

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 494 854**

51 Int. Cl.:

C07C 68/00 (2006.01)

C07C 69/96 (2006.01)

C07D 317/36 (2006.01)

C07D 317/38 (2006.01)

C07D 319/06 (2006.01)

C07B 61/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **02.12.2008 E 08856167 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **25.06.2014 EP 2218708**

54 Título: **Método para la producción de un compuesto de carbonato**

30 Prioridad:

03.12.2007 JP 2007312655

13.12.2007 JP 2007321773

13.08.2008 JP 2008208727

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

16.09.2014

73 Titular/es:

**ASAHI GLASS COMPANY, LIMITED (100.0%)
Shin-Marunouchi Building, 1-5-1 Marunouchi,
Chiyoda-ku
Tokyo 100-8405, JP**

72 Inventor/es:

**OKAMOTO, HIDEKAZU;
TAJIMA, KOUHEI y
OKAZOE, TAKASHI**

74 Agente/Representante:

VALLEJO LÓPEZ, Juan Pedro

ES 2 494 854 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Método para la producción de un compuesto de carbonato

5 **Campo de la invención**

La presente invención se refiere a un nuevo proceso para la producción de un compuesto de carbonato que contiene flúor.

10 **Antecedentes de la técnica**

Como procesos para la producción de un compuesto de carbonato, se conocen los siguientes procesos (JP 2005-60261, JP 2000-319230).

15 (1) Un proceso para la producción de un carbonato cíclico haciendo reaccionar dióxido de carbono gaseoso con un óxido de alqueno en presencia de un catalizador (véase, por ejemplo, Documento de Patente 1).

(2) Un proceso para la producción de un carbonato de dialquilo o un carbonato cíclico haciendo reaccionar fosgeno (COCl₂) con un alcohol (véase, por ejemplo, Documento de Patente 2).

20 (3) Un proceso para la producción de un compuesto de carbonato mediante una reacción de intercambio del grupo éster de un carbonato cíclico o carbonato de dimetilo con un alcohol en presencia de un catalizador de reacción de intercambio del grupo éster (véase, por ejemplo, Documento No de Patente 1).

(4) Un proceso para la producción de un compuesto de carbonato haciendo reaccionar cloroformiato de metilo con un alcohol (véase, por ejemplo, Documento de Patente 2).

25 No obstante, el proceso (1) comporta el problema de que únicamente se producen carbonatos cíclicos y no se pueden producir selectivamente diversos carbonatos.

El proceso (2) comporta problemas como la corrosión de las instalaciones de producción con el cloruro de hidrógeno producido como subproducto; que el fosgeno tiene toxicidad; y similares.

30 Puesto que el proceso (3) es una reacción de equilibrio, comporta problemas como que se debe usar un gran exceso de alcohol para mejorar el rendimiento del producto objetivo; es difícil de separar y retirar un compuesto de carbonato asimétrico producido como subproducto; y similares.

35 El proceso (4) comporta problemas de corrosión de las instalaciones de producción con el cloruro de hidrógeno producido como subproducto; y similares.

Además, como ejemplos de reacción de hexacloroacetona con un alcohol, se han presentado los siguientes ejemplos.

40 (5) Un ejemplo de síntesis de tricloroacetato mediante la reacción de hexacloroacetona con metanol (Documento No de Patente 2).

45 (6) Un ejemplo en el que se confirma la formación de carbonato de di(2-metil-2-propen-1-ilo) mediante la reacción de hexacloroacetona con 2-metil-2-propen-1-ilo a temperatura ambiente o una temperatura inferior (Documento No de Patente 3).

(7) Un ejemplo en el que se forma un alquilencarbonato cíclico y cloroformo mediante la reacción de un compuesto diol vecino (propilenglicol o similares) con hexacloroacetona en presencia de un catalizador básico (una sal de una base fuerte con un ácido débil) (Documento de Patente 3).

50 (8) Un ejemplo en el que se forma un alquilencarbonato cíclico y cloroformo mediante la reacción de un compuesto diol vecino (propilenglicol o similares) con hexacloroacetona usando un catalizador de hidrosilicato de un metal del Grupo 2 o 3 (Documento de Patente 4).

55 No obstante, no se conoce ningún ejemplo de síntesis de un compuesto de carbonato que contenga flúor mediante la reacción de hexacloroacetona con un alcohol que contiene flúor. Muchos alcoholes que contienen flúor son compuestos cuyos grupos OH presentan un alto grado de disociación ácido debido a una propiedad sustractora de electrones del átomo de flúor. En particular, el efecto es notable en un compuesto que tiene un átomo de flúor en posición β del grupo OH. Por tanto, se anticipa que un alcohol que contenga flúor muestre una reactividad extremadamente baja hacia la hexacloroacetona en comparación con un alcohol que no tenga un átomo de flúor.

60 Documento de Patente 1: JP-A-07-206847

Documento de Patente 2: JP-A-60-197639

Documento de Patente 3: Patente de Estados Unidos N° 4353831

Documento de Patente 4: Patente de Rusia N° 2309935

Documento No de Patente 1: Journal of Catalysis, 2006, Vol. 241, No. 1, p. 34-44

65 Documento No de Patente 2: Analytical Chemistry, 1983, Vol. 55, No. 8, p. 1222-1225

Documento No de Patente 3: Journal of Organic Chemistry, 1979, Vol. 44, No. 3, p. 359-363

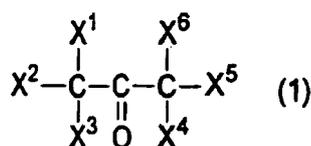
Divulgación de la invención**Problemas a resolver por la invención**

- 5 La invención proporciona un nuevo proceso de producción capaz de producir selectivamente diversos tipos de compuestos de carbonato que contienen flúor sin ningún tipo de inhibición en los rendimientos, sin el uso de ningún compuesto tóxico tal como fosgeno y sin la producción de ningún gas corrosivo tal como el cloruro de hidrógeno.

Medios para resolver los problemas

- 10 El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención es un proceso para la producción de un compuesto de carbonato que comprende la reacción de un compuesto representado mediante la siguiente fórmula (1) con un compuesto que contiene flúor que tiene al menos un grupo OH para obtener un compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato:

[quím. 1]



- 20 en la que X¹ a X³ cada uno representa un átomo de hidrógeno o un átomo de halógeno, al menos uno de X¹ a X³ es un átomo de halógeno, X⁴ a X⁶ cada uno representa un átomo de hidrógeno o un átomo de halógeno, y al menos uno de X⁴ a X⁶ es un átomo de halógeno.

- 25 El compuesto que contiene flúor anterior que tiene al menos un grupo OH es preferentemente un polifluoroalcanomonool que tiene de 2 a 10 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, o un polifluoroalcanodiol que tiene de 3 a 10 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico.

- 30 En el proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención, se prefiere que la reacción se lleve a cabo en presencia de un catalizador.

El catalizador preferentemente comprende una sal halógena. En la presente memoria descriptiva, la sal halógena significa una sal de un catión metálico u orgánico con un ion halógeno.

- 35 La sal halógena preferentemente comprende uno o más miembros seleccionados del grupo que consiste en sales halógenas de metales alcalinos, sales halógenas de metales alcalino-térreos, sales halógenas de amonios, sales halógenas de amonios cuaternarios, resinas de intercambio iónico que tienen una estructura de sal halógena.

La sal halógena preferentemente es un fluoruro de un metal alcalino.

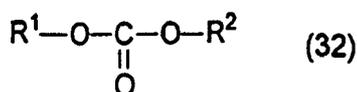
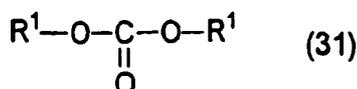
- 40 En el proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención, se prefiere que la reacción se lleve a cabo en presencia del catalizador y de un promotor, en el que el promotor es un catalizador ácido sólido.

- 45 El catalizador ácido sólido preferentemente comprende al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en óxidos metálicos que tienen un punto ácido fuerte, heteropolíácidos, y resinas de intercambio de cationes.

Los óxidos metálicos que tienen un punto ácido fuerte preferentemente comprenden al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en óxido de cerio (CeO₂/Ce₂O₃), sílice-alúmina (SiO₂·Al₂O₃), γ-alúmina (Al₂O₃), sílice-magnesia (SiO₂·MgO), zirconia (ZrO₂), sílice-zirconia (SiO₂·ZrO₂), ZnO·ZrO₂, y Al₂O₃·B₂O₃.

- 50 El compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato preferentemente es un compuesto representado mediante la siguiente fórmula (31) o un compuesto representado mediante la siguiente fórmula (32).

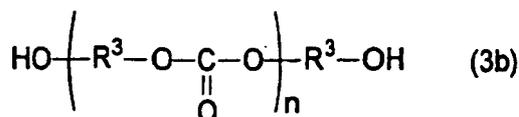
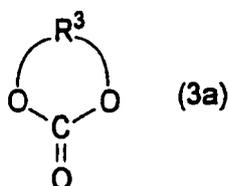
[quím. 2]



5 en las que R¹ y R² cada uno representa un grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor, siempre que R¹ y R² no sean el mismo grupo.

10 El compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato preferentemente es un compuesto de carbonato cíclico representado mediante la siguiente fórmula (3a) o un compuesto de carbonato lineal representado mediante la siguiente fórmula (3b).

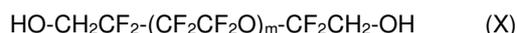
[quím. 3]



15 en las que R³ representa un grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático divalente que contiene flúor.

20 El compuesto que contiene flúor que tiene al menos un grupo OH preferentemente comprende al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en 2,2,2-trifluoroetanol, 2,2,3,3,3-pentafluoropropanol, 2,2,3,3-tetrafluoropropanol, 1-trifluorometil-2,2,2-trifluoro-1-etanol (hexafluoroisopropanol), 2,2,3,4,4,4-hexafluorobutanol, 2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentanol, 2,2-difluoro-2-(1,1,2,2-tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etanol (CF₃CF₂OCF₂CF₂OCF₂CH₂OH), 2,2-difluoro-2-(tetrafluoro-2-(tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etoxi)etanol (CF₃CF₂OCF₂CF₂OCF₂CF₂OCF₂CH₂OH), 2,3,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,3,3,3-hexafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)propoxi)-1-propanol (CF₃CF₂CF₂OCF(CF₃)CF₂OCF(CF₃)CH₂OH), 2,2,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)-1-propanol (CF₃CF₂CF₂OCF(CF₃)CH₂OH), y fenoles que contienen flúor.

30 El compuesto que contiene flúor que tiene al menos un grupo OH preferentemente comprende al menos un ion seleccionado del grupo que consiste en 3,3,3-trifluoro-1,2-propanodiol, 4,4,4,3,3-pentafluoro-1,2-butanodiol, 1,1,1,4,4,4-hexafluoro-2,3-butanodiol, 3,3,4,4-tetrafluoro-1,6-hexanodiol, 3,3,4,4,5,5,6,6-octafluoro-1,8-octanodiol, tetrafluorohidroquinona, tetrafluororesorcinol, 2,2-bis(4-hidroxifenil)-hexafluoropropano, y un compuesto representado por la siguiente fórmula (X):



35 en la que m es un número entero de 2 a 30 y m es preferentemente de 4 a 20.

En el proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención, se prefiere que la reacción se lleve a cabo con la retirada del sistema de reacción de los CHX¹X²X³ y/o CHX⁴X⁵X⁶ formados mediante destilación.

40 Efectos ventajosos de la invención

45 Según el proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención, se pueden producir selectivamente diversos tipos de compuestos de carbonato que contienen flúor sin ningún tipo de inhibición de altos rendimientos, sin el uso de ningún compuesto tóxico tal como fosgeno y sin la producción de ningún gas corrosivo tal como el cloruro de hidrógeno. Por otra parte, además de carbonatos cíclicos que contienen flúor, se pueden producir fácilmente oligómeros o polímeros de carbonatos que contienen flúor que tienen un grupo funcional reactivo en el

extremo.

