포화 탄화수소 또는 SiH 기를 포함하는 실란의 대응하는 유기 관능기와 라디칼 유도 그래프팅 반응할 수 있는 또는 하이드로실릴화 반응할 수 있는 불포화기를 갖는 탄화수소를 포함한다.

[0073] 탄화수소 폴리머에 실릴 기를 도입하기 위한 또 하나의 방법은 불포화 탄화수소 모노머와 실란의 불포화 기와의 공중합일 수 있다. 탄화수소 프리폴리머에 불포화 기의 도입은, 예를 들어 규소없는 탄화수소 모이어티의 중합 후에 체인 스톱퍼(chain stopper)로서 알케닐 할로게나이드의 사용을 포함할 수도 있다,

[0074] 실란과 프리폴리머 사이의 바람직한 반응 생성물은 다음의 구조를 포함한다:



[0076] 방법(iii)에 적합한 실란은 알콕시실란, 특히 -OH, -SH, 아미노, 에폭시, -COCl, 또는 -COOH에 대한 반응성이 있는 유기 관능기를 가지는 실란을 포함하나, 이에 제한되지 않는다.

[0077] 하나의 구체예에서, 이러한 실란은 이소시아네이트알킬 기를 가지며, 예를 들어 감마-이소시아네이트프로필트리메톡시실란, 감마-이소시아네이트프로필메틸디메톡시실란, 감마-이소시아네이트프로필트리에톡시실란, 감마-글리시독시프로필메틸디메톡시실란, 감마-글리시독시프로필트리메톡시실란, 감마-글리시독시프로필트리에톡시실란, 베타-(3,4-에폭시사이클로헥실)에틸트리메톡시실란, 베타-(3,4-에폭시사이클로헥실)에틸트리에톡시실란, 에폭시리모닐트리메톡시실란, N-(2-아미노에틸)-아미노프로필트리메톡시실란, 감마-아미노프로필트리에톡시실란, 감마-아미노프로필트리메톡시실란, 감마-아미노프로필메틸디메톡시실란, 감마-아미노프로필메틸디에톡시실란, 등이 있다.

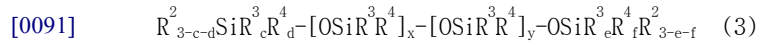
[0078] 하나의 구체예에서, 완전한 혼합후에 커플링 반응시키기 위한 블록킹된 아민이나 이소시아네이트 (Z'-X)<sub>n</sub>-Z' 를 선택하는 것이 바람직하다. 블록킹제의 예는 EP 0947531에 개시되고, 카프로락탐 또는 부타논옥시과 같은 헤테로사이클릭 질소 화합물, 또는 사이클릭 케톤을 사용하는 다른 블록킹 방법들이 미국특허 제6,827,875호에 기술되며, 이 특허문헌들은 그 전체내용이 본 출원에 참조문헌으로 통합된다.

[0079] 방법(iii)의 반응을 위한 적합한 프리폴리머의 예는, OH 기를 가지는 폴리알킬렌 옥사이드, 하나의 구체예에서 높은 분자량(M<sub>w</sub>, 중량평균 분자량 > 6000 g/mol)과 1.6 보자 적은 다분산지수(M<sub>w</sub>/M<sub>n</sub>)를 갖는 OH 기를 가지는 폴리알킬렌 옥사이드; NCO 관능화된 폴리알킬렌 옥사이드와 같이 잔류 NCO 기를 가지는 우레탄, 특히 블록킹된 이소시아네이트; 최종 경화에 유용한 추가 반응성 기를 가지는 대응하는 실란의 에폭시, 이소시아네이트, 아미노, 카복시할로게나이드 또는 할로젠알킬 기와 보충적으로 반응할 수 있는 -OH, -COOH, 아미노, 에폭시 기를 가지는 탄화수소들의 군에서 선택되는 프리폴리머를 포함하나, 이에 제한되지 않는다.

[0080] 폴리에테르에 NCO 기를 도입하는데 적합한 이소시아네이트는 톨루엔 디이소시아네이트, 디페닐메탄 디이소시아네이트, 또는 크실렌 디이소시아네이트; 이소포론 디이소시아네이트, 또는 헥사메틸렌 디이소시아네이트와 같은 지방족 폴리이소시아네이트를 포함할 수도 있다.

- [0081] 단위 X의 중합도는 경화 산물의 점도 및 기계적 특성의 요건에 의존한다. X가 폴리디메틸실록산 단위이면, 수평균 분자량( $M_n$ )에 기초한 평균 중합도는 바람직하게 7 내지 5000 실록시 단위, 바람직하게 200 내지 2000 단위이다. > 5 MPa의 충분한 인장강도를 달성하기 위하여, > 250의 평균 중합도( $P_n$ )가 적당하며, 이와 같이 하면 폴리디메틸실록산은 25°C에서 300 mPa.s 보다 높은 점도를 갖는다. X가 폴리실록산 이외의 탄화수소 단위이면, 중합도에 대한 점도는 훨씬 더 높다.
- [0082] 폴리옥시알킬렌 폴리머를 합성하는 방법의 예는, 예를 들어 미국특허 3,427,256; 3,427,334; 3,278,457; 3,278,458; 3,278,459; 3,427,335; 6,696,383; 및 6,919,293에 개시된, KOH와 같은 알칼리 촉매를 사용하는 중합방법, 유기알루미늄 화합물을 반응시키는 것에 의해 얻어지는 착물과 같은 금속-포피린 착물 촉매를 사용하는 중합방법, 복합 금속 시아나이드 착물 촉매를 사용하는 중합방법을 포함하나, 이에 제한되지 않는다.
- [0083] 기 X가 탄화수소 폴리머에서 선택되면, 이소부틸렌 단위를 가지는 폴리머 또는 코폴리머가 우수한 내후성, 우수한 내열성 및 낮은 가스 및 수분 투과성과 같은 물성을 가지기 때문에 특히 바람직하다.
- [0084] 모노머의 예는 4 내지 12개의 탄소원자를 가지는 올레핀, 비닐 에테르, 방향족 비닐 화합물, 비닐실란, 및 알릴 실란을 포함한다. 코폴리머 성분의 예는 1-부텐, 2-부텐, 2-메틸-1-부텐, 3-메틸-1-부텐, 펜텐, 4-메틸-1-펜텐, 헥센, 비닐사이클로헥센, 메틸 비닐 에테르, 에틸 비닐 에테르, 이소부틸 비닐 에테르, 스티렌, 알파-메틸스티렌, 디메틸스티렌, 베타-피넨, 인덴, 그리고 비한정적인 예를 들어, 비닐트리알콕시실란, 예컨대 비닐트리메톡시실란, 비닐메틸디클로로실란, 비닐디메틸메톡시실란, 디비닐디클로로실란, 디비닐디메톡시실란, 알릴트리클로로실란, 알릴메틸디클로로실란, 알릴디메틸메톡시실란, 디알릴디클로로실란, 디알릴디메톡시실란, 감마-메타크릴로일옥시프로필트리메톡시실란, 및 감마-메타크릴로일옥시프로필메틸디메톡시실란을 포함한다.
- [0085] 실록산-없는 유기 폴리머의 적합한 예는, 실릴화 폴리우레탄 (SPUR), 실릴화 폴리에스테르, 실릴화 폴리에테르, 실릴화 폴리카보네이트; 실릴화 폴리올레핀, 예컨대 실릴화 폴리에틸렌 및 폴리프로필렌; 실릴화 폴리에스테르 에테르, 및 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 상기 실록산-없는 유기 폴리머는 조성물의 약 10 내지 약 90 중량%, 또는 100중량부의 양으로 존재할 수 있다.
- [0086] 하나의 구체예에서, 폴리머 성분(A)은 실릴화 폴리우레탄 (SPUR)일 수 있다. 이러한 수분 경화성 화합물은 일반적으로 당분야에 알려져 있으며, (i) 이소시아네이트-말단 폴리우레탄 (PUR) 프리폴리머와 적절한 실란, 예를 들어 규소 원자에 위치한 알콕시 등과 같은 가수분해성 관능기와, 머캡탄, 일차 또는 이차 아민 (바람직하게 후자) 등과 같은 이차 활성 수소-함유 관능기를 모두 가진 실란을 반응시키는 것을 포함하는 다양한 방법에 의해; 또는 (ii) 하이드록실-말단 PUR (폴리우레탄) 프리폴리머와 적절한 이소시아네이트-말단 실란, 예를 들어 1 내지 3개의 알콕시기를 가지는 이소시아네이트-말단 실란을 반응시키는 것에 의해, 얻어질 수 있다. 이러한 반응들의 상세한 내용, 및 거기에 사용되는 이소시아네이트-말단 및 하이드록실-말단 PUR 프리폴리머를 제조하는 것에 관한 상세한 내용이 알려져 있으며, 그 중에 미국 특허 제4,985,491호; 제5,919,888호; 제6,207,794호; 제6,303,731호; 제6,359,101호; 및 제6,515,164호, 미국특허출원 공개 제2004/0122253호 및 제2005/0020706호 (이소시아네이트-말단 PUR 프리폴리머); 미국특허 3,786,081 및 4,481,367 (하이드록실-말단 PUR 프리폴리머); 미국특허 제3,627,722호; 제3,632,557호; 제3,971,751호; 제5,623,044호; 제5,852,137호; 제6,197,912호; 및 제6,310,170호 (이소시아네이트-말단 PUR 프리폴리머와 반응성 실란, 예를 들어 아미노알콕시실란의 반응에 의해 얻어지는 수분-경화성 SPUR (실란 변성/말단 폴리우레탄)); 및 미국특허 4,345,053호; 4,625,012호; 6,833,423호; 및 미국특허출원 공개 2002/0198352호 (하이드록실-말단 PUR 프리폴리머와 이소시아네이트실란의 반응에서 얻어지는 수분-경화성 SPUR)가 있다. 상기 미국특허문헌들의 전체내용은 본 출원에 참조문헌으로 통합된다. 수분-경화성 SPUR 물질의 다른 예는 미국 특허 제7,569,653호에 설명된 것들을 포함하며, 그 개시내용 전부는 본 출원에 참조문헌으로 통합된다.
- [0087] 하나의 구체예에서, 폴리머 성분(A)은 식(2)의 폴리머일 수 있다:
- [0088] 
$$R_{3-c}^2R_c^1Si-Z-[R_2SiO]_x [R^1SiO]_y -Z-SiR^1_cR_{3-c}^2(2)$$
- [0089] 위 식에서,  $R^1$ ,  $R^2$ , Z, 및 c는 식(2)에 대하여 위에서 정의한 바와 같고; R은  $C_1-C_6$  알킬 (대표적인 알킬은 메틸)이고; x는 0 내지 약 10,000, 하나의 구체예에서 1 내지 약 2500이고; y는 0 내지 약 10,000; 바람직하게 0 내지 500이다. 하나의 구체예에서, 식(2)의 화합물에서 Z는 결합 또는 2가의  $C_1-C_{14}$  알킬렌 기이고, 특히 바람직한 것은  $-C_2H_4-$  이다.

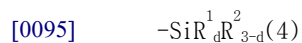
[0090] 하나의 구체예에서, 폴리머 성분(A)는 하기 식(3)의 폴리오가노실록산일 수 있다:



[0092]  $R^3$  및  $R^4$  는 동일한 규소 원자 상에서 같거나 다를 수 있으며, 수소;  $C_1-C_{10}$  알킬;  $C_1-C_{10}$  헤테로알킬,  $C_3-C_{12}$  사이클로알킬;  $C_2-C_{30}$  헤테로사이클로알킬;  $C_6-C_{13}$  아릴;  $C_7-C_{30}$  알킬아릴;  $C_7-C_{30}$  아릴알킬;  $C_4-C_{12}$  헤테로아릴;  $C_5-C_{30}$  헤테로아릴알킬;  $C_5-C_{30}$  헤테로알킬아릴;  $C_2-C_{100}$  폴리알킬렌 에테르; 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택된다.  $R^2$ ,  $c$ ,  $x$ , 및  $y$ 는 위에서 정의한 바와 같고;  $d$ 는 0, 1, 또는 2이고;  $e$ 는 0, 1, 또는 2이며;  $f$ 는 0, 1, 또는 2이다.

[0093] 적합한 폴리실록산-함유 폴리머 (A1)의 비한정적인 예는, 실란올-정지된 폴리디메틸실록산, 실란올 또는 알콕시-정지된 폴리오가노실록산, 예를 들어, 메톡시정지된 폴리디메틸실록산, 알콕시-정지된 폴리디메틸실록산-폴리디페닐실록산 코폴리머, 및 실란올 또는 알콕시-정지된 플루오로알킬-치환된 실록산, 예를 들어 폴리(메틸 3,3,3-트리플루오로프로필)실록산 및 폴리(메틸 3,3,3-트리플루오로프로필)실록산-폴리디메틸 실록산 코폴리머를 포함한다. 폴리오가노실록산 성분(A1)은 조성물의 약 10 내지 약 90 중량%, 또는 100중량부의 양으로 존재할 수 있다. 하나의 바람직한 구체예에서, 상기 폴리오가노실록산 성분은 약 10 내지 약 2500 실록시 단위 범위의 평균 사슬 길이를 가지며, 점도가 25°C에서 약 10 내지 약 500,000 mPa.s의 범위 내에 있다

[0094] 대안적으로, 본 조성물은 실록산 단위가 없고, 실록산 함유 폴리머(A1)과 비교할 만한 축합 반응에 의해 경화하는 실릴-말단 유기 폴리머 (A2)를 포함할 수도 있다. 폴리오가노실록산 폴리머 (A1)과 마찬가지로, 폴리머 성분 (A)로서 적합한 상기 유기 폴리머 (A2)는 말단 실릴 기를 포함한다. 하나의 구체예에서, 상기 말단 실릴 기는 하기 식(4)를 가질 수도 있다:



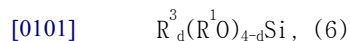
[0096] 여기서  $R^1$ ,  $R^2$ , 및  $d$ 는 위에서 정의한 바와 같다.

[0097] 본 발명의 폴리실록산 조성물은 성분(B)로서 크로스링커 또는 체인 익스텐더를 더 포함할 수 있다. 하나의 구체예에서, 크로스링커는 식(5)를 갖는다:



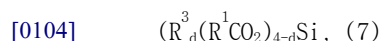
[0099] 여기서  $R^1$ ,  $R^2$ , 및  $d$ 는 위에서 정의한 바와 같다. 대안적으로, 크로스링커 성분은,  $R^2$  기의 전부는 아니나 하나 이상이 물의 존재하에 가수분해되고 방출된 다음 중간체 실란올이 축합반응하여 Si-O-Si 결합과 물을 산출하는, 식(5)의 축합 생성물일 수도 있다. 평균 중합도는 2 내지 10개의 Si 단위를 가지는 화합물이 되는 정도이다.

