

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 668 080**

51 Int. Cl.:

C07D 403/14 (2006.01)

C07D 209/46 (2006.01)

C08L 67/00 (2006.01)

C08J 5/18 (2006.01)

A23L 3/3436 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **12.11.2010** **PCT/US2010/056585**

87 Fecha y número de publicación internacional: **19.05.2011** **WO11060297**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **12.11.2010** **E 10830816 (4)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **18.04.2018** **EP 2499134**

54 Título: **Depuradores de oxígeno, composición que comprende los depuradores y artículos producidos a partir de las composiciones**

30 Prioridad:

13.11.2009 US 261219 P

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

16.05.2018

73 Titular/es:

PLASTIPAK PACKAGING, INC. (100.0%)
41605 Ann Arbor Road
Plymouth, MI 48170, US

72 Inventor/es:

DESHPANDE, GIRISH, NILKANTH

74 Agente/Representante:

ISERN JARA, Jorge

ES 2 668 080 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

Depuradores de oxígeno, composición que comprende los depuradores y artículos producidos a partir de las composiciones

Referencia cruzada a solicitudes relacionadas

Antecedentes

Muchos polímeros usados en materiales de empaquetado y otros artículos son permeables al oxígeno. Cuando el oxígeno atraviesa una composición polimérica o artículo, puede provocar un daño oxidativo a los contenidos del paquete. Es por lo tanto deseable para ciertas composiciones poliméricas y artículos tener capacidad depuradora de oxígeno, de tal manera que cuando el oxígeno atraviesa la composición o artículo, el daño oxidativo puede ser atenuado.

Se conoce en la técnica el hecho de incluir un depurador de oxígeno en la estructura de empaquetado para la protección de los materiales sensibles al oxígeno. Se considera que tales depuradores reaccionan con el oxígeno que está atrapado en el paquete o que atraviesa desde el exterior del paquete, extendiéndose de esta manera a la duración de los contenidos del paquete. Estos paquetes incluyen películas, botellas, envases y similares. Alimentos, bebidas (tales como cerveza y zumos de frutas), cosméticos, medicinas y similares, son particularmente sensibles a la exposición al oxígeno y requieren elevadas propiedades de barrera al oxígeno para conservar la frescura de los contenidos del paquete y evitar cambios en el sabor, textura y color.

Por lo tanto, existe una necesidad de compuestos y composiciones que tengan una capacidad depuradora de oxígeno mejorada. Estas y otras necesidades se satisfacen por la presente invención.

Sumario

De conformidad con el(los) fin(es) de la invención, según se realiza y se describe en general en el presente documento, la invención, en un aspecto, se refiere a moléculas depuradoras de oxígeno, composiciones que comprenden las moléculas y artículos preparados a partir de las composiciones.

Se divulgan también composiciones poliméricas que comprenden las moléculas depuradoras de oxígeno divulgadas.

Se divulgan también artículos preparados a partir de los polímeros y composiciones divulgados.

Se divulgan también métodos para producir moléculas depuradoras de oxígeno y composiciones poliméricas que comprenden las moléculas depuradoras de oxígeno divulgadas.

Se divulgan también los productos de los métodos divulgados.

Ventajas adicionales de la invención se expondrán en parte en la siguiente descripción y, en parte, serán evidentes a partir de la descripción o pueden aprenderse por la práctica de la invención. Las ventajas de la invención se realizarán y alcanzarán mediante los elementos y combinaciones particularmente señaladas en las reivindicaciones anexas. Se debe entender que tanto la anterior descripción general como la siguiente descripción detallada, son ejemplares y explicativas únicamente y no restrictivas de la invención, según se reivindica.

Breve descripción de los dibujos

La Figura 1 muestra datos de depuración de O₂ Oxysense™ para DCX-600 (depurador hexafuncional) y placas que contienen DC-300 (depurador tetrafuncional), como se describe en el Ejemplo 2.

La Figura 2 muestra datos de depuración de O₂ Oxysense™ para DCX-300-1 (depurador bifuncional) y placas que contienen DC-300 (depurador tetrafuncional), como se describe en el Ejemplo 3.

Descripción detallada

La presente invención se puede entender más rápidamente con referencia a la siguiente descripción detallada de la invención y los Ejemplos incluidos en la misma.

Antes de que los presentes compuestos, composiciones, artículos, sistemas, dispositivos y/o métodos se divulguen y se describan, se ha de entender que no se limitan a métodos sintéticos específicos, a menos que se especifique lo contrario, ni a reactivos particulares, a menos que se especifique lo contrario, ya que pueden, por supuesto, variar. También se ha de entender que la terminología usada en el presente documento es para los fines de describir aspectos particulares únicamente y no pretende ser limitante. Aunque puede usarse cualquier método y material

similar o equivalente a los descritos en este documento en la práctica o ensayo de la presente invención, a continuación, se describen métodos y materiales.

Se divulgan los componentes que deben utilizarse para preparar las composiciones de la invención, así como las composiciones mismas que deben usarse en los métodos divulgados en el presente documento. Estos y otros materiales se divulgan en el presente documento, y se entiende que cuando las combinaciones, subconjuntos, interacciones, grupos, etc. de estos materiales se divulgan, aunque la referencia específica a cada una de varias combinaciones colectivas e individuales y la permutación de estos compuestos puede no estar explícitamente divulgada, cada uno se contempla específicamente y se describe en el presente documento. Por ejemplo, si un compuesto particular se divulga y se analiza, y se analiza una serie de modificaciones que pueden realizarse a varias moléculas incluidos los compuestos, se contemplan específicamente todas y cada una de las combinaciones y permutaciones del compuesto, y las modificaciones que sean posibles salvo que se indique específicamente lo contrario. Por lo tanto, si se divulga una clase de moléculas A, B, y C así como una clase de moléculas D, E, y F y se divulga un ejemplo de una molécula de combinación, A-D, entonces, incluso si cada una no se enumera individualmente, cada una se contempla individual y colectivamente, lo que significa que las combinaciones, A-E, AF, B-D, B-E, B-F, C-D, C-E, y C-F se consideran divulgadas. Igualmente, cualquier subconjunto o combinación de estas se divulgan también. Por lo tanto, por ejemplo, el subgrupo de A-E, B-F y C-E se consideraría divulgado. Este concepto se aplica a todos los aspectos de esta solicitud incluidas las etapas en los métodos para producir y usar las composiciones de la invención. Por lo tanto, Si existe una variedad de etapas adicionales que se puedan realizar, se entiende que cada una de estas etapas se puede realizar con cualquier realización o combinación específica de realizaciones de los métodos de la invención.

Mientras que los aspectos de la presente invención se pueden describir y reivindicar en una clase estatutaria particular, tal como la clase estatutaria del sistema, se hace únicamente por conveniencia y un experto en la materia comprenderá que cada aspecto de la presente invención se puede describir y reivindicar en una clase estatutaria. A menos que se indique expresamente lo contrario, no se pretende de ninguna manera que ningún método o aspecto expuesto en el presente documento se interprete como requiriendo que sus etapas se realicen en un orden específico. Por consiguiente, cuando un método reivindicado no indique específicamente en las reivindicaciones o descripciones que las etapas deben limitarse a un orden específico, no se pretende de ninguna manera que se infiera un orden, en ningún caso. Esto se mantiene para cualquier posible base no expresa para su interpretación, incluidos los temas de lógica con respecto a la organización de las etapas o del flujo operacional, el significado llano derivado de la organización gramatical o la puntuación, o el número o tipo de aspectos descritos en la memoria descriptiva.

Como se usa en la memoria descriptiva y en las reivindicaciones adjuntas, las formas en singular "un", "una" y "el" o "la" incluyen referencia en plural a menos que el contexto indique claramente lo contrario. Por lo tanto, por ejemplo, una referencia a "grupo funcional", "un alquilo" o "un resto" incluye mezclas de dos o más de dichos grupos funcionales, alquilos o restos y similares.

Los intervalos se pueden expresar como desde "aproximadamente" un valor particular y /o hasta "aproximadamente" otro valor particular. Cuando se expresa tal intervalo, otro aspecto incluye desde el valor particular y/o hasta el otro valor particular. De manera similar, cuando los valores se expresan como aproximaciones, mediante el uso del precedente "aproximadamente", se entenderá que el valor particular constituye otro aspecto. Se entenderá adicionalmente que los parámetros de cada uno de los intervalos son significativos tanto en relación con el otro parámetro como independientemente del otro parámetro. Se entiende también que en el presente documento se divulga un número de valores y que cada valor se divulga también en el presente documento como "aproximadamente" este valor particular además del valor mismo. Por ejemplo, si se divulga el valor "10", entonces se divulga también "aproximadamente 10". Se entiende también que cada unidad entre dos unidades particulares se divulgan también. Por ejemplo, si se divulga 10 y 15, entonces 11, 12, 13 y 14 se divulgan también.

Tal como se usa en el presente documento, los términos "opcional" u "opcionalmente" significan que el evento o circunstancia descritos posteriormente se pueden producir o no, y que la descripción incluye casos en los que dicho evento o circunstancia se produce y casos en los que no.

Tal como se usa en el presente documento, el término "sustancialmente" significa que el evento o circunstancia descritos posteriormente se producen totalmente o que el evento o circunstancia descritos posteriormente generalmente, típicamente o aproximadamente se producen. Por ejemplo, cuando la memoria descriptiva divulga que se libera sustancialmente todo el agente, un experto en la materia relevante entenderá rápidamente que el agente no necesita liberarse completamente. Más bien, este término transmite a un experto en la materia relevante que el agente solo necesita ser liberado hasta una extensión en la que una cantidad eficaz ya no se libera adicionalmente.

Tal como se usa en el presente documento, el término "polímero" se refiere a un compuesto orgánico de peso molecular relativamente alto, natural o sintético, cuya estructura se puede representar por una unidad pequeña repetida, el monómero (por ejemplo, polietileno, caucho, celulosa). Los polímeros sintéticos se forman típicamente por polimerización por adición o condensación de monómeros.

Tal como se usa en el presente documento, el término "copolímero" se refiere a un polímero formado a partir de dos o más unidades de repetición diferentes (restos de monómeros). A modo de ejemplo y sin limitación, un copolímero puede ser un copolímero alternante, un copolímero al azar, un copolímero de bloque o un copolímero de injerto. Se contempla también que, en determinados aspectos, varios segmentos de bloque de un copolímero de bloque puedan ellos mismos comprender copolímeros.

Tal como se usa en el presente documento, el término "oligómero" se refiere a un polímero de peso molecular relativamente bajo en el que el número de unidades de repetición se encuentra entre dos y diez, por ejemplo, de dos a ocho, de dos a seis o de dos a cuatro. En un aspecto, una colección de oligómeros puede tener un número promedio de unidades de repetición desde aproximadamente dos hasta aproximadamente diez, por ejemplo, desde aproximadamente dos hasta aproximadamente ocho, desde aproximadamente dos hasta aproximadamente seis, o desde aproximadamente dos hasta aproximadamente cuatro.