Mejor modo para llevar a cabo la invención

5 En la presente memoria descriptiva, el compuesto representado mediante la fórmula (1) se denomina compuesto (1). Los compuestos representados por las otras fórmulas también se denominan de forma análoga.

Por otra parte, en la memoria descriptiva, el compuesto que contiene flúor significa un compuesto que tiene un átomo de flúor.

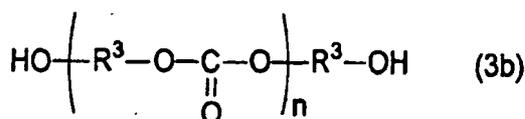
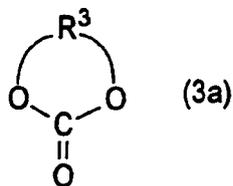
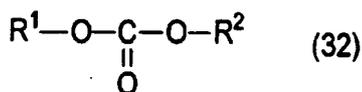
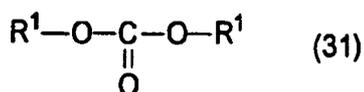
10 <Compuestos de carbonato>

Los compuestos de carbonato obtenidos mediante el proceso de producción de la invención son compuestos que tienen un enlace carbonato (-O-C(=O)-O-).

15 Ejemplos del compuesto de carbonato incluyen el compuesto (31), el compuesto (32), el compuesto (3a), el compuesto (3b), y el compuesto de carbonato ramificado que tiene dos o más grupos OH terminales (de aquí en adelante denominado compuesto de carbonato ramificado).

20

[quím. 4]



25 (Compuesto (31))

R¹ representa un grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor. Los grupos R¹ en los lados izquierdo y derecho son idénticos.

30 El grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor puede contener un átomo de oxígeno etérico.

El grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor puede ser lineal, ramificado, o cíclico.

35 R¹ puede tener un sustituyente. Como sustituyente, se prefiere un átomo de halógeno (excluyendo un átomo de flúor) en vista de la utilidad del compuesto (31).

40 Como grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor, se prefiere un grupo polifluoroalquilo que tiene de 2 a 10 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, en vista de la utilidad del compuesto (31). Como grupo alquilo en el grupo polifluoroalquilo que tiene de 2 a 10 átomos de carbono, se prefiere un grupo etilo, un grupo n-propilo, un grupo i-propilo, un grupo t-butilo, o un grupo n-pentilo. Como grupo alquilo en el grupo polifluoroalquilo que tiene un átomo de oxígeno etérico, se prefiere un grupo (etoxi(etoxi))etilo, un grupo (etoxi(etoxi(etoxi)))etilo, un grupo (propoxi)propilo, o un grupo (propoxi(propoxi))propilo.

El grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor puede tener un sustituyente de un grupo hidrocarbonado alifático o un grupo hidrocarbonado aromático sobre los núcleos aromáticos.

- 5 Ejemplos del grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor incluyen grupos fenilo que contienen flúor, grupos metilfenilo que contienen flúor, grupos etilfenilo que contienen flúor y grupos naftilo que contienen flúor, y se prefiere un grupo fenilo que contiene flúor en vista de la utilidad del compuesto (31).

(Compuesto (32))

- 10 R^1 y R^2 cada uno representa un grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor y R^1 y R^2 no son el mismo grupo.

El grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor puede contener un átomo de oxígeno etérico.

- 15 El grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor puede ser lineal, ramificado, o cíclico.

R^1 y R^2 pueden tener un sustituyente. Como sustituyente, se prefiere un átomo de halógeno (excluyendo un átomo de flúor) en vista de la utilidad del compuesto (32).

- 20 Como grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor, se prefiere un grupo polifluoroalquilo que tiene de 2 a 10 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, en vista de la utilidad del compuesto (32). Como grupo alquilo en el grupo polifluoroalquilo que tiene de 2 a 10 átomos de carbono, se prefiere un grupo etilo, un grupo n-propilo, un grupo i-propilo, un grupo t-butilo, o un grupo n-pentilo. Como grupo alquilo en el grupo polifluoroalquilo que tiene un átomo de oxígeno etérico, se prefiere un grupo (etoxi(etoxi))etilo, un grupo (etoxi(etoxi(etoxi)))etilo, un grupo (propoxi)propilo, o un grupo (propoxi(propoxi))propilo.

El grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor puede tener un sustituyente de un grupo hidrocarbonado alifático o grupo hidrocarbonado aromático sobre los núcleos aromáticos.

- 30 Como grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor, se prefiere un grupo hidrocarbonado aromático que tiene de 6 a 16 átomos de carbono.

- 35 Ejemplos del grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor incluyen grupos fenilo que contienen flúor, grupos metilfenilo que contienen flúor, grupos etilfenilo que contienen flúor y grupos naftilo que contienen flúor, y se prefiere un grupo fenilo que contiene flúor en vista de la utilidad del compuesto (32).

El compuesto asimétrico (32) se sabe que tiene un punto de fusión inferior al del compuesto simétrico (31) y se predice que sea superior en caso de que se use como disolvente o similar.

- 40 (Compuesto (3a))

El compuesto (3a) es un compuesto de carbonato cíclico.

- 45 R^3 representa un grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático divalente que contiene flúor.

El grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor puede contener un átomo de oxígeno etérico.

- 50 El grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor puede ser lineal, ramificado, o cíclico.

R^3 puede tener un sustituyente. Como sustituyente, se prefiere un átomo de halógeno (excluyendo un átomo de flúor) en vista de la utilidad del compuesto (3a).

- 55 Como R^3 , se prefiere un grupo polifluoroalquileno que tiene de 3 a 10 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, en vista de la utilidad del compuesto (3a). Como grupo alquilo en el grupo polifluoroalquileno que tiene de 3 a 10 átomos de carbono, se prefiere $-\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)-$, $-\text{CH}_2\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)-$, o $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$.

- 60 Como compuesto (3a), se prefiere un compuesto obtenido al sustituir una parte o todos los átomo(s) de hidrógeno de los siguientes compuestos por átomo(s) de flúor: 1,2-propilencarbonato, 1,3-propilencarbonato, o 1,2-butilencarbonato.

(Compuesto (3b))

- 65 El compuesto (3b) es un oligómero o polímero que tiene un grupo OH, que es un grupo funcional reactivo, en el extremo.

R³ representa un grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático divalente que contiene flúor. En caso de que haya presentes una pluralidad de grupos R³ en el compuesto (3b), los grupos R³ pueden ser de un solo tipo o pueden ser de dos o más tipos.

5 El grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor puede contener un átomo de oxígeno etérico.

El grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor puede ser lineal, ramificado, o cíclico.

10 R³ puede tener un sustituyente. Como sustituyente, se prefiere un átomo de halógeno (excluyendo un átomo de flúor) en vista de la utilidad del compuesto (3b).

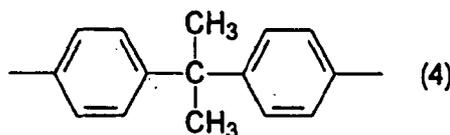
15 Como R³, se prefiere un grupo polifluoroalquileo que tiene de 3 a 64 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, en vista de la utilidad del compuesto (3b), es más preferido un grupo polifluoroalquileo que tiene de 3 a 14 átomos de carbono, y lo más preferido es un grupo polifluoroalquileo que tiene de 3 a 10 átomos de carbono. Como grupo alquilo en el polifluoroalquileo que tiene de 3 a 10 átomos de carbono, se prefiere -CH₂CH₂CH(CH₃)CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂CH₂-, -CH₂CH₂CH₂CH₂-, o -CH₂CH₂CH₂-. Como grupo alquileo en el grupo polifluoroalquileo que tiene un átomo de oxígeno etérico, se prefiere un grupo representado mediante la siguiente fórmula (XI).

20
$$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_m-\text{CH}_2\text{CH}_2-$$
 (XI)

en la que m es un número entero de 2 a 30 y m es preferentemente de 4 a 10.

25 Por otra parte, como R³, se prefiere un grupo obtenido al sustituir una parte o todos los átomo(s) de hidrógeno de un grupo representado mediante la siguiente fórmula (4) por átomo(s) de flúor:

[quím. 5]



30 El símbolo n en la fórmula (3b) representa un número entero de 1 a 1000, preferentemente un número entero de 5 a 100, y más preferentemente un número entero de 10 a 50. En relación con esto, el compuesto (3b) como producto de reacción normalmente se obtiene como mezcla de compuestos que tienen diferentes números n.

35 Como compuesto (3b) se prefiere un compuesto obtenido al sustituir una parte o todos los átomo(s) de hidrógeno del siguiente compuesto por átomo(s) de flúor: poli(1,3-propilencarbonato), poli(1,4-butilencarbonato), poli(3-metil-1,5-pentilencarbonato), poli(1,6-hexilencarbonato), poli(óxido de polietileno-α,ω-carbonate), o copolímeros que tienen estas unidades de repetición.

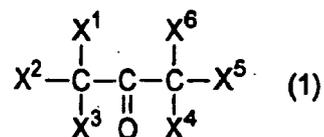
40 (Compuesto de carbonato ramificado)

45 Ejemplos del compuesto de carbonato ramificado incluyen oligómeros ramificados y polímeros ramificados, cada uno que tiene más de dos grupos OH terminales. El compuesto de carbonato ramificado que tiene más de dos grupos OH terminales incluye aquellos que tienen tres o más grupos OH terminales y mezclas de aquellos que tienen dos grupos OH terminales y aquellos que tienen tres o más grupos OH terminales. En el caso de mezclas, el número de grupos OH se evalúa con el valor medio, y "más de dos" representa, por ejemplo, 2,05, 2,1, o similares.

50 <Proceso para la producción de un compuesto de carbonato>

55 El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención es un proceso para la producción de un compuesto de carbonato haciendo reaccionar el compuesto (1) con un compuesto que contiene flúor que tiene un grupo OH y un compuesto que contiene flúor que tiene dos o más grupos OH, opcionalmente, en presencia de un catalizador.

[quím. 6]



5 (Compuesto (1))

X¹ a X⁶ son átomos de cloro. Teniendo en cuenta que se obtiene cloroformo como subproducto, lo más preferentemente son todos átomos de cloro.

10 El compuesto (1) es hexacloroacetona. En vista de la capacidad de producción simultánea de cloroformo industrialmente útil con un alto rendimiento, se prefiere la hexacloroacetona.

Entre los compuestos (1), se pueden producir fácilmente cloroacetonas mediante los procesos de cloración de acetona como se describe en los documentos JP-B-60-52741 y JP-B-61-16255. Por otra parte, se pueden producir fácilmente compuestos parcialmente fluorados por fluoración de cloroacetonas con fluoruro de hidrógeno como se describe en la patente de Estados Unidos N^o 6.235.950.

(Catalizador)

20 En el proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención se prefiere que el compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato se obtenga en presencia de un catalizador. Mediante el uso del catalizador, la reacción se puede llevar a cabo de forma eficiente y se puede mejorar el rendimiento.

25 Ejemplos del catalizador incluyen uno o más miembros seleccionados del grupo que consiste en metales alcalinos, metales alcalino-térreos; hidruros de metales alcalinos, hidruros de metales alcalino-térreos; hidróxidos de metales alcalinos, hidróxidos de metales alcalino-térreos; catalizadores de transferencia de fase; sales halógenas de metales alcalinos; sales halógenas de metales alcalino-térreos; sales halógenas de amonios; resinas de intercambio iónico; compuestos de uno o más metales seleccionados del grupo que consiste en estaño, titanio, aluminio, wolframio, molibdeno, circonio, y cinc; y catalizadores de la reacción de transesterificación.