[0100] 하나의 구체예에서, 크로스링커는 하기 식(6)을 가지는 알콕시실란이다:



[0102] 여기서  $R^1$ ,  $R^3$ , 및  $d$ 는 위에서 정의한 바와 같다.

[0103] 또 하나의 구체예에서, 크로스링커는 하기 식(7)을 가지는 아세톡시실란이다:



[0105] 여기서  $R^1$ ,  $R^3$ , 및  $d$ 는 위에서 정의한 바와 같다.

[0106] 다른 또 하나의 구체예에서, 크로스링커는 하기 식(8)을 가지는 옥시모실란이다:



[0108] 여기서  $R^1$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ , 및  $d$ 는 위에서 정의한 바와 같다.

[0109] 본 명세서에서 사용되는 용어 '크로스링커'는 (A)에서 정의되지 않은 분자당 3개 보다 적은 규소 원자와 적어도 2개의 가수분해성 기를 가지는 추가 반응성 성분을 포함하는 화합물을 포함한다. 하나의 구체예에서, 크로스링커 또는 체인 익스텐더는, 알콕시실란, 알콕시실록산, 옥시모실란, 옥시모실록산, 에녹시실란, 에녹시실록산, 아미노실란, 아미노실록산, 카복시실란, 카복시실록산, 알킬아미노실란, 알킬아미노실록산, 아릴아미노실란, 아릴아미노실록산, 알콕시아미노실란, 알킬아릴아미노실록산, 알콕시카바메이토실란, 알콕시카바메이토실록산, 이미데이토실란, 우레이도실란, 이소시아네이토실란, 이소티오시아네이토실란, 이들의 축합물, 하이드리도실란, 하이드리도실록산 (분자당 적어도 하나의 반응성  $\equiv\text{SiH}$  단위를 가지는 오가노실록산 모노머, 올리고머 및/또는 폴리머), 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수 있다. 적합한 크로스링커의 예는, 테트라에틸오르쏘실리케이이트 (TEOS); 메틸트리메톡시실란 (MTMS); 메틸트리에톡시실란; 비닐트리메톡시실란; 비닐트리에톡시실란; 메틸페닐디메톡시실란; 3,3,3-트리플루오로프로필트리메톡시실란; 메틸트리아세톡시실란; 비닐트리아세톡시실란; 에틸트리아세톡시실란; 디-부톡시디아세톡시실란; 페닐트리프로피온옥시실란; 메틸트리스(메틸에틸케톡시모)실란; 비닐트리스(메틸에틸케톡시모)실란; 3,3,3-트리플루오로프로필트리스(메틸에틸케톡시모)실란; 메틸트리스(이소프로펜옥시)실란; 비닐트리스(이소프로펜옥시)실란; 에틸폴리실리케이이트; 디메틸테트라아세톡시디실록산; 테트라-n-프로필오르쏘실리케이이트; 메틸디메톡시(에틸메틸케톡시모)실란; 메틸메톡시비스(에틸메틸케톡시모)실란; 메틸디메톡시(아세탈톡시모)실란; 메틸디메톡시(N-메틸카바메이토)실란; 에틸디메톡시(N-메틸카바메이토)실란; 메틸디메톡시이소프로펜옥시실란; 트리메톡시이소프로펜옥시실란; 메틸트리아이소프로펜옥시실란; 메틸디메톡시(but-2-en-2-옥시)실란; 메틸디메톡시(1-페닐에텐옥시)실란; 메틸디메톡시-2-(1-카보에톡시프로펜옥시)실란; 메틸메톡시디(N-메틸아미노)실란; 비닐디메톡시(메틸아미노)실란; 테트라-N,N-디에틸아미노실란; 메틸디메톡시(메틸아미노)실란; 메틸트리(사이클로헥실아미노)실란; 메틸디메톡시(에틸아미노)실란; 디메틸디(N,N-디메틸아미노)실란; 메틸디메톡시(이소프로필아미노)실란; 디메틸디(N,N-디에틸아미노)실란; 에틸디메톡시(N-에틸프로피온아미도)실란; 메틸디메톡시(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸트리스(N-메틸아세트아미도)실란; 에틸디메톡시(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸트리스(N-메틸벤즈아미도)실란; 메틸메톡시비스(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸디메톡시(카프로락타모)실란; 트리메톡시(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸디메톡시(에틸아세트이미데이토)실란; 메틸디메톡시(프로필아세트이미데이토)실란; 메틸디메톡시(N,N',N'-트리메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시(N-알릴-N',N'-디메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시(N-페닐-N',N'-디메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시이소시아네이토실란; 디메톡시디이소시아네이토실란; 메틸디메톡시이소티오시아네이토실란; 메틸메톡시디이소티오시아네이토실란, 이들의 축합물, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 하나의 구체예에서, 크로스링커는 조성물의 약 1 내지 약 10 중량%, 또는 폴리머 성분(A) 100중량부 당 약 0.1 내지 약 10 중량부의 양으로 존재할 수 있다. 또 하나의 구체예에서, 크로스링커는 폴리머 성분(A) 100중량부 당 약 0.1 내지 약 5중량부의 양으로 존재할 수 있다. 다른 또 하나의 구체예에서, 크로스링커는 폴리머 성분(A) 100중량부 당 약 0.5 내지 약 3 중량부의 양으로 존재할 수 있다. 여기서든 본 명세서 및 특허청구범위의 어디에서든, 수치들은 조합되어 새로운 또는 미개시의 범위를 형성할 수 있다.

[0110] 본 조성물은 체인 익스텐더를 포함할 수 있다. 체인 익스텐더는 반응성 또는 비-반응성일 수 있으며, 유기-관능성 규소 화합물, (예를 들어, 하이드록실, 카복실산, 에스테르, 폴리에테르, 아마이드, 아민, 알킬, 및/또는 방향족 그라프팅된/캠핑된 실록산), 알킬 정지된 실록산, 예를 들어, 메틸 정지된 PDMS, 비반응성 유기 폴리머, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하는 다양한 화합물들로부터 선택될 수 있으나, 이에 제한되지 않는다. 유기-관능성 규소 화합물은 유기규소 화합물이라 칭해질 수 있다. 유기 규소 화합물은 선형 또는 가지형일 수 있다. 적합한 유기-관능성 규소 화합물의 예는 하이드라이드 말단, 비닐 말단, 하이드록실 말단, 및/또는 아미노 말단 실록산을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 하나의 구체예에서, 체인 익스텐더는 유기-관능성 폴리디메틸실록산, 예를 들어 하이드라이드 말단 폴리디메틸실록산, 실란올 말단 폴리디메틸실록산, 비닐 말단 폴리디메틸실록산, 및/또는 아미노 말단 폴리디메틸 실록산이다.

[0111] 하나의 구체예에서, 체인 익스텐더는 가수분해성 기를 가지는 유기규소 화합물이다. 적합한 가수분해성 기의 예는 알콕시 기, 알콕시알콕시 기, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 적합한 가수분해성 기의 비환형적인 예는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 메톡시에톡시 등과, 이들 중 둘 이상의 조합을 포함한다. 적합한 유기규소 화합물의 다른 예는 테트라에톡시실란, 테트라메톡시실란, 메틸트리메톡시실란, 비닐트리메톡시실란, 메틸트리에톡시실란, 비닐트리에톡시실란, 에틸오르쏘실리케이이트, 프로필오르쏘실리케이이트, 특히 이러한 화합물들의 부분 가수분해물 등과, 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다.

[0112] 하나의 구체예에서, 크로스링커는 하기 식(9)를 갖는다:



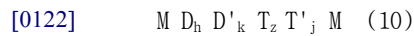
- [0113]  $R_q^1 Si R_{4-q}^2 (9)$ ,
- [0114] 여기서  $R^1$  은 포화  $C_1$ -  $C_{12}$  알킬 (하나 이상의 할로젠 (예를 들어 Cl, F), O, S 또는 N 원자로 치환될 수 있음),  $C_5$ - $C_{16}$  사이클로알킬,  $C_2$ - $C_{12}$  알케닐,  $C_7$ - $C_{16}$  아릴알킬,  $C_7$ - $C_{16}$  알킬아릴, 페닐,  $C_2$ - $C_4$  폴리알킬렌 에테르, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수 있다. 대표적인 바람직한 기는 메틸, 트리플루오로프로필 및/또는 페닐 기이고;  $R^2$  는 물과 같은 프로톤화제에 반응성인 기일 수 있으며, OH,  $C_1$ - $C_8$ -알콕시,  $C_2$ - $C_{18}$ -알콕시알킬, 아미노, 알케닐옥시, 옥시모알킬, 에녹시알킬, 아미노알킬, 카복시알킬, 아미도알킬, 아미도아릴, 카바메이토알킬 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수 있다.  $R^2$ 에 대한 대표적인 기는 OH, 알콕시, 알케닐옥시, 알킬옥시모, 알킬카복시, 알킬아미도, 아릴아미도, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하고; q는 0-3이다. 대안적으로, 크로스링커 성분은  $R^2$  기의 전부는 아니나 하나 이상이 물의 존재하에 가수분해되고 방출된 다음 중간체 실란올이 축합반응하여 Si-O-Si 결합과 물을 산출하는 식(6)의 축합 생성물일 수 있다. 평균 중합도는 2-10 Si 단위를 가지는 화합물이 되는 정도일 수 있다. .
- [0115] 본 명세서에서 사용되는 용어 '크로스링커'는 (A)에서 정의안된 분자당 3개 보다 적은 규소 원자와 적어도 2개의 가수분해성 기를 가지는 추가 반응성 성분을 포함하는 화합물을 포함한다. 하나의 구체예에서, 크로스링커 또는 체인 익스텐더는, 알콕시실란, 알콕시실록산, 옥시모실란, 옥시모실록산, 에녹시실란, 에녹시실록산, 아미노실란, 카복시실란, 카복시실록산, 알킬아미도실란, 알킬아미도실록산, 아릴아미도실란, 아릴아미도실록산, 알콕시아미도실란, 알콕시아미도실록산, 알콕시카바메이토실란, 알콕시카바메이토실록산, 이미데이토실란, 우레이도실란, 이소시아네이토실란, 티오이소시아네이토실란, 및 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수 있다. 적합한 크로스링커의 예는, 테트라에틸오르쏘실리케이트 (TEOS); 메틸트리메톡시실란 (MTMS); 메틸트리에톡시실란; 비닐트리메톡시실란; 비닐트리에톡시실란; 메틸페닐디메톡시실란; 3,3,3-트리플루오로-프로필트리메톡시실란; 메틸트리아세톡시실란; 비닐트리아세톡시실란; 에틸트리아세톡시실란; 디-부톡시디아세톡시실란; 페닐트리프로피온옥시실란; 메틸트리스(메틸에틸케톡시)실란; 비닐트리스(메틸에틸케톡시)실란; 3,3,3-트리플루오로프로필트리스(메틸에틸케톡시)실란; 메틸트리스(이소프로펜옥시)실란; 비닐트리스(이소프로펜옥시)실란; 에틸폴리실리케이트; 디메틸테트라아세톡시디실록산; 테트라-n-프로필오르쏘실리케이트; 메틸디메톡시(에틸메틸케톡시모)실란; 메틸메톡시비스-(에틸메틸케톡시모)실란; 메틸디메톡시(아세탈톡시모)실란; 메틸디메톡시(N-메틸카바메이토)실란; 에틸디메톡시(N-메틸카바메이토)실란; 메틸디메톡시이소프로펜옥시실란; 트리메톡시이소프로펜옥시실란; 메틸트리-이소-프로펜옥시실란; 메틸디메톡시(but-2-ene-2-옥시)실란; 메틸디메톡시(1-페닐에텐옥시)실란; 메틸디메톡시-2(1-카보에톡시프로펜옥시)실란; 메틸메톡시디-N-메틸아미노실란; 비닐디메톡시메틸아미노실란; 테트라-N,N-디에틸아미노실란; 메틸디메톡시메틸아미노실란; 메틸트리아이클로헥실아미노실란; 메틸디메톡시에틸아미노실란; 디메틸디-N,N-디메틸아미노실란; 메틸디메톡시이소프로필아미노실란 디메틸디-N,N-디에틸아미노실란. 에틸디메톡시(N-에틸프로피온아미도)실란; 메틸디메톡시(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸트리스(N-메틸아세트아미도)실란; 에틸디메톡시(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸트리스(N-메틸벤즈아미도)실란; 메틸메톡시비스(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸디메톡시(카프로락타모)실란; 트리메톡시(N-메틸아세트아미도)실란; 메틸디메톡시에틸아세트이미데이토실란; 메틸디메톡시프로필아세트이미데이토실란; 메틸디메톡시(N,N',N'-트리메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시(N-알릴-N',N'-디메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시(N-페닐-N',N'-디메틸우레이도)실란; 메틸디메톡시이소시아네이토실란; 디메톡시디이소시아네이토실란; 메틸디메톡시티오이소시아네이토실란; 메틸메톡시디티오이소시아네이토실란, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 크로스링커는 조성물의 약 1 내지 약 10 중량%, 또는 폴리머 성분(A) 100중량부 당 약 0.1 내지 약 10 중량부의 양으로 존재할 수도 있다.
- [0116] 하나의 구체예에서, 본 조성물은, 유기-관능성 규소 화합물, 저분자량 유기 폴리머, 고비점 용매, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 더 포함할 수 있다. 유기-관능성 규소 화합물은 유기-관능성 실란 및/또는 유기-관능성 실록산을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 카복실산 촉매 성분과 함께 유기-관능성 실란, 유기-관능성 실록산, 및/또는 저분자량 유기 폴리머의 사용은 조성물의 특성들을 향상시킬 수 있는 것으로 판명되었다. 이러한 조성물은 양호한 경화성 및 접착성을 나타낼뿐만 아니라 저장중에 안정성을 유지하고 상분리를 나타내지 않는다.
- [0117] 또한, 상기 저분자량 유기 폴리머, 고비점 용매, 및 유기-관능성 규소 화합물은 본 명세서에서 익스텐더(extenders)라 칭해질 수도 있다.
- [0118] 익스텐더로 적합한 저분자량 유기 폴리머는 150°C 보다 높은 비점, 하나의 구체예에서 150°C 내지 450°C의 비점

을 가지는 화합물 또는 물질을 포함한다. 익스텐더로 적합한 저분자량 화합물은 반복하는 에테르 연결사슬(linkage)을 포함하며 말단 관능기로서 둘 이상의 하이드록실 기를 가지는 폴리에테르 폴리올들, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 하나의 구체예에서, 폴리에틸렌 글리콜이 익스텐더로 사용될 수 있다.

