

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 678 249**

51 Int. Cl.:

C08K 5/1545 (2006.01)

C08K 5/3437 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **12.09.2012 PCT/US2012/054840**

87 Fecha y número de publicación internacional: **21.03.2013 WO13040020**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **12.09.2012 E 12831859 (9)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **06.06.2018 EP 2750890**

54 Título: **Botellas de PET con una barrera monocapa al dióxido de carbono**

30 Prioridad:
12.09.2011 US 201161533449 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
09.08.2018

73 Titular/es:
**PLASTIPAK PACKAGING, INC. (100.0%)
41605 Ann Arbor Road
Plymouth, MI 48170, US**

72 Inventor/es:
DESHPANDE, GIRISH, N.

74 Agente/Representante:
ISERN JARA, Jorge

ES 2 678 249 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

Botellas de PET con una barrera monocapa al dióxido de carbono

5 Referencia cruzada con solicitudes relacionadas

Esta solicitud reclama el beneficio de la prioridad a la Solicitud provisional de los EE.UU. N.º 61/533.449, presentada el 12 de septiembre de 2011, que se incorpora aquí por referencia en su totalidad.

10 Antecedentes

Las bebidas que comprenden dióxido de carbono (bebidas carbonatadas), entre otras, gaseosa, cerveza, y similares, proporcionan una propiedad organoléptica que tiene como resultado una "sensación bucal refrescante" cuando se consumen. Las bebidas carbonatadas, especialmente las bebidas no alcohólicas carbonatadas, deben retener su carbonatación con el fin de no percibirse como sin burbujas. Las bebidas carbonatadas que se envasan en envases que comprenden tereftalato de polietileno (PET) pueden perder su cantidad de carbonatación debido a la difusión del dióxido de carbono a través del envase de PET.

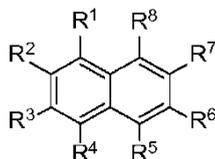
Las soluciones actuales para resolver el problema de la difusión de CO₂ incluyen proporcionar un envase más grueso, sin embargo, esta solución conduce a un aumento del coste en la fabricación del envase. Otra solución es proporcionar una barrera impermeable, por ejemplo, una resina. El coste añadido de la resina, como la modificación del equipo y los procesos para fabricar el contenido de PET hace que esta solución sea prohibitiva en cuanto al precio. La adición de ciertos adyuvantes, es decir, MXD6, puede tener un impacto sobre la transparencia y las propiedades ópticas del envase que comprende el polímero de PET resultante.

Por lo tanto, hay una necesidad de proporcionar un período de conservación mayor para las bebidas carbonatadas, que no implique incrementar el grosor de las paredes de los envases, aplicar un recubrimiento costoso, mezclar ingredientes que impacten en la transparencia de los envases, o cualquier combinación de estas limitaciones.

30 Sumario

En la presente memoria se divulgan composiciones de polímero, que comprenden:

- 35 a) un polímero de base;
b) de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 10 % en peso de un compuesto que tiene la fórmula:



40 en la que R¹ a R⁸ se seleccionan cada uno independientemente de:

- 45 i) hidrógeno;
ii) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
iii) alquenilo C₂-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
iv) alquinilo C₂-C₁₂ lineal o ramificado sustituido o no sustituido;
v) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;
vi) heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido;
vii) heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido;
viii) $-\text{[C}(\text{R}^{10\text{a}})(\text{R}^{10\text{b}})]_y\text{OR}^{11}$;
50 en la que R¹¹ se selecciona de:

- a) -H;
b) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido o haloalquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
55 c) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido o alquilenarilo C₇-C₂₀;
d) heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido; y
e) heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido;

60 ix) $-\text{[C}(\text{R}^{10\text{a}})(\text{R}^{10\text{b}})]_y\text{N}(\text{R}^{12\text{a}})(\text{R}^{12\text{b}})$;
en la que R^{12a} y R^{12b} se seleccionan cada uno independientemente de:

- a) -H;
 b) $-\text{OR}^{13}$;
 R^{13} es hidrógeno o alquilo $\text{C}_1\text{-C}_4$ lineal;
 c) alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
 d) arilo C_6 o C_{10} sustituido o no sustituido;
 e) heterocíclico $\text{C}_1\text{-C}_9$ sustituido o no sustituido;
 f) heteroarilo $\text{C}_1\text{-C}_{11}$ sustituido o no sustituido; y
 g) R^{12a} y R^{12b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

x) $-\text{C}(\text{R}^{10a})(\text{R}^{11b})_y\text{C}(\text{O})\text{R}^{14}$;
 en la que R^{14} se selecciona de:

- a) alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
 b) $-\text{OR}^{15}$;
 en la que R^{15} es hidrógeno, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_4$ lineal sustituido o no sustituido, arilo C_6 o C_{10} sustituido o no sustituido, heterocíclico $\text{C}_1\text{-C}_9$ sustituido o no sustituido, heteroarilo $\text{C}_1\text{-C}_{11}$ sustituido o no sustituido; y
 c) $-\text{N}(\text{R}^{16a})(\text{R}^{16b})$; en la que R^{16a} y R^{16b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; arilo C_6 o C_{10} sustituido o no sustituido; heterocíclico $\text{C}_1\text{-C}_9$ sustituido o no sustituido; heteroarilo $\text{C}_1\text{-C}_{11}$ sustituido o no sustituido; o R^{16a} y R^{16b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

xi) $-\text{C}(\text{R}^{10a})(\text{R}^{10b})_y\text{OC}(\text{O})\text{R}^{17}$;
 en la que R^{17} se selecciona de:

- a) alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; y
 b) $-\text{N}(\text{R}^{18a})(\text{R}^{18b})$;
 R^{18a} y R^{18b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; arilo C_6 o C_{10} sustituido o no sustituido; heterocíclico $\text{C}_1\text{-C}_9$ sustituido o no sustituido; heteroarilo $\text{C}_1\text{-C}_{11}$ sustituido o no sustituido; o R^{18a} y R^{18b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

xii) $-\text{C}(\text{R}^{10a})(\text{R}^{10b})_y\text{NR}^{19}\text{C}(\text{O})\text{R}^{20}$;
 en la que R^{19} se selecciona de:

- a) -H; y
 b) alquilo $\text{C}_1\text{-C}_4$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;

en la que R^{20} se selecciona de:

- a) alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; y
 b) $-\text{N}(\text{R}^{21a})(\text{R}^{21b})$;
 R^{21a} y R^{21b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; arilo C_6 o C_{10} sustituido o no sustituido; heterocíclico $\text{C}_1\text{-C}_9$ sustituido o no sustituido; heteroarilo $\text{C}_1\text{-C}_{11}$ sustituido o no sustituido; o R^{21a} y R^{21b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

xiii) $-\text{C}(\text{R}^{10a})(\text{R}^{10b})_y\text{CN}$;

xiv) $-\text{C}(\text{R}^{10a})(\text{R}^{10b})_y\text{NO}_2$;

xv) $-\text{C}(\text{R}^{10a})(\text{R}^{10b})_y\text{SO}_2\text{R}^{22}$;

R^{22} es hidrógeno, hidroxilo, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_4$ lineal o ramificado sustituido o no sustituido; arilo C_6 , C_{10} , o C_{14} sustituido o no sustituido; alquilenarilo $\text{C}_7\text{-C}_{15}$; heterocíclico $\text{C}_1\text{-C}_9$ sustituido o no sustituido; o heteroarilo $\text{C}_1\text{-C}_{11}$ sustituido o no sustituido; y

xvi) halógeno;

xvii) $-\text{C}(\text{R}^{10a})(\text{R}^{10b})_y(\text{CH}_j\text{X}_k)_h\text{CH}_i\text{X}_k$; en la que X es halógeno, el índice j es un número entero de 0 a 2, el índice k es un número entero de 1 a 3, $j + k = 3$; el índice j' es un número entero de 0 a 2, el índice k' es un número entero de 0 a 2, $j' + k' = 2$; el índice h es de 0 a 5;

R^{10a} y R^{10b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno o alquilo $\text{C}_1\text{-C}_4$; y el índice y es de 0 a 5;

R¹ y R⁸ pueden tomarse conjuntamente para formar un anillo de 5 a 7 miembros que contiene de 3 a 7 átomos de carbono y de 0 a 2 heteroátomos seleccionados de oxígeno, azufre o nitrógeno, en el que uno o más de los átomos de carbono pueden estar sustituidos o no sustituidos o ser una unidad carbonilo.