Tal como se usa en el presente documento, el término "polímero estrella" se refiere a una molécula polimérica ramificada en la que un punto de ramificación único da lugar a múltiples cadenas lineales o brazos. El punto de ramificación único puede ser una fracción química única o puede ser una sección muy reticulada de polímero. En un aspecto, un polímero estrella puede tener forma generalmente esférica. En un aspecto adicional, un polímero estrella puede tener forma de partícula. Si los brazos son idénticos la molécula polimérica estrella se dice que es regular. Si los brazos adyacentes están compuestos por diferentes subunidades de repetición, la molécula polimérica estrella se dice que está variegada.

Tal como se usa en el presente documento, la expresión "peso molecular" (PM) se refiere a la masa de una molécula de esta sustancia, relativa a la unidad u de masa atómica unificada (igual a 1/12 de la masa de un átomo de carbono-12).

Tal como se usa en el presente documento, la expresión "peso molecular promedio en número" (M_n) se refiere al promedio común, medio, de los pesos moleculares de los polímeros individuales. M_n se puede determinar midiendo el peso molecular de n moléculas poliméricas, sumando los pesos y dividiendo por n. M_n se calcula por:

$$\bar{M}_n = \frac{\sum_i N_i M_i}{\sum_i N_i},$$

donde N_i es el número de moléculas de peso molecular M_i . El peso molecular promedio en número puede determinarse por cromatografía de permeación en gel, viscosimetría (ecuación de Mark-Houwink), dispersión de luz, ultracentrifugación analítica, osmometría de la presión de vapor, titulación de grupos terminales y propiedades coligativas.

Tal como se usa en el presente documento, la expresión "peso molecular promedio en número" (M_w) se refiere a una medida alternativa del peso molecular de un polímero. M_w se calcula por:

$$\bar{M}_w = \frac{\sum_i N_i M_i^2}{\sum_i N_i M_i},$$

donde N_i es el número de moléculas de peso molecular M_i . de manera intuitiva, si el peso molecular promedio en peso es w, y se selecciona un monómero al azar, entonces el polímero al que pertenece tendrá un peso de w en promedio. El peso molecular promedio en peso se puede determinar mediante dispersión de luz, dispersión de neutrones de ángulo pequeño (SANS por sus siglas en inglés), dispersión por rayos X y velocidad de sedimentación.

Tal como se usa en el presente documento, los términos "polidispersidad" e "índice de polidispersidad" (PDI por sus siglas en inglés) se refiere a la proporción del promedio en peso al promedio en número (M_w/M_n).

Tal como se usa en el presente documento, la expresión "agente compatibilizante" se refiere a una pequeña molécula o polímero que tiene tanto grupos funcionales polares como no polares. Por ejemplo, un éster de ácido graso tiene tanto grupos funcionales polares como no polares.

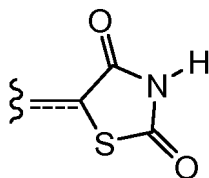
Un porcentaje en peso (% en peso) de un componente, salvo que se indique específicamente lo contrario, se basa en el peso total de la formulación o composición en la que se incluye el componente.

Tal como se usa en el presente documento, la nomenclatura para los compuestos, incluidos los compuestos orgánicos, se puede dar usando los nombres comunes, recomendaciones de la IUPAC, IUBMB o CAS para la nomenclatura. Cuando una o más características estereoquímicas están presentes, se pueden emplear las reglas de Cahn-Ingold-Prelog para la estereoquímica para designar la prioridad estereoquímica, especificación E/Z y similares.

Un experto en la materia puede rápidamente asegurar la estructura de un compuesto si se da un nombre, sea por reducción sistémica de la estructura del compuesto usando las convenciones de denominación, o por el programa disponible comercialmente, tal como CHEMDRAW™ (Cambridgesoft Corporation, EE.UU).

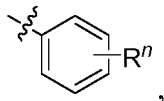
Un resto de una especie química, como se usa en la memoria descriptiva incluidas las reivindicaciones, se refiere a la fracción que es el producto resultante de la especie química en un esquema de reacción particular o posterior formulación o producto químico, independientemente de si la fracción se ha obtenido realmente de la especie química. Por lo tanto, un resto de etilenglicol en un poliéster se refiere a una o más unidades de $-OCH_2CH_2O-$ en el poliéster, independientemente de si se usó etilenglicol para preparar el poliéster. De manera similar, un resto de ácido sebácico en un poliéster se refiere a una o más fracciones de $-CO(CH_2)_8CO-$ en el poliéster, independientemente de si el resto se obtiene reaccionando ácido sebácico o un éster del mismo para obtener el poliéster.

Un sinónimo muy próximo del término "resto" es el término "radical", el cual se usa en la memoria descriptiva y en las reivindicaciones concluyentes, se refiere a un fragmento, grupo o estructura de una molécula descrita en el presente documento, independientemente de cómo se haya preparado la molécula. Por ejemplo, el radical 2,4-tiazolidinadiona en un compuesto particular tiene la estructura

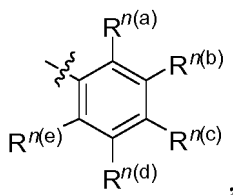


independientemente de si se usó tiazolidinadiona para preparar el compuesto. En algunas realizaciones, el radical (por ejemplo, un alquilo) se puede modificar adicionalmente (es decir, alquilo sustituido) teniendo uno o más "radicales sustituyentes" unidos al mismo. El número de átomos en un radical dado no es fundamental para la presente invención a menos que se indique lo contrario en alguna parte del presente documento.

En algunos aspectos, una estructura de un compuesto se puede representar por una fórmula:



que se entiende que es equivalente a la fórmula:



en la que n es normalmente un número entero. Es decir, R^n se entiende que representa cinco sustituyentes independientes, $R^{n(a)}$, $R^{n(b)}$, $R^{n(c)}$, $R^{n(d)}$, $R^{n(e)}$. Por "sustituyentes independientes", se entiende que cada sustituyente R se puede definir independientemente. Por ejemplo, si en un caso $R^{n(a)}$ es halógeno, entonces $R^{n(b)}$ no es necesariamente halógeno en este caso.

Tal como se usa en el presente documento, el término "sustituido" se contempla que incluye todos los sustituyentes permisibles de compuestos orgánicos. En un amplio aspecto, los sustituyentes permisibles incluyen sustituyentes acíclicos y cíclicos, ramificados y no ramificados, carbocíclicos y heterocíclicos, y aromáticos y no aromáticos de compuestos orgánicos. Los sustituyentes ilustrativos incluyen, por ejemplo, los descritos a continuación. Los sustituyentes permisibles pueden ser uno o más y el mismo o diferente para los compuestos orgánicos adecuados. Para los fines de esta divulgación, los heteroátomos, tal como nitrógeno, puede tener sustituyentes de hidrógeno y/o cualquier sustituyente permisible de compuestos orgánicos descritos en el presente documento que reúnan las valencias de los heteroátomos. Esta divulgación no pretende estar limitada de ninguna manera por los sustituyentes permisibles de compuestos orgánicos. Además, los términos "substitución" o "sustituido con" incluyen la condición implícita de que cada sustitución está conforme con la valencia permitida del átomo sustituido y del sustituyente y de que la sustitución da como resultado un compuesto estable, por ejemplo, un compuesto que no sufre espontáneamente la transformación como por redistribución, ciclación, eliminación, etc.

Para definir varios términos, "A¹", "A²", "A³" y "A⁴" se utilizan en el presente documento como símbolos genéricos para representar varios sustituyentes específicos. Estos símbolos pueden ser cualquier sustituyente, sin limitarse a los que se divulgan en el presente documento y cuando se define que son determinados sustituyentes en un caso, pueden, en otro caso, definirse como algún otro sustituyente.

El término "alquilo", como se usa en el presente documento es un grupo hidrocarburo saturado, ramificado o no ramificado, de 1 a 24 átomos de carbono, por ejemplo, de 1 a 12 carbonos, de 1 a 8 carbonos, de 1 a 6 carbonos o de 1 a 4 carbonos, tal como metilo, etilo, *n*-propilo, isopropilo, *n*-butilo, isobutilo, *s*-butilo, *t*-butilo, *n*-pentilo, isopentilo, *s*-pentilo, neopentilo, hexilo, heptilo, octilo, nonilo, decilo, dodecilo, tetradecilo, hexadecilo, eicosilo, tetracosilo y similares. El grupo alquilo puede ser cíclico o acíclico. El grupo alquilo puede estar ramificado o no ramificado. El grupo alquilo puede también estar sustituido o no sustituido. Por ejemplo, el grupo alquilo puede estar sustituido con uno o más grupos que incluyen alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alcoxi, amino, éter, haluro, hidroxilo, nitro, sililo, sulfo-oxo o tiol, como se describe en el presente documento. Un grupo "alquilo inferior" es un grupo alquilo que contiene de uno a seis (por ejemplo, uno a cuatro) átomos de carbono.

A lo largo de la memoria descriptiva "alquilo" se usa generalmente para referirse tanto a grupos alquilo no sustituidos como a grupos alquilo sustituidos; sin embargo, también se hace referencia específicamente en el presente documento a los grupos alquilo sustituidos mediante identificación de los sustituyentes específicos en el grupo alquilo. Por ejemplo, el término "alquilo halogenado" se refiere específicamente a un grupo alquilo que está sustituido por uno o más haluros, *por ejemplo*, flúor, cloro, bromo o yodo. El término "alcoxialquilo" se refiere específicamente a un grupo alquilo que está sustituido por uno o más grupos alcoxi, como se describe más adelante. El término "alquilamino" se refiere específicamente a un grupo alquilo que está sustituido por uno o más grupos amino, como se describe a continuación y similares. Cuando se utiliza "alquilo" en un caso y un término específico como "alquilalcohol" se usa en otro caso, no pretende implicar que el término "alquilo" no se refiere tampoco a los términos específicos tales como "alquilalcohol" y similares.

Esta práctica se usa también para otros grupos descritos en el presente documento. Es decir, mientras que un término tal como "cicloalquilo" se refiere a ambas fracciones cicloalquilo sustituidas y no sustituidas, las fracciones sustituidas pueden, además, ser específicamente identificadas en el presente documento; por ejemplo, un cicloalquilo sustituido particular se puede denominar, *por ejemplo*, "alquilocicloalquilo". De manera similar, un alcoxi sustituido se puede denominar específicamente, *por ejemplo*, "alcoxi halogenado", un alqueno sustituido particular puede ser, *por ejemplo*, un "alquenilalcohol" y similares. De nuevo, la práctica de usar un término general, tal como "cicloalquilo" y un término específico, tal como "alquilocicloalquilo", no pretende implicar que el término general no incluye tampoco el término específico.