[0119] 익스텐더로 적합한 고비점 분자는 적어도 150°C의 비점, 예를 들어 150°C와 450°C 사이, 225°C와 375°C 사이, 심지어 275°C와 325°C 사이의 비점을 가지는 고비점 용매를 포함한다. 익스텐더로서 고비점 용매의 예는 DMF, DMSO, 카르비톨 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다.

[0120] 유기-관능성 규소 화합물은 카복실산, 에스테르, 폴리에테르, 아마이드, 아민, 알킬, 아릴, 방향족 그래프팅된 또는 말단캡핑된 실록산, 유기 폴리머, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하는 다양한 화합물로부터 선택될 수 있으나, 이에 제한되지 않는다. 예를 들어 유기-관능성 규소 화합물은 예를 들어 메틸-정지된 PDMS와 같은 알킬-정지된 실록산일 수 있다. 유기-관능성 규소 화합물은 유기규소 화합물이라 칭해질 수 있다. 유기규소 화합물은 선형 또는 가지형일 수 있다. 적합한 유기-관능성 규소 화합물의 예는, 하이드리도-관능 실록산, 비닐-관능 실록산, 하이드록실-관능 실록산, 및 아미노-관능 실록산을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 하나의 구체예에서, 익스텐더는, 예를 들어 하이드라이드-말단 폴리디메틸실록산, 실란올-말단 폴리디메틸실록산, 비닐-말단 폴리디메틸실록산, 또는 아미노-말단 폴리디메틸실록산과 같은 유기-관능성 폴리디메틸실록산 화합물이다.

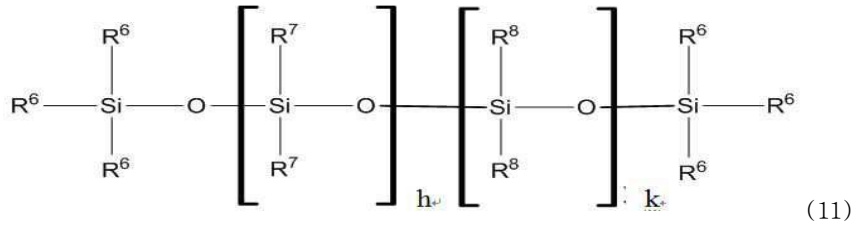
[0121] 하나의 구체예에서, 본 발명의 조성물은 하기 식(10)의 유기-관능성 실록산을 포함하여 구성된다:



[0123] 여기서, M은  $R^6_3SiO_{1/2}$ 를 나타내고; D는  $R^7_2SiO_{2/2}$ 이고; D'는  $R^8_2SiO_{2/2}$  이고; T는  $R^9SiO_{3/2}$ 이고; T'는  $R^{10}SiO_{3/2}$ 이며;  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ , 및  $R^{10}$  은 수소 및 1가의 유기 기, 예를 들어 알킬기, 헤테로알킬 기, 알케닐 기, 헤테로알케닐 기, 사이클로알킬 기, 헤테로사이클로알킬, 아릴기, 헤테로아릴 기, 아릴옥시 기, 아르알킬 기, 헤테로아르알킬 기, 알킬아릴 기, 헤테로알킬아릴 기, 에폭시 기, 아미노 기, 머캡토 기, 트리플루오로프로필 기, 폴리알킬렌 옥사이드 기, 규소-함유 알킬기, 규소-함유 아릴기, 적어도 둘의  $R^6$ , 둘의  $R^7$ , 또는 둘의  $R^8$  기에 형성된 알킬, 아릴, 알킬아릴, 또는 아르알킬 브리지(bridge)로부터 독립적으로 선택된다. 첨자 h, k, z, 및 j의 값은 본 발명의 폴리머의 원하는 최종 점도(end viscosity)에 따라 광범위하게 변할 수 있다. 하나의 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물의 점도는 25 °C에서 약 1 센티스토크(cSt) 내지 약 2,000,000 센티스토크의 범위내이다. 또 하나의 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물의 점도는 25°C에서 약 1 cSt 내지 약 200,000 cSt의 범위이다. 다른 또 하나의 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물의 점도는 25 °C에서 약 1 cSt 내지 약 10,000 cSt의 범위이다. 또 하나의 다른 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물의 점도는 25°C에서 약 1 cSt 내지 약 3,000 cSt의 점도이다. 여기서든 본 명세서 및 특허청구범위의 어디에서든 수치들은 조합되는 새로운 그리고 미개시의 범위를 형성할 수 있다. 유기-관능성 규소 화합물은 적어도 하나의 유기 기를 포함하여 구성된다. 하나의 구체예에서,  $R^6$ ,  $R^7$ , 및  $R^8$  는 C1-C13 알킬기, C1-C13 알콕시기, C2-C13 알케닐 기, C2-C13 알케닐옥시 기, C3-C6 사이클로알킬 기, C3-C6 사이클로알콕시 기, C6-C14 아릴기, C6-C10 아릴옥시 기, C7-C13 아르알킬 기, C7-C13 아르알콕시 기, C7-C13 알킬아릴기, C7-C13 알킬아릴옥시 기, 및 C2-C8 에테르 기로부터 독립적으로 선택된다. 하나의 구체예에서,  $R^6$ ,  $R^7$ ,  $R^8$ ,  $R^9$ , 및/또는  $R^{10}$  기 중의 적어도 하나는 수소이다.

[0124] 하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산 화합물은 알콕시 기, 알킬아릴 기, 에테르 기, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하여 구성된다. 적합한 알콕시 기의 예는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 이소부톡시 등을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 적합한 알킬아릴 기의 예는, 알킬 페놀을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 적합한 에테르 기의 예는 메틸 에테르 기, 에틸 에테르 기, 프로필 에테르 기, 부틸 에테르 기, 등과 이들 중 둘 이상의 조합과 같은 알킬 에테르를 포함하나, 이에 제한되지 않는다.

[0125] 하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산은 하기 식(11)을 가질 수 있다:

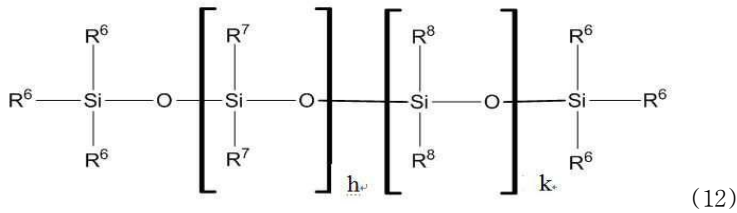


[0126]

[0127] 여기서 R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, h, 및 k는 위에서 정의한 바와 같다. 하나의 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물의 점도는 25°C 에서 약 1 cSt 내지 약 2,000 cSt의 범위이다. 하나의 구체예에서, R<sup>6</sup> 중의 적어도 하나는 알킬, 아릴, 알콕시, 에테르 기, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택된다.

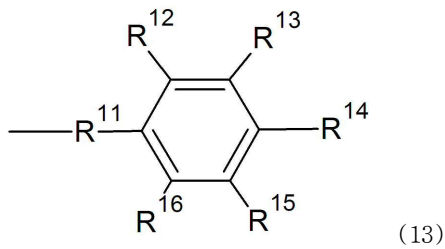
[0128]

하나의 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물은 하기 식(12)를 갖는다 :



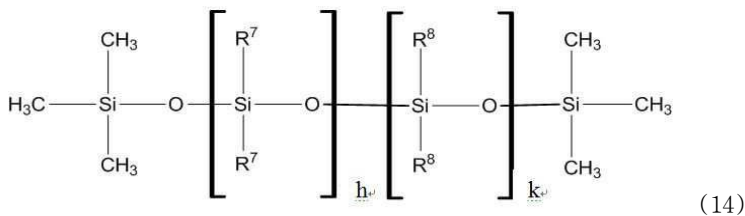
[0129]

[0130] 여기서 h 및 k는 위에서 정의한 바와 같고, 적어도 하나의 R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, 또는 R<sup>8</sup> 은 하기 식(13)의 군에서 선택된다:



[0131]

[0132] 여기서 R<sup>11</sup> 은 2가의 탄화수소이고, R<sup>12</sup>, R<sup>13</sup>, R<sup>14</sup>, R<sup>15</sup>, 및 R<sup>16</sup> 은 수소, 하이드록시, 알킬, 헤테로알킬, 알콕시, 알케닐, 헤테로알케닐, 알케닐옥시, 사이클로알킬, 헤테로사이클로알킬, 사이클로알콕시, 아릴, 헤테로아릴, 아릴옥시, 아르알킬, 헤테로아르알킬, 알킬아릴, 헤테로알킬아릴, 알킬아릴옥시, 알킬, 아르알킬, 알킬알콕시, 디알콕시, R<sup>12</sup>-R<sup>13</sup>, R<sup>13</sup>-R<sup>14</sup>, R<sup>14</sup>-R<sup>15</sup>, 및 R<sup>15</sup>-R<sup>16</sup> 중의 하나 이상에 의해 형성된 헤테로알킬, 헤테로아릴, 헤테로아르알킬, 또는 헤테로알킬아릴 브리지, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 독립적으로 선택된다. 하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산은 알킬-정지된다. 하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산은 메틸-정지된다. 하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산은 하기 식(14)를 갖는다:

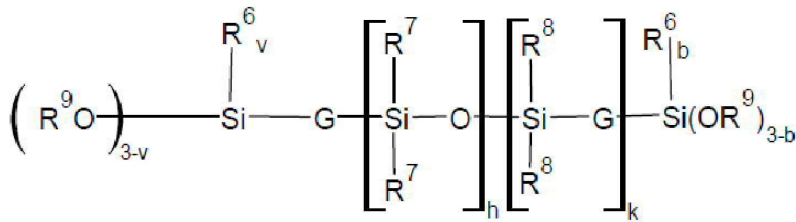


[0133]

[0134] 여기서 R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>, h, 및 k는 위에서 정의한 바와 같다.

[0135]

하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산은 하기 식(15)를 갖는다:



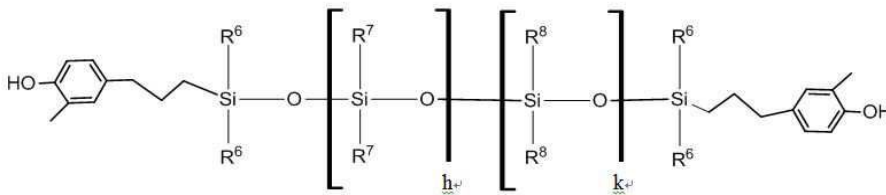
[0136]

[0137]

여기서 v = 0 또는 1이고, b = 0 또는 1이고, G는 산소 원자 또는 치환안된 2가의 탄화수소 기를 나타내며, R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>, h, 및 k는 위에서 설명한 바와 같다.

[0138]

하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산은 예를 들어 알킬 페놀 기와 같은 알킬아릴 기를 포함하여 구성된다. 하나의 구체예에서, 유기-관능성 실록산은 하기 식을 갖는다:



[0139]

[0140]

여기서 R<sup>6</sup>, R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, h, 및 k는 위에서 설명한 바와 같다.

[0141]

하나의 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물은 가수분해성 기를 가지는 유기규소 화합물이다. 적합한 가수분해성 기의 예는 알콕시 기, 알콕시알콕시 기, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 적합한 가수분해성 기의 비한정적인 예는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, 부톡시, 메톡시에톡시 등과 이들 중 둘 이상의 조합을 포함한다. 적합한 유기규소 화합물의 추가적인 예는, 테트라에톡시실란, 테트라메톡시실란, 메틸트리메톡시실란, 비닐트리메톡시실란, 메틸트리에톡시실란, 비닐트리에톡시실란, 에틸오르쏘실리케이이트, 프로필오르쏘실리케이이트, 이러한 화합물들의 부분 가수분해물, 및 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하나, 이에 제한되지 않는다.

[0142]

하나의 구체예에서, 유기-관능성 규소 화합물, 저분자량 유기 폴리머, 고비점 용매, 또는 이들 중 둘 이상의 조합 중의 적어도 하나는 적어도 하나의 하이드리도실릴 기를 가지며, 그 조성물은 Si-O-Si 결합과 수소 가스의 방출을 형성하기 위한 Si-OH 기와 Si-H 기 사이의 탈수소 축합 반응(dehydrogenative condensation reaction)으로 폴리머를 제조하는데 사용될 수 있다.

[0143]

유기-관능성 규소 물질은 폴리머 성분의 100중량부 당 약 0.0001 내지 약 20 중량부, 0.001 내지 15 중량부; 0.01 내지 10 중량부; 심지어 0.1 내지 5 중량부의 양으로 제공될 수 있다. 여기서든 본 명세서 및 특허청구범위의 어디에서든, 수치들은 조합되고 새로운 그리고 비개시의 범위를 형성할 수 있다.

[0144]

또한, 크로스링커 및/또는 체인 익스텐더는 미국특허출원 공개 제2013/0303676에 개시된 바와 같은 조성물의 일부로 제공될 수 있으며, 상기 특허문헌은 그 전체내용이 본 출원에 참조문헌으로 통합된다.

[0145]

체인 익스텐더는 폴리머 성분 100중량부에 대하여 약 0.0001 내지 약 20 중량부, 0.001 내지 15 중량부; 0.01 내지 10 중량부; 심지어 0.1 내지 5 중량부의 양으로 제공될 수 있다. 여기서든 본 명세서 및 특허청구범위의 어디에서든, 수치들은 조합되고 새로운 그리고 비개시의 범위를 형성할 수 있다.

[0146]

하나의 구체예에서, 크로스링커 또는 체인 익스텐더 (B)는 알콕시실란, 알콕시실록산, 옥시모실란, 옥시모실록산, 에녹시실란, 에녹시실록산, 아미노실란, 카복시실란, 카복시실록산, 알킬아미노실란, 알킬아미노실록산, 아릴아미노실란, 아릴아미노실록산, 알콕시아미노실란, 알콕시아미노실록산, 알콕시카바메이트실란, 알콕시카바메이트실록산, 및 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수도 있다.

[0147]

프리폴리머 Z'-X-Z' 와의 반응에서 소모되지 않고, R<sup>5</sup>로부터 선택된 추가적인 관능기를 포함하여 구성되는, 성분(A)의 0.1 중량% 보다 많은 양의 추가적인 알콕시 실란은, 또한 접착 촉진제로서 작용할 수 있으며, 성분(D)에 속하는 것으로 정의되어 산정된다.