5 También en la presente memoria se divulgan métodos para preparar las composiciones, artículos que comprenden las composiciones, y métodos para elaborar los artículos.

10 Las ventajas adicionales de la invención se expondrán en parte en la descripción que sigue, y en parte serán obvias a partir de la descripción, o pueden aprenderse por la práctica de la invención. Las ventajas de la invención se materializarán y se conseguirán mediante los elementos y combinaciones particularmente destacadas en las reivindicaciones adjuntas. Se entenderá que, tanto la descripción general precedente como la siguiente descripción detallada, son ilustrativas y explicativas solamente, y no son restrictivas de la invención como se reivindica.

15 Breve descripción de los dibujos

Las figuras adjuntas, las cuales se incorporan y constituyen parte de esta memoria descriptiva, ilustran varios aspectos y, en conjunto con la descripción, sirven para explicar los principios de la invención.

20 La Figura 1 muestra datos representativos de pérdida de CO₂ para las composiciones de polímero divulgadas, como se describe posteriormente en el Ejemplo 1.

La Figura 2(a) muestra datos representativos de pérdida de CO₂ para las composiciones de polímero divulgadas, como se describe posteriormente en el Ejemplo 1.

25 La Figura 2(b) muestra datos representativos de pérdida de CO₂ para las composiciones de polímero divulgadas, como se describe posteriormente en el Ejemplo 1.

La Figura 3(a) muestra datos representativos de pérdida de CO₂ para las composiciones de polímero divulgadas, como se describe posteriormente en el Ejemplo 1.

30 La Figura 3(b) muestra datos representativos de pérdida de CO₂ para las composiciones de polímero divulgadas, como se describe posteriormente en el Ejemplo 1.

35 La Figura 4 muestra datos representativos de pérdida de CO₂ para las composiciones de polímero divulgadas, como se describe posteriormente en el Ejemplo 2.

La Figura 5 muestra datos representativos de pérdida de CO₂ para las composiciones de polímero divulgadas, como se describe posteriormente en el Ejemplo 2.

40 Descripción detallada

La presente invención puede entenderse más fácilmente por la referencia a la siguiente descripción detallada de la invención y los Ejemplos incluidos en la misma.

45 Antes de que los presentes compuestos, composiciones, artículos, sistemas, dispositivos y/o métodos se divulgan y describan, se entenderá que no se limitan a métodos de síntesis específicos, a menos que se especifique de otra manera, o a reactivos particulares, a menos que se especifique de otra manera, dado que tales, por supuesto, pueden variar. También debe entenderse que la terminología usada en la presente memoria es para el propósito de describir aspectos particulares solamente y no pretende ser limitante. Aunque cualquier método y material similar o
50 equivalente a los descritos en la presente memoria pueda utilizarse en la práctica o comprobación de la presente invención, ahora se describen ejemplos de métodos y materiales.

A menos que se defina de otra manera, todos los términos técnicos y científicos utilizados en la presente memoria tienen el mismo significado que comprende comúnmente un experto en la materia a la que pertenece esta invención.
55 Aunque cualquier método y material similar o equivalente a los descritos en la presente memoria pueda utilizarse en la práctica o comprobación de la presente invención, ahora se describen ejemplos de métodos y materiales.

En esta memoria descriptiva y en las reivindicaciones que aparecen a continuación, se hará referencia a una serie de términos, los cuales deberán definirse por tener los siguientes significados:

60 Todos los porcentajes, relaciones y proporciones en la presente memoria son en peso, a menos que se especifique de otra manera. Todas las temperaturas están en grados Celsius (°C) a menos que se especifique de otra manera.

A lo largo de la descripción y reivindicaciones de esta memoria descriptiva, la palabra "comprender" y otras formas de la palabra, tal como "que comprende" y "comprende", significa que incluye, pero no se limita a, y no pretende excluir, por ejemplo, otros aditivos, componentes, números enteros o etapas.

Como se utiliza en la descripción y las reivindicaciones adjuntas, las formas singulares “un”, “una” y “el/la/los/las” incluyen referentes plurales, a menos que el contexto lo dicte claramente de otra manera. De esta manera, por ejemplo, la referencia a “una composición” incluye mezclas de dos o más composiciones semejantes, la referencia a “un ácido fenilsulfámico” incluye mezclas de dos o más ácidos fenilsulfámicos semejantes, la referencia a “el compuesto” incluye mezclas de dos o más compuestos semejantes, y similares.

“Opcional” u “opcionalmente” significa que el evento o circunstancia descrita a continuación puede o puede no ocurrir, y que la descripción incluye casos donde el evento o circunstancia ocurre y casos donde no.

Los intervalos pueden expresarse en la presente memoria como de “aproximadamente” un valor particular y/o a “aproximadamente” otro valor particular. Cuando se expresa tal intervalo, otro aspecto incluye a partir de ése valor particular y/o al otro valor particular. De manera similar, cuando los valores se expresan como aproximaciones, por el uso del antecedente “aproximadamente”, se entenderá que el valor particular forma otro aspecto. Se entenderá además que los criterios de valoración de cada uno de los intervalos son significativos tanto en relación con el otro criterio de valoración, como independientemente del otro criterio de valoración. Se entiende también que hay una serie de valores divulgados en la presente memoria, y que cada valor también se divulga en la presente memoria como “aproximadamente” ese valor particular, además del valor en sí. Por ejemplo, si se divulga el valor “10”, entonces “aproximadamente 10” también se divulga. También se entiende que, cuando se divulga un valor, entonces también se divulgan “menor que o igual a” el valor, “mayor que o igual al valor” e intervalos posibles entre valores, tal como entiende apropiadamente el experto. Por ejemplo, si se divulga el valor “10”, entonces “menor o igual a 10” así como “mayor o igual a 10” también se divulga. También se entiende que, a lo largo de la solicitud, se proporcionan datos en una serie de formatos diferentes, y que estos datos representan criterios de valoración y puntos de inicio, e intervalos para cualquier combinación de los puntos de datos. Por ejemplo, si un punto de datos particular “10” y un punto de datos particular “15” se divulgan, se entenderá que más de, más de o igual a, menos de, menos de o igual a, e igual a 10 y 15 se consideran también divulgados, así como entre 10 y 15. También se entiende que cada unidad entre dos unidades particulares también se divulgan. Por ejemplo, si se divulgan 10 y 15, entonces 11, 12, 13 y 14 también se divulgan.

Como se utiliza en la presente memoria, el término “sustancialmente” significa que el evento o circunstancia descrita a continuación se presenta completamente o que el evento o circunstancia descrita a continuación, se presenta general, típica o aproximadamente. Por ejemplo, cuando la memoria descriptiva divulga que sustancialmente todo un agente, se libera, un experto en la materia relevante entendería fácilmente que el agente no necesita liberarse completamente. Más bien, este término transmite a un experto en la materia relevante que el agente sólo necesita liberarse en la medida en que una cantidad efectiva ya no es retenida.

Como se utiliza en la presente memoria, el término “polímero” se refiere a un compuesto orgánico de peso molecular relativamente alto, natural o sintético, cuya estructura puede representarse por una pequeña unidad repetida, el monómero (por ejemplo, polietileno, caucho, celulosa). Los polímeros sintéticos típicamente se forman por polimerización de adición o condensación de monómeros.

Como se utiliza en la presente memoria, el término “copolímero” se refiere a un polímero formado a partir de dos o más unidades repetitivas diferentes (residuos de monómeros). A modo de ejemplo y sin limitación, un copolímero puede ser un copolímero alternante, un copolímero aleatorio, un copolímero de bloques, o un copolímero de injerto. También se contempla que, en ciertos aspectos, diversos segmentos de bloques de un copolímero de bloques puedan ellos mismos comprender copolímeros.