El término "cicloalquilo" como se usa en el presente documento es un anillo basado en carbono no aromático compuesto por al menos tres átomos de carbono. Ejemplos de grupos cicloalquilo incluyen, pero sin limitación, ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, norbornilo y similares. El término "heterocicloalquilo" es un tipo de grupo cicloalquilo como se ha definido anteriormente y se incluye dentro del significado del término "cicloalquilo", cuando al menos uno de los átomos de carbono del anillo se sustituye por un heteroátomo tal como, pero sin limitación, nitrógeno, oxígeno, azufre o fósforo. El grupo cicloalquilo y el grupo heterocicloalquilo pueden estar sustituidos o no sustituidos. El grupo cicloalquilo y el grupo heterocicloalquilo pueden estar sustituidos por uno o más grupos que incluyen alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alcoxi, amino, éter, haluro, hidroxilo, nitro, sililo, sulfo-oxo o tiol, según se describe en el presente documento.

Los términos "alcoxi" y "alcoxilo" como se usan en el presente documento para referirse a un grupo alquilo o cicloalquilo unido a través de un enlace éter; es decir, un grupo "alcoxi" se puede definir como -OA¹ donde A¹ es alquilo o cicloalquilo tal y como se ha definido anteriormente. "Alcoxi" también incluye polímeros de grupos alcoxi tal y como se acaban de describir; es decir, un alcoxi puede ser un poliéter tal como -OA¹-OA² o -OA¹-(OA²)_a-OA³, donde "a" es un número entero de 1 a 200 y A¹, A², y A³ son grupos alquilo y/o cicloalquilo.

El término "alqueno" como se usa en el presente documento es un grupo hidrocarburo de 2 a 24 átomos de carbono con una fórmula estructural que contiene al menos un doble enlace carbono-carbono. Las estructuras asimétricas tales como (A¹A²)C=C(A³A⁴) pretenden incluir los isómeros *E* y *Z*. Esto se puede suponer en las fórmulas estructurales en el presente documento en las que está presente un alqueno asimétrico o se puede indicar explícitamente por el símbolo de unión C=C. El grupo alqueno se puede sustituir por uno o varios grupos incluyendo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alcoxi, alqueno, cicloalqueno, alquino, cicloalquino, arilo, heteroarilo, aldehído, amino, ácido carboxílico, éster, éter, haluro, hidroxilo, cetona, azida, nitro, sililo, sulfo-oxo o tiol, como se describe en el presente documento.

El término "cicloalqueno" como se usa en el presente documento es un anillo basado en carbono no aromático compuesto por al menos tres átomos de carbono y conteniendo al menos un doble enlace carbono-carbono, es decir, C=C. Ejemplos de grupos cicloalqueno incluyen, pero sin limitación, ciclopropeno, ciclobuteno, ciclopenteno, ciclopentadieno, ciclohexeno, ciclohexadieno, norborneno y similares. El término "heterocicloalqueno" es un tipo de grupo cicloalqueno según se ha definido anteriormente y se incluye en el significado del término "cicloalqueno", cuando al menos uno de los átomos de carbono del anillo se sustituye por un

heteroátomo tal como, pero sin limitación, nitrógeno, oxígeno, azufre o fósforo. El grupo cicloalquenilo y el grupo heterocicloalquenilo pueden estar sustituidos o no sustituidos. El grupo cicloalquenilo y el grupo heterocicloalquenilo pueden estar sustituidos por uno o más grupos que incluyen alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alcoxi, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo, heteroarilo, aldehído, amino, ácido carboxílico, éster, éter, haluro, hidroxilo, cetona, azida, nitro, sililo, sulfo-oxo o tiol, según se describe en el presente documento.

El término "alquinilo" como se usa en el presente documento es un grupo hidrocarburo de 2 a 24 átomos de carbono con una fórmula estructural que contiene al menos un triple enlace carbono-carbono. El grupo alquinilo puede estar sustituido o no sustituido por uno o más grupos incluyendo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alcoxi, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo, heteroarilo, aldehído, amino, ácido carboxílico, éster, éter, haluro, hidroxilo, cetona, azida, nitro, sililo, sulfo-oxo o tiol, como se describe en el presente documento.

El término "cicloalquinilo" como se utiliza en el presente documento es un anillo basado en carbono no aromático compuesto por al menos siete átomos de carbono y conteniendo al menos un triple enlace carbono-carbono. Ejemplos de grupos cicloalquinilo incluyen, pero sin limitación, cicloheptinilo, ciclooctinilo, ciclodecino y similares. El término "heterocicloalquinilo" es un tipo de grupo cicloalquinilo tal como se ha definido anteriormente y está incluido en el significado del término "cicloalquinilo", cuando al menos uno de los átomos de carbono del anillo se sustituye por un heteroátomo tal como, pero sin limitación, nitrógeno, oxígeno, azufre o fósforo. El grupo cicloalquinilo y el grupo heterocicloalquinilo pueden estar sustituidos o no sustituidos. El grupo cicloalquinilo y el grupo heterocicloalquinilo pueden estar sustituidos por uno o más grupos incluyendo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alcoxi, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo, heteroarilo, aldehído, amino, ácido carboxílico, éster, éter, haluro, hidroxilo, cetona, azida, nitro, sililo, sulfo-oxo o tiol, según se describe en el presente documento.

El término "arilo" como se usa en el presente documento es un grupo que contiene cualquier grupo aromático basado en carbono incluyendo benceno, naftaleno, fenilo, bifenilo, fenoxibenceno y similares. El término "arilo" también incluye "heteroarilo", que se define como un grupo que contiene un grupo aromático que tiene al menos un heteroátomo incorporado dentro del anillo del grupo aromático. Ejemplos de heteroátomos incluyen, pero sin limitación, nitrógeno, oxígeno, azufre y fósforo. Igualmente, el término "no heteroarilo", que se incluye también en el término "arilo", define un grupo que contiene un grupo aromático que no contiene un heteroátomo. El grupo arilo puede estar sustituido o no sustituido. El grupo arilo puede estar sustituido por uno o más grupos que incluyen alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alcoxi, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo, heteroarilo, aldehído, amino, ácido carboxílico, éster, éter, haluro, hidroxilo, cetona, azida, nitro, sililo, sulfo-oxo o tiol, según se describe en el presente documento. El término "biarilo" es un tipo específico de grupo arilo y se incluye en la definición de "arilo". Biarilo se refiere a dos grupos arilo que se enlazan juntos vía una estructura de anillo condensado, como en naftaleno, o se fijan vía uno o más enlaces carbono-carbono, como en bifenilo.

El término "aldehído" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-C(O)H$. En toda esta memoria descriptiva "C(O)" es una breve anotación a mano para un grupo carbonilo, es decir, $C=O$.

Los términos "amina" o "amino" como se usan en el presente documento están representados por la fórmula $NA^1A^2A^3$, donde A^1 , A^2 , y A^3 pueden ser, independientemente, hidrógeno o un grupo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo o heteroarilo como se describe en el presente documento.

El término "ácido carboxílico" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-C(O)OH$.

El término "éster" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-OC(O)A^1$ or $-C(O)OA^1$, donde A^1 puede ser un grupo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo o heteroarilo como se describe en el presente documento. El término "poliéster" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-(A^1O(O)C-A^2-C(O)O)_a$ o $-(A^1O(O)C-A^2-OC(O))_a$, donde A^1 y A^2 pueden ser, independientemente, un grupo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo o heteroarilo descritos en el presente documento y "a" es un número entero de 1 a 500. "Poliéster" es como el término usado para describir un grupo que está producido por la reacción entre un compuesto que tiene al menos dos grupos ácido carboxílico con un compuesto que tiene al menos dos grupos hidroxilo.

El término "éter" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula A^1OA^2 , donde A^1 y A^2 pueden ser, independientemente, un grupo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo o heteroarilo descrito en el presente documento. El término "poliéter" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-(A^1O-A^2O)_a$, donde A^1 y A^2 pueden ser, independientemente, un grupo alquilo opcionalmente sustituido, cicloalquilo, alquenilo, cicloalquenilo, alquinilo, cicloalquinilo, arilo o heteroarilo descritos en el presente documento y "a" es un número entero de 1 a 500. Ejemplos de grupos poliéter incluyen óxido de polietileno, óxido de polipropileno y óxido de polibutileno.

El término "haluro" como se usa en el presente documento se refiere a los halógenos flúor, cloro, bromo y yodo.

El término "heterociclo", como se usa en el presente documento se refiere a sistemas anulares aromáticos o no aromáticos individuales o multicíclicos en los que al menos uno de los miembros del anillo es distinto del carbono. Heterociclo incluye piridina, pirimidina, furano, tiofeno, pirrol, isoxazol, isotiazol, pirazol, oxazol, tiazol, imidazol, oxazol, que incluyen, 1,2,3-oxadiazol, 1,2,5-oxadiazol y 1,3,4-oxadiazol, tiadiazol, que incluyen, 1,2,3-tiadiazol, 1,2,5-tiadiazol y 1,3,4-tiadiazol, triazol, que incluyen, 1,2,3-triazol, 1,3,4-triazol, tetrazol, que incluye 1,2,3,4-tetrazol y 1,2,4,5-tetrazol, piridina, piridazina, pirimidina, pirazina, triazina, que incluye 1,2,4-triazina y 1,3,5-triazina, tetrazina, que incluye 1,2,4,5-tetrazina, pirrolidina, piperidina, piperazina, morfolina, azetidina, tetrahidropirano, tetrahidrofurano, dioxano y similares.

El término "hidroxilo" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula -OH.

El término "cetona" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $A^1C(O)A^2$, donde A^1 y A^2 pueden ser, independientemente, un grupo alquilo opcionalmente sustituido cicloalquilo, alqueno, cicloalqueno, alquino, cicloalquino, arilo o heteroarilo como se describe en el presente documento.

El término "azida" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-N_3$.

El término "nitro" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-NO_2$.

El término "nitrilo" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-CN$.

El término "tiol" como se usa en el presente documento está representado por la fórmula $-SH$.

Determinados casos de los términos definidos anteriormente pueden producirse más de una vez en las fórmulas estructurales y después de que esto se produzca cada término debería definirse independientemente del otro.

Tal como se usa en el presente documento, el término "cantidad eficaz" se refiere a una cantidad que es suficiente para lograr el resultado deseado o para tener un efecto sobre una condición indeseada. Por ejemplo, una "cantidad visualmente eficaz" se refiere a una cantidad que es suficiente para lograr el resultado deseado (es decir, impartir color a una composición o un artículo), pero es generalmente suficiente para causar efectos secundarios adversos (por ejemplo, el torcimiento de un artículo polimérico).

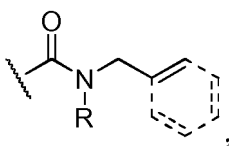
El término "grupo saliente" se refiere a un átomo (o un grupo de átomos) con capacidad de extracción de electrones que se puede desplazar como especie estable, llevando consigo los electrones de enlace. Ejemplos de grupos salientes adecuados incluyen ésteres de sulfonato, incluyendo triflato, mesilato, tosilato, brosilato y haluros.

Los compuestos descritos en el presente documento pueden contener uno o más dobles enlaces y, por lo tanto, dar lugar potencialmente a isómeros cis/trans (*E/Z*), así como a otros isómeros conformacionales. A menos que se indique lo contrario, la invención incluye todos estos posibles isómeros, así como mezclas de dichos isómeros.