30 Ejemplos de metales alcalinos incluyen Li, Na, K, Rb y Cs.

Ejemplos de metales alcalinotérreos incluyen Be, Ca y Sr.

35 Ejemplos de hidruros de metales alcalinos incluyen LiH, NaH, KH, RbH y CsH.

Ejemplos de hidruros de metales alcalinotérreos incluyen BeH₂, CaH₂ y SrH₂.

40 Ejemplos de hidróxidos de metales alcalinos incluyen LiOH, NaOH, KOH, RbOH y CsOH.

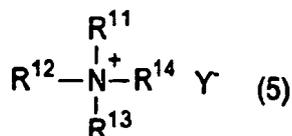
Ejemplos de hidróxidos de metales alcalinotérreos incluyen Be(OH)₂, Ca(OH)₂ y Sr(OH)₂.

Ejemplos de catalizadores de transferencia de fase incluyen sales de amonio cuaternario, sales de fosfonio cuaternario, sales de arsonio cuaternario y sales de sulfonio.

45 Ejemplos de sales de amonio cuaternario incluyen compuestos (5):

[quím. 7]

50



en la que R¹¹ a R¹⁴ cada uno representa un grupo hidrocarbonado e Y⁻ representa un anión.

55 Ejemplos de R¹¹ a R¹⁴ incluyen grupos alquilo, grupos cicloalquilo, grupos alquenoilo, grupos cicloalquenoilo, grupos arilo, grupos alquilarilo y grupos aralquilo, y se prefieren los grupos alquilo, grupos arilo, o grupos aralquilo.

El número total de átomos de carbono de R¹¹ al 14 es preferentemente de 4 a 100 por molécula de R¹¹R¹²R¹³R¹⁴N⁺.

R¹¹ a R¹⁴ pueden ser el mismo grupo o pueden ser grupos diferentes.

5 R¹¹ a R¹⁴ pueden estar sustituidos con grupo(s) funcionales inertes en las condiciones de reacción. Aunque el grupo funcional inerte varía dependiendo de las condiciones de reacción, sus ejemplos incluyen un átomo de halógeno, un grupo éster, un grupo nitrilo, un grupo acilo, un grupo carboxilo y un grupo alcoxilo.

10 R¹¹ a R¹⁴ se pueden combinar entre sí para formar un anillo heterocíclico que incluye un anillo heterocíclico que contiene nitrógeno o similar.

R¹¹ a R¹⁴ pueden ser parte de un compuesto polimérico.

15 Ejemplos de R¹¹R¹²R¹³R¹⁴N⁺ incluyen un ion de tetrametilamonio, un ion de tetraetilamonio, un ion de tetra-n-propilamonio, un ion de tetra-n-butilamonio, un ion de tri-n-octilmetilamonio, un ion de cetiltrimetilamonio, un ion de benciltrimetilamonio, un ion de benciltrietilamonio, un ion cetilbencildimetilamonio, un ion de cetilpiridinio, un ion de n-dodecilpiridinio, un ion de feniltrimetilamonio, un ion de feniltrietilamonio, un ion de n-bencilpicolinio, un ion de pentametonio, y un ion de hexametonio.

20 Ejemplos de Y⁻ incluyen un ion de cloro, un ion de flúor, un ion de bromo, un ion de yodo, un ion sulfato, un ion nitrato, un ion fosfato, un ion perclorato, un ion hidrogenosulfato, un ion hidróxido, un ion acetato, un ion benzoato, un ion benenosulfonato, y un ion p-toluenosulfonato, y se prefiere un ion de cloro, un ion de bromo, un ion de yodo, un ion hidrogenosulfato o un ion hidróxido.

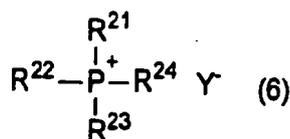
25 Como compuesto (5), en vista de la versatilidad y reactividad del compuesto (5) se prefiere una combinación del siguiente R¹¹R¹²R¹³R¹⁴N⁺ y el siguiente Y⁻.

R¹¹R¹²R¹³R¹⁴N⁺: un ion de tetrametilamonio, un ion de tetraetilamonio, un ion de tetra-n-propilamonio, un ion de tetra-n-butilamonio, o un ion de tri-n-octilmetilamonio.

30 Y⁻: un ion de flúor, un ion de cloro, o un ion de bromo.

Ejemplos de las sales de fosfonio cuaternario incluyen compuestos (6):

35 [quím. 8]



40 en la que R²¹ a R²⁴ cada uno representa un grupo hidrocarbonado e Y⁻ representa un anión.

Ejemplos de R²¹ a R²⁴ incluyen grupos alquilo, grupos cicloalquilo, grupos alquenilo, grupos cicloalquenilo, grupos arilo, grupos alquilarilo y grupos aralquilo, y se prefieren los grupos alquilo, grupos arilo, o grupos aralquilo.

45 El número total de átomos de carbono de R²¹ a R²⁴ es preferentemente de 4 a 100 por molécula de R²¹R²²R²³R²⁴P⁺.

R²¹ a R²⁴ pueden ser el mismo grupo o pueden ser grupos diferentes.

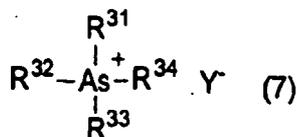
50 R²¹ a R²⁴ pueden estar sustituidos con un grupo funcional inerte en condiciones de reacción. Aunque el grupo funcional inerte varía dependiendo de las condiciones de reacción, sus ejemplos incluyen un átomo de halógeno, un grupo éster, un grupo nitrilo, un grupo acilo, un grupo carboxilo y un grupo alcoxilo.

55 Ejemplos de R²¹R²²R²³R²⁴P⁺ incluyen un ion de tetraetilfosfonio, un ion de tetra-n-butilfosfonio, un ion de tri-n-octiletilfosfonio, un ion cetiltri-etilfosfonio, un ion de cetiltri-n-butilfosfonio, un ion de n-butiltrifenilfosfonio, un ion de n-amiltrifenilfosfonio, un ion de metiltrifenilfosfonio, un ion de benciltrifenilfosfonio, y un ion de tetrafenilfosfonio.

Ejemplos de Y⁻ incluyen un ion de cloro, un ion de flúor, un ion de bromo, un ion de yodo, un ion sulfato, un ion nitrato, un ion fosfato, un ion perclorato, un ion hidrogenosulfato, un ion hidróxido, un ion acetato, un ion benzoato, un ion benenosulfonato, y un ion p-toluenosulfonato, y se prefiere un ion de flúor, un ion de cloro o un ion de bromo.

60 Ejemplos de sales de arsonio cuaternario incluyen compuestos (7):

[quím. 9]



5 en la que R^{31} a R^{34} cada uno representa un grupo hidrocarbonado e Y^- representa un anión.

Ejemplos de R^{31} a R^{34} incluyen grupos alquilo, grupos cicloalquilo, grupos alquenilo, grupos cicloalquenilo, grupos arilo, grupos alquilarilo y grupos aralquilo, y se prefieren los grupos alquilo, grupos arilo, o grupos aralquilo.

10 El número total de átomos de carbono de R^{31} a R^{34} es preferentemente de 4 a 100 por molécula de $\text{R}^{31}\text{R}^{32}\text{R}^{33}\text{R}^{34}\text{As}^+$.

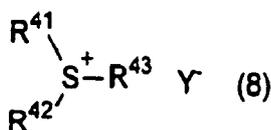
R^{31} a R^{34} pueden ser el mismo grupo o pueden ser grupos diferentes.

15 R^{31} a R^{34} pueden estar sustituidos con un grupo funcional inerte en condiciones de reacción. Aunque el grupo funcional inerte varía dependiendo de las condiciones de reacción, sus ejemplos incluyen un átomo de halógeno, un grupo éster, un grupo nitrilo, un grupo acilo, un grupo carboxilo y un grupo alcoxilo.

20 Ejemplos del compuesto (7) incluyen fluoruro de trifenilmetilarsonio, fluoruro de tetrafenilarsonio, cloruro de trifenilmetilarsonio, cloruro de tetrafenilarsonio, bromuro de tetrafenilarsonio, y sus derivados poliméricos.

Ejemplos de sales de sulfonio incluyen compuestos (8):

25 [quím. 10]



en la que R^{41} a R^{43} cada uno representa un grupo hidrocarbonado e Y^- representa un anión.

30 Ejemplos de R^{41} a R^{43} incluyen grupos alquilo, grupos cicloalquilo, grupos alquenilo, grupos cicloalquenilo, grupos arilo, grupos alquilarilo y grupos aralquilo, y se prefieren los grupos alquilo, grupos arilo, o grupos aralquilo.

35 El número total de átomos de carbono de R^{41} a R^{43} es preferentemente de 4 a 100 por molécula de $\text{R}^{41}\text{R}^{42}\text{R}^{43}\text{S}^+$.

R^{41} a R^{43} pueden ser el mismo grupo o pueden ser grupos diferentes.

40 R^{41} a R^{43} pueden estar sustituidos con un grupo funcional inerte en condiciones de reacción. Aunque el grupo funcional inerte varía dependiendo de las condiciones de reacción, sus ejemplos incluyen un átomo de halógeno, un grupo éster, un grupo nitrilo, un grupo acilo, un grupo carboxilo y un grupo alcoxilo.

R^{41} a R^{43} se pueden combinar entre sí para formar un anillo heterocíclico que incluye un anillo heterocíclico que contiene nitrógeno.

45 R^{41} a R^{43} pueden ser parte de un compuesto polimérico.

Ejemplos de Y^- incluyen diversos aniones. Se prefiere un ion de halógeno y es más preferido un ion de flúor, un ion de cloro, o un ion de bromo.

50 Ejemplos del compuesto (8) incluyen yoduro de di-n-butilmetilsulfonio, un tetrafluoroborato de tri-n-butilsulfonio, un yoduro de dihexilmetilsulfonio, yoduro de dicitclohexilmetilsulfonio, cloruro de dodecilmetiletilsulfonio, y difluorotrimetilsilicato de tris(dietilamino)sulfonio.

55 Ejemplos de sales halógenas de metales alcalinos incluyen el LiF, LiCl, LiBr, NaF, NaCl, NaBr, KF, KCl, KBr, RbF, RbCl, RbBr, CsF, CsCl y CsBr.

Ejemplos de sales halógenas de metales alcalinos incluyen BeF_2 , BeCl_2 , BeBr_2 , CaF_2 , CaCl_2 , CaBr_2 , SrF_2 , SrCl_2 y RbSr_2 .

Ejemplos de sales halógenas de amonios incluyen NH_4F , NH_4Cl y NH_4Br .

Las resinas de intercambio de iones incluyen resinas de intercambio de iones de tipo catiónico y resinas de intercambio de iones de tipo aniónico. Ejemplos de productos disponibles en el mercado incluyen la serie DIAION (marca registrada) (fabricada por Mitsubishi Chemical Corporation), la serie Amberlite (marca registrada) (fabricada por Rohm and Haas Company) y la serie Amberlyst (marca registrada) (fabricada por Rohm and Haas Company).

Como resinas de intercambio de iones, en vista de la velocidad de reacción, se prefieren resinas de intercambio de iones de tipo aniónico en las que se usa un ion de halógeno como anión (resinas de intercambio de iones que tienen una estructura de sal halógena).

Ejemplos de compuestos de uno o más metales seleccionados del grupo constituido por estaño, titanio, aluminio, wolframio, molibdeno, circonio, y cinc incluyen compuestos de titanio (titanatos de tetrabutilo, titanatos de tetrapropilo, titanatos de tetraetilo, titanatos de tetrametilo, etc.), compuestos de organoestaño (octilato de estaño, óxido de monobutilestaño, tris(2-etilhexanoato) de monobutilestaño, óxido de dibutilestaño, laurato de dibutilestaño, diacetato de dibutilestaño, hidroxioóxido de monobutilestaño, etc.), óxido estannoso, haluros de estaño (cloruro estannoso, bromuro estannoso, yoduro estannoso, etc.), y cloruro de aluminio.