Como se utiliza en la presente memoria, el término “oligómero” se refiere a un polímero de peso molecular relativamente bajo en el cual el número de unidades repetitivas es 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 repetitivas de aproximadamente dos a aproximadamente diez, por ejemplo, de aproximadamente dos a aproximadamente ocho, de aproximadamente dos a aproximadamente seis, o de aproximadamente dos a aproximadamente cuatro.

Como se utiliza en la presente memoria, la expresión “polímero de estrella” se refiere a una molécula polimérica ramificada en la cual un solo punto de ramificación da lugar a múltiples cadenas o brazos lineales. El único punto de ramificación puede ser un solo resto químico o puede ser una sección altamente reticulada del polímero. En un aspecto, un polímero de estrella puede tener generalmente una forma esférica. En un aspecto adicional, un polímero de estrella puede estar conformado en partículas. Si los brazos son idénticos, se dice que la molécula de polímero de estrella es regular. Si los brazos adyacentes se componen de diferentes subunidades repetitivas, se dice que la molécula de polímero de estrella es irregular.

Como se usa en la presente memoria, la expresión “peso molecular” (MW) se refiere a la masa de una molécula de esa sustancia, respecto a la unidad de masa atómica unificada u (igual a 1/12 de la masa de un átomo de carbono-12).

Como se usa en la presente memoria, la expresión “peso molecular promedio en número” (M_n) se refiere a la media aritmética común de los pesos moleculares de los polímeros individuales. M_n puede determinarse midiendo el peso molecular de n moléculas de polímero, sumando los pesos, y dividiendo entre n . M_n se calcula por:

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

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

Como se utiliza en la presente memoria, la expresión “peso molecular promedio ponderado” (M_w) se refiere a una medida alternativa del peso molecular de un polímero. M_w se calcula por:

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

15 en la que N_i es el número de moléculas de peso molecular M_i . Intuitivamente, si el peso molecular promedio ponderado es w , y se selecciona un monómero aleatorio, entonces el polímero al que pertenece tendrá de promedio un peso de w . El peso molecular promedio ponderado puede determinarse por dispersión de luz, dispersión de neutrones de ángulo pequeño (SANS), dispersión de rayos X, y velocidad de sedimentación.

Como se usan en la presente memoria, los términos “polidispersidad” e “índice de polidispersidad” (PDI) se refieren a la relación entre el promedio ponderado y el promedio en número (M_w/M_n).

25 Como se utiliza en la presente memoria, la expresión “agente compatibilizante” se refiere a una molécula o polímero pequeño que tiene grupos funcionales polares y no polares. Por ejemplo, un éster de ácido graso tiene grupos funcionales polares y no polares.

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

35 Como se utiliza en la presente memoria, la nomenclatura para los compuestos, incluyendo compuestos orgánicos, puede determinarse utilizando las recomendaciones de nombres comunes, IUPAC, IUBMB, o CAS para nomenclatura. Cuando se presentan uno o más atributos estereoquímicos, pueden emplearse las reglas de Cahn-Ingold-Prelog para estereoquímica para designar la prioridad estereoquímica, la especificación *E/Z*, y similares. Un experto en la materia puede constatar fácilmente la estructura de un compuesto si se determina un nombre, ya sea por reducción sistemática de la estructura del compuesto utilizando convenciones de nomenclatura, o por software disponible comercialmente, tal como CHEMDRAW™ (Cambridgesoft Corporation, EE.UU.).

40 La siguiente jerarquía química se utiliza a lo largo de la memoria descriptiva para describir y hacer posible el alcance de la presente divulgación y para destacar particularmente y reivindicar inconfundiblemente las unidades que comprenden los compuestos de la presente divulgación, sin embargo, a menos que se defina de otra manera específicamente, los términos utilizados en la presente memoria son los mismos que los del experto. El término “hidrocarbilo” representa cualquier unidad basada en átomos de carbono (molécula orgánica), conteniendo las unidades opcionalmente uno o más grupos funcionales orgánicos, incluyendo sales que comprenden átomos inorgánicos, entre otros, sales carboxilato, sales de amonio cuaternario. Dentro del significado amplio del término “hidrocarbilo” se encuentran las clases “hidrocarbilo acíclico” e “hidrocarbilo cíclico”, términos que se utilizan para dividir las unidades hidrocarbilo en clases cíclica y no cíclica.

45 50 En lo que se refiere a las siguientes definiciones, las unidades de “hidrocarbilo cíclico” pueden comprender sólo átomos de carbono en el anillo (es decir, anillos carbocíclico y arilo) o pueden comprender uno o más heteroátomos en el anillo (es decir, anillos heterocíclico y heteroarilo). Para los anillos “carbocíclicos” el menor número de átomos de carbono en un anillo es de 3 átomos de carbono; ciclopropilo. Para anillos “arilo” el menor número de átomos de carbono en un anillo es de 6 átomos de carbono; fenilo. Para anillos “heterocíclicos” el menor número de átomos de carbono en un anillo es de 1 átomo de carbono; diazirinilo. El óxido de etileno comprende 2 átomos de carbono y es un heterociclo C_2 . Para anillos “heteroarilo” el menor número de átomos de carbono en un anillo es de 1 átomo de carbono; 1,2,3,4-tetrazolilo. Lo siguiente es una descripción no limitante de los términos “hidrocarbilo acíclico” e “hidrocarbilo cíclico” como se utilizan en la presente memoria.

60

A. Hidrocarbilo acíclico sustituido y no sustituido:

Para los fines de la presente divulgación la expresión "hidrocarbilo acíclico sustituido y no sustituido" abarca 3 categorías de unidades:

- 5 1) alquilo lineal o ramificado, ejemplos no limitativos del cual incluyen, metilo (C₁), etilo (C₂), n-propilo (C₃), iso-propilo (C₃), n-butilo (C₄), sec-butilo (C₄), iso-butilo (C₄), terc-butilo (C₄), y similares; alquilo lineal o ramificado sustituido, ejemplos no limitativos del cual incluyen, hidroximetilo (C₁), clorometilo (C₁), trifluorometilo (C₁), aminometilo (C₁), 1-cloroetilo (C₂), 2-hidroxietilo (C₂), 1,2-difluoroetilo (C₂), 3-carboxipropilo (C₃), y similares.
- 10 2) alqueno lineal o ramificado, ejemplos no limitativos del cual incluyen, etenilo (C₂), 3-propenilo (C₃), 1-propenilo (también 2-metiletenilo) (C₃), isopropenilo (también 2-metileten-2-ilo) (C₃), buten-4-ilo (C₄), y similares; alqueno lineal o ramificado sustituido, ejemplos no limitativos del cual incluyen, 2-cloroetenilo (también 2-clorovinilo) (C₂), 4-hidroxibuten-1-ilo (C₄), 7-hidroxi-7-metiloct-4-en-2-ilo (C₉), 7-hidroxi-7-metiloct-3,5-dien-2-ilo (C₉), y similares.
- 15 3) alquino lineal o ramificado, ejemplos no limitativos del cual incluyen, etinilo (C₂), prop-2-inilo (también propargilo) (C₃), propin-1-ilo (C₃), y 2-metil-hex-4-in-1-ilo (C₇); alquino lineal o ramificado sustituido, ejemplos no limitativos del cual incluyen, 5-hidroxi-5-metilhex-3-inilo (C₇), 6-hidroxi-6-metilhept-3-in-2-ilo (C₈), 5-hidroxi-5-etilhept-3-inilo (C₉), y similares.