A menos que se indique lo contrario, una fórmula con enlaces químicos mostrada únicamente como líneas gruesas y no como cuñas o líneas discontinuas contempla cada posible isómero, *por ejemplo*, cada enantiómero y diastereómero y una mezcla de isómeros, tal como una mezcla racémica o no racémica. Los compuestos descritos en el presente documento pueden contener uno o más centros asimétricos y, por lo tanto, dan lugar potencialmente a diastereómeros e isómeros ópticos. A menos que se indique lo contrario, la presente invención incluye todos dichos posibles diastereómeros así como sus mezclas racémicas, sus enantiómeros puros rediseñados, todos los posibles isómeros geométricos y sales farmacéuticamente aceptables de los mismos. Las mezclas de estereoisómeros, así como estereoisómeros específicos aislados, se incluyen también. Durante el transcurso de los procedimientos sintéticos usados para preparar dichos compuestos o en la utilización de procedimientos de racemización o epimerización conocidos por los expertos en la materia, los productos de dichos procedimientos pueden ser una mezcla de estereoisómeros.

Los compuestos divulgados son compuestos de amida N-álílica o compuestos de amida N-bencílica. El compuesto de amida es útil como un depurador de oxígeno. La capacidad de depuración de oxígeno del compuesto de amida puede ser aumentada, en varios aspectos, por la presencia de un metal de transición.

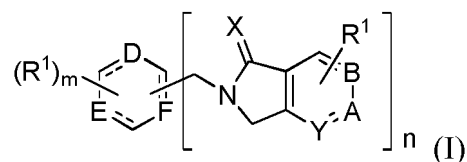
Los compuestos de amida N-álílica o N-bencílica divulgados tienen la estructura general mostrada a continuación:



donde cada --- independientemente indica un enlace covalente opcional.

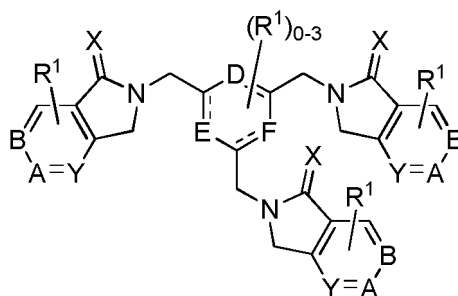
El compuesto de amida N-alílica o N-bencílico puede estar sustituido adicionalmente y puede estar presente más de una funcionalidad de amida en un compuesto. En un aspecto, un compuesto de amida N-alílico o N-bencílico puede ser polimérico. En un aspecto adicional, un compuesto de amida N-alílico o N-bencílico puede ser no polimérico.

5 En un aspecto, el compuesto de amida tiene una estructura de Fórmula I:



10 en la que el símbolo --- cuando se usa junto con una línea de enlace representa un enlace único o doble; en la que n es 3, 4, 5 o 6; en la que m es un número entero de 0 a 6-n; en la que cada X se selecciona independientemente del grupo que consiste en O, S y NH; en la que cada Y, cada A y cada B se seleccionan independientemente del grupo que consiste en N, CR¹, y CR²; en la que D, E y F se seleccionan independientemente del grupo que consiste en CH, N, O y S; y en la que cada R¹ y cada R² se seleccionan independientemente del grupo que consiste en H, alquilo, arilo, grupos de extracción de electrones, grupos de liberación de electrones y un metal de transición.

15 En un aspecto, el compuesto de fórmula I puede estar representado por la siguiente fórmula:



20 El grupo alquilo del compuesto de Fórmula I puede ser un grupo hidrocarburo saturado ramificado o no ramificado de 1 a 24 átomos de carbono, por ejemplo, 1 a 18 átomos de carbono, de 1 a 14 átomos de carbono, de 1 a 12 átomos de carbono, de 1 a 10 átomos de carbono, 1 a 8, 1 a 6 átomos de carbono o 1 a 4 átomos de carbono, tal como metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, isobutilo, t-butilo, pentilo, hexilo, heptilo, octilo, decilo, tetradecilo, hexadecilo, eicosilo, tetracosilo y similares. El grupo alquilo puede estar sustituido o no sustituido. El grupo alquilo
25 puede estar sustituido por uno o más grupos que incluyen, pero sin limitación, alquilo, alquilo halogenado, alcoxi, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, aldehído, amino, ácido carboxílico, éster, haluro, hidroxamato, hidroxilo, cetona, nitro, sililo, sulfo-oxo, sulfonilo, sulfona, sulfóxido o tiol, como se describe más adelante. El grupo alquilo puede ser halogenado, que incluye un grupo alquilo que está sustituido por uno o más haluros, por ejemplo, flúor, cloro, bromo o yodo. El grupo alquilo puede ser también un grupo alquilo inferior, que es un grupo alquilo que contiene de uno a seis (por ejemplo, de uno a cuatro) átomos de carbono.

El grupo arilo del compuesto de Fórmula I puede ser cualquier grupo aromático basado en carbono incluyendo pero sin limitación, benceno, naftaleno, fenilo, bifenilo, etc. El grupo arilo puede ser también heteroarilo, que se define como un grupo aromático que tiene al menos un heteroátomo incorporado dentro del anillo del grupo aromático.
35 Ejemplos de heteroátomos incluyen, pero sin limitación, nitrógeno, oxígeno, azufre y fósforo. El grupo arilo puede estar sustituido o no sustituido. El grupo arilo puede estar sustituido por uno o más grupos incluyendo, pero sin limitación, alquilo, alquilo halogenado, alcoxi, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, aldehído, amino, ácido carboxílico, éster, haluro, hidroxamato, hidroxilo, cetona, nitro, sililo, sulfo-oxo, sulfonilo, sulfona, sulfóxido o tiol como se describe en el presente documento. Un grupo biarilo es un tipo específico de grupo arilo y se incluye en la
40 definición de arilo. Biarilo se refiere a dos grupos arilo que están enlazados entre sí por medio de una estructura de anillo condensado, como en el naftaleno o que se unen por medio de uno o más enlaces carbono-carbono, como en bifenilo.

Los grupos de extracción de electrones adecuados y los grupos de liberación de electrones se conocen generalmente en la técnica. Los grupos de extracción de electrones preferidos incluyen nitro, ácido carboxílico, ésteres, por ejemplo, ésteres de alquilo inferior y ciano. Los grupos de liberación de electrones preferidos incluyen grupos alquilo de cadena lineal o ramificada, por ejemplo, metilo, etilo, propilo, isopropilo, butilo, isobutilo y terc-butilo. Otros grupos de liberación de electrones preferidos incluyen alcoxi, por ejemplo, metoxi y etoxi. Otros grupos de liberación de electrones preferidos incluyen tioalquilo. Otros grupos de liberación de electrones adicionales
50 incluyen aminas, por ejemplo, -NH₂, y NH(alquilo inferior) y N(alquilo inferior)₂.

Los compuestos de amida depuradores de oxígeno se divulgan en la publicación de solicitud de patente de Estados Unidos n.º 20080277622, Deshpande et al. "Oxygen Scavenging Molecules, Articles Containing Same, And Methods of Their Use",.

Una versión de Compuesto I puede prepararse reaccionando un mol de 1,3,5-trimetilaminobenceno con tres moles de 1-isoindolinona (CAS # 87-41-2) en un reactor de tanque agitado continuo (CSTR por sus siglas en inglés) usando un disolvente tal como xileno con presión de N₂ y a temperaturas que superan 200 °C. Después de la retirada por destilación de agua como un subproducto de la reacción, el producto de la reacción se aísla y purifica usando lavados de disolvente sucesivos.

El compuesto de amida, en determinados aspectos, puede formar complejo con un metal de transición. Por ejemplo, el compuesto de amida puede formar complejo con el metal de transición a través de uno o más grupos arilo, por ejemplo, a través de la formación de complejos pi-cloud. El compuesto de amida se puede polimerizar también por medio de metal de transición.

Se divulgan también las composiciones poliméricas. En general, la composición polimérica divulgada comprende un polímero de base; un compuesto de amida de Fórmula I presente en una cantidad de aproximadamente 0,10 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición; y un metal de transición en un estado de oxidación positiva, el metal presente en una cantidad de aproximadamente 10 ppm a aproximadamente 400 ppm.

En general, el compuesto de amida está presente en la composición en una cantidad de 0,1 a aproximadamente 10 por ciento en peso. En un aspecto, el compuesto de amida está presente en la composición en una cantidad de 1 a aproximadamente 10 por ciento en peso. En un aspecto adicional, el compuesto de amida está presente en la composición en una cantidad de 1 a aproximadamente 5 por ciento en peso. En un aspecto adicional, el compuesto de amida está presente en la composición en una cantidad de 1 a aproximadamente 3 por ciento en peso.

Una variedad de diferentes polímeros se puede usar como el polímero de base. Las composiciones divulgadas permiten la depuración de oxígeno y por lo tanto el polímero de base generalmente incluye aquellos polímeros que pueden ser sometidos a oxidación. Por ejemplo, los polímeros que presentan al menos algo de permeabilidad de oxígeno son útiles con las composiciones divulgadas, al menos en la medida en que las composiciones divulgadas pueden reducir el daño oxidativo al polímero.

El polímero de base puede ser un polímero usado normalmente en materiales de empaquetado que incluyen polietileno, tal como polietileno de baja densidad, polietileno de muy baja densidad, polietileno de ultrabaja densidad, polietileno de alta densidad y polietileno de baja densidad lineal; poliésteres tales como (PET), (PEN) y sus copolímeros tales como PET/IP; cloruro de polivinilo (PVC); cloruro de polivinilideno (PVDC); y copolímeros de etileno tales como copolímero de etileno-acetato de vinilo, copolímeros de etileno/(met)acrilato de alquilo, copolímeros de etileno/ácido (met)acrílico e ionómeros. Mezclas de diferentes polímeros de base también pueden usarse.

En un aspecto adicional, un polímero de base puede incluir uno o más polímeros aprobados por la Administración de Alimentos y Medicamentos (FDA) de los Estados Unidos. Ejemplos incluyen tereftalato de polietileno, polipropileno y polietileno.

En un aspecto adicional, el polímero de base comprende un polímero o copolímero de poliéster. Los poliésteres preferidos incluyen polímeros de ácidos ftálicos, tales como tereftalato de polietileno (PET) o un copolímero del mismo. PET, por ejemplo, se puede producir a partir de ácido tereftálico y etilenglicol. PET se puede producir también usando tereftalato de dimetilo y etilenglicol. Los copolímeros preferidos de ácidos ftálicos incluyen copolímeros de un ácido ftálico y uno o más compuestos orgánicos hidroxilados. Ejemplos de compuestos orgánicos hidroxilados adecuados incluyen 1,4-ciclohexanodimetanol, 1,2-propanodiol, 1,4-butanodiol, 2,2-dimetil-1, 3-propanodiol, 2-metil-1, 3-propanodiol (2MPDO), 1,6-hexanodiol, 1,2-ciclohexanodiol, 1,4-ciclohexanodiol, 1,2-ciclohexanodimetanol, 1,3-ciclohexanodimetanol y dioles que contienen uno o más átomos de oxígeno en la cadena, por ejemplo, dietilenglicol, trietilenglicol, dipropilenglicol, tripropilenglicol o mezclas de los mismos y similares.