Los catalizadores de la reacción de transesterificación incluyen catalizadores alcalinos o ácidos (alcoholatos de metales alcalinos, butil-litio, ácido p-toluenosulfónico, ácido sulfúrico, ácido perclórico, BF_3 , etc.) y similares.

Como catalizador, en vista de la facilidad de manipulación a nivel industrial, reactividad, y selectividad hacia los productos objetivo, se prefiere una sal halógena.

La sal halógena preferentemente es uno o más miembros seleccionados del grupo que consiste en sales halógenas de metales alcalinos, sales halógenas de metales alcalino-térreos, sales halógenas de amonios, sales halógenas de amonios cuaternarios, y resinas de intercambio iónico que tienen una estructura de sal halógena.

Como sal halógena, en vista de la reactividad y utilización a escala industrial, se prefiere un fluoruro de un metal alcalino (NaF , KF , o similares) o un bromuro de amonio cuaternario.

La sal halógena puede estar sobre un soporte de un óxido metálico o un óxido compuesto. Ejemplos del compuesto incluyen la cal sodada.

(Promotor)

En el proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención, se prefiere obtener el compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato en presencia de un catalizador y un promotor. Usando el promotor, se puede mejorar la actividad del catalizador.

Como promotor, se usa un catalizador ácido sólido.

El catalizador ácido sólido es preferentemente al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en óxidos metálicos que tienen un punto ácido fuerte, heteropoliácidos, y resinas de intercambio catiónico.

Ejemplos de óxidos metálicos que tienen un punto ácido fuerte incluyen $\text{SiO}_2\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{SiO}_2\cdot\text{MgO}$, $\text{SiO}_2\cdot\text{ZrO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{B}_2\text{O}_3$, Al_2O_3 , ZrO_2 , $\text{ZnO}\cdot\text{ZrO}_2$, CeO_2 , Ce_2O_3 , y varias zeolitas. En vista de la fuerza del ácido y la selectividad de la reacción, se prefiere al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en óxido de cerio ($\text{CeO}_2/\text{Ce}_2\text{O}_3$), sílice-alúmina ($\text{SiO}_2\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$), γ -alúmina (Al_2O_3), sílice-magnesia ($\text{SiO}_2\cdot\text{MgO}$), zirconia (ZrO_2), sílice-zirconia ($\text{SiO}_2\cdot\text{ZrO}_2$), $\text{ZnO}\cdot\text{ZrO}_2$ y $\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{B}_2\text{O}_3$.

(Procedimiento para producir el compuesto (31))

El compuesto (31) se produce haciendo reaccionar el compuesto (1) con un compuesto (21), opcionalmente, en presencia de un catalizador.

[quím. 11]



Ejemplos del compuesto (21) incluyen un alcohol alifático monovalente que contiene flúor y un fenol monovalente que contiene flúor.

Como alcohol alifático monovalente que contiene flúor, en vista de la versatilidad de uso industrial, se prefiere un alcohol alifático saturado que contiene flúor y es más preferido un polifluoroalcanomonool que tiene de 2 a 10 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico.

Ejemplos del polifluoroalcanomonool que tienen de 2 a 10 átomos de carbono incluyen 2,2,2-trifluoroetanol, 2,2,3,3,3-pentafluoropropanol, 2,2,3,3-tetrafluoropropanol, 1-trifluorometil-2,2,2-trifluoro-1-etanol (hexafluoroisopropanol), 3,3,3-trifluoropropanol, 3-fluoropropanol, 2-fluoropropanol, 2-metil-2-fluoroetanol, 2,2,3,4,4,4-hexafluorobutanol, 2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentanol, 3,3,4,4,4-pentafluorobutanol, 4,4,5,5,5-pentafluoropentanol, 3,3,4,4,5,5,6,6,6-nonafluorohexanol, 2,2-difluoro-2-(1,1,2,2-tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etanol ($\text{CF}_3\text{CF}_2\text{OCF}_2\text{CF}_2\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{OH}$), 2,2-difluoro-2-(tetrafluoro-2-(tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etoxi)etanol ($\text{CF}_3\text{CF}_2\text{OCF}_2\text{CF}_2\text{OCF}_2\text{CF}_2\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{OH}$), 2,3,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,3,3,3-hexafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)propoxi)-1-propanol ($\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CF}_2\text{OCF}(\text{CF}_3)\text{CF}_2\text{OCF}(\text{CF}_3)\text{CH}_2\text{OH}$), y 2,2,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)-1-propanol ($\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CF}_2\text{OCF}(\text{CF}_3)\text{CH}_2\text{OH}$).

Como alcohol alifático monovalente que contiene flúor, en vista de la utilidad del compuesto (31), es más preferido un polifluoroalcanomonool que tiene de 2 a 6 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un oxígeno etérico. Específicamente, es más preferido 2,2,2-trifluoroetanol, 2,2,3,3,3-pentafluoropropanol, 2,2,3,3-tetrafluoropropanol, 1-trifluorometil-2,2,2-trifluoro-1-etanol (hexafluoroisopropanol), 3,3,3-trifluoropropanol, 3-fluoropropanol, 2-fluoropropanol, 2-metil-2-fluoroetanol, 2,2,3,4,4,4-hexafluorobutanol, 2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentanol, 2,2-difluoro-2-(1,1,2,2-tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etanol ($\text{CF}_3\text{CF}_2\text{OCF}_2\text{CF}_2\text{OCF}_2\text{CH}_2\text{OH}$), o 2,2,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)-1-propanol ($\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CF}_2\text{OCF}(\text{CF}_3)\text{CH}_2\text{OH}$), y lo más preferido es 2,2,2-trifluoroetanol, 2,2,3,3,3-pentafluoropropanol, 2,2,3,3-tetrafluoropropanol, 1-trifluorometil-2,2,2-trifluoro-1-etanol (hexafluoroisopropanol), 2,2,3,4,4,4-hexafluorobutanol, o 2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentanol.

Como fenol monovalente que contiene flúor, en vista de la utilidad del compuesto (31), se prefiere un fenol que contiene flúor.

La relación de la primera cantidad molar cargada del compuesto (21) a la primera cantidad molar cargada del compuesto (1) (compuesto (21)/compuesto (1)) es preferentemente superior a 1, más preferentemente de 1,5 o superior, y en particular preferentemente de 2 o superior, en vista de la mejora del rendimiento del compuesto (31). Al regular la relación por encima de 1, el equilibrio de reacción se desplaza hacia el lado del compuesto (31), mejorando así el rendimiento de la reacción.

La cantidad de catalizador en caso de que se use catalizador en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del catalizador, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la etapa de retirada del catalizador después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.

La cantidad de promotor en caso de que se use promotor en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del promotor, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la etapa de retirada del promotor después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.

Puesto que el compuesto (21) mayoritariamente tiene una baja compatibilidad con el compuesto (1), la reacción forma a veces un sistema heterogéneo en una fase temprana de la reacción. Por consiguiente, en la reacción, se puede usar un disolvente con el fin de promover la reacción. No obstante, cuando se consideran la eficiencia volumétrica de un reactor y la pérdida de producto objetivo en la etapa de separación del disolvente, se prefiere realizar la reacción sin ningún disolvente, si es posible.

El disolvente puede ser uno que esté presente de manera estable a la temperatura de reacción y que presente una alta solubilidad de los materiales de partida y, en vista de la capacidad de separación del compuesto (1), el compuesto (21), el compuesto (31), y los subproductos mediante destilación después de la reacción, se prefiere usar un disolvente que tenga un punto de ebullición diferente del de cada uno de estos compuestos o usar el compuesto (31) como disolvente.

Como disolvente, se prefieren compuestos de carbonato de diferentes de puntos de ebullición, el compuesto (31), y éteres que tienen un punto de ebullición relativamente alto. Sus ejemplos específicos incluyen etilencarbonato, propilencarbonato, carbonato de dimetilo, carbonato de dietilo, carbonato de dipropilo, carbonato de dibutilo, carbonato de dioctilo, glima, diglima, triglima y tetraglima.

Cuando se considera el efecto de usar el disolvente, la cantidad del disolvente es preferentemente una cantidad tal que la concentración del sustrato pasa del 10 al 80 % en masa. No obstante, en el caso de un sustrato en el que no se observa demasiado el efecto de usar un disolvente, considerando la separación se prefiere no usar disolvente (concentración de sustrato del 100 % en masa).

En la invención, al menos una parte de la reacción entre el compuesto (1) y el compuesto (21) preferentemente se lleva a cabo a una temperatura de reacción de 40 a 200 °C.

Cuando la temperatura de reacción es inferior a 40 °C, el rendimiento del compuesto de carbonato es extremadamente bajo. Cuando la temperatura de reacción supera los 200 °C, la disminución del rendimiento debido a la descomposición del compuesto (1) a usar como material de partida es notable. Cuando la temperatura cae dentro del intervalo anterior, se puede producir compuesto de carbonato con altos rendimientos a una velocidad de reacción adecuada para su uso industrial.

La temperatura de reacción es más preferentemente de 40 a 160 °C, más preferentemente de 50 a 150 °C, y en particular preferentemente de 60 a 140 °C.

La eficacia de la reacción se puede mejorar llevando a cabo la reacción a temperaturas de reacción diferentes en la fase temprana de reacción y en la fase tardía de reacción. Esto es debido a que las reacciones de sustitución de los dos grupos funcionales en el compuesto (1) suceden de forma escalonada y la velocidad de reacción de la primera etapa de la reacción de sustitución es elevada pero la velocidad de reacción de la segunda reacción de sustitución es comparativamente baja. Puesto que la primera etapa de la reacción de sustitución se produce fácilmente a una temperatura relativamente baja de 0 a 100 °C aproximadamente y es una reacción con una gran generación de calor durante un tiempo, preferentemente se deja que la reacción suceda a una temperatura relativamente baja en la fase temprana de reacción. La segunda etapa de la reacción de sustitución se lleva a cabo a una temperatura relativamente elevada de 50 a 200 °C en vista de la velocidad de reacción.

La presión de reacción normalmente es a presión atmosférica. Dependiendo de la presión de vapor del compuesto (21) a la temperatura de reacción, se prefiere aplicar presión.

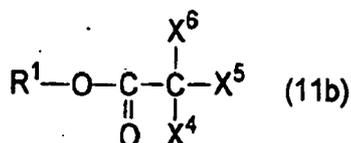
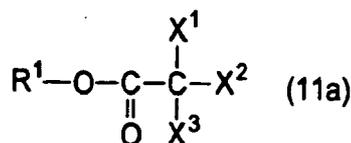
En la presente reacción, se forman $\text{CHX}^1\text{X}^2\text{X}^3$ y/o $\text{CHX}^4\text{X}^5\text{X}^6$ (cloroformo y similares), que son metanos halogenados que tienen un bajo punto de ebullición, a medida que se produce la reacción. Por consiguiente, con el fin de mejorar el rendimiento de reacción desplazando el equilibrio de reacción hacia el lado del compuesto (31) y completar la reacción estequiométricamente, se prefiere llevar a cabo la reacción retirando del sistema de reacción los $\text{CHX}^1\text{X}^2\text{X}^3$ y/o $\text{CHX}^4\text{X}^5\text{X}^6$ formados mediante destilación.

Como método para retirar los metanos halogenados mediante destilación, desde el punto de vista de la facilidad de implementación se prefiere un modo de destilación de la reacción que utiliza el hecho de que cada uno de los metanos halogenados tenga un bajo punto de ebullición en comparación con el compuesto (21) y el compuesto (31).