B. Hidrocarbilo cíclico sustituido y no sustituido:

Para los fines de la presente divulgación la expresión "hidrocarbilo cíclico sustituido y no sustituido" abarca 5 categorías de unidades:

- 25 1) El término "carbocíclico" se define en la presente memoria como "que abarca anillos que comprenden de 3 a 20 átomos de carbono, en los que los átomos que comprenden dichos anillos se limitan a átomos de carbono y además cada anillo puede estar independientemente sustituido con uno o más restos capaces de sustituir a uno o más átomos de hidrógeno". Los siguientes son ejemplos no limitativos de "anillos carbocíclicos sustituidos y no sustituidos", los cuales abarcan las siguientes categorías de unidades:

- 30 i) anillos carbocíclicos que tienen un único anillo hidrocarbonado sustituido o no sustituido, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen, ciclopropilo (C₃), 2-metilciclopropilo (C₃), ciclopropenilo (C₃), ciclobutilo (C₄), 2,3-dihidroxiciclobutilo (C₄), ciclobutenilo (C₄), ciclopentilo (C₅), ciclopentenilo (C₅), ciclopentadienilo (C₅), ciclohexilo (C₆), ciclohexenilo (C₆), cicloheptilo (C₇), ciclooctanilo (C₈), 2,5-dimetilciclohexilo (C₆), 3,5-diclorociclohexilo (C₆), 4-hidroxiciclohexilo (C₆), y 3,3,5-trimetilciclohex-1-ilo (C₆).
- 35 ii) anillos carbocíclicos que tienen dos o más anillos hidrocarbonados condensados sustituidos o no sustituidos, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen, octahidropentalenilo (C₈), octahidro-1H-indenilo (C₉), 3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-3H-inden-4-ilo (C₉), decahidroazulenilo (C₁₀).
- 40 iii) anillos carbocíclicos que son anillos hidrocarbonados bicíclicos sustituidos o no sustituidos, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen, biciclo-[2.1.1]hexanilo, biciclo[2.2.1]heptanilo, biciclo[3.1.1]heptanilo, 1,3-dimetil[2.2.1]heptan-2-ilo, biciclo[2.2.2]octanilo y biciclo[3.3.3]undecanilo.

- 45 2) El término "arilo" se define en la presente memoria como "unidades que comprenden al menos un anillo de fenilo o naftilo y en el que no hay anillos heteroarilo ni heterocíclico condensados con el anillo fenilo o naftilo y además cada anillo puede estar independientemente sustituido con uno o más restos capaces de reemplazar a uno o más átomos de hidrógeno". Los siguientes son ejemplos no limitativos de "anillos arilo sustituidos y no sustituidos" que abarcan las siguientes categorías de unidades:

- 50 i) anillos arilo C₆ o C₁₀ sustituidos o no sustituidos; anillos fenilo y naftilo independientemente de si están sustituidos o no sustituidos, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen, fenilo (C₆), naftilen-1-ilo (C₁₀), naftilen-2-ilo (C₁₀), 4-fluorofenilo (C₆), 2-hidroxifenilo (C₆), 3-metilfenilo (C₆), 2-amino-4-fluorofenilo (C₆), 2-(N,N-dietilamino)fenilo (C₆), 2-cianofenilo (C₆), 2,6-di-terc-butilfenilo (C₆), 3-metoxifenilo (C₆), 8-hidroxinaftilen-2-ilo (C₁₀), 4,5-dimetoxinaftilen-1-ilo (C₁₀), y 6-ciano-naftilen-1-ilo (C₁₀).
- 55 ii) anillos arilo C₆ o C₁₀ condensados con 1 o 2 anillos saturados para formar sistemas de anillo C₈-C₂₀, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen, biciclo[4.2.0]octa-1,3,5-trienilo (C₈), e indanilo (C₉).

- 60 3) Los términos "heterocíclico" y/o "heterociclo" se definen en la presente memoria como "unidades que comprenden uno o más anillos que tienen de 3 a 20 átomos en los que al menos un átomo en al menos un anillo es un heteroátomo seleccionado de nitrógeno (N), oxígeno (O), o azufre (S), o mezclas de N, O y S, y en el que además el anillo que contiene el heteroátomo tampoco es un anillo aromático. "Los siguientes son ejemplos no limitativos de "anillos heterocíclicos sustituidos y no sustituidos" que abarcan las siguientes categorías de unidades:

- 65 i) unidades heterocíclicas que tienen un único anillo que contiene uno o más heteroátomos, ejemplos no limitativos de las cuales incluyen, diazirinilo (C₁), aziridinilo (C₂), urazolilo (C₂), azetidino (C₃), pirazolidinilo (C₃), imidazolidinilo (C₃), oxazolidinilo (C₃), isoxazolinilo (C₃), tiazolidinilo (C₃), isotiazolinilo (C₃), oxatiazolidinonilo (C₃), oxazolidinonilo (C₃), hidantoinilo (C₃), tetrahidrofuranilo (C₄), pirrolidinilo (C₄),

morfolinilo (C₄), piperazinilo (C₄), piperidinilo (C₄), dihidropiranilo (C₅), tetrahidropiranilo (C₅), piperidin-2-onilo (valerolactam) (C₅), 2,3,4,5-tetrahidro-1H-azepinilo (C₆), 2,3-dihidro-1H-indolo (C₈), y 1,2,3,4-tetrahidroquinolina (C₉).

5 ii) unidades heterocíclicas que tienen 2 o más anillos, uno de los cuales es un anillo heterocíclico, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen hexahidro-1H-pirrolizino (C₇), 3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-1H-benzo[d]imidazolilo (C₇), 3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-1H-indolilo (C₈), 1,2,3,4-tetrahidroquinolinilo (C₉), y decahidro-1H-cicloocta[b]pirrolilo (C₁₀).

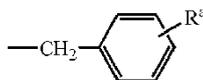
10 4) El término "heteroarilo" se define en la presente memoria como "abarca uno o más anillos que comprenden de 5 a 20 átomos en los que al menos un átomo en al menos un anillo es un heteroátomo seleccionado de nitrógeno (N), oxígeno (O), o azufre (S), o mezclas de N, O y S, y en el que además al menos uno de los anillos que comprende un heteroátomo es un anillo aromático". Los siguientes son ejemplos no limitativos de "anillos heterocíclicos sustituidos y no sustituidos" que abarcan las siguientes categorías de unidades:

15 i) anillos heteroarilo que contienen un único anillo, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen, 1,2,3,4-tetrazolilo (C₁), [1,2,3]triazolilo (C₂), [1,2,4]triazolilo (C₂), triazinilo (C₃), tiazolilo (C₃), 1H-imidazolilo (C₃), oxazolilo (C₃), isoxazolilo (C₃), isotiazolilo (C₃), furanilo (C₄), tiofenilo (C₄), pirimidinilo (C₄), 2-fenilpirimidinilo (C₄), piridinilo (C₅), 3-metilpiridinilo (C₅), y 4-dimetilaminopiridinilo (C₅)

20 ii) anillos heteroarilo que contienen 2 o más anillos condensados uno de los cuales es un anillo heteroarilo, ejemplos no limitativos de los cuales incluyen: 7H-purinilo (C₅), 9H-purinilo (C₅), 6-amino-9H-purinilo (C₅), 5H-pirrol[3,2-d]pirimidinilo (C₆), 7H-pirrol[2,3-d]pirimidinilo (C₆), pirido[2,3-d]pirimidinilo (C₇), 2-fenilbenzo[d]tiazolilo (C₇), 1H-indolilo (C₈), 4,5,6,7-tetrahidro-1-H-indolilo (C₈), quinoxalinilo (C₈), 5-metilquinoxalinilo (C₈), quinazolinilo (C₈), quinolinilo (C₉), 8-hidroxi-quinolinilo (C₉) e isoquinolinilo (C₉).