Aún en un aspecto adicional, el polímero de base incluye un homopolímero y copolímero de tereftalato de polietileno modificado con uno o más modificadores de ácido policarboxílico en una cantidad acumulativa de menos de aproximadamente 15 % en moles, o aproximadamente 10 % en moles o menos, o aproximadamente 8 % en moles o menos, o uno o más modificadores de compuestos de hidroxilo en una cantidad de menos de aproximadamente 60 % en moles, o menos de aproximadamente 50 % en moles, o menos de aproximadamente 40 % en moles, o menos de aproximadamente 15 % en moles, o aproximadamente 10 % en moles o menos, o aproximadamente 8 % en moles o menos y homopolímeros y copolímeros de naftalato de polietileno modificados con una cantidad acumulativa de menos de aproximadamente 15 % en moles, o aproximadamente 10 % en moles o menos, o aproximadamente 8 % en moles o menos, de uno o más modificadores de ácido policarboxílico o modificado con menos de aproximadamente 60 % en moles, o menos de aproximadamente 50 % en moles, o menos de aproximadamente 40 % en moles, o menos de aproximadamente 15 % en moles, o aproximadamente 10 % en moles o menos, o aproximadamente 8 % en moles o menos de uno o más modificadores de compuestos de hidroxilo

y mezclas de los mismos. En algunos aspectos, el polímero de base comprende al menos 90 % en moles, 92 % en moles o 94 % en moles de unidades de repetición de tereftalato de etileno basado en los moles de todas las unidades de repetición en los polímeros de poliéster.

5 Poliésteres tales como (PET) se pueden preparar mediante procedimientos de polimerización conocidos en la técnica suficientes para lograr la esterificación y la policondensación. Los procesos de producción de la fase fundida de los poliésteres incluyen la condensación directa de un ácido dicarboxílico con un diol, opcionalmente en presencia de uno o más catalizadores de la esterificación, en la zona de esterificación, seguido por la policondensación en el prepolímero y zonas de terminación en presencia de un catalizador de la policondensación; o intercambio de ésteres normalmente en presencia de un catalizador de la transesterificación en la zona de intercambio de ésteres, seguido por la prepolymerización y polimerización en presencia de un catalizador de la policondensación.

15 Como se ha analizado de manera breve anteriormente, la composición comprende un metal de transición en un estado de oxidación positivo. El metal de transición aumenta las propiedades de depuración de oxígeno del compuesto de amida. En general, el metal de transición estará presente en una cantidad de aproximadamente 10 ppm a aproximadamente 400 ppm. En un aspecto, aproximadamente 200 ppm del metal de transición está presente. En un aspecto adicional, aproximadamente 250 ppm del metal de transición está presente. En aplicaciones de pared (por oposición a las aplicaciones de mezcla madre donde se usa más de un metal de transición), se puede preferir mantener el nivel de metal inferior a 300, más preferentemente 250 ppm. En un aspecto adicional, el metal de transición está presente desde 30 hasta 150 ppm. En un aspecto adicional, aproximadamente 50 ppm del metal de transición está presente. En un aspecto adicional, aproximadamente 100 ppm del metal de transición está presente. En un aspecto adicional, aproximadamente 150 ppm del metal de transición está presente.

25 En un aspecto, el metal de transición puede ser un metal de transición de la primera, segunda o tercera serie de transición de la Tabla Periódica. El metal puede ser Rh, Ru, o uno de los elementos en las series de Sc hasta Zn (*por ejemplo*, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu y Zn). En un aspecto, el metal de transición es cobalto. El cobalto se puede usar en estados de oxidación +2 o +3. En algunos aspectos, se prefiere usar cobalto en el estado de oxidación +2. En un aspecto adicional, el metal de transición es rodio. Por ejemplo, se puede usar el rodio en el estado de oxidación +2. El metal de transición puede ser también una forma de oxidación positiva de zinc.

30 El metal de transición puede estar presente como una sal. El catión de la sal puede ser el metal de transición en un estado de oxidación positivo. Una variedad de aniones puede estabilizar el metal de transición cargado positivamente. Aniones adecuados de las sales incluyen, pero sin limitación, cloruro, acetato, oleato, estearato, palmitato, 2-etilhexanoato, carboxilatos, tales como neodecanoatos, octanoatos, acetatos, lactatos, naftalatos, malatos, estearatos, acetilacetatos, linoleatos, oleatos, palmitatos, 2-etilhexanoatos o glicolatos de etileno; o como sus óxidos, boratos, carbonatos, dióxidos, hidróxidos, nitratos, fosfatos, sulfatos o silicatos, entre otros. Sales de metales de transición representativas incluyen 2-etilhexanoato de cobalto (II), oleato de cobalto y neodecanoato de cobalto (II). La sal de metal de transición puede ser también un ionómero, en cuyo caso un contraión polimérico puede estar presente.

40 En un aspecto, la composición puede comprender un colorante en una cantidad visualmente eficaz. Una cantidad visualmente eficaz se refiere a una cantidad de colorante que da como resultado la composición o un artículo producido a partir de ésta que aparece coloreado a simple vista. Una composición que comprende una cantidad visualmente eficaz de colorante se puede referir a una composición que tiene al menos 0,01 % en peso de colorante. 45 En un aspecto adicional, la composición puede comprender al menos 0,25 % en peso de colorante. Aún en un aspecto adicional, la composición puede comprender al menos 0,5 % en peso de colorante. Las composiciones pueden incluir también hasta o incluso exceder aproximadamente 3 % en peso de colorante.

50 Una cantidad visualmente eficaz puede ser determinada, por ejemplo, realizando barrido espectrofotométrico de la composición o artículo usando un intervalo de longitud de onda desde 400 hasta 700 nm (región visible). Los colores específicos pueden caracterizarse de acuerdo con su patrón espectral. Cada color también tiene su propia L característica (gradación de luminosidad), números a (rojo a verde) y b (amarillo a azul), que se pueden usar para caracterizar las composiciones y artículos.

55 El colorante puede ser una variedad de pigmentos y tintes, muchos de los cuales están disponibles comercialmente. Ejemplos de colorantes incluyen sin limitación Ámbar Oscuro de COLORMATRIX, código de producto: 189-10034-6, Verde Hoja Seca de COLORMATRIX, códigos de producto: 284-2801-3 y 84-2801-1, ámbar de AMERICHEM, código de producto: 59108-CD1, verde Champagne y ámbar de CLORMATRIX, código de producto: 189-10100-1.

60 La composición puede incluir otros componentes tales como cargas, adyuvantes de cristalización, modificadores de impacto, lubricantes de superficie, agentes de desapilado, estabilizantes, agentes absorbentes de luz ultravioleta, desactivadores de metales, agentes de nucleación tales como polietileno y polipropileno, estabilizadores de fosfato y materias colorantes. Típicamente, la cantidad total de tales componentes será inferior al 10 % en peso de la composición. En algunas realizaciones, la cantidad de estos componentes opcionales es inferior a aproximadamente 65 el 5 % en peso de la composición.

La composición puede comprender un aditivo de recalentamiento. Los aditivos de recalentamiento se usan habitualmente en la fabricación de composiciones poliméricas de poliéster usadas para producir botellas moldeadas por estirado y soplado porque las preformas producidas a partir de la composición han de ser recalentadas antes de introducir el molde para estirado y soplado dentro de una botella. Se puede usar cualquier aditivo de recalentamiento convencional, tal como varias formas de partículas de color negro, *por ejemplo*, negro carbón, carbón activado, óxido de hierro negro, carbón vítreo, carburo de silicio, partículas de color gris tales como antimonio y otros aditivos de recalentamiento tales como sílices, óxido de hierro rojo y similares.

La composición puede comprender también un modificador de impacto. Ejemplos de modificadores de impacto típicos útiles en la composición incluyen terpolímeros de etileno-acrilato-glicidilo y copolímeros de etileno-acrilato en los cuales el acrilato de metilo o etilo o el metacrilato de metilo o etilo o los correspondientes acrilatos de butilo, copolímeros de bloque de estireno y varios modificadores de impacto de tipo núcleo/corteza acrílico. Los modificadores de impacto pueden usarse en cantidades convencionales de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 25 por ciento en peso de la composición global y, en algunos aspectos, en cantidades de aproximadamente 0,1 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición.

En muchas aplicaciones, no solo los contenidos del paquete son sensibles a la entrada de oxígeno, sino que también los contenidos pueden ser afectados por la luz UV. Los zumos de frutas y productos farmacéuticos son dos ejemplos de tales contenidos. Por consiguiente, en algunos aspectos, es deseable incorporar en la composición un compuesto absorbentes de UV en una cantidad eficaz para proteger los contenidos empaquetados.

La composición o un artículo producidos a partir de ésta pueden tener un índice de transmisión de oxígeno (OTR por sus siglas en inglés) de menos de aproximadamente 0,1 (unidades de cc/paquete/día o 1-5 cc-mm/m²-día-atm) en condiciones estándar. En un aspecto adicional, el OTR puede ser inferior a 0,03, inferior a 0,01, inferior a 0,005 o inferior a 0,001. El OTR es una medida de cuán bien funciona el compuesto de amida en la depuración de oxígeno que atraviesa la composición o artículo.

Cuando el OTR se expresa para una composición o artículo dados, se emplean normalmente las unidades "cc/paquete/día" ("cc/pkg/día"). El término paquete se refiere a una barrera entre una atmósfera de contenido de oxígeno relativamente inferior y una atmósfera de contenido de oxígeno relativamente superior. Las barreras típicas (por ejemplo, paquetes) incluyen botellas, envases termoconformados y películas (por ejemplo, embalaje retráctil).

El índice de transmisión de oxígeno (permeación de oxígeno) se puede medir, por ejemplo, como se describe en la patente de los Estados Unidos n.º 5.021.515. Un material del área A se puede exponer a una presión parcial p de oxígeno sobre un lado y a una presión parcial esencialmente nula de oxígeno sobre el otro lado. La cantidad de oxígeno que emerge sobre este último lado se mide y expresa como índice de volumen dV/dt, siendo convertido el volumen a algunas condiciones estándar de temperatura y presión. Después de un tiempo de exposición determinado (normalmente un periodo de unos pocos días) dV/dt se encuentra generalmente que se estabiliza, y un valor P_W se puede calcular a partir de la siguiente ecuación:

$$dV/dt = P_W A p \quad (1)$$

P_W se refiere a la permeancia de la pared. (La analogía con la permeancia magnética y la conductancia eléctrica sugeriría que P_W debería describirse como "permeancia por unidad de área", pero se sigue la nomenclatura en Encyclopaedia of Polymer Science and Technology, Vol. 2, Wiley Interscience, 1985, página 178.) Las condiciones estándar para expresar dV/dt son 0 °C y 1 atm (1 atm=101 325 Nm⁻²). Si el espesor del área de pared es sustancialmente constante sobre el área A con el valor T y la pared es uniforme a través del espesor (es decir, la pared no es una pared laminada o revestida) entonces la permeabilidad del material en la dirección normal con respecto a la pared se calcula a partir de la siguiente ecuación.

$$dV/dt = P_M A p / T \quad (2)$$

Para materiales no depuradores, P_W y P_M están a una aproximación razonable independiente de t y p, y P_M de T aunque sean frecuente y apreciablemente dependientes de otras condiciones de la medición tales como la humedad de la atmósfera sobre el lado rico en oxígeno y la temperatura de la medición.