(Proceso para la producción del compuesto (32))

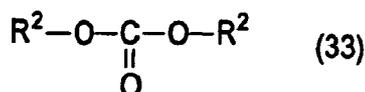
El compuesto (32) se produce preferentemente al reaccionar el compuesto (1) con el compuesto (21) opcionalmente en presencia de un catalizador para obtener un compuesto (11a) y/o compuesto (11b) (de aquí en adelante el compuesto (11a) y el compuesto (11b) se denominan de forma colectiva compuesto (11)) y a continuación la reacción del compuesto (11) con el compuesto (22).

[quím. 12]



Por otra parte, el compuesto (1), el compuesto (21), y el compuesto (22) se pueden hacer reaccionar al mismo tiempo. En ese caso, se obtiene como mezcla el compuesto (32), el compuesto (31), y el compuesto (33).

[quím. 13]



5 Ejemplos del compuesto (22) incluyen los alcoholes alifáticos monovalentes que contienen flúor y fenoles monovalentes que contienen flúor anteriormente mencionados. No obstante, como compuesto (22), se usa un alcohol diferente del compuesto (21).

10 Como alcohol alifático monovalente que contiene flúor, en vista de la utilidad del compuesto (32), se prefiere un fluoroalcanomonool que tiene de 2 a 6 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, y es más preferido un fluoroalcanomonool que tiene de 2 a 4 átomos de carbono sin átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico.

15 Como fluoroalcanomonool que tiene de 2 a 6 átomos de carbono, se prefiere 2,2,2-trifluoroetanol, 2,2,3,3,3-pentafluoropropanol, 2,2,3,3-tetrafluoropropanol, 1-trifluorometil-2,2,2-trifluoro-1-etanol (hexafluoroisopropanol), 3,3,3-trifluoropropanol, 3-fluoropropanol, 2-fluoropropanol, 2-metil-2-fluoroetanol, 2,2,3,4,4,4-hexafluorobutanol, 2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentanol, 2,2-difluoro-2-(1,1,2,2-tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etanol (CF₃CF₂OCF₂CF₂OCF₂CH₂OH), o 2,2,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)-1-propanol (CF₃CF₂CF₂OCF(CF₃)CH₂OH).

20 Como fluoroalcanomonool que tiene de 2 a 4 átomos de carbono, se prefiere 2,2,2-trifluoroetanol, 2,2,3,3,3-pentafluoropropanol, 2,2,3,3-tetrafluoropropanol, 1-trifluorometil-2,2,2-trifluoro-1-etanol (hexafluoroisopropanol), o 2,2,3,4,4,4-hexafluorobutanol.

25 Como fenol monovalente que contiene flúor, en vista de la utilidad del compuesto (32), se prefiere un fenol que contiene flúor.

30 La relación de las primeras cantidades molares cargadas del compuesto (21) y el compuesto (22) a la primera cantidad molar cargada del compuesto (1) ((compuesto (21) + compuesto (22))/compuesto (1)) es preferentemente superior a 1, más preferentemente de 1,5 o superior, y en particular preferentemente de 2 o superior.

35 Por otra parte, en vista de la mejora del rendimiento del compuesto (32), se prefiere que el compuesto (21) se haga reaccionar con el compuesto (1) a una relación de 1 equivalente molar o inferior a este último compuesto para formar selectivamente el compuesto (11) y a continuación el compuesto (22) se hace reaccionar con el compuesto (11) en una relación de 1 a 2 equivalentes molares a este último compuesto. Cuando la cantidad del compuesto (22) es inferior a un equivalente molar, el rendimiento del compuesto (32) objetivo se reduce. Cuando la cantidad es superior a 2 equivalentes molares, se forma el compuesto (33) mediante la reacción de intercambio de grupos éster entre el compuesto (32) y el compuesto (22) formados, de manera que el rendimiento del compuesto (32) objetivo se reduce.

40 La cantidad de catalizador en caso de que se use catalizador en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del catalizador, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la etapa de retirada del catalizador después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.

45 La cantidad de promotor en caso de que se use promotor en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del promotor, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la etapa de retirada del promotor después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.

50 Puesto que el compuesto (21) y el compuesto (22) mayoritariamente tienen una baja compatibilidad con el compuesto (1) y el compuesto (11), la reacción forma a veces un sistema heterogéneo en una fase temprana de la reacción. Por consiguiente, en la reacción, se puede usar un disolvente con el fin de promover la reacción. No obstante, cuando se consideran la eficiencia volumétrica de un reactor y la pérdida de producto objetivo en la etapa de separación del disolvente, se prefiere realizar la reacción sin ningún disolvente, si es posible.

55 El disolvente puede ser uno que esté presente de manera estable a la temperatura de reacción y que presente una alta solubilidad de los materiales de partida y, en vista de la capacidad de separación del compuesto (1), el compuesto (11), el compuesto (21), el compuesto (22), el compuesto (32), y los subproductos mediante destilación después de la reacción, se prefiere usar un disolvente que tenga un punto de ebullición diferente del de cada uno de estos compuestos o usar el compuesto (32) como disolvente.

Como disolvente, se prefieren compuestos de carbonato de diferentes puntos de ebullición, el compuesto (32), y éteres que tienen un punto de ebullición relativamente alto. Sus ejemplos específicos incluyen etilencarbonato, propilencarbonato, carbonato de dimetilo, carbonato de dietilo, carbonato de dipropilo, carbonato de dibutilo, carbonato de dioctilo, glima, diglima, triglima y tetraglima.

5 Cuando se considera el efecto de usar el disolvente, la cantidad del disolvente es preferentemente una cantidad tal que la concentración del sustrato pasa del 10 al 80 % en masa. No obstante, en el caso de un sustrato en el que no se observa demasiado el efecto de usar un disolvente, considerando la separación se prefiere no usar disolvente (concentración de sustrato del 100 % en masa).

10 En la invención, al menos una parte de la reacción entre el compuesto (1) y el compuesto (21) y/o el compuesto (22) preferentemente se lleva a cabo a una temperatura de reacción de 40 a 200 °C.

15 Cuando la temperatura de reacción es inferior a 40 °C, el rendimiento del compuesto de carbonato es extremadamente bajo. Cuando la temperatura de reacción supera los 200 °C, la disminución del rendimiento debido a la descomposición del compuesto (1) a usar como material de partida es notable. Cuando la temperatura cae dentro del intervalo anterior, se puede producir compuesto de carbonato con altos rendimientos a una velocidad de reacción adecuada para su uso industrial.

20 La temperatura de reacción es más preferentemente de 40 a 160 °C, más preferentemente de 50 a 150 °C, y en particular preferentemente de 60 a 140 °C.

25 La eficacia de la reacción se puede mejorar llevando a cabo la reacción a temperaturas de reacción diferentes en la fase temprana de reacción y en la fase tardía de reacción. En concreto, preferentemente la reacción de formación del compuesto (11) al reaccionar el compuesto (21) con el compuesto (1) es a una temperatura de reacción de 40 °C o inferior en vista de la mejora del rendimiento del compuesto (11). La reacción se puede llevar a cabo a una temperatura superior a 40 °C pero puesto que la reacción es demasiado vigorosa, pueden aumentar los subproductos o se puede formar el compuesto (31) que es un producto disustituido, por lo que en algunos casos el rendimiento del producto objetivo se reduce. En el caso en el que el compuesto (1) se hace reaccionar con el compuesto (21) a una temperatura de reacción de 40 °C o inferior, el compuesto (11) se puede sintetizar selectivamente incluso cuando el compuesto (21) se hace reaccionar con el compuesto (1) en una relación de 1 equivalente o superior a este último compuesto. No obstante, a menos que la reacción se lleve a cabo después de que el compuesto (21) sin reaccionar se haya retirado del sistema de reacción, antes de que se haga reaccionar el siguiente compuesto (22), se puede provocar la reducción del rendimiento del compuesto (32) objetivo mediante la producción del compuesto (31) como subproducto.

35 La reacción entre el compuesto (11) y el compuesto (22) preferentemente se lleva a cabo a una temperatura de reacción de 40 a 200 °C, y más preferentemente se lleva a cabo a una temperatura de reacción de 50 a 200 °C.

40 Así, puesto que la diferencia entre la velocidad de reacción de la primera etapa y la velocidad de reacción de la segunda etapa es grande, existe la ventaja de que el compuesto (11) se pueda sintetizar y se pueda aislar fácilmente como intermedio y el compuesto (22) asimétrico, que hasta ahora ha sido muy difícil de sintetizar, se puede sintetizar selectivamente utilizando la diferencia entre las velocidades de reacción.

45 La presión de reacción normalmente es a presión atmosférica. Dependiendo de la presión de vapor del compuesto (21) y del compuesto (22) a la temperatura de reacción, se prefiere aplicar presión.

50 En la presente reacción, se forman $\text{CHX}^1\text{X}^2\text{X}^3$ y/o $\text{CHX}^4\text{X}^5\text{X}^6$ (cloroformo y similares), que son metanos halogenados que tienen un bajo punto de ebullición, a medida que se produce la reacción. Por consiguiente, con el fin de mejorar el rendimiento de reacción desplazando el equilibrio de reacción hacia el lado del compuesto (31) y completar la reacción estequiométricamente, se prefiere llevar a cabo la reacción retirando del sistema de reacción los $\text{CHX}^1\text{X}^2\text{X}^3$ y/o $\text{CHX}^4\text{X}^5\text{X}^6$ formados mediante destilación.

55 Como método para retirar los metanos halogenados mediante destilación, desde el punto de vista de la facilidad de implementación se prefiere un modo de destilación de la reacción que utiliza el hecho de que cada uno de los metanos halogenados tenga un bajo punto de ebullición en comparación con el compuesto (21), el compuesto (11), el compuesto (22) y el compuesto (32).

60 (Proceso para la producción del compuesto (3a), compuesto (3b))

El compuesto (3a) y el compuesto (3b) se producen al reaccionar el compuesto (1) con un compuesto (23), opcionalmente, en presencia de un catalizador.

[quím. 14]

65 $\text{HO-R}^3\text{-OH}$ (23)

Ejemplos del compuesto (23) incluyen alcoholes alifáticos divalentes que contienen flúor y fenoles divalentes que contienen flúor.

5 El alcohol alifático divalente que contiene flúor es preferentemente un polifluoroalcanodiol que tiene de 3 a 64 átomos de carbono, más preferentemente un polifluoroalcanodiol que tiene de 3 a 14 átomos de carbono, lo más preferentemente un polifluoroalcanodiol que tiene de 3 a 10 átomos de carbono, que no tiene ningún átomo de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, en vista de la versatilidad de uso industrial.

10 El alcohol alifático divalente que contiene flúor es, en vista de la utilidad del compuesto (3a) y el compuesto (3b), preferentemente 3,3,3-trifluoro-1,2-propanodiol, 4,4,4,3,3-pentafluoro-1,2-butanodiol, 1,1,1,4,4,4-hexafluoro-2,3-butanodiol, 3,3,4,4-tetrafluoro-1,6-hexanodiol, 2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoro-1,6-hexanodiol, 3,3,4,4,5,5,6,6-octafluoro-1,8-octanodiol, o un compuesto representado mediante la siguiente fórmula (X):



15 en la que m es un número entero de 2 a 30.

Ejemplos de los fenoles divalentes que contienen flúor incluyen tetrafluorohidroquinona, tetrafluororesorcinol y 2,2-bis(4-hidroxifenil)-hexafluoropropano [bisfenol AF], y se prefiere 2,2-bis(4-hidroxifenil) hexafluoropropano, tetrafluorohidroquinona o tetrafluororesorcinol.

25 En el caso en que el producto objetivo es el compuesto (3a), con respecto a la relación de los sustratos (materiales de partida), la proporción del compuesto (23) es preferentemente de 0,1 a 10 equivalentes molares a compuesto (1) y, en vista de la eficiencia de la reacción y el rendimiento, es más preferentemente de 0,5 a 2 equivalentes molares.