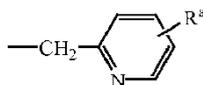
25 5) unidades hidrocarbilo cíclico C₁-C₆ unidas (independientemente de si son unidades carbocíclico, unidades arilo C₆ o C₁₀, unidades heterocíclico o unidades heteroarilo), que están conectadas a otro resto, unidad o núcleo de la molécula mediante una unidad alquileo C₁-C₆. Ejemplos no limitativos de unidades hidrocarbilo cíclico unidas incluyen bencilo C₁-(C₆) que tiene la fórmula:

30



35 en la que R^a es opcionalmente una o más sustituciones independientemente seleccionadas de hidrógeno. Otros ejemplos incluyen unidades arilo, entre otras, (2-hidroxifenil)hexil C₆-(C₆); naftalen-2-ilmetil C₁-(C₁₀), 4-fluorobencil C₁-(C₆), 2-(3-hidroxifenil)etil C₂-(C₆), así como unidades alquilencarbocíclicas C₃-C₁₀ sustituidas y no sustituidas, por ejemplo, ciclopropilmetil C₁-(C₃), ciclopentilmetil C₂-(C₅), ciclohexilmetil C₁-(C₆). Incluidas en esta categoría están las unidades alquileo-heteroarilo C₁-C₁₀ sustituidas y no sustituidas, por ejemplo una unidad 2-picolil C₁-(C₆) que tiene la fórmula:

40

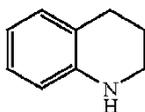


45 en la que R^a es lo mismo que se ha definido anteriormente. Además, las unidades hidrocarbilo cíclico unidas C₁-C₁₂ incluyen unidades alquilheterocíclicas y unidades alquileo-heteroarilo C₁-C₁₀, ejemplos no limitativos de las cuales incluyen aziridinilmetil C₁-(C₂) y oxazol-2-ilmetil C₁-(C₃).

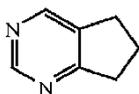
Para los propósitos de la presente divulgación, los anillos carbocíclicos son de C₃ a C₂₀; los anillos arilo son C₆ o C₁₀; los anillos heterocíclicos son de C₁ a C₉; y los anillos heteroarilo son de C₁ a C₉.

50 Para los propósitos de la presente divulgación, y para proporcionar consistencia al definir la presente divulgación, las unidades de anillos condensados, así como anillos espirocíclicos, anillos bicíclicos y similares, que comprenden un solo heteroátomo, se caracterizarán y referirán en la presente memoria como incluidos en la familia cíclica correspondiente al anillo que contiene heteroátomos, aunque el experto puede tener caracterizaciones alternativas. Por ejemplo, la 1,2,3,4-tetrahidroquinolina que tiene la fórmula:

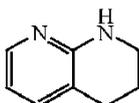
55



se considera para los propósitos de la presente divulgación, una unidad heteroarilo. La 6,7-dihidro-5H-ciclopentapirimidina que tiene la fórmula:



se considera para los propósitos de la presente divulgación, una unidad heteroarilo. Cuando una unidad de anillo condensado contiene heteroátomos tanto en un anillo saturado (anillo heterocíclico) como en un anillo arilo (anillo heteroarilo), el anillo arilo predominará y determinará el tipo de categoría a la cual se asigna el anillo en la presente memoria para los propósitos de describir la invención. Por ejemplo, la 1,2,3,4-tetrahidro-[1,8]naftiridina que tiene la fórmula:



se considera, para los propósitos de la presente divulgación, una unidad heteroarilo.

El término "sustituido" se utiliza de lo largo de la memoria descriptiva. El término "sustituido" se aplica a las unidades descritas en la presente memoria como "unidad o resto sustituido es una unidad o resto hidrocarbilo, ya sea acíclico o cíclico, que tiene uno o más átomos de hidrógeno reemplazados por un sustituyente o varios sustituyentes, como se define en la presente memoria a continuación". Las unidades, cuando sustituyen átomos de hidrógeno, son capaces de reemplazar un átomo de hidrógeno, dos átomos de hidrógeno, o tres átomos de hidrógeno de un resto hidrocarbilo a la vez. Además, estos sustituyentes pueden reemplazar dos átomos de hidrógeno en dos carbonos adyacentes para formar el sustituyente, nuevo resto, o unidad. Por ejemplo, una unidad sustituida que requiere un reemplazo de un solo átomo de hidrógeno incluye halógeno, hidroxilo, y similares. Un reemplazo de dos átomos de hidrógeno incluye carbonilo, oximino, y similares. Un reemplazo de dos átomos de hidrógeno de átomos de carbonos adyacentes incluye epoxi, y similares. El reemplazo de tres hidrógenos incluye ciano, y similares. El término sustituido se utiliza a lo largo de la presente memoria descriptiva para indicar que un resto hidrocarbilo, entre otros, anillo aromático, cadena alquilo; puede tener uno o más de los átomos de hidrógeno reemplazados por un sustituyente. Cuando un resto se describe como "sustituido" se puede reemplazar cualquier número de los átomos de hidrógeno. Por ejemplo, 4-hidroxifenilo es un "anillo carbocíclico aromático sustituido (anillo arilo)", (N,N-dimetil-5-amino)octanilo es una "unidad alquilo lineal C₈ sustituida", 3-guanidinopropilo es una "unidad alquilo lineal C₃ sustituida", y 2-carboxipiridinilo es una "unidad heteroarilo sustituida".

COMPOSICIONES DE POLÍMEROS

En la presente memoria se divulgan composiciones de polímeros, que comprenden:

- a) un polímero de base;
- b) de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 10 % en peso de un absorbente de oxígeno; y
- c) de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 10 % en peso de un compuesto descrito además en la presente memoria a continuación.

POLÍMEROS DE BASE

Las composiciones divulgadas comprenden un polímero de base. El polímero de base puede comprender uno o más homopolímeros o copolímeros, como se describe en la presente memoria. Las composiciones pueden comprender de aproximadamente 80 % a aproximadamente 99,98 % en peso de un polímero de base. En una realización, la composición comprende de aproximadamente 80 % a aproximadamente 99 % en peso de un polímero de base. En otra realización, la composición comprende de aproximadamente 85 % a aproximadamente 99 % en peso de un polímero de base. En una realización adicional, la composición comprende de aproximadamente 90 % a aproximadamente 99,98 % en peso de un polímero de base. En una realización adicional más, la composición comprende de aproximadamente 95 % a aproximadamente 99 % en peso de un polímero de base. En otra realización adicional más, la composición comprende de aproximadamente 95 % a aproximadamente 99,98 % en peso de un polímero de base. Incluso en otra realización adicional más, la composición comprende de aproximadamente 97 % a aproximadamente 99 % en peso de un polímero de base.

Puede utilizarse una diversidad de diferentes polímeros como el polímero de base. Las composiciones divulgadas hacen posible la absorción de oxígeno y, de esta manera, el polímero de base generalmente incluye los polímeros que pueden someterse a oxidación. Por ejemplo, los polímeros que exhiben al menos cierta permeabilidad al oxígeno son útiles con las composiciones divulgadas, por lo menos en cuanto a que las composiciones divulgadas pueden reducir el daño oxidante al polímero.

El polímero de base puede ser un polímero comúnmente utilizado para envasar materiales que incluye polietileno, tal como polietileno de baja densidad, polietileno de muy baja densidad, polietileno de ultra baja densidad, polietileno de alta densidad, y polietileno lineal de baja densidad; poliésteres tales como (PET), (PEN) y sus copolímeros tales

como PET/IP; poli(cloruro de vinilo) (PVC); poli(cloruro de vinilideno) (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. También pueden utilizarse combinaciones de diferentes polímeros de base.

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

10 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. El PET, por ejemplo, puede prepararse a partir de ácido tereftálico y etilenglicol. El PET también puede prepararse utilizando 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-ciclohexandimetanol, 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 estos, y similares.

20 En otro aspecto adicional más, el polímero de base incluye un homopolímero de tereftalato de polietileno y copolímero modificado con uno o más modificadores de ácido policarboxílico en una cantidad acumulativa de menos de aproximadamente 15 % molar, o aproximadamente 10 % molar o menos, o aproximadamente 8 % molar o menos, o uno o más modificadores de compuestos hidroxilo en una cantidad de menos de aproximadamente 60 % molar, o menos de aproximadamente 50 % molar, o menos de aproximadamente 40 % molar, o menos de aproximadamente 15 % molar, o aproximadamente 10 % molar o menos, o aproximadamente 8 % molar o menos y homopolímeros de naftalato de polietileno y copolímeros modificados con una cantidad acumulativa de menos de aproximadamente 15 % molar, o aproximadamente 10 % molar o menos, o aproximadamente 8 % molar o menos, de uno o más modificadores de ácido policarboxílico o modificados con menos de aproximadamente 60 % molar, o menos de aproximadamente 50 % molar, o menos de aproximadamente 40 % molar, o menos de aproximadamente 15 % molar, o aproximadamente 10 % molar o menos, o aproximadamente 8 % molar o menos de uno o más modificadores de compuestos hidroxilo, y combinaciones de los mismos. En algunos aspectos, el polímero de base comprende al menos 90 % molar, 92 % molar o 94 % molar de unidades repetidas de tereftalato de etileno basado en los moles de todas las unidades repetidas en los polímeros de poliéster.