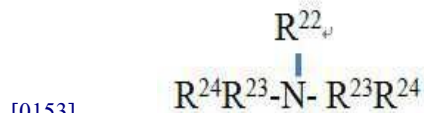
[0148] 축합 촉매 (C)는 이차 아민, 삼차 아민, 치환된 아민, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 아민 화합물을 포함하여 구성된다. 구체예들에서, 상기 아민은 선형 또는사이클릭 지방족 아민, 방향족 아민, 헤테로사이클릭 아민, 아미노 에스테르 화합물, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택될 수도 있다. 본 발명자는, 이러한 화합물이 반응성 실릴 기를 갖는 화합물을 포함하여 구성되는 조성물의 경화를 촉진할 수 있음을 발견하였다. 이차 아민 또는 삼차 아민은, 포화 또는 불포화일 수 있는 탄화수소기를 포함하여 구성되는 아민화합물을 가리킬 수도 있다. 본 명세서에서 사용되는 용어 "치환된 아민"은 아민 질소에 부착된 탄화수소기 이외의 기 또는 아민 질소에 부착된 탄화수소기를 포함하여 구성되는 아민을 가리킨다.

[0149] 하나의 구체예에서, 촉매는 이차 아민, 삼차 아민, 아미노실란, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택된다.

[0150] 하나의 구체예에서, 촉매는 선형, 가지형, 사이클릭, 포화, 불포화, 폴리관능 아민, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 지방족 아민을 포함하여 구성된다. 상기 아민은 그 화합물의 일부로서 하나 이상의 다른 관능기를 포함할 수도 있다.

[0151] 하나의 구체예에서, 촉매는 아민 관능기가 방향족 고리에 직접 부착된 방향족 아민, 스페이서를 개재하여 부착된 방향족 아민, 상기 고리 내에 들어가 있는 방향족 아민, 또는 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하여 구성된다.

[0152] 하나의 구체예에서, 촉매는 하나의 아민 관능기 또는 복수의 아민 관능기를 포함하여 구성된다. 상기 아민 화합물은 하나 또는 복수개의 하기 식의 아민 관능기를 포함하여 구성된다:



[0153]

[0154] 여기서  $R^{22}$  는, 수소;  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기;  $C_6-C_{10}$  아릴기;  $C_7-C_{16}$  선형 또는 가지형 알킬아릴 기;  $C_2-C_4$  폴리알킬렌 에테르; 또는 선형 또는 가지형  $C_7-C_{16}$  헤테로아르알킬, 헤테로알킬, 헤테로사이클로알킬, 또는 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택되고;  $R^{23}$  및  $R^{24}$  는  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는  $C_1-C_{15}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기;  $C_6-C_{10}$  아릴기;  $C_7-C_{16}$  선형 또는 가지형 알킬아릴 기;  $C_2-C_4$  폴리알킬렌 에테르; 선형 또는 가지형  $C_7-C_{16}$  헤테로아르알킬; 헤테로알킬, 헤테로사이클로알킬, 헤테로아릴로부터 독립적으로 선택되, 상기 질소 원자가 이 화합물 내에서  $R^{23}$ ,  $R^{24}$ ,  $R^{23}$  및  $R^{24}$  중의 어느 하나 또는 조합된  $R^{23}$ ,  $R^{24}$  로 bi-치환된 것을 전제로 한다. 즉, 상기 질소는 두개의  $R^{23}$  기,  $R^{23}$  및  $R^{24}$  기, 두개의  $R^{24}$  기,  $R^{23}$  기 및  $R^{23}R^{24}$  기,  $R^{24}$  및  $R^{23}R^{24}$  기, 두개의  $R^{23}R^{24}$  기 등으로 bi-치환될 수 있다. .

[0155] 하나의 구체예에서, 상기 촉매는, 디알킬 아민 및 치환된 디알킬 아민, 디메틸아민, 디이소프로필아민, 디부틸아민, N-메틸부틸아민, N,N-디알릴 트리메틸렌디아민, 디아밀아민, 디헥실아민, 디옥틸아민, N-에틸세틸아민, 디도데실아민, 디테트라데실아민, 디리시놀레일아민, N-이소프로필스테아릴아민, N-이소아밀헥실아민, N-에틸옥틸아민, 디옥타데실아민, 이들의 호몰로그 및 아날로그, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 이차아민을 포함하여 구성된다.

[0156] 하나의 구체예에서, 상기 촉매는 디사이클로헥실아민, N-메틸사이클로헥실아민, 디사이클로펜틸아민, N-옥틸사이클로헥실아민, N-옥틸-3,5,5-트리메틸사이클로헥실아민, 및 이들의 호몰로그 및 아날로그; 그리고 불포화 이차 아민, 예를 들어 디알릴아민, N-에틸알릴아민, N-옥틸알릴아민, 디올레일아민, N-이소프로필올레일아민, N-메틸-3,3,5-트리메틸-5-사이클로헥센일아민, N-아릴-리놀레일아민, N-메틸-프로파길아민, 디페닐아민, 이들의 아날로그 및 호몰로그, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 이차 사이클로알킬아민을 포함하여 구성된다.

[0157] 하나의 구체예에서, 상기 촉매는 트리메틸아민, 트리에틸아민, 트리-이소프로필아민, 트리부틸아민, N-에틸디부틸아민, N-에틸-N-부틸아밀아민, N,N-디에틸 아닐린, 트리알릴아민, N,N-디프로필사이클로헥실아민, N,N-디프로

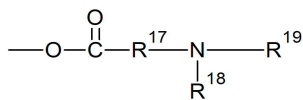
필올레일-아민, 트리메틸아민, N-옥틸디알릴아민, N,N-디프로필사이클로헥실아민, 디메틸아미노프로필아민, 디메틸아미노에톡시프로필아민, 펜타메틸디에틸렌트리아민, N-메틸모폴린, N-에틸모폴린, N,N-디메틸벤질아민, N,N-디메틸에탄올아민, N,N,N',N'-테트라메틸-1,4-부탄디아민, N,N-디메틸피페라진, 비스(디메틸아미노에틸)에테르, 비스(2-디메틸아미노에틸)에테르, 모폴린, N-치환된 모폴린, 예를 들어 N-메틸 또는 N-에틸 모폴린, 4,4'-(옥시디-2,1-에탄디일)비스, 트리에틸렌디아민, 펜타메틸 디에틸렌 트리아민, 디메틸 사이클로헥실 아민, N-세틸 N,N-디메틸 아민, N-코코-모폴린, N,N-디메틸 아미노메틸 N-메틸 에탄올 아민, N,N,N'-트리메틸-N'-하이드록시에틸 비스(아미노에틸)에테르, N,N-비스(3-디메틸아미노프로필)N-이소프로판올아민, (N,N-디메틸)아미노-에톡시 에탄올, N,N,N',N'-테트라메틸 헥산 디아민, N,N-디모폴리노디에틸 에테르, N-메틸 이미다졸, 디메틸 아미노프로필 디프로판올아민, 비스(디메틸아미노프로필)아미노-2-프로판올, 테트라메틸아미노 비스 (프로필아민), (디메틸(아미노에톡시에틸))(디메틸 아민)에틸)에테르, 트리스(디메틸아미노 프로필) 아민, 디사이클로헥실 메틸 아민, 비스(N,N-디메틸-3-아미노프로필) 아민, N,N-비스 (3-디메틸아미노프로필)-N-이소프로판올아민, 1,3-프로판디아민, 1,2-에틸렌 피페리딘, 메틸-하이드록시에틸 피페라진, 디메틸아미노프로필-S-트리아진, 비스디메틸아미노프로필우레아, 이들의 아날로그 및 호몰로그, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는, 삼차 아민을 포함하여 구성된다.

[0158] 하나의 구체예에서, 상기 촉매는 피페리딘, 피리딘, 메틸피페라진, 2,2,4,6-테트라메틸피페리딘, 2,2,4,6-테트라메틸-테트라하이드로피리딘, N-에틸 2,2,4,6 테트라메틸피페리딘, 2-아미노피리미딘, 2-아미노피리딘, 2-(디메틸아미노)피리딘, 4-(디메틸아미노)피리딘, 2-하이드록시피리딘, 이미다졸, 2-에틸-4-메틸이미다졸, 모폴린, N-메틸모폴린, 피페리딘, 2-피페리딘메탄올, 2-(2-피페리디노)에탄올, 피페리돈, 1,2-디메틸-1,4,5,6-테트라하이드로피리미딘, 아지리딘, 메톡시메틸디페닐아민, 니코틴, 펜토바르비탈, 메타돈, 코카인, 및 트리페닐아민, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택되는 헤테로사이클릭 아민을 포함하여 구성된다.

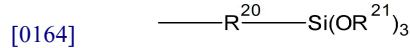
[0159] 하나의 구체예에서, 상기 촉매는 디에탄올아민, 트리에탄올아민, N-메틸-1,3-프로판디아민, N,N'-디메틸-1,3-프로판디아민, 디에틸렌트리아민, 트리에틸렌테트라아민, 2-(2-아미노에틸아미노)에탄올, 3-디메틸아미노프로필아민, 3-디에틸아미노프로필아민, 3-디부틸아미노프로필아민, 3-모폴리노프로필아민, 2-(1-피페리디닐)에틸아민, 및 2,4,6-트리스(디메틸아미노메틸)페놀, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 선택된다.

[0160] 하나의 구체예에서, 상기 촉매 (C)는 적어도 하나의 아미노 에스테르 관능기를 포함하는 아미노 에스테르 화합물을 포함하여 구성된다. 하나의 구체예에서, 상기 아미노 에스테르 화합물은 복수의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성된다. 아미노 에스테르 관능기의 수는 특별히 제한되지 않으며, 특정 목적 및 의도된 용도에 바람직한 수로 선택될 수 있다. 촉매로서 아미노 에스테르 화합물의 활성은 아미노 에스테르 관능기의 수가 클수록 증가하는 것으로 판명되었다. 하나의 구체예에서, 아미노 에스테르 화합물은 1개 이상의 아미노 에스테르 관능기; 3개 이상의 아미노 에스테르 관능기; 4개 이상의 아미노 에스테르 관능기; 심지어 5개 이상의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성된다. 하나의 구체예에서, 아미노 에스테르 화합물은 1-10개의 아미노 에스테르 관능기; 2-8개의 아미노 에스테르 관능기; 심지어 3-6개의 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성된다.

[0161] 아미노 에스테르 화합물은 베타-아미노 에스테르 화합물일 수도 있다. 상기 아미노 에스테르 화합물 내의 아미노 에스테르 관능기는 하기 식을 가질 수 있다:

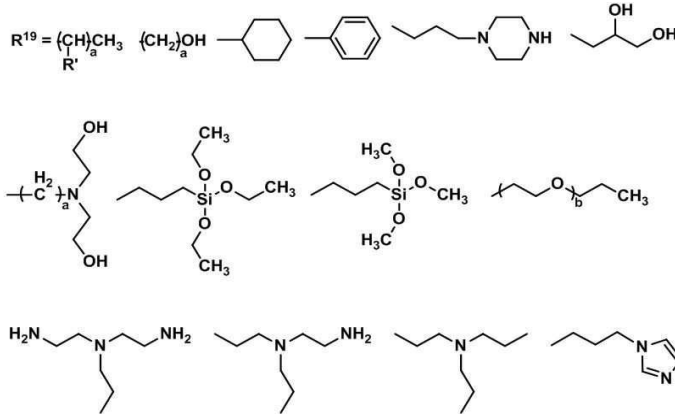


[0162] 여기서 R<sup>17</sup> 은 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub> 알킬기이고, R<sup>18</sup> 및 R<sup>19</sup> 는 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub> 아릴기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 알킬아릴 기; C<sub>7</sub>-C<sub>16</sub> 아릴알킬 기; C<sub>2</sub>-C<sub>4</sub> 폴리알킬렌 에테르; 치환된 규소, 치환된 실록산, 또는 이들 중 둘 이상의 조합으로부터 독립적으로 선택된다. R<sup>18</sup> 및 R<sup>19</sup> 기에 적합한 기의 비한정적인 예는 수소; 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 부틸, 이소부틸 등과 같은 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 알킬기; 알킬 에테르, 하이드록실 말단 알킬기, 아민 말단 알킬기 등과 같은 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub> 알킬 기; 알킬 알콕시 실란 기를 포함한다. 하나의 구체예에서, R<sup>18</sup> 는 수소이고, R<sup>19</sup> 는 C<sub>1</sub>-C<sub>5</sub> 알킬, 또는 하기 식의 알킬 알콕시 실란으로부터 선택된다:



[0165] 여기서  $\text{R}^{20}$  및  $\text{R}^{21}$  은  $\text{C}_1\text{--C}_{10}$  알킬로부터 독립적으로 선택된다.

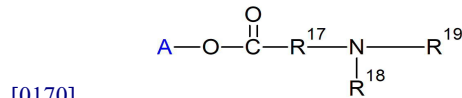
[0166] 적합한  $\text{R}^{19}$  기의 비한정적인 예는 다음의 기들을 포함한다:



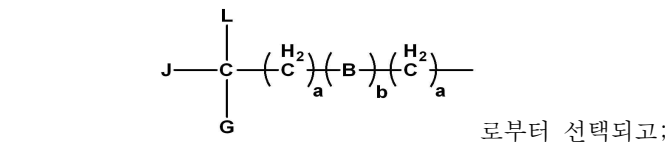
[0167]

[0168] ( $a$ 는 1 내지 10이고;  $b$ 는 0 내지 10이며,  $\text{R}'$ 는 H 또는  $(\text{CH}_2)_a\text{CH}_3$  임)

[0169] 아미노 에스테르는 대칭일 수도 있고 비대칭일 수도 있으며, 포화 또는 불포화기를 포함하여 구성될 수도 있다. 아미노 에스테르 화합물은, 하나의 구체예에서, 하기 식의 화합물일 수 있다:

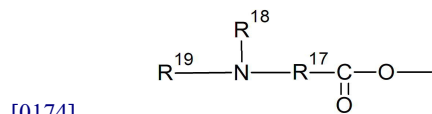


[0171] 여기서  $\text{A}$ 는 수소;  $\text{C}_1\text{--C}_{10}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는  $\text{C}_1\text{--C}_{10}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기;  $\text{C}_6\text{--C}_{10}$  아릴기;  $\text{C}_7\text{--C}_{16}$  알킬아릴기;  $\text{C}_7\text{--C}_{16}$  아릴알킬기;  $\text{C}_2\text{--C}_4$  폴리알킬렌 에테르; 치환된 규소, 치환된 실록산, 또는



[0172] 여기서  $\text{B}$ 는  $\text{C}_1\text{--C}_{10}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기; 할라이드, N, O, 또는 S로부터 선택되는 하나 이상의 치환기를 포함하여 구성되는  $\text{C}_1\text{--C}_{10}$  선형, 가지형, 또는 사이클릭 알킬기;  $\text{C}_6\text{--C}_{10}$  아릴기; 또는 식  $[\text{R}^1\text{R}^2\text{R}^{3-c}\text{Si---Z}]_n\text{---X---Z---SiR}^1\text{R}^2\text{R}^{3-c}$ 의 규소 함유 화합물이고;

[0173] 여기서  $\text{R}^1$ ,  $\text{R}^2$ ,  $\text{Z}$ ,  $\text{X}$ , 및  $c$ 는 위에서 설명한 바와 같을 수 있고; 그리고  $\text{G}$ ,  $\text{J}$ , 및  $\text{L}$ 은 수소 및 하기 식의 아미노 에스테르 기로부터 독립적으로 선택되며

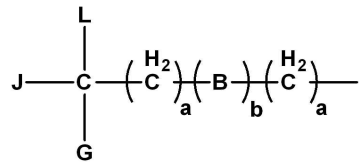


[0175] 여기서  $\text{R}^{17}$ ,  $\text{R}^{18}$ , 및  $\text{R}^{19}$ 는 위에서 설명한 바와 같을 수 있고;  $a$ 는 1 내지 10이고;  $b$ 는 0 내지 10이다.