30 En el caso en que el producto objetivo es el compuesto (3b), la relación de los sustratos varía dependiendo del peso molecular del compuesto (3b), pero la relación del compuesto (23) es preferentemente de 0,5 a 2 equivalentes molares a compuesto (1) y, en vista de la eficiencia de la reacción y el rendimiento, es más preferentemente de 0,75 a 1,5 equivalentes molares.

35 La cantidad de catalizador en caso de que se use catalizador en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del catalizador, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la etapa de retirada del catalizador después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.

40 La cantidad de promotor en caso de que se use promotor en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del promotor, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la etapa de retirada del promotor después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.

45 Puesto que el compuesto (23) mayoritariamente tiene una baja compatibilidad con el compuesto (1), la reacción forma a veces un sistema heterogéneo en una fase temprana de la reacción. Por consiguiente, en la reacción, se puede usar un disolvente con el fin de promover la reacción. No obstante, cuando se consideran la eficiencia volumétrica de un reactor y la pérdida de producto objetivo en la etapa de separación del disolvente, se prefiere realizar la reacción sin ningún disolvente, si es posible.

50 El disolvente puede ser uno que esté presente de manera estable a la temperatura de reacción y que presente una alta solubilidad de los materiales de partida y, en vista de la capacidad de separación del compuesto (1), el compuesto (23), el compuesto (3a), el compuesto (3b) y los subproductos mediante destilación después de la reacción, se prefiere usar un disolvente que tenga un punto de ebullición diferente del de cada uno de estos compuestos o usar el compuesto (3a) como disolvente.

55 Como disolvente, se prefieren compuestos de carbonato de diferentes de puntos de ebullición, el compuesto (3a), y éteres que tienen un punto de ebullición relativamente alto. Sus ejemplos específicos incluyen etilencarbonato, propilencarbonato, carbonato de dimetilo, carbonato de dietilo, carbonato de dipropilo, carbonato de dibutilo, carbonato de dioctilo, glima, diglima, triglima y tetraglima.

60 Cuando se considera el efecto de usar el disolvente, la cantidad del disolvente es preferentemente una cantidad tal que la concentración del sustrato pasa del 10 al 80 % en masa. No obstante, en el caso de un sustrato en el que no se observa demasiado el efecto de usar un disolvente, considerando la separación se prefiere no usar disolvente (concentración de sustrato del 100 % en masa).

65 La temperatura de reacción varía dependiendo de los sustratos, los catalizadores, y similares y por lo general es de 0 a 200 °C.

- La eficacia de la reacción se puede mejorar llevando a cabo la reacción a temperaturas de reacción diferentes en la fase temprana de reacción y en la fase tardía de reacción. Esto es debido a que las reacciones de sustitución de los dos grupos funcionales en el compuesto (1) suceden de forma escalonada y la velocidad de reacción de la primera etapa de la reacción de sustitución es elevada pero la velocidad de reacción de la segunda reacción de sustitución es comparativamente baja. Puesto que la primera etapa de la reacción de sustitución se produce fácilmente a una temperatura relativamente baja de 0 a 100 °C aproximadamente y es una reacción con una gran generación de calor durante un tiempo, preferentemente se deja que la reacción suceda a una temperatura relativamente baja en la fase temprana de reacción. La segunda etapa de la reacción de sustitución se lleva a cabo a una temperatura relativamente elevada de 50 a 200 °C en vista de la velocidad de reacción.
- En relación con esto, en caso de que el producto objetivo tenga una estructura anular estable de 5 miembros, tal como un etilencarbonato alquil sustituido, puesto que el efecto estabilizante por la ciclación es grande la reacción de la segunda etapa entre el compuesto (1) y el compuesto (23) también sucede a una velocidad de reacción muy alta y la reacción se completa en un corto periodo de tiempo incluso a una temperatura relativamente baja de 0 a 80 °C.
- La presión de reacción normalmente es a presión atmosférica. Dependiendo de la presión de vapor del compuesto (23) a la temperatura de reacción, se prefiere aplicar presión.
- En la presente reacción, se forman $\text{CHX}^1\text{X}^2\text{X}^3$ y/o $\text{CHX}^4\text{X}^5\text{X}^6$ (cloroformo y similares), que son metanos halogenados que tienen un bajo punto de ebullición, a medida que se produce la reacción. Por consiguiente, con el fin de mejorar el rendimiento de reacción desplazando el equilibrio de reacción hacia el lado del compuesto (3a) y del compuesto (3b) y completar la reacción estequiométricamente, se prefiere llevar a cabo la reacción retirando del sistema de reacción los $\text{CHX}^1\text{X}^2\text{X}^3$ y/o $\text{CHX}^4\text{X}^5\text{X}^6$ formados mediante destilación.
- Como método para retirar los metanos halogenados mediante destilación, desde el punto de vista de la facilidad de implementación se prefiere un modo de destilación de la reacción que utiliza el hecho de que cada uno de los metanos halogenados tenga un bajo punto de ebullición en comparación con el compuesto (23), el compuesto (3a), el compuesto (3b) y el compuesto (31).
- (Proceso para la producción de un compuesto de carbonato ramificado)
- El compuesto de carbonato ramificado se produce al reaccionar el compuesto (1) con un compuesto que contiene flúor que tiene más de dos grupos OH.
- Ejemplos del compuesto que contiene flúor que tiene más de dos grupos OH incluyen alcoholes alifáticos que contienen flúor trivalentes o con una valencia superior, fenoles que contienen flúor trivalentes o con una valencia superior, y sus mezclas y los compuestos que contienen flúor que tienen dos grupos OH anteriores. En el caso de las mezclas, el valor medio de los grupos OH terminales se toma como número de grupos OH.
- Ejemplos de los alcoholes alifáticos que contienen flúor trivalentes o con una valencia superior incluyen compuestos obtenidos al sustituir una parte o todos los átomo(s) de hidrógeno de los siguientes compuestos por átomo(s) de flúor: glicerina, diglicerina, poliglicerina, trimetilolpropano, 1,2,6-hexanotriol, pentaeritritol, tetrametilolciclohexano, metilglicósido, sorbitol, manitol, dulcitol, sacarosa, etc.
- Ejemplos de fenoles que contienen flúor trivalentes o con una valencia superior incluyen compuestos obtenidos al sustituir una parte o todos los átomo(s) de hidrógeno del fluoroglicinol por átomo(s) de flúor, compuestos obtenidos al sustituir una parte o todos los átomo(s) de hidrógeno de condensados de fenoles por átomo(s) de flúor.
- Ejemplos de los condensados de fenoles incluyen condensados iniciales de tipo resol en los que los fenoles se condensan y se combinan con un exceso de aldehídos en presencia de un catalizador alcalino; condensados iniciales de tipo bencílico que se producen mediante la reacción de un sistema no acuoso en el momento en el que se sintetizan los condensados iniciales de tipo resol; y condensados iniciales de tipo novolaca en los que el exceso de fenoles se hace reaccionar con formaldehídos en presencia de un catalizador ácido. El peso molecular de los condensados iniciales preferentemente es de 200 a 10.000 aproximadamente.
- La relación de los sustratos varía dependiendo del peso molecular del compuesto de carbonato ramificado, pero la relación entre el compuesto que tiene más de dos grupos OH es preferentemente de 0,5 a 2 equivalentes molares respecto al compuesto (1) y más preferentemente de 0,75 a 1,5 equivalentes molares.
- La cantidad de catalizador en caso de que se use catalizador en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del catalizador, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la etapa de retirada del catalizador después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.
- La cantidad de promotor en caso de que se use promotor en la reacción se selecciona de diversas maneras dependiendo del promotor, pero preferentemente es del 0,01 al 30 % en masa y, considerando la reactividad y la

etapa de retirada del promotor después de la reacción, es más preferentemente del 0,1 al 10 % en masa basado en el sustrato.

5 Puesto que el compuesto que contiene flúor que tiene más de dos grupos OH mayoritariamente tiene una baja compatibilidad con el compuesto (1), la reacción forma a veces un sistema heterogéneo en una fase temprana de la reacción. Por consiguiente, en la reacción, se puede usar un disolvente con el fin de promover la reacción. No obstante, cuando se consideran la eficiencia volumétrica de un reactor y la pérdida de producto objetivo en la etapa de separación del disolvente, se prefiere realizar la reacción sin ningún disolvente, si es posible.

10 El disolvente puede ser uno que esté presente de manera estable a la temperatura de reacción y que presente una alta solubilidad de los materiales de partida y, en vista de la capacidad de separación del compuesto (1), el compuesto que contiene flúor que tiene más de dos grupos OH, el compuesto de carbonato ramificado, y los subproductos mediante destilación después de la reacción, se prefiere usar un disolvente que tenga un punto de ebullición diferente del de cada uno de estos compuestos o usar el compuesto (3a) como disolvente.

15 Como disolvente, se prefieren compuestos de carbonato de diferentes de puntos de ebullición, el compuesto (3a), y éteres que tienen un punto de ebullición relativamente alto. Sus ejemplos específicos incluyen etilencarbonato, propilencarbonato, carbonato de dimetilo, carbonato de dietilo, carbonato de dipropilo, carbonato de dibutilo, carbonato de dioctilo, glima, diglima, triglima y tetraglima.

20 Cuando se considera el efecto de usar el disolvente, la cantidad del disolvente es preferentemente una cantidad tal que la concentración del sustrato pasa del 10 al 80 % en masa. No obstante, en el caso de un sustrato en el que no se observa demasiado el efecto de usar un disolvente, considerando la separación se prefiere no usar disolvente (concentración de sustrato del 100 % en masa).

25 La temperatura de reacción varía dependiendo de los sustratos, los catalizadores, y similares y por lo general es de 0 a 200 °C

30 La eficacia de la reacción se puede mejorar llevando a cabo la reacción a temperaturas de reacción diferentes en la fase temprana de reacción y en la fase tardía de reacción. Esto es debido a que las reacciones de sustitución de los dos grupos funcionales en el compuesto (1) suceden de forma escalonada y la velocidad de reacción de la primera etapa de la reacción de sustitución es elevada pero la velocidad de reacción de la segunda reacción de sustitución es comparativamente baja. Puesto que la primera etapa de la reacción de sustitución se produce fácilmente a una temperatura relativamente baja de 0 a 100 °C aproximadamente y es una reacción con una gran generación de calor durante un tiempo, preferentemente se deja que la reacción suceda a una temperatura relativamente baja en la fase temprana de reacción. La segunda etapa de la reacción de sustitución se lleva a cabo a una temperatura relativamente elevada de 50 a 200 °C en vista de la velocidad de reacción.

40 La presión de reacción normalmente es a presión atmosférica. Dependiendo de la presión de vapor del compuesto que tiene más de dos grupos OH a la temperatura de reacción, se prefiere aplicar presión.

45 En la presente reacción, se forma cloroformo, que es un metano halogenado que tiene un bajo punto de ebullición, a medida que se produce la reacción. Por consiguiente, con el fin de mejorar el rendimiento de reacción desplazando el equilibrio de reacción hacia el lado del compuesto de carbonato ramificado y completar la reacción estequiométricamente, se prefiere llevar a cabo la reacción retirando del sistema de reacción el cloroformo formado mediante destilación.

50 Como método para retirar los metanos halogenados mediante destilación, desde el punto de vista de la facilidad de implementación se prefiere un modo de destilación de la reacción que utiliza el hecho de que cada uno de los metanos halogenados tenga un bajo punto de ebullición en comparación con el compuesto que tiene más de dos grupos OH y el compuesto de carbonato ramificado.

55 Puesto que el proceso para producir un compuesto de carbonato de la invención como se ha descrito anteriormente es un proceso en el que el compuesto (1) se hace reaccionar con un compuesto que contiene flúor que tiene un grupo OH para obtener un compuesto de carbonato, se puede preparar selectivamente un di(fluroalquil) carbonato o un di(fluroalril) carbonato simétricos y un di(fluroalquil) carbonato o un di(fluroalril) carbonato asimétricos sin ninguna inhibición en altos rendimientos modificando convenientemente el compuesto que contiene flúor que tiene un grupo OH en un proceso de reacción.