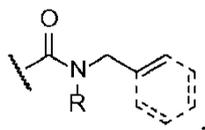
35 Los poliésteres tales como el PET pueden prepararse por procedimientos de polimerización conocidos en la técnica, suficientes para efectuar la esterificación y policondensación. Los procesos fabricación en fase de fusión de poliéster incluyen condensación directa de un ácido dicarboxílico con un diol, opcionalmente en presencia de uno o más catalizadores de esterificación, en la zona de esterificación, seguido por policondensación en las zonas de prepolímero y acabado, en presencia de un catalizador de policondensación; o intercambio de éster habitualmente en presencia de un catalizador de transesterificación en la zona de intercambio de éster, seguido por prepolimerización y polimerización en presencia de un catalizador de policondensación.

ABSORBENTE DE OXÍGENO

45 Las composiciones comprenden de aproximadamente 0,10 % a aproximadamente 10 % en peso del absorbente de oxígeno. En una realización, las composiciones comprenden de aproximadamente 0,5 % a aproximadamente 10 % en peso de un absorbente de oxígeno. En otra realización, las composiciones comprenden de aproximadamente 1 % a aproximadamente 5 % en peso de un absorbente de oxígeno. En una realización adicional, las composiciones comprenden de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 1 % en peso de un absorbente de oxígeno. En una realización adicional, las composiciones comprenden de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 5 % en peso de un absorbente de oxígeno. En otra realización adicional, las composiciones comprenden de aproximadamente 3 % a aproximadamente 10 % en peso de un absorbente de oxígeno. En otra realización adicional más, las composiciones comprenden de aproximadamente 5 % a aproximadamente 10 % en peso de un absorbente de oxígeno. Incluso en otra realización adicional, las composiciones comprenden de aproximadamente 2 % a aproximadamente 7 % en peso de un absorbente de oxígeno.

55 Preferiblemente, el absorbente de oxígeno es un absorbente de oxígeno *N*-alílico o absorbente de oxígeno *N*-bencílico. El absorbente de oxígeno puede funcionar como un absorbente de oxígeno en la composición. La capacidad de absorción de oxígeno del absorbente de oxígeno puede potenciarse por el metal de transición.

60 Los absorbentes de oxígeno *N*-alílicos o *N*-bencílicos tienen la estructura general mostrada a continuación:

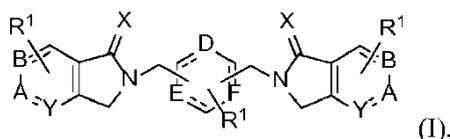


en la que cada --- indica independientemente un enlace covalente opcional.

También se aprecia que un absorbente de oxígeno N-alílico o N-bencílico además puede sustituirse y que más de una funcionalidad amida puede presentarse en un compuesto. En un aspecto, un absorbente de oxígeno N-alílico o N-bencílico puede ser polimérico. En un aspecto adicional, un absorbente de oxígeno N-alílico o N-bencílico puede ser no polimérico.

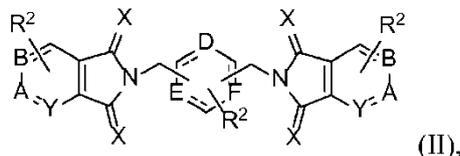
Generalmente, el absorbente de oxígeno está presente en la composición en una cantidad de 0,1 a aproximadamente 10 por ciento en peso. En un aspecto, el absorbente de oxígeno está presente en la composición en una cantidad de 1 a aproximadamente 10 por ciento en peso. En un aspecto adicional, el absorbente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

En un aspecto, el absorbente de oxígeno tiene una estructura de Fórmula I:



en la que cada X se selecciona 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 y CR¹; en la que D, E, y F se seleccionan independientemente del grupo que consiste en CH, N, O, y S; en la que el símbolo --- cuando se utiliza en conjunto con una línea de enlace, representa un enlace sencillo o uno doble; y en la que cada R¹ se selecciona independientemente del grupo que consiste en H, alquilo, arilo, grupos aceptores electrones y grupos donadores de electrones.

En un aspecto adicional, el absorbente de oxígeno tiene una estructura de Fórmula II:



en la que cada X se selecciona 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 y CR²; en la que D, E, y F se seleccionan independientemente del grupo que consiste en CH, N, O, y S; en la que el símbolo --- cuando se utiliza en conjunto con una línea de enlace, representa un enlace sencillo o uno doble; y en la que cada R² se selecciona independientemente del grupo que consiste en H, alquilo, arilo, grupos aceptores electrones y grupos donadores de electrones.

El grupo alquilo de Fórmula (I) o (II) puede ser un grupo hidrocarburo saturado, ramificado o sin ramificar, 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, de 1 a 8, de 1 a 6 átomos de carbono, o de 1 a 4 átomos de carbono, tales 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 puede sustituirse con uno o más grupos, incluyendo, pero sin limitarse a, 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 posteriormente. El grupo alquilo puede halogenarse, lo cual incluye un grupo alquilo que se sustituye con uno o más haluros, por ejemplo, flúor, cloro, bromo o yodo. El grupo alquilo también puede ser un grupo alquilo inferior, el cual es un grupo alquilo que contiene de uno a seis (por ejemplo, de uno a cuatro) átomos de carbono.

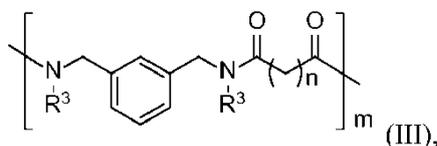
El grupo arilo de Fórmula (I) o (II) puede ser cualquier grupo aromático a base de carbono incluyendo, pero sin limitarse a, benceno, naftaleno, fenilo, bifenilo, etc. El grupo arilo también puede ser heteroarilo, el cual se define como un grupo aromático que tiene al menos un heteroátomo incorporado dentro del anillo del grupo aromático. Ejemplos de heteroátomos incluyen, pero no se limitan a, nitrógeno, oxígeno, azufre y fósforo. El grupo arilo puede estar sustituido o no sustituido. El grupo arilo puede sustituirse con uno o más grupos, incluyendo, pero sin limitarse a, 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 la presente memoria. Un grupo 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 unen entre sí mediante una estructura de anillo condensado, como en el naftaleno, o se unen mediante uno o más enlaces carbono-carbono, como en bifenilo.

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

15 Los absorbentes de oxígeno preferidos de Fórmula (I) y (II) se divulgan en la Publicación de Solicitud de Patente de los Estados Unidos N.º 20080277622, Deshpande et al., "Moléculas absorbentes de oxígeno, artículos que contienen las mismas, y métodos de uso", la cual se incorpora en la presente memoria mediante esta referencia para su enseñanza de absorbentes de oxígeno, su preparación, y su uso como materiales absorbentes de oxígeno.