[0176] 하나의 구체예에서,  $\text{B}$ 는 예를 들어 식  $[\text{R}^1\text{R}^2\text{R}^{3-c}\text{Si---Z}]_n\text{---X---Z---SiR}^1\text{R}^2\text{R}^{3-c}$ 의 단위와 같은 규소 함유 단위이다. 하나의 구체예에서, 상기 규소 함유 단위는 알킬 실록산 단위이다. 적합한 알킬 실록산의 비한정적인 예는 메틸 실

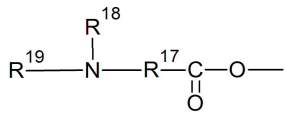
록산, 에틸 실록산 등을 포함한다.

[0177] 하나의 구체예에서, A는 하기 식을 가지며



[0178]

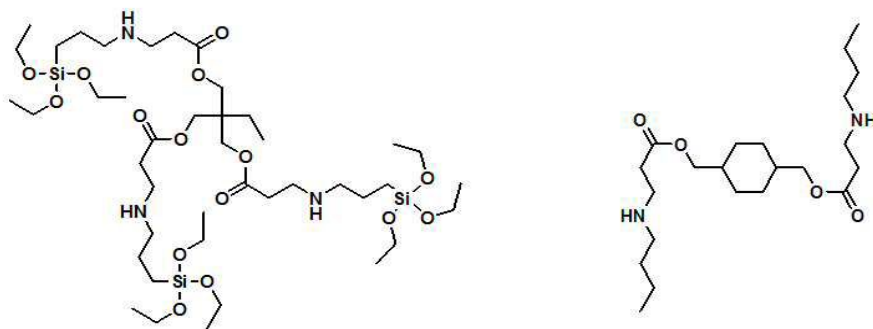
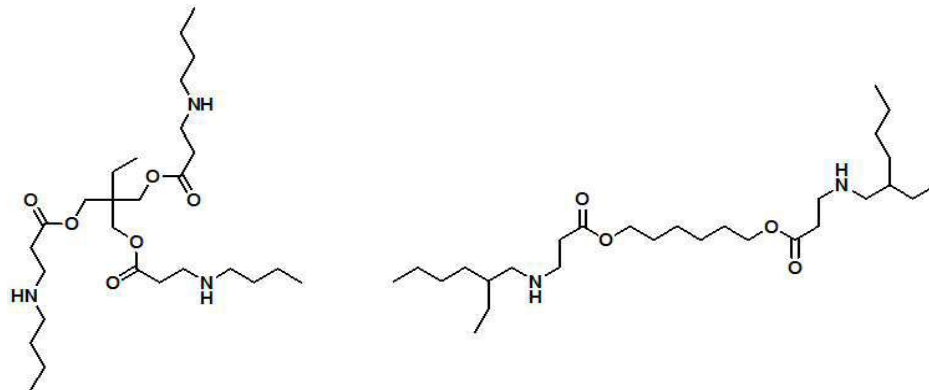
[0179] 그리고 G, J, 및 L 중의 적어도 하나는 하기 식의 아미노 에스테르 기로부터 선택된다:



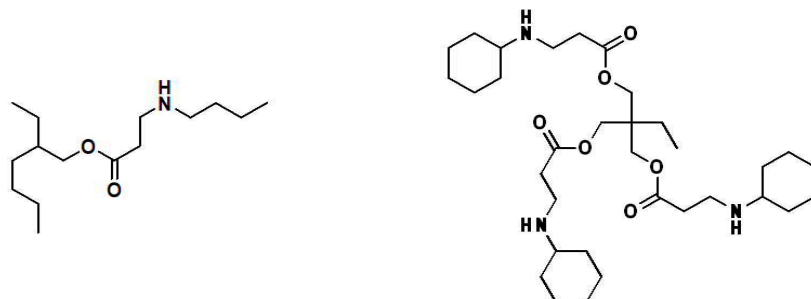
[0180]

[0181] 여기서 R<sup>17</sup>, R<sup>18</sup>, 및 R<sup>19</sup> 는 위에서 설명한 바와 같을 수 있다.

[0182] 적합한 아미노 에스테르의 비한정적인 예는 다음을 포함한다:



[0183]



[0184]

[0185] 다른 구체예들에서, 아미노 에스테르는 복수의 반복하는 아미노 에스테르 관능기를 포함하여 구성되는 폴리 아미노 에스테르일 수 있다. 상기 폴리 아미노 에스테르는 50 g/mol 내지 10000 g/mol; 100 g/mol 내지 5000 g/mol; 250 g/mol 내지 2500 g/mol; 심지어 약 500 g/mol 내지 약 1000 g/mol 범위의 분자량을 가질 수 있다.

또 하나의 구체예에서, 본 발명에서 아미노에스테르로부터 유도된 폴리머는 5.5 내지 8.5 범위의 pKa를 갖는다. 또한 상기 폴리머는 필요에 따라 3.0 내지 9.0 범위의 pKa를 가지도록 설계될 수도 있다. 특정 구체예들에서, 상기 폴리머는 pKa를 1 보다 높게 하는 하나 이상의 산성 및/또는 염기성 모이어티를 갖는다. 본 발명은 또한 촉매 성분(C)으로 사용하기에 적합한 베타-아미노 에스테르를 제조하는 방법을 제공한다. 베타-아미노 에스테르는 아크릴레이트와 아민의 마이클 첨가 반응(Michael addition reaction)을 통해 합성될 수 있다. 이 반응은 어떤 촉매로 필요로 함이 없이 실온에서 수행된다. 이 반응은 일반적으로 부생성물이 없다. 목표하는 아미노 에스테르가 이 반응을 수행하기 위하여 적절한 관능 아크릴레이트 및 아민 화합물을 선정하는 것에 의해 형성될 수 있다.

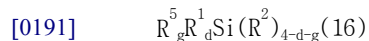
[0186] 아미노 에스테르를 포함하여 구성되는 촉매 성분(C)은 폴리머 (A) 100 중량부 기준 0.0001 내지 약 10 중량부 (wt. pt.); 폴리머 (A) 100 중량부 기준 0.005 내지 약 7.5 중량부; 폴리머 (A) 100 중량부 기준 약 0.01 내지 약 5.0 중량부; 폴리머 (A) 100 중량부 기준 약 0.15 내지 약 2.0 중량부; 심지어 폴리머 (A) 100 중량부 기준 약 0.5 내지 약 1.5 중량부의 양으로 존재할 수 있다. 하나의 구체예에서, 촉매 (C)는 폴리머 (A) 100 중량부 기준 약 0.01 내지 약 1 중량부; 폴리머 (A) 100 중량부 기준 약 0.025 내지 약 0.8 중량부; 심지어 폴리머 (A) 100 중량부 기준 약 0.05 내지 약 0.5 중량부의 양으로 존재한다.

[0187] 본 발명의 조성물은 성분(A) 또는 (B)와 다른 접착 촉진제 성분 (D)을 임의선택적으로 포함한다. 또 하나의 구체예에서, 본 발명의 경화성 조성물은 접착 촉진제를 포함하여 구성된다. 아미노 에스테르는 광범위의 접착 촉진제와 함께 사용될 수 있다.

[0188] 하나의 구체예에서, 접착 촉진제 (D)는 성분(B)의 실란과 같지 않은, 기 R<sup>5</sup>, 예를 들어, 아미노실란,을 포함하여 구성되는 유기 관능 실란 및 다른 실란일 수 있으며, 폴리머 (A)의 말단캡핑에 필요한 실란의 양을 초과하는 양으로 존재한다. (A)를 제조하는 방법에서 반응안된 실란 (B) 또는 (D)의 양은, 말단캡핑 후에 자유 실란이 200°C까지의 고온 및 1 mbar까지의 진공에서 (A)의 0.1 중량% 보다 많이 증발된 양으로 정의될 수 있다.

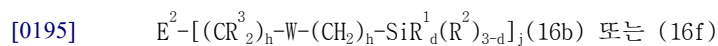
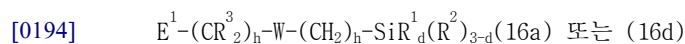
[0189] 따라서, 일부 선택된 아민은, 필요에 따라, 실리кон/반응성 실릴 기를 함유하는 비-실리кон 폴리머의 금속-착물 촉매작용 촉합 경화의 속도를 미세 조정하게 위하여 유리하게 첨가될 수 있다.

[0190] 하나의 구체예에서, 본 발명의 조성물은 하기 일반식(16)으로 표시된 바와 같은 R<sup>5</sup> 기를 포함하는 접착 촉진제 (D)를 포함하여 구성된다:



[0192] 여기서 R<sup>5</sup>는 E-(CR<sub>2</sub>)<sub>h</sub>-W-(CH<sub>2</sub>)<sub>h</sub>- 이고; R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, 및 d는 위에서 설명한 바와 같고; g는 1 또는 2이고; d + g는 1 내지 2이다.

[0193] 적합한 화합물의 비한정적인 예는 다음을 포함한다:



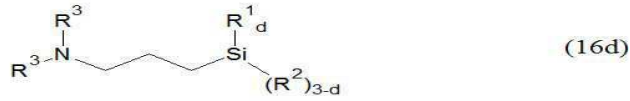
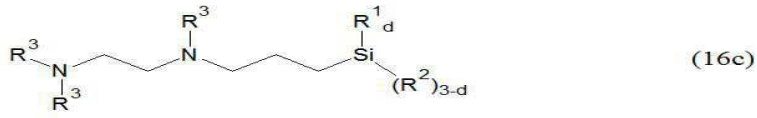
[0196] 여기서 j는 2 내지 3이고; h는 0 내지 8이며 같거나 다를 수 있다.

[0197] 상기 기 E는 기 E<sup>1</sup> 또는 E<sup>2</sup>로부터 선택될 수 있다. E<sup>1</sup>은 아민을 포함하여 구성되는 1가의 기, -NH<sub>2</sub>, -NHR, -(NHC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>a</sub>NHR, NHC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, 할로젠, 슈도할로젠(pseudohalogen), 14개까지의 탄소원자를 갖는 불포화 지방족 기, 14개까지의 탄소원자를 갖는 에폭시-기-함유 지방족 기, 시아누레이트-함유 기, 및 이소시아누레이트-함유 기로부터 선택될 수 있다.

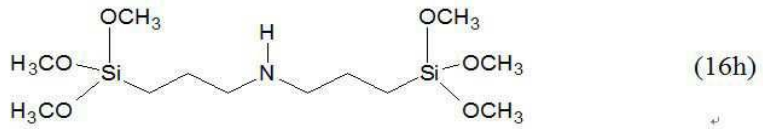
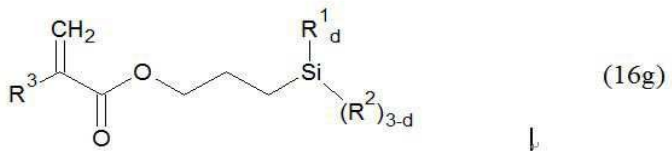
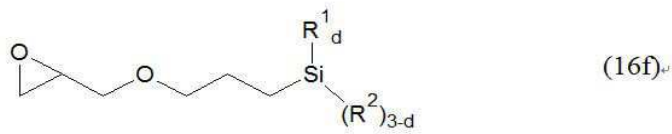
[0198] E<sup>2</sup>는 아민을 이루는 2가 또는 다가의 기, 폴리아민, 시아누레이트-함유 및 이소시아누레이트-함유 기, 설파이드, 설페이트, 포스페이트, 포스파이트, 및 R<sup>5</sup> 및 R<sup>2</sup> 기를 함유할 수 있는 폴리오가노실록산 기를 포함하여 구성되는 군에서 선택될 수 있으며; W는 단일 결합, -COO-, -O-, 에폭시, -S-, -CONH-, -HN-CO-NH- 단위로 부터 선택되는 헤테로원자 기로 이루어진 군에서 선택되고; R<sup>3</sup>은 위에서 정의한 바와 같고, R<sup>1</sup>은 위에서 정의

한바와 같이 같거나 다를 수 있으며,  $R^2$  는 위에서 정의한 바와 같고 같거나 다를 수 있다.