Para las paredes depuradoras de oxígeno, P_W y P_M son funciones de t porque las concentraciones y la actividad del depurador varían con el tiempo (particularmente mientras que se consume el depurador). Esto típicamente no impide la medición de P_W y P_M de manera razonable y exacta como una función del tiempo, porque los cambios en dV/dt son relativamente graduales una vez que ha terminado el periodo de equilibrio inicial normal de unos pocos días. Después de una exposición de unos pocos días a las condiciones de medición, sin embargo, un material no depurador logra normalmente un estado estable en el que dV/dt es igual al índice de entrada de oxígeno en la pared, mientras que un material depurador logra un estado (casi) estable en el que dV/dt es considerablemente inferior al índice de entrada de oxígeno al material. Siendo este el caso, es probable que P_W calculado a partir de (1) sea una

función de p así como de t y que P_M en (2) sea una función de p y T igualmente de t . P_W y P_M para los materiales depuradores son, estrictamente hablando, permeancias y permeabilidades no reales del todo (puesto que la permeación y la depuración están produciéndose simultáneamente) sin que, más bien, son aparentes.

5 Los valores de P_W y P_M (salvo donde se indique lo contrario) ha de entenderse que se refieren a condiciones en las que $p=0,21$ atm, la humedad relativa sobre el lado rico en oxígeno de la pared es 50 %, la temperatura es 23 °C y (en el caso de valores P_M) el espesor del material de aproximadamente 0,45 mm. Las condiciones próximas a las tres primeras de entre estas, por lo menos, son convencionales en la industria del empaquetado.

10 Por ejemplo, el OTR se puede medir para botellas, por ejemplo, controlando la atmósfera sobre ambos lados de una muestra de botellas y midiendo el índice de permeación de oxígeno en el tiempo. Típicamente, las botellas se montan sobre un plato de tal manera que haya dos orificios para la entrada y la salida de gas. El interior de las botellas se separa del exterior mediante un sellado estanco al aire. Después del sellado, el interior de la botella se enjuaga con gas N_2 (o mezcla $N_2 + H_2$) para eliminar cualquier oxígeno presente antes del montaje sobre el plato. La
15 botella se coloca después en una cámara de ambiente controlado (mantenida a 23 °C y 50 % de HR) de tal manera que el exterior de la botella es una atmósfera estándar con ~21 % de oxígeno. El interior de la botella se purga continuamente con N_2 (o $N_2 + H_2$) a un índice de flujo de gas conocido. La salida de los gases purgados contiene oxígeno que atraviesa la pared de la botella. Este gas purgado desde el interior de la botella pasa a través de un sensor que está calibrado para medir el contenido de oxígeno del gas purgado. Tales mediciones del contenido de
20 oxígeno se hacen continuamente en el tiempo hasta que se alcanza un estado estable. Este valor de estado estable se presenta normalmente como índice de transmisión de oxígeno (OTR) para esta botella en las unidades de cc/paquete/día. Un OTR preferido para botellas PET es inferior a 0,1 cc/paquete/día; más preferido es inferior a 0,01 cc/paquete/día; más preferido para botellas PET es inferior a 0,001 cc/paquete/día durante la vida útil del producto empaquetado.

25 En un aspecto, una composición divulgada tiene un OTR inferior a aquel de una composición idéntica alternativa en ausencia del compuesto de amida y el metal de transición. En aspectos adicionales, una composición divulgada tiene un OTR inferior a aproximadamente un 75 %, inferior a aproximadamente un 50 %, inferior a aproximadamente un 25%, inferior a aproximadamente un 20%, inferior a aproximadamente un 10%, inferior a aproximadamente un 5 %, o inferior a un 1 % de una composición idéntica alternativa en ausencia del compuesto de amida y el metal de transición.

Existen varios métodos para producir la composición. En un aspecto, la composición se puede producir mezclando el polímero de base con el compuesto de amida y opcionalmente el metal de transición. En algunos aspectos, algo o
35 parte del metal de transición puede estar ya presente en el polímero de base antes de la mezcla, por ejemplo, si el metal de transición se usa como un catalizador para producir el polímero de base. En algunos aspectos, el polímero de base, el componente orgánico oxidable y el metal de transición se mezclan mediante giro en una tolva. Otros ingredientes opcionales se pueden añadir durante este proceso de mezcla o añadir después de la mezcla anteriormente mencionada o a un componente individual antes de la etapa de mezcla anteriormente mencionada.

40 Cuando se desea el procesamiento de fundición para la composición, la composición se puede producir también añadiendo cada ingrediente por separado y mezclando los ingredientes justo antes del procesamiento de fundición de la composición para formar un artículo. En algunas realizaciones, la mezcla puede hacerse justo antes de la zona del proceso de fundición. En otras realizaciones, uno o más ingredientes se pueden premezclar en una etapa separada antes de reunir todos los ingredientes.

45 En algunos aspectos, el metal de transición se puede añadir puro o en un vehículo (tal como líquido o cera) a una extrusora u otro dispositivo para producir el artículo, o el metal puede estar presente en un concentrado o vehículo con el compuesto de amida, en un concentrado o vehículo con el polímero de base, o en un concentrado o vehículo con una mezcla de polímero de base/compuesto de amida. Es deseable que la adición del metal de transición no aumente sustancialmente la viscosidad intrínseca de la fundición en la zona de procesamiento de la fundición. Por lo tanto, el metal o metales de transición se pueden añadir en dos o más etapas, tal como una vez durante la fase de fundición para la producción del polímero de base y nuevamente una vez más a la zona de fundición del artículo.

55 La mezcla fundida del polímero de base, compuesto de amida, y catalizador del metal de transición se pueden preparar también añadiendo los componentes en la boca de una máquina de moldeo por inyección que: (i) produce una preforma que puede ser moldeada por estirado y soplado en la forma del envase, (ii) produce una película que se puede orientar en una película de empaquetado, (iii) produce una hoja que se puede termoconformar en una bandeja alimentaria, o (iv) produce un envase moldeado por inyección. La sección de mezcla de la extrusora debería ser de un diseño para producir una mezcla homogénea. Estas etapas del proceso funcionan bien para formar
60 botellas de refrescos carbonatados, de agua o de cerveza, películas de empaquetado y bandejas termoconformadas. Se puede emplear la presente invención en cualquiera de los procesos convencionales conocidos para producir un envase polimérico, película, bandeja u otro artículo que se beneficiaría de la depuración de oxígeno.

65

Varios artículos se pueden preparar a partir de las composiciones divulgadas. Por lo tanto, los artículos preparados a partir de las composiciones tendrán también la composición presente en el artículo. Los artículos adecuados incluyen recipientes y películas, tales como películas de hoja flexible, bolsas flexibles, bolsitas, envases semirrígidos y rígidos tales como botellas (por ejemplo, botellas PET) o latas metálicas, o combinaciones de los mismos. Las películas y bolsas flexibles típicas incluyen aquellas usadas para varios artículos de alimentos y se pueden componer de uno o una multiplicidad de capas para formar la película global o material de empaquetado tipo bolsa. La composición de la presente invención se puede usar en una, varias o todas las capas de este material de empaquetado.

Los artículos específicos incluyen preformas, envases y películas para el empaquetado de alimentos, bebidas, cosméticos, productos farmacéuticos y productos para el cuidado personal en los que se necesita una barrera de oxígeno elevada. Ejemplos de envases para bebidas son botellas para contener agua y refrescos carbonatados, y la invención es particularmente útil en aplicaciones para botellas que contienen zumos, bebidas deportivas, cerveza y otras bebidas en las que el oxígeno afecta perjudicialmente al sabor, aroma, rendimiento (por ejemplo, degradación de vitaminas) o color de la bebida. Las composiciones son también particularmente útiles como una hoja para termoconformado en paquetes rígidos y películas para estructuras flexibles. Paquetes rígidos incluyen bandejas alimentarias y tapas. Ejemplos de aplicaciones en bandejas alimentarias incluyen bandejas alimentarias horneables duales o bandejas alimentarias de almacenamiento en frío, ambas en el envase de base y en el sellado (sea una tapa termoconformada o una película), en las que los contenidos alimenticios pueden decaer con la entrada de oxígeno. Las composiciones se pueden usar también en la fabricación de envases cosméticos y envases para productos farmacéuticos o dispositivos médicos.

Otros artículos adecuados incluyen artículos rígidos o semirrígidos incluyendo plástico, tal como el que se utiliza para zumos, refrescos, así como bandejas termoconformadas o taza que tiene normalmente un espesor en el intervalo de 100 a 1000 micrómetros. Las paredes de dichos artículos pueden comprender bandejas simples o múltiples de materiales. El artículo puede adquirir también la forma de una botella o lata, o una copa, tapón, revestimiento de copa o de tapón, plastisol o junta. La composición de la presente invención se puede usar como una capa integral o porción de, o como un recubrimiento o revestimiento externo o interno de, el artículo de empaquetado semirrígido o rígido formado. Como un revestimiento, la composición puede ser extruida como una película junto con el artículo rígido mismo, *por ejemplo*, por coextrusión, recubrimiento por extrusión o un proceso de laminación por extrusión, de manera que forme el revestimiento *in situ* durante la producción del artículo; o alternativamente se puede adherir por calor y/o presión, por adhesivo o por cualquier otro método adecuado.

Cuando las composiciones se usan en una pared o como una capa de una pared, la permeabilidad de la composición para el oxígeno es ventajosamente no superior a aproximadamente 3,0, o aproximadamente 1,7, o aproximadamente 0,7, o aproximadamente 0,2, o aproximadamente 0,03 cm³-mm/(m²-atm-día). En algunos aspectos, la permeabilidad de la composición no es más de tres cuartas partes de aquella en ausencia del compuesto de amida. En algunos aspectos, la permeabilidad no es superior a aproximadamente una mitad, una décima parte en algunas realizaciones, una vigesimoquinta parte en otras realizaciones, y no más de una centésima parte de aquella en ausencia del compuesto de amida.

Aunque puede ser preferible desde el punto de vista de la conveniencia del empaquetado y/o de la eficacia de la depuración emplear la presente invención como una parte integral o discreta de la pared del empaquetado, la invención se puede usar también como un componente no integral de un artículo de empaquetado tal como, por ejemplo, un revestimiento de tapón de botella, un inserto de hoja adhesiva o no adhesiva, sellador, sobrecito, inserto de alfombrilla fibrosa o similares.