En un aspecto adicional, el absorbente de oxígeno es polimérico o copolimérico y comprende una estructura de Fórmula III:

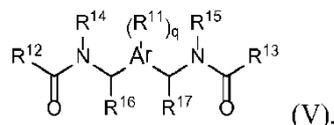
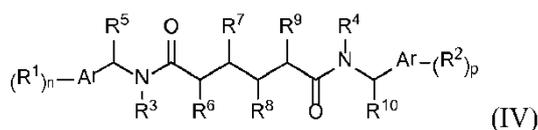


20 en la que m es un número entero positivo mayor de 10; en la que n es un número entero de 1 a 6; y en la que R₃ es H o alquilo C₁-C₄. El grupo alquilo C₁-C₄ puede ser metilo, etilo, propilo, butilo, isopropilo o isobutilo sustituido o no sustituido. En un aspecto adicional, R³ es H. En un aspecto, n es 4. Un ejemplo de un compuesto de Fórmula III es MXD6 (disponible comercialmente, por ejemplo, de Mitsubishi Gas Chemicals de Japón). MXD6 es un polímero producido por la condensación de meta-xilileno diamina y ácido adípico. Los compuestos de Fórmula III pueden obtenerse de fuentes comerciales o prepararse por métodos de polimerización conocidos en la técnica. Los grados adecuados incluyen HB-5299 de EMS Grivory; 6001, 6003, 6007 y 6121 de Mitsubishi Gas and Chemical Company.

30 En un aspecto, el absorbente de oxígeno tiene una estructura de Fórmula I: el absorbente de oxígeno tiene una estructura representada por una fórmula:

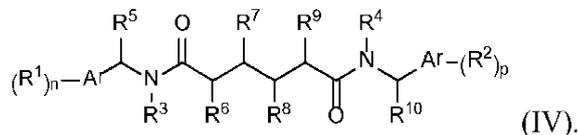


35 en la que x es 0, 1 o 2; en la que E tiene una estructura de Fórmula IV o Fórmula V:

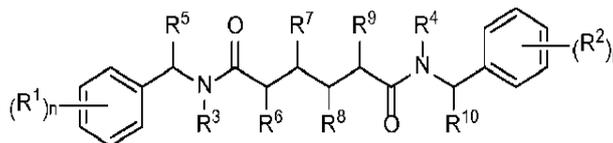


40 en la que L es un grupo de unión de Fórmula -(O-R²¹)_z-O-, -(NH-R²¹)_z-NH-, -(NH-C(=O)R²²)_t-NH-, -NH-R²⁵-NH(C(=O)R²⁶NHR²⁵NH)_u-, -(O-R²³-O-R²⁴-C(=O)-O)_s- donde L está unido a un átomo de carbono de al menos un Ar en la Fórmula IV o donde R¹² y/o R¹³ de Fórmula V es L; en la que Ar es arilo o heteroarilo; en la que R¹, R², y R¹¹ son cada uno de ellos independientemente, H, alquilo C₁-C₁₂, alcoxi C₁-C₆, arilo C₆-C₂₀, hidroxilo, alqueno C₂-C₆, NR¹⁹R²⁰, acetilo, nitro, glicerilo, carbohidrato, -C(=O)H, L, o dos grupos R¹ o R² pueden formar un grupo de Fórmula -O-R¹⁸-O; en la que R³, R⁴, R¹⁴, y R¹⁵ son cada uno de ellos H; R⁵ a R¹⁰ y R¹⁶, y R¹⁷ son cada uno de ellos, independientemente, H o alquilo C₁-C₃; R¹² y R¹³ son cada uno de ellos, independientemente, H, alquilo C₁-C₆, arilo C₆-C₂₀, alcoxi C₁-C₆, o L; en la que R¹⁸ es alquilo C₂-C₆; R¹⁹ y R²⁰ son cada uno de ellos, independientemente, H, alquilo C₁-C₆, o arilo C₆-C₂₀; en la que R², y R²⁴ son cada uno de ellos, independientemente, alquilo C₁-C₆; en la que R²², R²³, R²⁵ y R²⁶ son cada uno de ellos, independientemente, alquilo C₁-C₆ o arilo C₆-C₂₀; en la que n y p son independientemente 0 o un número entero de 1 a 5; en la que q es 0 o un número entero de 1 a 4; en la que s y z son independientemente 1, 2, o 3; y en la que t y u son independientemente 1 o 2.

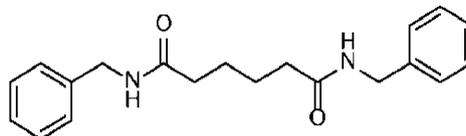
En un aspecto adicional, E tiene una estructura de Fórmula IV:



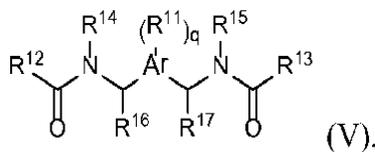
5 En un aspecto adicional, el absorbente de oxígeno tiene una estructura representada por una fórmula:



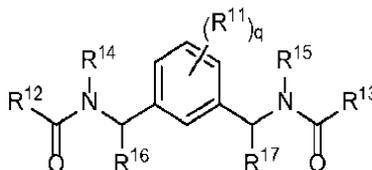
10 En un aspecto adicional, n y p son cada uno 0, 1 o 2 y R¹ y R² son cada uno de ellos independientemente H, alquilo C₁-C₄, hidroxilo, alcoxi C₁-C₃, o carbohidrato. En un aspecto adicional, R¹ y R² son cada uno de ellos independientemente H, metilo, etilo, hidroxilo, metoxi, etoxi o glucosa. En un aspecto adicional, R⁵ a R¹⁰ son cada uno H. En un aspecto adicional, R¹ y R² son cada uno H. En un aspecto adicional, el absorbente de oxígeno tiene una estructura representada por una fórmula:



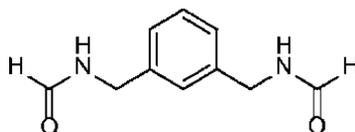
15 En un aspecto adicional, E tiene una estructura de Fórmula V:



20 En un aspecto adicional, el absorbente de oxígeno tiene una estructura representada por una fórmula:



25 En un aspecto adicional, R¹⁶ y R¹⁷ son H. En un aspecto adicional, cada R¹¹ es independientemente H, alquilo C₁-C₄, hidroxilo o alcoxi C₁-C₃, o carbohidrato. En un aspecto adicional, cada R¹¹ es independientemente H, metilo, etilo, hidroxilo, metoxi o etoxi. En un aspecto adicional, el absorbente de oxígeno tiene una estructura representada por una fórmula:



30 Los absorbentes de oxígeno preferidos de Fórmula (IV) y (V) se divulgan en la Publicación de Solicitud de Patente de los Estados Unidos N.º 20060180790, Deshpande et al. "Composiciones absorbentes de oxígeno y envases que comprenden dichas composiciones", la cual se incorpora en la presente memoria mediante esta referencia para su enseñanza de absorbentes de oxígeno, su preparación, y su uso como materiales absorbentes de oxígeno.

35 En otros aspectos, el absorbente de oxígeno puede ser uno cualquiera o más de los absorbentes de oxígeno a base de polibutadieno conocidos convencionalmente. Ejemplos ilustrativos y no limitativos de absorbentes de oxígeno a

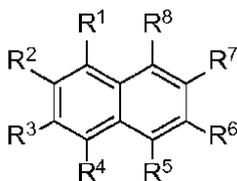
base de polibutadieno comercializados incluyen la línea Amosorb® de absorbentes de oxígeno disponible en ColorMatrix de Berea, Ohio, EE.UU.

COMPUESTOS

En la presente memoria se divulgan compuestos capaces de formularse con uno o más polímeros de base, en el que los compuestos, cuando se formulan con el uno o más polímeros de base, proporcionan una composición de polímero que puede servir como barrera para desacelerar, retardar o detener el flujo de dióxido de carbono o vapor de agua u otro transporte gaseoso/organoléptico a través de la composición de polímero.

Las composiciones comprenden de aproximadamente 0,10 % a aproximadamente 10 % en peso del compuesto. En una realización, las composiciones comprenden de aproximadamente 0,5 % a aproximadamente 10 % en peso de un compuesto. En otra realización, las composiciones comprenden de aproximadamente 1 % a aproximadamente 5 % en peso de un compuesto. En una realización adicional, las composiciones comprenden de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 1 % en peso de un compuesto. En otra realización adicional, las composiciones comprenden de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 5 % en peso de un compuesto. En una realización adicional más, las composiciones comprenden de aproximadamente 3 % a aproximadamente 10 % en peso de un compuesto. En otra realización adicional más, las composiciones comprenden de aproximadamente 5 % a aproximadamente 10 % en peso de un compuesto. Incluso en otra realización, las composiciones comprenden de aproximadamente 2 % a aproximadamente 7 % en peso de un compuesto.