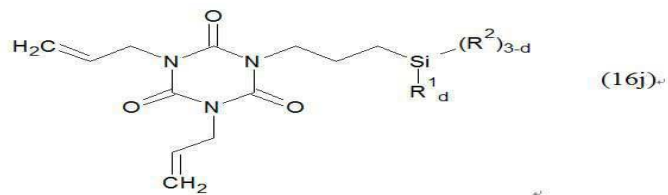
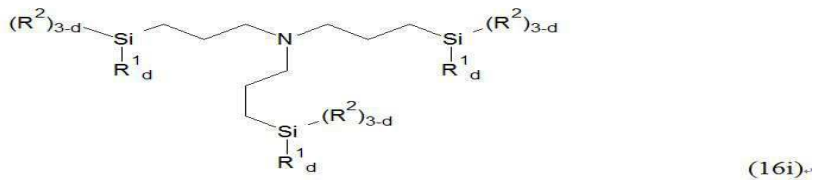
[0199] 성분(D)의 비한정적인 예는 다음을 포함한다:



[0200]

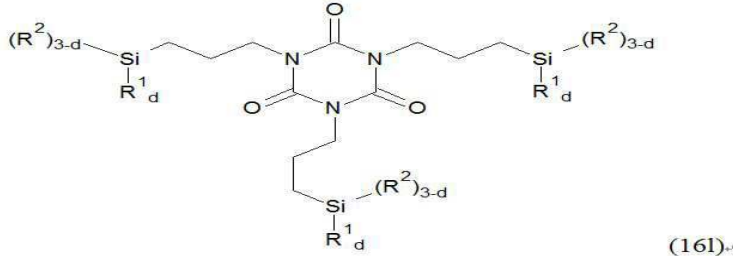
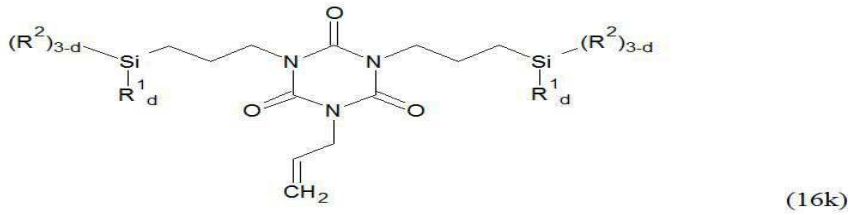


[0201]



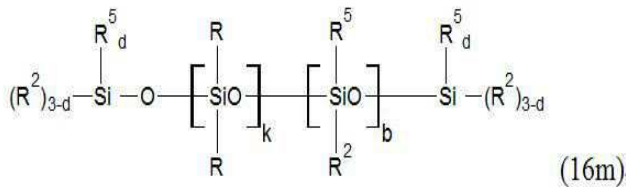
[0202]





[0203]

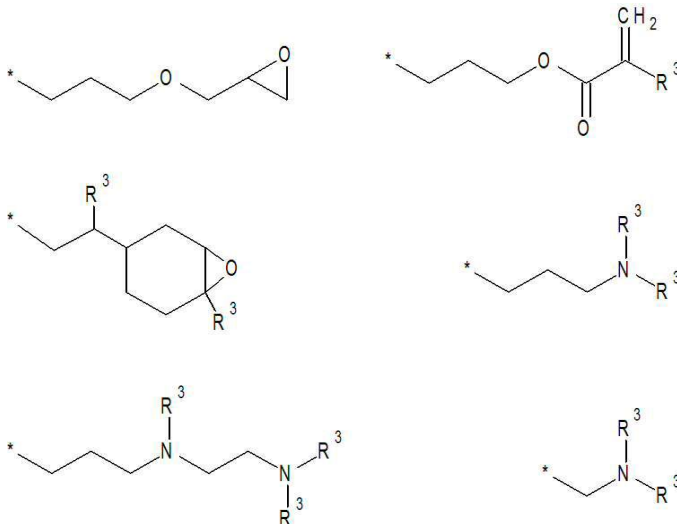
[0204] 여기서 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, 및 d는 위에서 정의한 바와 같다. 성분(D)의 예는 식 (16a-16l)의 화합물을 포함한다. 또한, 식 (16b)의 화합물 (D)은 하기 식(16m)의 화합물을 포함하여 구성될 수 있다:



[0205]

[0206] 여기서 R, R<sup>2</sup>, R<sup>5</sup>, 및 d는 위에서 정의한 바와 같고; k는 0 내지 6이고 (그리고 하나의 구체예에서 바람직하게 0 임); b는 위에서 설명한 바와 같고 (하나의 구체예에서 바람직하게 0 내지 5임); 1 + b ≤ 10 이다. 하나의 구체예에서, R<sup>5</sup> 는 다음으로부터 선택된다:

[0207] E<sup>1</sup>-(CR<sup>3</sup>)<sub>n</sub>-W-(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>-



[0208]

[0209] 접착 촉진제의 대표적인 군은 아미노-기-함유 실란 커플링제들로 이루어진 군에서 선택된다. 아미노-기-함유 실란 접착 촉진제 (D)는 가수분해성 기에 부착된 규소원자를 함유하는 기(이후로는 규소원자에 부착된 가수분해성 기라 칭함)를 가지는 산성 화합물이다. 그 특정 예는 위에서 설명한 가수분해성 기를 갖는 동일한 실리기를 포함한다. 이러한 기들 중에서, 메톡시 기와 에톡시 기가 특히 적합하다. 가수분해성 기의 수는 2 이상일 수 있으며, 특히 적합한 것은 3 이상의 가수분해성 기를 갖는 화합물이다.

[0210]

다른 적합한 접착 촉진제 (D)의 예는, N-(2-아미노에틸)아미노프로필트리메톡시실란, 감마-아미노프로필트리메톡시실란, 감마-아미노프로필트리메톡시실란, 비스(3-트리메톡시실릴프로필)아민, N-페닐-감마-아미노프로필트

리메톡시실란, 트리아미노관능트리메톡시실란, 감마-아미노프로필메틸디메톡시실란, 감마-아미노프로필메틸디메톡시실란, 메타크릴옥시프로필트리메톡시실란, 메틸아미노프로필트리메톡시실란, 감마-글리시독시프로필에틸디메톡시실란, 감마-글리시독시프로필트리메톡시실란, 감마-글리시독시에틸트리메톡시실란, 감마-글리시독시프로필메틸디메톡시실란, 감마-글리시독시프로필메틸디메톡시실란, 베타-(3,4-에폭시사이클로헥실)에틸트리메톡시실란, 베타-(3,4-에폭시사이클로헥실)에틸메틸디메톡시실란, 베타-(3,4-에폭시사이클로헥실)에틸트리메톡시실란, 베타-(3,4-에폭시사이클로헥실)에틸메틸디메톡시실란, 에폭시리모닐트리메톡시실란, 이소시아네이트프로필트리메톡시실란, 이소시아네이트프로필트리메톡시실란, 이소시아네이트프로필메틸디메톡시실란, 베타-시아노에틸트리메톡시실란, 감마-아크릴옥시프로필트리메톡시실란, 감마-메타크릴옥시프로필메틸디메톡시실란, 알파, 오메가-비스(아미노알킬디에톡시실릴)폴리디메틸실록산 (Pn =1-7), 알파, 오메가-비스(아미노알킬디에톡시실릴)옥타메틸테트라실록산, 4-아미노-3,3-디메틸부틸트리메톡시실란, 및 N-에틸-3-트리메톡시실릴-2-메틸프로판아민, 3-(N,N-디에틸아미노프로필) 트리메톡시실란, 이들 중 둘 이상의 조합 등을 포함하나 이에 제한되지 않는다. 특히 적합한 접착 촉진제는 비스(알킬트리알콕시실릴)아민 및 트리스(알킬트리알콕시실릴)아민을 포함하여, 그 비한정적인 예는 비스(3-트리메톡시실릴프로필)아민 및 트리스(3-트리메톡시실릴프로필)아민을 포함한다.

[0211] 또한, 이들을 변성하여 얻은 유도체, 예를 들어 아미노-개질 실릴 폴리머, 실릴화 아미노 폴리머, 불포화 아미노실란 착물, 페닐아미노 장쇄 알킬 실란 및 아미노실릴화 실리콘을 사용하는 것도 가능하다. 이러한 아미노-기-함유 실란 커플링 제는 단독으로 사용될 수도 있고, 또는 이들 중 두 종 이상이 조합되어 사용될 수도 있다.

[0212] 접착 촉진제 (D)는 폴리머 성분(A) 100 중량부 기준 약 0.1 내지 약 5.0 중량%의 양으로 존재할 수도 있다. 하나의 구체예에서, 접착 촉진제는 폴리머 성분(A) 100 중량부 기준 약 0.15 내지 약 2.0 중량%의 양으로 존재할 수도 있다. 또 하나의 구체예에서, 접착 촉진제는 폴리머 성분(A)의 약 0.5 내지 약 1.5 중량%의 양으로 존재할 수도 있다. 이는 폴리머 (A)의 말단캡핑에서 나온 자유 실란의 함량이 0.1 wt.% 보다 적은 (A)의 조성물 내의 (D)의 양을 한정한다.

[0213] 본 발명의 조성물은 필러 성분(E)을 더 포함할 수 있다. 필러 성분(들) (E)은 강화 또는 반-강화(semi-reinforcing) 필러로서 사용되는 것과 같은, 즉 경화후에 더 높은 인장강도를 달성하는 것과 같은 다양한 기능을 가질 수도 있다. 필러 성분은 또한 점도를 증가시키는 능력, 유사가소성(pseudoplasticity)/시어 시닝(shear thinning)을 수립하는 능력, 틱소트로픽 거동(thixotropic behavior)을 나타내는 능력을 가질 수도 있다. 비-강화 필러는 증량제로 작용할 수 있다. 강화 필러는 상대 BET-표면(related BET-surface) 50 m<sup>2</sup>/g 보다 높은 비표면적을 갖는 것으로 특징지어지는 반면, 반-강화 필러는 10-50 m<sup>2</sup>/g의 비표면을 갖는다. 소위 증량 필러는 바람직하게 BET-법에 의한 10 m<sup>2</sup>/g 보다 적은 비표면적과, 100 μm 아래의 평균입자직경을 갖는다. 하나의 구체예에서, 반-강화 필러는 탄산칼슘 필러, 실리카 필러, 또는 이들의 혼합물이다. 적합한 강화 필러의 예는 폼드 실리카(fumed silicas) 또는 침강 실리카를 포함하나, 이에 제한되지 않으며, 상기 실리카들은 그 친수성을 낮게 하고, 그 수분 함량을 줄이고, 그리고 조성물의 점도 및 저장 안정성을 조절하기 위하여 유기실란 또는 실록산으로 부분 또는 전부 처리된 것일 수 있다. 이러한 필러는 소수성 필러라 명명된다. 상표명은 Aerosil®, HDK®, Cab-O-Sil® 등이 있다.

[0214] 적합한 증량 필러의 예는 분쇄된 실리카(ground silicas) (Celite®), 침강 및 콜로이드 탄산칼슘 (임의선택적으로 스테아레이트 또는 스테아르산과 같은 화합물로 선택적으로 처리된 것); 폼드 실리카, 침강 실리카, 실리카 겔, 소수화된 실리카 및 소수화된 실리카겔과 같은 강화 실리카; 파쇄된 및 분쇄된 석영, 크리스로발라이트, 알루미늄, 수산화알루미늄, 이산화티탄, 산화아연, 규조토, 산화철, 카본블랙, 분말화된 아크릴로니트릴, 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 폴리테트라플루오로에틸렌 및 그라파이트와 같은 열가소성 플라스틱, 카울린, 벤토나이트 또는 (처리된/처리안된) 몬모릴로나이트와 같은 점토 등을 포함하나, 이에 제한되지 않는다.

[0215] 첨가되는 필러의 유형 및 양은 경화된 실리콘/비-실리콘 조성물에 요구되는 물성에 좌우된다. 그래서, 필러는 단일 종일 수도 있고, 2종 이상의 혼합물일 수도 있다. 증량 필러는 성분(A) 100중량부와 관련된 조성물의 약 0 내지 약 300 중량%로 존재할 수 있다. 강화 필러는 성분(A) 100중량부와 관련된 조성물의 약 5 내지 약 60 중량%, 바람직하게 5 내지 30 중량%로 존재할 수 있다. .

[0216] 본 발명의 조성물은 임의선택적으로 산성 화합물 (F)을 포함하여 구성되며, 상기 산성 화합물 (F)은 접착 촉진제 및 아미노 에스테르와 함께 (이러한 화합물들의 부재시의 경화에 비해) 경화를 촉진할 수도 있다. 성분(F)는 조성물의 약 0.01 내지 약 5 중량%의 양으로 존재할 수도 있다. 또 하나의 구체예에서 성분(A) 100중량부 당 0.01 내지 약 8 중량부가 사용되고, 바람직하게 성분(A) 100중량부 당 0.02 내지 3 중량부, 더욱 바람직하게 성



분(A) 100중량부 당 0.02 내지 1 중량부가 사용된다.