Además de los artículos aplicables para empaquetar alimentos y bebidas, los artículos para empaquetar otros productos sensibles al oxígeno se pueden beneficiar también de la presente invención. Tales productos incluirían productos farmacéuticos, productos médicos sensibles al oxígeno, metales o productos corrosivos, productos electrónicos y similares.

En un aspecto adicional, la composición se puede usar como una mezcla madre para ser mezclada con un polímero o un componente que contiene un polímero. En dichas composiciones, la concentración del compuesto de amida y el metal de transición será lo suficientemente alto para permitir que el producto mezclado final tenga cantidades adecuadas de estos componentes. La mezcla madre puede contener también una cantidad de este polímero de base con el cual se mezcla la mezcla madre.

La permeabilidad al oxígeno de un artículo se puede mantener durante un periodo de tiempo más largo mediante el almacenamiento del artículo en un envase cerrado herméticamente o en una atmósfera inerte tal como nitrógeno antes de usar con materiales sensibles al oxígeno.

Los artículos se pueden producir por varios métodos conocidos en la técnica. En general, los artículos se preparan mediante métodos de procesamiento por fundición (es decir, una fundición de la composición). Tales procesos incluyen generalmente el moldeo por inyección, el moldeo por estirado y soplado, extrusión, termoconformación, moldeo por soplado por extrusión y (específicamente para estructuras multicapa) coextrusión y laminación usando

capas de unión adhesiva. La orientación, *por ejemplo*, por moldeo por estirado y soplado, del polímero se puede usar con poliésteres de ftalato debido a las ventajas mecánicas conocidas resultantes.

La zona de procesamiento por fundición para producir el artículo puede ser operada en condiciones habituales para producir los artículos previstos, tales como preformas, botellas, bandejas y otros artículos mencionados anteriormente. En un aspecto, tales condiciones son eficaces para procesar la fundición sin aumentar sustancialmente la viscosidad intrínseca de la fundición y que son ineficaces para promover las reacciones de transesterificación. En algunos aspectos preferidos, las condiciones operativas adecuadas eficaces para establecer una mezcla física del polímero de base, componente orgánico oxidable y metal de transición son temperaturas en la zona de procesamiento dentro de un intervalo de aproximadamente 250 °C hasta aproximadamente 300 °C en un tiempo de ciclo total inferior a aproximadamente 6 minutos, y normalmente sin la aplicación de vacío y con una presión positiva que varía de aproximadamente 0 psig (libras de fuerza por pulgada cuadrada de calibre) hasta aproximadamente 900 psig. En algunas realizaciones, el tiempo de permanencia de la fundición sobre el husillo puede variar de aproximadamente 1 a aproximadamente 4 minutos.

Parte experimental

Los siguientes ejemplos se han incluido para proporcionar a los expertos en la materia una divulgación y descripción completas de cómo se elaboran y se evalúan los compuestos, composiciones, artículos, dispositivos y/o métodos reivindicados en el presente documento, y se pretende que sean puramente ejemplares y no se pretende limitar la divulgación. Se han realizado esfuerzos para asegurar la precisión con respecto a los números (*por ejemplo*, cantidades, temperatura, etc.), pero deben tenerse en cuenta algunos errores y desviaciones. Salvo que se indique lo contrario, las partes son partes en peso, la temperatura está en °C o es una temperatura ambiente, y la presión está en o cerca de la atmosférica.

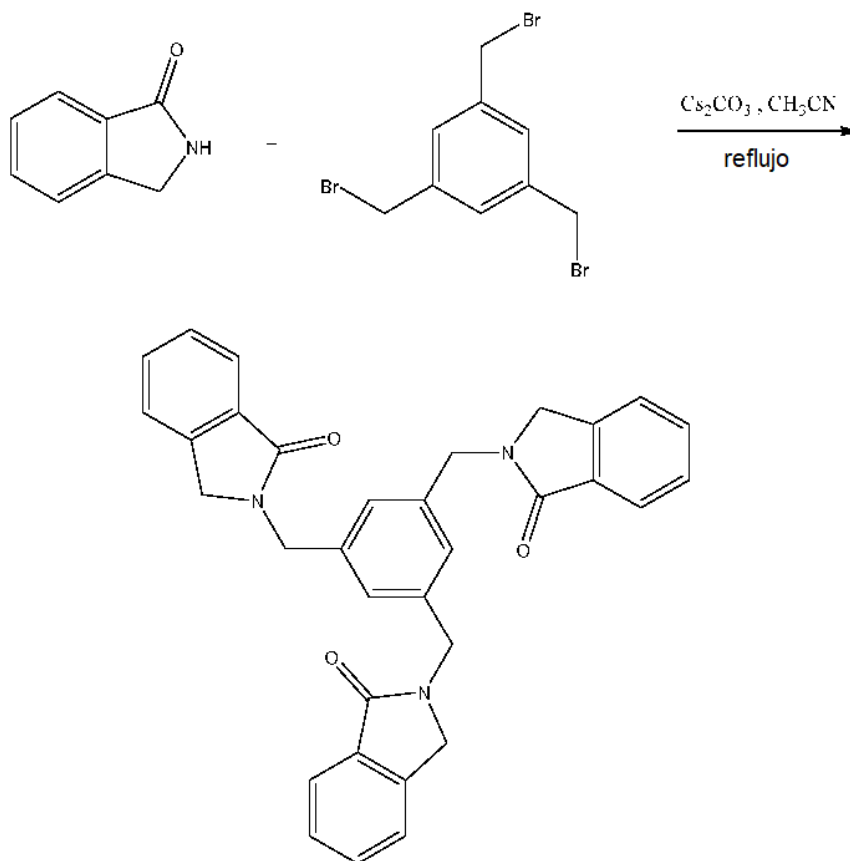
EJEMPLO 1 Síntesis de 1,3,5-Tris(ftalimidinometil)benceno

Una mezcla de 61,1 g (459 mmol) de ftalimidina, 42,9 g (120 mmol) de 1,3,5-tris(bromometil)benceno y 177,1 g (544 mmol) de Cs_2CO_3 en 1 l de CH_3CN se calentó a reflujo durante 19 horas. Después de enfriar a temperatura ambiente, la mezcla de reacción se repartió entre 1 l de EtOAc y 1 l de agua desionizada y las fases se separaron. La fase orgánica se lavó con 802 g de salmuera y se secó sobre 203 g de Na_2SO_4 anhidro. El líquido se decantó del agente de secado y el agente de secado se suspendió en 500 ml de CH_2Cl_2 para secar hasta disolver algún sólido de color pardo que permaneció en el mismo. Las fases orgánicas combinadas se concentraron al vacío para producir 74,1 g de sólido naranja. TLC (EtOAc) mostró que este material era una mezcla del producto deseado y ftalimidina de partida.

El material en bruto se disolvió en 200 ml de CH_2Cl_2 a 35 °C. La mitad de ello se cromatografió sobre 1163 g de gel de sílice (malla 70-230), eluyendo con EtOAc. Después de una primera ejecución de 1,3 l, se cortaron fracciones de 70 X 250 ml. Las fracciones de producto puro se agruparon y se concentraron al vacío. La segunda mitad de la solución en bruto se cromatografió de manera similar y las fracciones del producto se combinaron con aquellas de la primera ejecución. El resultado, después de la recogida y el secado al vacío a peso constante, fue 8,6 g.

La segunda columna se lavó exhaustivamente con EtOAc con la sospecha de que el producto, con solubilidad limitada en EtOAc, hubiera cristalizado sobre la columna y se estuviera eluyendo lentamente hacia afuera. El lavado de la columna con 4,5 l de EtOAc dio otros 4,0 g de producto.

El esquema de reacción se representa a continuación:

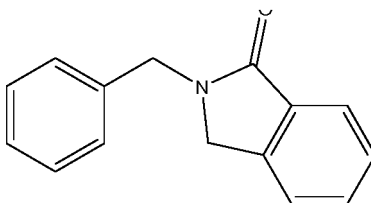


EJEMPLO 2:

- 5 El compuesto, DCX-600 preparado en el Ejemplo 1 {1,3,5-Tris(ftalimidinometil) benceno O [1,3,5-fenilenotris(metileno)]tris-[2,3-dihidro-1H-Isoindol-1-ona]} se mezcló al 1,4 % en peso con resina PET caliente y seca (Vitiva™ de Eastman Chemical Company) y 80 ppm de catalizador de Cobalto (añadido como una mezcla madre basada en PET). Esta mezcla se introdujo en una máquina de moldeo por inyección BOY 22S para moldear placas.
- 10 Para comparar el rendimiento de depuración de O_2 de DCX-600, las placas producidas con DC-300 (LDR = 1,4 % en peso) se moldearon también al mismo tiempo, en condiciones de procesamiento similares. Estas placas se molieron y analizaron para el rendimiento de depuración de O_2 usando Oxysense™. La Figura 1 muestra los datos de Oxysense para el compuesto DCX-600 como función del tiempo. Como se ve en la Figura 1, las placas producidas usando el compuesto DCX-600 en oxígeno depurado por PET a un índice similar a DC-300 a 75 °C.

EJEMPLO 3:

El compuesto 2-bencil-1-isoindolinona (DCX-300-1) se preparó reaccionando bencilamina con ftalida (2-benzofuran-1(3H)-ona. La estructura química de 2-bencil-1-isoindolinona se muestra a continuación:



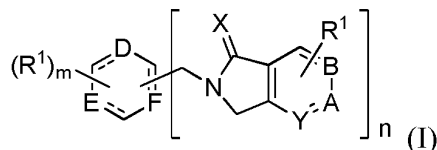
- 20 1,4 % en peso de este compuesto DCX-300-1 (número de lote LP 081710, preparado por Cymer LLC, Decatur, TN) se mezcló con resina Eastlon CB-651S seca (número de lote 0104896, fabricado por Far Eastern Textiles) y 80 ppm de catalizador de cobalto (añadido como una mezcla madre sólida de Neodecanoato de Cobalto en PET). La resina PET se secó en una secadora Piovan a 170 °C durante 4 horas antes de usarse para la mezcla. La mezcla se introdujo en la máquina de moldeo por inyección BOY 22 S para moldear las placas. Las temperaturas del barril de la moldeadora por inyección BOY 22 S durante el moldeo por inyección fue ~ 275 °C para ambas zonas de calentamiento, la presión de inyección fue ~ 700 psi, las temperaturas del calentador de boquilla y del calentador de
- 25

inyección fueron ~ 280 °C. El molde se enfrió con agua. Las placas se ensayaron con respecto a la depuración de oxígeno usando Oxysense™. Los datos Oxysense™ se muestran en la Figura 2. Como se ve en la Figura 2, el depurador bifuncional O₂ (DCX-300-1) depura el O₂ a un índice similar al del depurador de oxígeno DC-300 de Constar International (depurador de O₂ tetra-funcional)

5 Será evidente para los expertos en la materia que se pueden realizar diversos cambios y modificaciones en la presente invención sin apartarse del alcance o espíritu de la invención. Otras realizaciones de la invención serán evidentes para los expertos en la materia a partir de la consideración de la memoria descriptiva y práctica de la invención según se divulga en el presente documento. Se prevé que la memoria descriptiva y ejemplos se
10 consideren únicamente de manera ejemplar, estando indicado un alcance real de la invención en las siguientes reivindicaciones.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto que tiene una estructura de Fórmula I:



en la que el símbolo --- cuando se usa junto con una línea de enlace representa un enlace único o doble;
en la que n es 3, 4, 5 o 6;

en la que m es un número entero de 0 a 6-n;

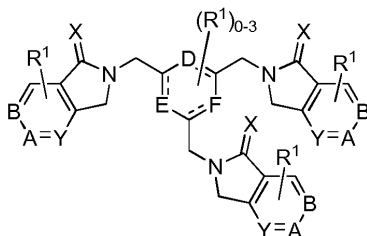
en la que cada X se selecciona independientemente del grupo que consiste en O, S y NH;

en la que cada Y, cada A y cada B se seleccionan independientemente del grupo que consiste en N, CR¹, y CR²;

en la que D, E y F se seleccionan independientemente del grupo que consiste en CH, N, O y S; y

en la que cada R¹ y cada R² se selecciona independientemente del grupo que consiste en H, alquilo, arilo, grupos de extracción de electrones, grupos de liberación de electrones y un metal de transición.