60 Por otra parte, puesto que el proceso para la producción de un compuesto de carbonato de la invención es un proceso en el que el compuesto (1) se hace reaccionar con el compuesto que contiene flúor que tiene dos o más grupos OH para obtener un compuesto de carbonato, se pueden preparar selectivamente un carbonato cíclico que contiene flúor y un policarbonato que contiene flúor sin ninguna inhibición en altos rendimientos modificando convenientemente el compuesto que contiene flúor que tiene dos o más grupos OH en un proceso de reacción.

65

Por otra parte, puesto que el subproducto es un compuesto orgánico que tiene un bajo punto de ebullición, tal como cloroformo, el proceso de producción se puede simplificar, por ejemplo, los subproductos se pueden retirar fácilmente del sistema de reacción, a diferencia de otros métodos tales como un método que usa fosgeno.

- 5 Además, al cambiar el compuesto (1) por hexacloroacetona, simultáneamente se puede producir cloroformo que es útil a nivel industrial.

Por otra parte, mediante el uso de un compuesto parcialmente fluorado como compuesto (1), se pueden producir simultáneamente diclorofluorometano (R21), clorodifluorometano (R22), o similares útiles a nivel industrial.

10

Ejemplos

La presente invención se ilustra con mayor detalle en referencia a los siguientes ejemplos, pero no se debe interpretar que la invención está limitada por ellos.

15

Los Ejemplos 1 a 13 son los Ejemplos de la invención.

(Cromatografía de gases)

- 20 El análisis sobre un cromatógrafo (de aquí en adelante denominado CG) se realizó usando un modelo 6890 fabricado por Agilent Company.

Ejemplo 1

- 25 Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexacloroacetona, 392 g (2,97 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, y 4 g de KF (fluoruro potásico) en un reactor de vidrio de 500 ml equipado con un agitador, un condensador de reflujo a 20 °C, y una línea de destilación, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 10 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 645 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 98 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 1 con los rendimientos mostrados en la Tabla 1.

35

De los resultados mostrados en la Tabla 1, la tasa de conversión de la hexacloroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(\text{=O})$ basado en la hexacloroacetona fue del 93 %, y el rendimiento del cloroformo fue del 96 %.

40

[Tabla 1]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexacloroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	20,9 %	134,1 g
Cloroformo	35,3 %	226 g
Tetracloruro de carbono	0,03 %	0,2 g
$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(\text{=O})$	41,6 %	267 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(\text{=O})\text{CCl}_3$	2,1 %	13,3 g
Otros	0,07 %	0,4 g

Ejemplo 2

- 45 Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexacloroacetona, 392 g (2,97 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, y 4 g de bromuro de tetrabutilamonio (denominado en lo sucesivo TBAB) en un reactor similar al del Ejemplo 1, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 20 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 625 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 95 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 2 con los rendimientos mostrados en la Tabla 2.

50

- 55 De los resultados mostrados en la Tabla 2, la tasa de conversión de la hexacloroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(\text{=O})$ basado en la hexacloroacetona fue del 89 %, y el rendimiento del cloroformo

fue del 90 %.

[Tabla 2]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexafluoroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	20,2 %	125,2 g
Cloroformo	34,2 %	212,5 g
Tetracloruro de carbono	0,03 %	0,2 g
$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$	41,2 %	255,8 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CCl}_3$	4,3 %	26,9 g
Otros	0,07 %	0,4 g

5 Ejemplo 3

Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexafluoroacetona, 45,5 g (0,99 mol) de etanol, y 4 g de KF en un reactor similar al del Ejemplo 1, el conjunto se mantuvo en agitación a 30 °C durante 1 hora. A continuación, se añadieron 130,7 g (0,99 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, la temperatura se eleva gradualmente, y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 10 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 431,1 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 97,5 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 3 con los rendimientos mostrados en la Tabla 3.

A partir de los resultados que se muestran en la Tabla 3, la tasa de conversión de la hexafluoroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_3$ basado en la hexafluoroacetona fue del 74 %, y el rendimiento de cloroformo fue del 93 %.

[Tabla 3]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexafluoroacetona	0 %	0 g
Etanol	10 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	2,9 %	12,4 g
Cloroformo	51,7 %	220,9 g
Tetracloruro de carbono	0,1 %	0,4 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_3$	35,0 %	149,6 g
Otros	10,3 %	43,8 g

25 Ejemplo 4

Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexafluoroacetona, 392 g (2,97 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, y 4 g de CsF en un reactor similar al del Ejemplo 1, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 20 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 634 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 96 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 4 con los rendimientos mostrados en la Tabla 4.

De los resultados mostrados en la Tabla 4, la tasa de conversión de la hexafluoroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$ basado en la hexafluoroacetona fue del 93 %, y el rendimiento de cloroformo fue del 92 %.

[Tabla 4]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexafluoroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	19,9 %	125,2 g
Cloroformo	34,5 %	217,5 g
Tetracloruro de carbono	0,03 %	0,2 g

$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$	42,2 %	265,8 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CCl}_3$	2,7 %	16,9 g
Otros	0,67 %	4,4 g

Ejemplo 5

- 5 Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexacloroacetona, 262 g (1,98 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, 2 g de KF, y 2 g de óxido de cerio ($\text{CeO}/\text{Ce}_2\text{O}_3$; fabricado por Daiichi Kigenso Kagaku Kogyo Co., Ltd.) en un reactor similar al del Ejemplo 1, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 20 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 517 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 98 %).
- 10 Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 5 con los rendimientos mostrados en la Tabla 5.
- 15 De los resultados mostrados en la Tabla 5, la tasa de conversión de la hexacloroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$ basado en la hexacloroacetona fue del 93 %, y el rendimiento del cloroformo fue del 94 %.

[Tabla 5]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexacloroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	1,3 %	6,5 g
Cloroformo	43,2 %	221,8 g
Tetracloruro de carbono	0,03 %	0,2 g
$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$	52,3 %	268,0 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CCl}_3$	2,4 %	12,5 g
Otros	10,77 %	4,0 g

- 20
- Ejemplo 6
- 25 Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexacloroacetona, 262 g (1,98 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, 2 g de KF, y 2 g de sílice-alúmina ($\text{SiO}_2\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$; fabricado por Nikki Chemical Co., Ltd.) en un reactor similar al del Ejemplo 1, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 20 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 518 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 98 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 6 con los rendimientos mostrados en la Tabla 6.
- 30

- 35 De los resultados mostrados en la Tabla 6, la tasa de conversión de la hexacloroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$ basado en la hexacloroacetona fue del 94 %, y el rendimiento del cloroformo fue del 96 %.

[Tabla 6]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexacloroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	0,7 %	3,6 g
Cloroformo	44,1 %	226,6 g
Tetracloruro de carbono	0,04 %	0,2 g
$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$	52,7 %	271,0 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CCl}_3$	1,5 %	7,5 g
Otros	0,96 %	5,1 g

40

Ejemplo 7

Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexafluoroacetona, 262 g (1,98 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, 2 g de KF, y 2 g de ZnO·ZrO₂ (fabricado por Daiichi Kagaku Kigenso Kogyo Co., Ltd.) en un reactor similar al del Ejemplo 1, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 20 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 518 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 98 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 7 con los rendimientos mostrados en la Tabla 7.

De los resultados mostrados en la Tabla 7, la tasa de conversión de la hexafluoroacetona fue del 100 %, el rendimiento de (CHF₂CF₂CH₂O)₂C(=O) basado en la hexafluoroacetona fue del 95 %, y el rendimiento del cloroformo fue del 96 %.

[Tabla 7]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexafluoroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	0,6 %	3,3 g
Cloroformo	44,2 %	227,2 g
Tetracloruro de carbono	0,04 %	0,2 g
(CHF ₂ CF ₂ CH ₂ O) ₂ C(=O)	52,9 %	272,0 g
CHF ₂ CF ₂ CH ₂ OC(=O)CCl ₃	1,4 %	7,0 g
Otros	0,86 %	4,3 g

Ejemplo 8

Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexafluoroacetona, 262 g (1,98 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, 2 g de KF, y 2 g de óxido de circonio (ZrO₂, fabricado por Daiichi Kagaku Kigenso Kogyo Co., Ltd.) en un reactor de presión hermético de 500 ml hecho de Hastelloy, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 140 °C durante 10 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan 527 g de un líquido en bruto recuperado presente en el reactor (tasa de recuperación: 99,8 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 8 con los rendimientos mostrados en la Tabla 8.

De los resultados mostrados en la Tabla 8, la tasa de conversión de la hexafluoroacetona fue del 100 %, el rendimiento de (CHF₂CF₂CH₂O)₂C(=O) basado en la hexafluoroacetona fue del 99 %, y el rendimiento del cloroformo fue del 99 %.

[Tabla 8]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexafluoroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	0,2 %	1,1 g
Cloroformo	44,9 %	235 g
Tetracloruro de carbono	0,04 %	0,2 g
(CHF ₂ CF ₂ CH ₂ O) ₂ C(=O)	54,3 %	284 g
CHF ₂ CF ₂ CH ₂ OC(=O)CCl ₃	0,4 %	2,3 g
Otros	0,16 %	0,4 g

Ejemplo 9

Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexafluoroacetona, 198 g (1,98 mol) de 2,2,2-trifluoroetanol, 2 g de KF, y 2 g de óxido de circonio (ZrO₂, fabricado por Daiichi Kagaku Kigenso Kogyo Co., Ltd.) en un reactor de presión hermético de 500 ml hecho de Hastelloy, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 140 °C durante 10 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan 462 g de un líquido en bruto recuperado presente en el reactor (tasa de recuperación: 99,6 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 9 con los rendimientos mostrados en la Tabla 9.

De los resultados mostrados en la Tabla 9, la tasa de conversión de la hexacloroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(CF_3CH_2O)_2C(=O)$ basado en la hexacloroacetona fue del 99 %, y el rendimiento de cloroformo fue del 99 %.

5

[Tabla 9]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexacloroacetona	0 %	0 g
2,2,2-Trifluoroetanol	0,12 %	0,6 g
Cloroformo	51,1 %	234 g
Tetracloruro de carbono	0,04 %	0,2 g
$(CF_3CH_2O)_2C(=O)$	48,3 %	221 g
$CF_3CH_2OC(=O)CCl_3$	0,3 %	1,4 g
Otros	0,14 %	0,8 g

Ejemplo 10

Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexacloroacetona, 333 g (1,98 mol) de 1,1,1,3,3,3-hexafluoroisopropanol, 4 g de KF, y 4 g de sílice-alúmina ($SiO_2 \cdot Al_2O_3$: fabricado por Nikki Chemical Co., Ltd.) en un reactor de presión hermético de 500 ml hecho de Hastelloy, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 140 °C durante 20 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan 599 g de un líquido en bruto recuperado presente en el reactor (tasa de recuperación: 99,4 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 10 con los rendimientos mostrados en la Tabla 10.

De los resultados mostrados en la Tabla 10, la tasa de conversión de la hexacloroacetona fue del 50 %, el rendimiento de $((CF_3)_2CHO)_2C(=O)$ basado en la hexacloroacetona fue del 15 %, y el rendimiento de cloroformo fue del 32 %.

20

[Tabla 10]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexacloroacetona	22,0 %	130 g
1,1,1,3,3,3-Hexafluoroisopropanol	38,1 %	225 g
Cloroformo	12,8 %	76 g
Tetracloruro de carbono	0,08 %	0,5 g
$((CF_3)_2CHO)_2C(=O)$	9,0 %	53 g
$(CF_3)_2CHOC(=O)CCl_3$	17,9 %	106 g
Otros	0,12 %	0,5 g

Ejemplo 11

25

En un reactor de vidrio de 500 ml equipado con un agitador, un condensador de reflujo a 20 °C, y una línea de destilación se cargaron 4 g de NaH, y a continuación se añadieron 262 g (1,98 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol lentamente gota a gota en un periodo de 30 minutos. Después de completar la adición gota a gota, se añadieron 262 g (0,99 mol) de hexacloroacetona gota a gota enfriando con un baño de agua para que la temperatura interior no alcanzase 50 °C o superior. Después de completar la adición gota a gota, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C durante 10 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan 517 g de un líquido en bruto recuperado presente en el reactor (tasa de recuperación: 98,0 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 11 con los rendimientos mostrados en la Tabla 11.