- [0217] 산성 화합물(F)은 다양한 포스페이트 에스테르, 포스포네이트, 포스파이트, 포스포나이트, 설파이트, 설페이트, 슈도할로게나이드, 가지형 알킬 카복실산, 이들 중 둘 이상의 조합 등으로부터 선택될 수도 있다. 특정 이론에 구애됨이 없이, 산성 화합물 (F)은, 하나의 구체예에서, 주위 공기와 접촉 사용 전에 카트리지에 밀봉될 때 더 긴 저장시간을 보장하기 위하여 안정화제로 유용할 수도 있다. 특히 알콕시-말단 폴리실록산은 카트리지에 저장 후 경화하는 능력을 상실할 수 있고 경화조건하에 감소된 경도를 나타낼 수 있다. 따라서, 저장 시간을 늘릴 수 있거나 수개월에 걸쳐 경화능력을 늘릴 수 있는, 하기 식(9)의 화합물을 첨가하는 것이 유용할 수도 있다: .
- [0218]  $O=P(OR^6)_{3-c}(OH)_c(9)$
- [0219] 여기서 c는 위에서 정의한 바와 같고;  $R^6$  은 선형 또는 가지형 그리고 임의선택적으로 치환된  $C_1-C_{30}$  알킬기, 선형 또는 가지형  $C_5-C_{14}$  사이클로알킬 기,  $C_6-C_{14}$  아릴기,  $C_6-C_{31}$  알킬아릴 기, 선형 또는 가지형  $C_2-C_{30}$  알케닐 기 또는 선형 또는 가지형  $C_1-C_{30}$  알콕시알킬 기,  $C_4-C_{300}$  폴리알케닐렌 옥사이드 기 (폴리에테르), 예를 들어 Mar lophor® N5 산, 트리오가닐실릴- 및 디오가닐 ( $C_1-C_8$ )-알콕시실릴 기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [0220] 포스페이트는 일차 에스테르와 이차 에스테르의 혼합물도 포함할 수 있다. 적합한 포스포네이트의 비한정적인 예는 1-하이드록시에탄-(1,1-디포스포산) (HEDP), 아미노트리스(메틸렌 포스포산) (ATMP), 디에틸렌트리아민펜타(메틸렌 포스포산) (DTPMP), 1,2-디아미노에탄-테트라(메틸렌 포스포산) (EDTMP), 및 포스포노부탄트리카복실산 (PBTC)을 포함한다.
- [0221] 또 하나의 구체예에서, 식  $O=P(OR^7)_{3-g}(OH)_g$  의 화합물이 함유 또는 첨가될 수 있으며, 여기서 g는 1 또는 2이고,  $R^7$  은  $R^6$  처럼 정의되거나, 또는 하나 이상의 아미노기를 갖는 2가의 또는 다가의 탄화수소이다.
- [0222] 또 하나의 유형은 식  $R^6P(O)(OH)_2$ 의 포스포산 화합물이며, 그 예를 들면 알킬 포스포산, 바람직하게 핵실 또는 옥틸 포스포산이 있다.
- [0223] 하나의 구체예에서, 산성 화합물은 식  $(R^8O)PO(OH)_2$  를 갖는 인산의 모노에스테르; 식  $R^8P(O)(OH)_2$ 의 포스포산; 또는 식  $(R^8O)P(OH)_2$  을 갖는 아인산의 모노에스테르이며, 여기서  $R^8$  은  $C_1-C_{18}$  알킬,  $C_2-C_{20}$  알콕시알킬, 페닐,  $C_7-C_{12}$  알킬아릴,  $C_2-C_4$  폴리알킬렌 옥사이드 에스테르 또는 이의 디에스테르와의 혼합물 등이 있다.
- [0224] 또 하나의 구체예에서, 산성 화합물은 예를 들어  $C_4-C_{30}$  카복실산, 가지형  $C_4-C_{30}$  알킬 카복실산을 포함하는, 알파 삼차탄소(alpha tertiary carbon)를 갖는  $C_5-C_{19}$  산 및 이들 중 둘 이상의 조합을 포함하는 카복실산이다. 이러한 화합물의 적합한 예는 Versatic® Acid, 라우르산 및 스테아르산을 포함하나, 이에 제한되지 않는다. 하나의 구체예에서, 산성 화합물은 가지형 알킬 카복실산들을 포함하는 혼합물일 수도 있다. 하나의 구체예에서, 산성 화합물은 주로 삼차 지방족  $C_{10}$  카복실산들의 혼합물이다. .
- [0225] 일반적으로, 산성 성분(F)은 촉매 (C)에 대해 1몰비 또는 이보다 적은 몰비로 첨가된다. 구체예들에서, 산성 성분(F)은 (F):(C)의 몰비 1:15 내지 1:1의 몰비로 첨가된다.
- [0226] 본 발명의 경화성 조성물은 가소제, 안정화제, 항균제, 살균제, 살균제 및/또는 용매와 같은 보조 물질(G)을 포함할 수도 있다. 반응성 폴리오가노실록산에 대하여 바람직한 가소제는 10 내지 300 실록시 단위의 사슬 길이를 가지는 폴리오가노실록산들의 군에서 선택된다. 바람직한 것은 25°C에서 100 내지 1000 mPa.s의 점도를 가지는 트리메틸실릴 말단 폴리디메틸실록산이다. 임의선택적인 용매(분산 매질 또는 익스텐더)의 선택은 촉진제의 균일한 분산을 보장하여 경화 속도를 변화시키는 역할을 할 수도 있다. 이러한 용매는 극성 및 비극성 용매를 포함하며, 그 예를 들면 톨루엔, 핵산, 클로로포름, 메탄올, 에탄올, 이소프로필 알코올, 아세톤, 메틸에틸케톤, 디메틸포름 구아니딘-함유 (DMF), 디메틸 설펡사이드 (DMSO), N-메틸피롤리돈 (NMP), 및 프로필렌 카보네이트가 있다. 물(water)은 2-파트 조성물 RTV-2을 급속 경화를 촉진하기 위한 부가 성분(G)일 수 있으며, 이 경우 물은 두 조성물 중의 한 파트에 존재할 수 있다. 특히 적합한 비극성 용매는 톨루엔, 핵산 등을 포함하나, 이에 제한되지 않으며, 상기 용매는 경화 및 도포 후에 증발시켜야 한다. 또 하나의 구체예에서, 용매는 알킬벤젠, 프탈산 에스테르, 아릴설포산 에스테르, 트리알킬- 또는 트리아릴포스페이트 에스테르와 같은 고비점 탄화수소를 포

함하며, 이러한 용매는 낮은 증기압을 가지며, 증량하여 코스트를 낮출 수 있다. 예를 들어 미국특허 제 6,599,633호; 미국특허 제 4,312,801호에 인용된 것일 수도 있다. 용매는 본 발명의 촉매 조성물의 약 20 내지 약 99 중량%의 양으로 존재할 수 있다.

- [0227] 본 출원인은 촉매로서 아미노 에스테르를 사용하는 것이 적합한 택-프리 시간, 경도 및/또는 경화시간을 나타내는 경화된 폴리머를 산출하는 경화성 조성물을 제공할 수 있으며, 심지어 주석 촉매를 사용하여 만든 조성물과 대등할 수 있다는 것을 발견하였다. 경화특성들은 아미노 에스테르 촉매를 하나 이상의 접착 촉진제와 함께 사용하는 것에 의해 조절될 수 있다.
- [0228] 하나의 구체예에서, 본 발명의 조성물은 100 중량%의 폴리머 성분(A); 약 0.1 내지 약 10 중량%의 크로스링커 성분(B); 및 약 0.01 내지 약 7 중량%의 촉매 (C)를 포함하여 구성된다. 하나의 구체예에서, 본 발명의 조성물은 약 0.1 내지 약 5 중량%, 하나의 구체예에서 0.15 내지 1 중량%,의 접착 촉진제 성분(D); 약 0 내지 약 300 중량부의 필러 성분(E); 약 0.01 내지 약 7 중량%의 산성 화합물 (F); 임의선택적으로 0 내지 약 15 중량%의 성분(G)을 더 포함하여 구성되며, 여기서 성분(B) - (G)의 중량%는 각각 폴리머 성분(A) 100중량부 기준이다. 하나의 구체예에서, 본 발명의 조성물은 성분(A) 100중량부 당 약 0.01 내지 약 1 중량%의 양으로 성분(F)를 포함하여 구성된다. 다른 또 하나의 구체예에서, 본 발명의 조성물은 성분(A) 100 중량% 당 약 0.1 내지 약 0.8 중량%의 양으로 촉진제(C)를 포함하여 구성된다.
- [0229] 본 발명의 경화성 조성물은 1-파트 조성물로 제공될 수도 있고 2-파트 조성물로 제공될 수도 있음을 이해하여야 한다. 1-파트 조성물은 위에서 설명한 다양한 성분들의 혼합을 포함하여 구성되는 조성물을 가리킨다. 2-파트 조성물은 분리하여 저장하였다가 경화를 위하여 도포하기 직전에 함께 혼합되는 제1 부분과 제2 부분을 포함하여 구성될 수도 있다. 하나의 구체예에서, 2-파트 조성물은 폴리머 성분(A) 및 크로스링커 성분(B)을 포함하여 구성되는 제1 부분 (P1)과, 아미노 에스테르를 포함하여 구성되는 촉매 성분(C)을 포함하여 구성되는 제2 부분 (P2)을 포함하여 구성된다. 상기 제1 부분과 제2 부분은 특정 목적 및 의도된 용도에 필요한 경우 다른 성분(F) 및/또는 (G)를 포함할 수도 있다. 하나의 구체예에서, 제1 부분 (P1)은 접착 촉진제 (D) 및/또는 필러 (E)를 임의선택적으로 포함하여 구성될 수 있고, 제2 부분 (P2)은 보조 물질(G), 경화속도 개질 성분(F), 및 물을 임의선택적으로 포함하여 구성될 수 있다.
- [0230] 하나의 구체예에서, 2-파트 조성물은, (i) 폴리머 성분(A), 임의선택적인 필러 성분(E), 및 임의선택적인 산성 화합물 (F)을 포함하여 구성되는 제1 부분과; (ii) 크로스링커 (B), 촉매 성분(C), 임의선택적인 접착 촉진제 (D), 및 임의선택적인 산성 화합물 (F)을 포함하여 구성되는 제2 부분을 포함하여 구성되며; 제1 부분과 제2 부분을 이들을 혼합하여 경화를 위해 도포될 때까지 분리 저장된다.
- [0231] 대표적인 2-파트 조성물의 예는, 100 중량부의 성분(A), 및 0 내지 70 중량부의 성분(E)를 포함하여 구성되는 제1 부분 (i) 과; 0.1 내지 5 중량부의 적어도 하나의 크로스링커 (B); 0.01 내지 4 중량부의 촉매 (C); 0.1 내지 2 중량부의 접착 촉진제 (D); 및 0.02 내지 1 중량부의 성분(F)를 포함하여 구성되는 제2 부분 (ii)을 포함하여 구성된다.
- [0232] 이러한 모든 중합/가교 루트들(routes)은, 여러 용도에 사용될 수 있는 제품들을 구성할 수 있는, 더 많이 또는 더 적게 중합된, 그리고 더 많이 또는 더 적게 가교된 실리콘 제품들을 생성시킨다. 본 발명의 경화성 조성물은 시일링, 몰드 제작, 그레이징(glaing), 프로토타이핑 (prototyping)을 위한 재료; 접착제; 위생실의 코팅; 서로 다른 재료 사이의 조인트 시일, 예를 들어 세라믹 또는 광물 표면과 열가소성 물질 사이의 실란트; 종이 이형제; 합침 제; 접착제, 웨더 스트립 코팅(weather strip coating), 포인팅 제품, 발포체 등과 같은 다양한 용도에 적합 할 수 있다. 촉진제로서 아미노 에스테르 를 포함하여 구성되는 본 발명의 경화성 조성물은, 예를 들어 범용 및 산업 실란트, 포팅 (potting) 화합물, 코크 (caulk), 건축용 접착제 또는 코팅, 절연 유리, 유리 시트가 금속 프레임에 고정되어 실링되는 구조물 그레이징; 코크스, 금속판, 차체, 차량, 전자 장치 등의 접착제과 같은 광범위의 용도에 적합할 수 있다. 또한, 본발명의 조성물은 광범위의 금속, 미네랄, 세라믹, 러버 또는 플라스틱 표면에 접착할 수 있는 1-파트 RTV-1 또는 2-파트 RTV-2 제제로 사용될 수 있다.
- [0233] 경화촉진제로서 유기 첨가제가 존재하는 또는 부재하는, 아미노 에스테르 촉매를 포함하여 구성되는 경화성 조성물들은, 하기 실시예들을 참조하면 잘 이해할 수 있을 것이다.
- [0234] 실시예
- [0235] 일반 실험 절차
- [0236] 아래에 제시되는 결과들은 두 가지의 성분 A를 갖는 조제를 사용하여 마련된 것이다. 실란올-경지된 PDMS + 실

리카 필러 + 저분자량 PDMS에 폴리실리케이트가 사전혼합되어 성분 A1으로 사용된다. 실란올-정지된 PDMS + 실리카 필러 + 저분자량 PDMS를 혼합하여 제조된 다른 조제는, 이후로는 성분 A2라 칭해지며, 유리, 알루미늄, 플라스틱 기재와 같은 다양한 기재에 대한 보다 신속한 경화성 및 양호한 접착성을 달성하기 위해 설계된다.

[0237] 혼합물은 약 1 그램의 에틸 폴리실리케이트 (EPS), 0.6 내지 1.4 그램의 아미노-관능 실란들의 혼합물, 0.1 내지 0.5 그램의 아미노 에스테르 촉매, 및 약 97 내지 99.5 그램의 (실란올-정지된 PDMS + 실리카 필러 + 저분자량 PDMS) 혼합물로 만들어졌다. 상기 혼합물은 하우스차일드 믹서(Hauschild mixer)를 사용하여 1.5분 동안 혼합되었다. 혼합된 조제는 테플론 몰드(길이\*폭\*깊이=10 cm x 10 cm x 1 cm) 내에 주입되어, 폼 후드(fume hood) 내측에 놓여졌다. 표면 경화 (TFT) 및 벌크 경화는 시간(최대 3일)의 함수로서 모니터링되었다.

[0238] 열 노화 방법 (Heat Ageing Method)

[0239] 에틸 폴리실리케이트를 함유하는 상기 사전혼합된 혼합물 {접착 촉진제(들), 유기-관능성 실록산(들) 및 촉매}을 (1)50°C에서 4시간 동안, 또는 (2) 70°C에서 5일 동안 오븐에 넣어두었다. 정해진 기간이 경과한 후, 이 혼합물을 오븐에서 꺼내 주위 온도로 되돌려 놓았다. 다음, 이 혼합물은 성분 A와 조합하여 하우스차일드 믹서에서 1.5분동안 혼합하였다. 혼합된 조제를 테플론 몰드(길이\*폭\*깊이=10 cm x 10 cm x 2 cm)에 주입하여 폼 후드 내측에 놓아두었다. 이러한 열 노화 절차들은 오랜 기간 동안의 실온 저장 효과를 시뮬레이션한 것이다.

[0240] 택-프리 시간 (TFT) 측정 방법 A

[0241] 전형적인 TFT 측정에서, 사전혼합된 성분 A 및 성분 B의 조성물을 테플론 몰드(길이x폭x깊이 = 50mmx30mmx20 mm)에 주입한 후, 스테인리스강 압설자(spatula)를 사용하여 고르게 펴고, 스테인리스강 웨이트/ 스테인리스강 압설자를 이 조제의 표면 위에 올려 놓고 표면의 테키니스(tackiness)를 측정하였다. TFT는 끈적이지 않는(non-tacky) 표면을 얻는데 걸리는 시간으로 정의된다. 이 시간은 가장 근접한 분(minute)으로 기록된다.

[0242] 택-프리 시간 측정 방법 B

[0243] 택-프리 시간은 건조된 손가락으로 조제의 표면위에 부드럽게 올려놓고 끈적이지 않는 표면을 체크하여 기록하는, 핑거 소프트 터치 법(finger soft touch method)을 사용하여 측정하였다.

[0244] 쇼어 A 경도 측정 방법

[0245] 쇼어 A 경도 값은 치수 50mmX30mmX10mm/20mm의 시편을 준비하여 측정하였다. 시편을 24시간(시편-1), 48시간(시편-2) 및 72시간(시편-3) 경과 후에 몰드에서 꺼냈다. 쇼어 A 측정은 몰드에서 꺼낸 후 즉시 맨 위와 맨 밑 양쪽에서 수행되었다. 이 측정 방법은 시편의 벌크 경화에 소요되는 시간의 척도로 사용되었다. 벌크 경화 시간은 두께에 걸친(즉 맨 위에서 맨 밑 까지) 조제의 완전한 경화에 소요되는 시간이다.

[0246] 기재 접착 시험 방법

[0247] 유리, 금속 및 플라스틱 기재에 대한 응집 파괴(cohesive failure)를 다음과 같은 방식으로 측정하였다. 사전 혼합된 성분 A 및 성분 B의 조성물을 사전에 세정 건조된 표준 플라스틱, 유리 및 금속 기재 위에 얇은 선들로 도포하였다. 이 기재들을 실온에서 3일동안 유지하였다. 3일 후에, 접착 및 경화된 물질을 기재로부터 제거하여 응집 또는 접착 파괴를 체크하였다.