2. El compuesto de la reivindicación 1, que tiene una estructura:



3. Una composición polimérica mezclada por fundición que comprende:

a. un polímero de base;

b. al menos un compuesto que tiene una estructura de Fórmula I según se define en la reivindicación 1 o 2, presente en una cantidad de aproximadamente 0,10 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición; y

c. un metal de transición en un estado de oxidación positivo, el metal presente en una cantidad de aproximadamente 10 ppm a aproximadamente 400 ppm.

4. La composición de la reivindicación 3, en la que la composición tiene un OTR inferior a aproximadamente 0,1 cc/paquete/día.

5. La composición de la reivindicación 3, comprendiendo además una cantidad visualmente eficaz de colorante.

6. La composición de la reivindicación 3, en la que el metal de transición es cobalto.

7. La composición de la reivindicación 6, en la que el metal de transición comprende además zinc.

8. La composición de la reivindicación 3, en la que la concentración de metal de transición es 30 a 150 ppm.

9. La composición de la reivindicación 3, en la que el polímero de base comprende un polímero o copolímero de poliéster, preferentemente tereftalato de polietileno o copolímero del mismo.

10. La composición de la reivindicación 3, en la que el compuesto de amida está presente en una cantidad de aproximadamente 1 a aproximadamente 10 por ciento en peso, preferentemente aproximadamente 1 a aproximadamente 5 por ciento en peso, especialmente aproximadamente 1 a aproximadamente 3 por ciento en peso, basado en el peso de la composición.

11. Un artículo que comprende una composición de un polímero de base; al menos un compuesto que tiene una estructura de Fórmula I según se define en la reivindicación 1 o 2, presente en una cantidad de aproximadamente 0,10 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición; y un metal de transición en un estado de oxidación positiva, el metal presente en una cantidad de aproximadamente 10 ppm a aproximadamente 400 ppm.

12. El artículo de la reivindicación 11, dimensionado como un recipiente o una película.

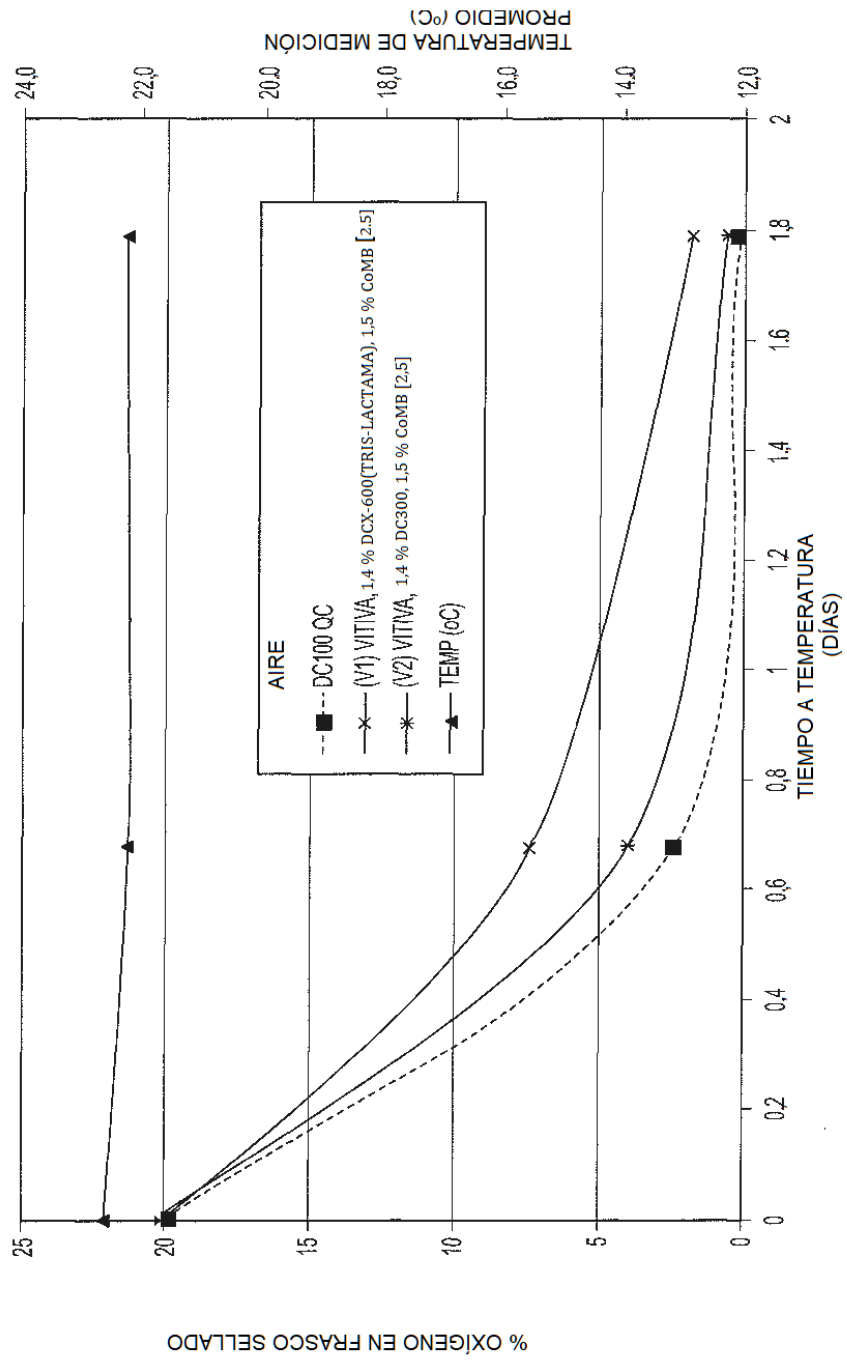


FIG. 1

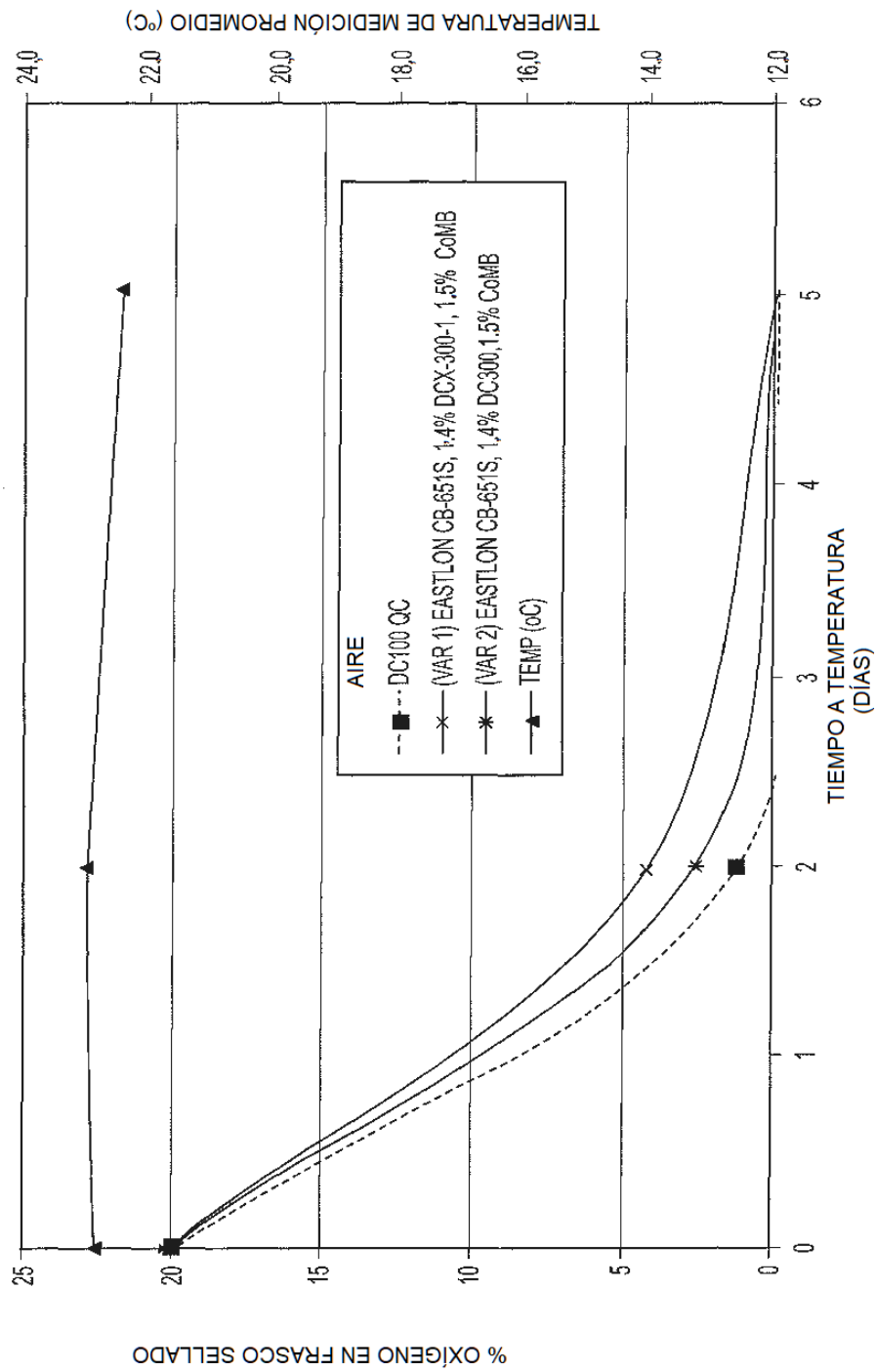


FIG. 2