30

De los resultados mostrados en la Tabla 11, la tasa de conversión de la hexacloroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(CHF_2CF_2CH_2O)_2C(=O)$ basado en la hexacloroacetona fue del 2 %, y el rendimiento de cloroformo fue del 49 %.

40

[Tabla 11]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexacloroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	24,7 %	126 g
Cloroformo	22,9 %	117 g

Tetracloruro de carbono	0,06 %	0,3 g
$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$	1,1 %	5,6 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CCl}_3$	51,1 %	261 g
Otros	0,14 %	1,1 g

Ejemplo 12

5 En un reactor de vidrio de 500 ml equipado con un agitador, un condensador de reflujo a 20 °C, y una línea de destilación se cargaron 4 g de Na, y a continuación se añadieron 262 g (1,98 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol lentamente gota a gota durante un periodo de 30 minutos. Después de completar la adición gota a gota, se añadieron 262 g (0,99 mol) de hexafluoroacetona gota a gota enfriando con un baño de agua para que la temperatura interior no alcanzase 50 °C o superior. Después de completar la adición gota a gota, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C durante 10 horas.

10 Después de que se haya completado la reacción, se recuperan 516 g de un líquido en bruto recuperado presente en el reactor (tasa de recuperación: 98,0 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 12 con los rendimientos mostrados en la Tabla 12.

15 De los resultados mostrados en la Tabla 12, la tasa de conversión de la hexafluoroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$ basado en la hexafluoroacetona fue del 2 %, y el rendimiento de cloroformo fue del 50 %.

[Tabla 12]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexafluoroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	24,3 %	124 g
Cloroformo	23,3 %	119 g
Tetracloruro de carbono	0,06 %	0,3 g
$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$	1,23 %	6,3 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CCl}_3$	50,9 %	260 g
Otros	0,21 %	1,4 g

20 Ejemplo 13

Después de cargar 262 g (0,99 mol) de hexafluoroacetona, 262 g (1,98 mol) de 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol, 2 g de KF, y 2 g de una resina de intercambio de iones de tipo aniónico (Amberlyte IRA-900, Cl-form fabricado por Rohm and Haas Company) en un reactor similar al del Ejemplo 1, la temperatura se eleva gradualmente con agitación y se lleva a cabo una reacción a una temperatura interna de 100 °C. Mientras el cloroformo formado por la reacción se retira mediante destilación a través de la línea de destilación, la reacción se lleva a cabo durante 20 horas. Después de que se haya completado la reacción, se recuperan las fracciones destiladas procedentes de la línea de destilación y un líquido de reacción en bruto presentes en el reactor para obtener 523 g de un líquido en bruto recuperado (tasa de recuperación: 99 %). Como resultado del análisis en CG de un componente orgánico recuperado mediante destilación simple del líquido en bruto recuperado al vacío, se confirma que se habían formado los compuestos mostrados en la Tabla 13 con los rendimientos mostrados en la Tabla 13.

35 De los resultados mostrados en la Tabla 13, la tasa de conversión de la hexafluoroacetona fue del 100 %, el rendimiento de $(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$ basado en la hexafluoroacetona fue del 97 %, y el rendimiento del cloroformo fue del 98 %.

[Tabla 13]

Compuesto	Composición del CG (% en masa)	Rendimiento
Hexafluoroacetona	0 %	0 g
2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol	0,5 %	2,6 g
Cloroformo	44,6 %	231,3 g
Tetracloruro de carbono	0,05 %	0,3 g
$(\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{O})_2\text{C}(=\text{O})$	53,8 %	279,0 g
$\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OC}(=\text{O})\text{CCl}_3$	1,0 %	5,4 g
Otros	0,05 %	0,4 g

40 Esta solicitud se basa en la Solicitud de Patente Japonesa N° 2007-312655 presentada el 3 de diciembre de 2007, la Solicitud de Patente Japonesa N° 2007-321773 presentada el 13 de diciembre de 2007 y la Solicitud de Patente

Japonesa N° 2008-208727 presentada el 13 de agosto de 2008.

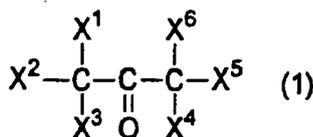
Aplicabilidad industrial

- 5 Los compuestos de carbonato que contienen flúor obtenidos por el proceso de producción de la invención se pueden aplicar a diversos usos y son útiles como disolventes orgánicos, materias primas de resinas, materias primas para productos farmacéuticos y productos químicos agrícolas, y similares. Por otra parte, los compuestos de carbonato aromáticos que contienen flúor también son útiles como medios resistentes al calor.
- 10 En particular, los carbonatos cíclicos que contienen flúor obtenidos por el proceso de producción de la invención son industrialmente muy útiles como disolventes aplicables a diversos usos, electrolitos, eliminadores de resistencia, procesadores de fibras acrílicas, agentes hidroxietilantes, materias primas para productos farmacéuticos, endurecedores de suelo, y el similares.
- 15 Por otra parte, los policarbonatos que contienen flúor obtenidos por el proceso de producción de la invención son útiles como oligómeros que tienen un grupo OH reactivo en el extremo, como materias primas para diversos materiales poliméricos tales como poliuretanos altamente funcionales, poliésteres, policarbonatos, y resinas epoxi, diluyentes reactivos, plastificantes reactivos, y similares.

REIVINDICACIONES

1. Un proceso para la producción de un compuesto de carbonato que comprende la reacción de un compuesto representado mediante la siguiente fórmula (1) con un compuesto que contiene flúor que tiene al menos un grupo OH en presencia de un catalizador para obtener un compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato:

[quím. 1]



10

en la que X¹ a X⁶ cada uno representa un átomo de cloro, y en donde el compuesto que contiene flúor que tiene al menos un grupo OH es un polifluoroalcanomonool que tiene de 2 a 10 átomos de carbono sin átomos de flúor en la posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico, o un polifluoroalcanodiol que tiene de 3 a 10 átomos de carbono, que no tiene átomos de flúor en posición α y que puede tener un átomo de oxígeno etérico.

15

2. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con la reivindicación 1, en el que el catalizador comprende una sal halógena.

20

3. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con la reivindicación 2, en el que la sal halógena comprende uno o más miembros seleccionados del grupo constituido por sales halógenas de metales alcalinos, sales halógenas de metales alcalino-térreos, sales halógenas de amonios, sales halógenas de amonios cuaternarios y resinas de intercambio iónico que tienen una estructura de sal halógena.

25

4. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con las reivindicaciones 2 o 3, en el que la sal halógena es un fluoruro de un metal alcalino.

30

5. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4, en el que la reacción se lleva a cabo en presencia del catalizador y de un promotor, en el que el promotor es un catalizador ácido sólido.

35

6. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con la reivindicación 5, en el que el catalizador ácido sólido comprende al menos un miembro seleccionado del grupo constituido por óxidos metálicos que tienen un punto ácido fuerte, heteropoliácidos y resinas de intercambio catiónico.

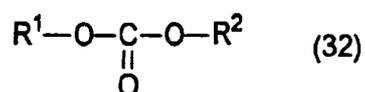
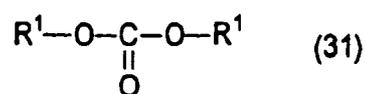
40

7. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con la reivindicación 6, en el que los óxidos metálicos que tienen un punto ácido fuerte comprenden al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en óxido de cerio (CeO₂/Ce₂O₃), sílice-alúmina (SiO₂·Al₂O₃), γ-alúmina (Al₂O₃), sílice-magnesia (SiO₂·MgO), zirconia (ZrO₂), sílice-zirconia (SiO₂·ZrO₂), ZnO·ZrO₂ y Al₂O₃·B₂O₃.

45

8. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7, en el que el compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato es un compuesto representado mediante la siguiente fórmula (31) o un compuesto representado mediante la siguiente fórmula (32):

[quím. 2]



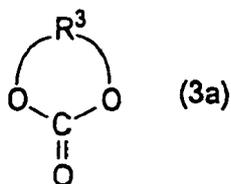
50

en las que R¹ y R² cada uno representa un grupo hidrocarbonado alifático monovalente que contiene flúor o un

grupo hidrocarbonado aromático monovalente que contiene flúor, siempre que R¹ y R² no sean el mismo grupo.

9. El proceso para la producción de un compuesto de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7, en el que el compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato es un compuesto de carbonato cíclico representado mediante la siguiente fórmula (3a):

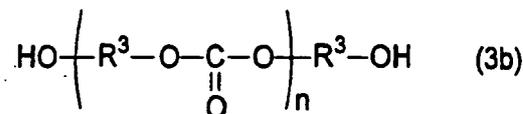
[quím. 3]



en la que R³ representa un grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático divalente que contiene flúor.

10. El proceso para la producción de un compuesto de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7, en el que el compuesto que contiene flúor que tiene un enlace carbonato es un compuesto de carbonato cíclico representado mediante la siguiente fórmula (3b):

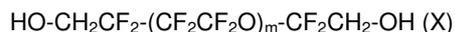
[quím. 4]



en la que R³ representa un grupo hidrocarbonado alifático divalente que contiene flúor o un grupo hidrocarbonado aromático divalente que contiene flúor.

11. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8, en el que el compuesto que contiene flúor que tiene al menos un grupo OH comprende al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en 2,2,2-trifluoroetanol, 2,2,3,3,3-pentafluoropropanol, 2,2,3,3-tetrafluoropropanol, 1-trifluorometil-2,2,2-trifluoro-1-etanol (hexafluoroisopropanol), 2,2,3,4,4,4-hexafluorobutanol, 2,2,3,3,4,4,5,5-octafluoropentanol, 2,2-difluoro-2-(1,1,2,2-tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etanol (CF₃CF₂OCF₂CF₂OCF₂CH₂OH), 2,2-difluoro-2-(tetrafluoro-2-(tetrafluoro-2-(pentafluoroetoxi)etoxi)etoxi)etanol (CF₃CF₂OCF₂CF₂OCF₂CF₂OCF₂CH₂OH), 2,3,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,3,3,3-hexafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)propoxi)-1-propanol (CF₃CF₂CF₂OCF(CF₃)CF₂OCF(CF₃)CH₂OH), 2,2,3,3-tetrafluoro-2-(1,1,2,2,3,3,3-heptafluoropropoxi)-1-propanol (CF₃CF₂CF₂OCF(CF₃)CH₂OH), y fenoles que contienen flúor.

12. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7, 9, y 10, en el que el compuesto que contiene flúor que tiene al menos un grupo OH comprende al menos un miembro seleccionado del grupo que consiste en 3,3,3-trifluoro-1,2-propanodiol, 4,4,4,3,3-pentafluoro-1,2-butanodiol, 1,1,1,4,4,4-hexafluoro-2,3-butanodiol, 3,3,4,4-tetrafluoro-1,6-hexanodiol, 3,3,4,4,5,5,6,6-octafluoro-1,8-octanodiol, tetrafluorohidroquinona, tetrafluororesorcinol, 2,2-bis(4-hidroxifenil)-hexafluoropropano y un compuesto representado por la siguiente fórmula (X):



en la que m es un número entero de 2 a 30.

13. El proceso para la producción de un compuesto de carbonato de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12, en el que la reacción se lleva a cabo, con la retirada del CHX¹X²X³ y/o del CHX⁴X⁵X⁶ formados del sistema de reacción, mediante destilación.