[0248] 표 1. TFT 특성 및 벌크 경화 특성의 비교

표 1

[0249]

	C1	1	2	3	4
성분 A1	100	100			
성분 A2			100	100	100
EPS			1	1	1
비스-[감마-(트리메톡시실릴)프로필]아민			0.8	0.8	0.8
N-(베타-아미노에틸)-감마-아미노프로필 트리메톡시실란			0.6	0.6	0.6
DBTDL (디부틸주석 디라우레이트)	0.5				
디사이클로헥실아민		0.4			
2,2(에틸렌디옥시) 비스-에틸렌 디아민			0.4		
N-프로필 에틸렌 디아민				0.4	

메톡시 정지된 PDMS		0.1			
N-(2-하이드록시)-에틸렌디아민					0.4
경화성					
TFT (분)	173	97	41	34	38
경도 (3d)	50/49	45/45	32/32	31/29	29/27
접착성 (3d)					
ABS	NT	NT	X	o	o
PBT	NT	NT	X	o	o
AC	NT	NT	X	x	o

[0250] 시편두께 = #10mm

[0251] NT = 테스트 안됨

[0252] 접착성: o = 응집파괴(CF); x = 접착 실패됨

[0253] 실시예 5-20

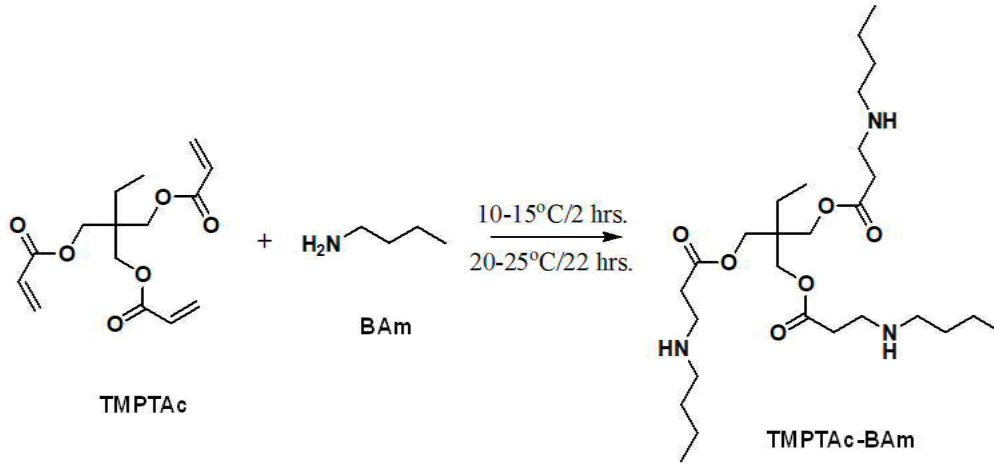
[0254] 실시예 5-20은 성분 A1을 사용하여 제조하였다. 이 조성물들은 이 실시예들에서 설명된 다양한 유기 아민들을 혼합하는 것에 의해 위에서 설명한 바와 같이 경화되었다. 실시예 5-11은 일차 아민들을 사용하는 비교 실시예들이다. 표 1 및 2는 경화성 조성물들에 대한 결과들을 보여준다.

**표 2**

	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
PDMS-OH	100															
실리카 및 CaCO <sub>3</sub>																
중축합된 TEOS																
알릴 아민	1		1													
부틸 아민		0.1														
데실 아민				1	0.5											
2-에틸헥실아민						0.5	1									
디에탄올아민								1								
디사이클로헥실아민									1							
1-메틸피페라진										0.5						
N (2-하이드록시에틸)에틸렌디아민											0.1					
2,2'(에틸렌디옥시)비스(에틸아민)												0.1				
모폴린													1			
메틸벤질아민														1		
A-메틸벤질아민															1	
테트라에틸렌펜타아민																0.5
TFT (분)	18	23	18	6	8	14	7	46	47	17	7	11	21	13	38	3
경도 (쇼어 A)	33	33	33	40/37	40	43	42	28	44	36	20	30	30	34	32	29/40
- 2일	44	43	44		42	43	42	39	43	38	36	43	37	39	39	

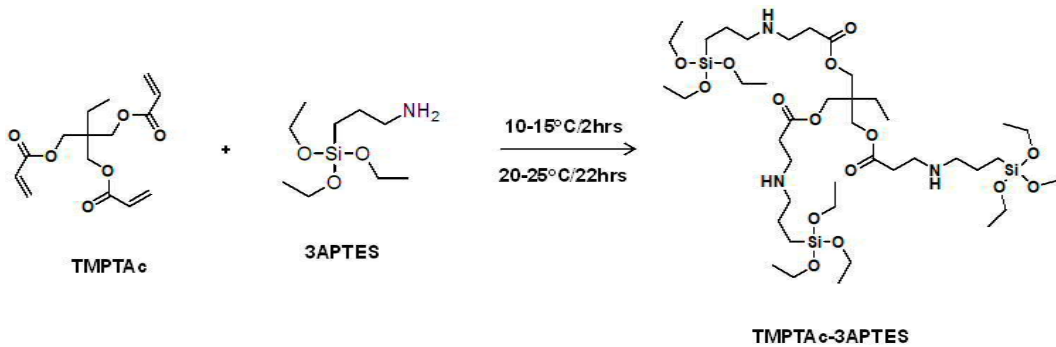
[0256] TMPTAc-Bam의 합성: 마이클 첨가 반응

[0257] TMPTAc 및 BAm으로부터 β-아미노에스테르가 촉매의 부재하에 벌크로 합성되었다. The TMPTAc과 BAm 사이의 물비는 1:2.7로 유지되었다. 전형적인 실험에서, 7.0그램의 TMPTAc를 100ML 둥근 바닥 (RB)에 넣고, 이 RB 플라스크에 부착된 첨가 깔때기에 4.665그램의 BAm을 넣었다. TMPTAc를 함유하는 RB 플라스크를 빙수조(ice-water bath)를 사용하여 10-15°C로 냉각하였다. BAm을 15분에 걸쳐 교반하에 적하하였다. 2시간 후, 빙수조를 제거하고 온도를 20-25°C로 유지하였다. 이 반응을 교반하에 24시간동안 진행하였다. 생성물을 <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR 및 FTIR 스펙트로스코피를 사용하여 그 구조에 대하여 특성분석하였다. 이 반응의 개략도는 다음과 같다.

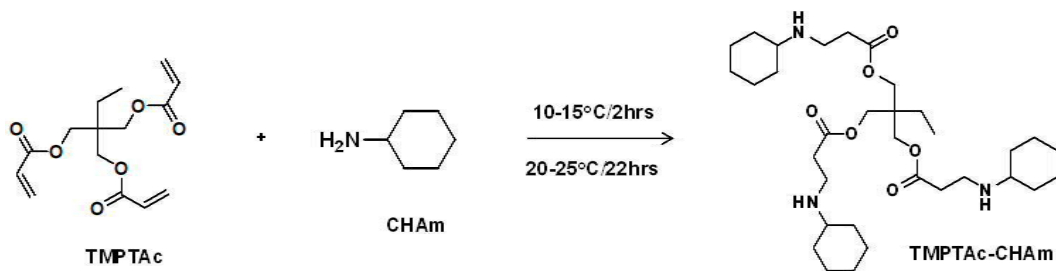


[0258] 추가적인 아미노 에스테르 화합물들

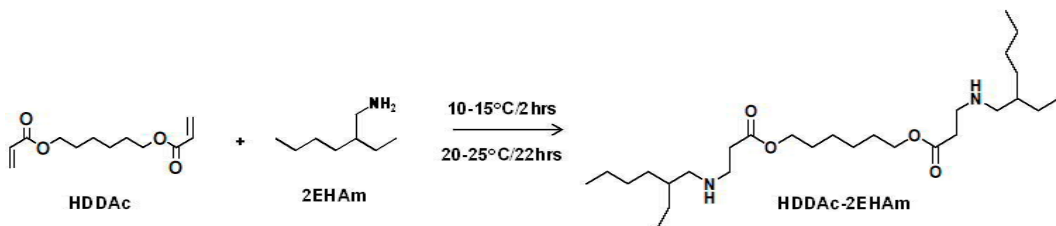
[0259] 유사한 프로세스를 사용하여, 다음의 아미노 에스테르들을 생성하였다.



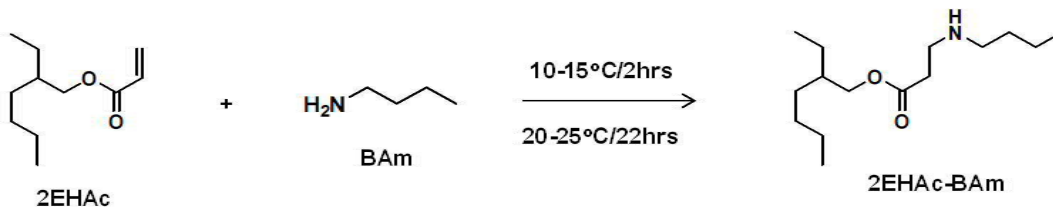
[0260]



[0261]



[0262]



[0263]

[0264] **실시예 1-8**

[0265] β-아미노에스테르 (TMPTAc-BAm)를 실란올, 알콕시실란 및 필러를 포함하는 조제(성분 A)에서 시험하였다. TMPTAc-BAm 마스터배치를 다양한 농도로 실록산 백분 및 폴리에틸렌 글리콜 가지 (PEPDMS)를 포함하여 구성되는 폴리머를 사용하여 제조하였다 (성분 B). 전형적인 실험에서, 100그램의 성분 A를 취하여 5그램의 성분B와 혼합하였다. 혼합된 조제들을 테플론몰드(길이 x폭 x깊이 = 50mm x 30mm x 10mm)에 주입하고 스테인리스강 압설자를 사용하여 고르게 폼했다. 10그램, 스테인리스강 웨이트/스테인리스강 압설자를 조제의 표면 위에 올려놓고 테키니스를 확인하였다. 택 크리 시간 (TFT)은 끈적이지 않는 표면을 얻는데 소요되는 시간으로 정의된다. 3일이 지난 후에 시편을 몰드에서 꺼냈다. 경도 (쇼어 A)는 맨 위 및 맨 밑 양쪽에서 측정되었다. 다른 아미노에스테르들은 PEPDMS를 사용하지 않고 시험되었다. 그 결과들은 표 3에 요약되어 있다.

**표 3**

[0266]

실시예	성분 B (0.5그램/100그램 성분 A)		TFT (분)	경도 맨위/맨밑
	TMPTAc-BAm (gm)	PEPDMS		
1	0.5	0.0	63	43/43
2	0.4	0.1	76	40/40
3	0.3	0.2	98	38/38
4	0.2	0.3	124	35/36

[0267]

상기 결과들은 촉매로 β-β-미노에스테르를 포함하여 구성되는 조제는 시편 전체에 걸쳐 균일한 경도를 제공하고 더 긴 TFT를 제공하는 것을 보여준다. 몰드 제작에 특화된 요건은 함께 혼합될 때 더 긴 작업시간이다. 조성물들은 더 긴 TFT를 나타내는 것이 필요함과 동시에 특정 시간이 경과한 후 벌크 경화가 양호한 것이 필요하다. 위에 설명된 분자는 표 4에 제시된 적용에 매우 양호하게 작용한다.

**표 4**

[0268]

	5	6	7	8
성분- A1	100	100	100	100
TMPTAc-3APTES	0.5			
TMPTAc-CHAm		0.5		
HDDAc-2EHAm			0.5	
2EHAc-BAm				0.5
특성들				
TFT (분)	92	52	141	90
경도 (3 일)- 맨 위	31	34	41	43
경도 (3 일)- 맨 밑	31	34	41	43

[0269] **실시예 9-12**

[0270] 본 연구에서 사용된 트리알킬에스테르 (트리에틸 시트레이트 (TEC))는 알드리치(Aldrich)에서 구입하여 추가의 최적화 없이 그대로 사용되었다. 조제들은 크로스링커, 접착 촉진제 및 촉매를 사용하여 제조되었다. 이 조제의 상세 및 결과들이 표 5에 요약되어 있다. 아미노실란 접착 촉진제와 함께 TEC의 사용은 쇼어 A 경도로 입증되는 바와 같이 양호한 경화성을 보여준다. 이 조제는 또한 A1, 유리, ABS와 같은 기체에 대해 양호한 접착성을 보여준다. 또한, PBT 및 AC에 대한 접착성은 접착 촉진제들의 혼합물을 통해 달성될 수 있다.



표 5

	9	10	11	12
성분 A2	100	100	100	100
EPS	1	1	1	1
비스-[감마- ( 트리메톡시실릴)프로필]아민	0.8	0.8	0.8	0.8
N-( 베타-아미노에틸)-감마-아미노프로필 트리메톡시실란	0.6	0.6	0.6	0.6
감마-아미노프로필트리메톡시실란				1.8
TEC	0.05	0.2	0.4	0.4
VA-10				
특성들				
TFT (분)	27	32	45	35
경도 (3일) -맨 위	33	35	34	28
경도 (3일) -맨 밑	26	28	27	16
알루미늄에 대한 접착성	o	o	o	o
유리에 대한 접착성	o	o	o	o
ABS에 대한 접착성	o	o	o	o
PBT에 대한 접착성	x	x	x	o
AC에 대한 접착성	x	x	x	o

[0271]

[0272] 실시예 13-18

[0273] 실시예 13-18은 성분 A2를 이용한 두종류의 다른 아미노에스테르를 사용하여 다음과 같이 제조되었다. 실험 결과들은 아미노에스테르로 신속 경화성을 달성하고 수많은 다양한 유형의 기재에 대해 양호한 접착성을 가질 수 있음을 보여준다. 그 결과들은 표 6에 제시되어 있다.

표 6

	13	14	15	16	17	18
성분 A2	100	100	100	100	100	100
EPS	2	2	2	2	2	2
비스-[감마- ( 트리메톡시실릴)프로필]아민	1.2					
N-( 베타-아미노에틸)-감마-아미노프로필 트리메톡시실란		1.2				
감마-아미노프로필트리메톡시실란			1.2		1.2	1.2
HDDAc-2EHAm	1	1	1			
2EHAc-Bam				1	1	1
특성들						
TFT (분)	58	93	43	60	102	50
경도 (3일) -맨 위	38	13	29	39	17	25
경도 (3일) -맨 밑	31	1	9	31	10	8
ABS에 대한 접착성	NT	o	o	NT	o	o
PBT에 대한 접착성		o	o		o	o
AC에 대한 접착성		o	x		o	x

[0274]

[0275] 본 발명의 구체예들이 위에서 설명되었지만, 그 수정 및 변경들은 본 명세서를 읽고 이해한 타인이 도출해낼 수 있다. 다음의 청구항들은 청구항의 영역내에 있는 모든 수정들 및 변경들, 또는 그 등가물을 포함하는 것으로 의도된다.