Los compuestos que se pueden formular con el polímero de base tienen la fórmula:



en la que R¹ a R⁸ se seleccionan cada uno independientemente de:

- i) hidrógeno;
 - ii) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
 - iii) alqueno C₂-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
 - iv) alquino C₂-C₁₂ lineal o ramificado sustituido o no sustituido;
 - v) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;
 - vi) heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido;
 - vii) heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido;
 - viii) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{OR}^{11}$;
- en la que R¹¹ se selecciona de:

- a) -H;
- b) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido o haloalquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
- c) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido o alquilenarilo C₇-C₂₀;
- d) heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido; y
- e) heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido;

- ix) $-\text{[C(R}^{12a}\text{)(R}^{12b}\text{)]}_y\text{N(R}^{12a}\text{)(R}^{12b}\text{)}$;
- en la que R^{12a} y R^{12b} se seleccionan cada uno independientemente de:

- a) -H;
- b) -OR¹³;

R¹³ es hidrógeno o alquilo C₁-C₄ lineal;

- c) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
- d) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;
- e) heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido;
- f) heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido; y
- g) R^{12a} y R^{12b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

- x) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{11b}\text{)]}_y\text{C(O)R}^{14}$;

en la que R¹⁴ se selecciona de:

- a) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
b) -OR¹⁵;

5 en la que R¹⁵ es hidrógeno, alquilo C₁-C₄ lineal sustituido o no sustituido, arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido, heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido, heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido; y

- c) -N(R^{16a})(R^{16b});

10 en la que R^{16a} y R^{16b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido; heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido; heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido; o R^{16a} y R^{16b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

- xi) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{OC(O)R}^{17}$;

15 en la que R¹⁷ se selecciona de:

- a) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; y

- b) -N(R^{18a})(R^{18b});

20 R^{18a} y R^{18b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido; heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido; heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido; o R^{18a} y R^{18b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

- xii) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{NR}^{19}\text{C(O)R}^{20}$;

25 en la que R¹⁸ se selecciona de:

- a) -H; y

- b) alquilo C₁-C₄ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;

30

en la que R²⁰ se selecciona de:

- a) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; y

- b) -N(R^{21a})(R^{21b});

35 R^{21a} y R^{21b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido; heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido; heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido; o R^{21a} y R^{21b} se pueden tomar conjuntamente para formar un anillo sustituido o no sustituido que tiene de 3 a 10 átomos de carbono y de 0 a 3 heteroátomos seleccionados de oxígeno, nitrógeno y azufre;

40

- xiii) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{CN}$;

- xiv) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{NO}_2$;

- xv) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{SO}_2\text{R}^{22}$;

45 R²² es hidrógeno, hidroxilo, alquilo C₁-C₄ lineal o ramificado sustituido o no sustituido; arilo C₆, C₁₀, o C₁₄ sustituido o no sustituido; alquilenarilo C₇-C₁₅; heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido; o heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido; y

- xvi) halógeno;

xvii) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y(\text{CH}_j\text{X}_k)_h\text{CH}_j\text{X}_k$; en la que X es halógeno, el índice j es un número entero de 0 a 2, el índice k es un número entero de 1 a 3, j + k = 3; el índice j' es un número entero de 0 a 2, el índice k' es un número entero de 0 a 2, j' + k' = 2; el índice h es de 0 a 5;

50

R^{10a} y R^{10b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno o alquilo C₁-C₄; y

el índice y es de 0 a 5;

R¹ y R⁸ pueden tomarse conjuntamente para formar un anillo de 5 a 7 miembros que contiene de 3 a 7 átomos de carbono y de 0 a 2 heteroátomos seleccionados de oxígeno, azufre o nitrógeno, en el que uno o más de los átomos de carbono pueden estar sustituidos o no sustituidos o ser una unidad carbonilo.

55

Como se ha descrito anteriormente en la presente memoria, las diversas unidades que comprenden R¹ a R⁸ pueden estar sustituidas por una o más unidades independientemente seleccionadas de:

- 60 i) alquilo, alqueno y alquino C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico;
ii) alcoxi, alquenoiloxi y alquinoiloxi C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico;
iii) haloalquilo, haloalquenoilo y haloalquinoilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico;
iv) arilo C₆ o C₁₀;
v) alquilenarilo C₆ o C₁₀;
65 vi) anillos heterocíclicos C₁-C₉;
vii) anillos heteroarilo C₁-C₉;

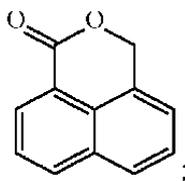
- viii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zOR^{101}$.
- ix) $-(CR^{102a}R^{102b})_zC(O)R^{101}$.
- x) $-(CR^{102a}R^{102b})_zC(O)OR^{101}$.
- xi) $-(CR^{102a}R^{102b})_zC(O)N(R^{101})_2$;
- xii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zN(R^{101})_2$;
- xiii) halógeno;
- xiv) $-(CR^{102a}R^{102b})_zCN$;
- xv) $-(CR^{102a}R^{102b})_zNO_2$;
- xvi) CH_2X_k ; en la que X es halógeno, el índice j es un número entero de 0 a 2, $j + k = 3$; por ejemplo,
- xvii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zSR^{101}$.
- xviii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zSO_2R^{101}$ y
- xix) $-(CR^{102a}R^{102b})_zSO_3R^{101}$;

en la que cada R^{101} es independientemente hidrógeno, alquilo C_1-C_6 lineal, ramificado o cíclico, sustituido o no sustituido, fenilo, bencilo, heterocíclico o heteroarilo; o dos unidades R^{101} pueden tomarse conjuntamente para formar un anillo que comprende 3-7 átomos; R^{102a} y R^{102b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno o alquilo C_1-C_4 lineal o ramificado; el índice z es de 0 a 4.

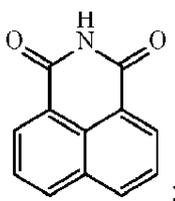
Un aspecto de la presente divulgación se refiere a compuestos en los que R^1 y R^8 pueden tomarse conjuntamente para formar un anillo de 5 a 7 miembros que contiene de 3 a 7 átomos de carbono y de 0 a 2 heteroátomos seleccionados de oxígeno, azufre o nitrógeno, en los que uno o más de los átomos de carbono pueden estar sustituidos o no sustituidos o ser una unidad carbonilo.

Una realización de este aspecto se refiere a compuestos en los que R^1 y R^8 se toman conjuntamente para formar un anillo de 6 miembros, por ejemplo, compuestos seleccionados de:

- i) benzo[de]isocromen-1(3H)-ona que tiene la fórmula:



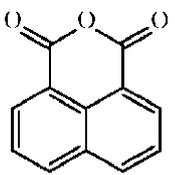
- ii) 1H-benzo[de]isoquinolin-1,3(2H)-diona que tiene la fórmula:



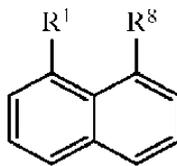
- iii) 2,3-dihidro-1H-benzo[de]isoquinolin-1-ona que tiene la fórmula:



- y
- iv) benzo[de]-isocromen-1,3-diona que tiene la fórmula:



Otro aspecto de la presente divulgación en lo que se refiere a los compuestos, incluye compuestos que tienen la fórmula:



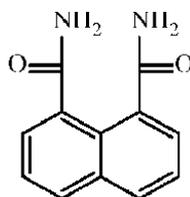
5

en la que R^1 y R^8 son cada uno de ellos independientemente:

- i) hidrógeno o
- ii) $-C(O)R^{14}$,

10

en la que R^{14} es $-OR^{15}$ o $-N(R^{16a})(R^{16b})$; R^{15} es hidrógeno o metilo; R^{16a} y R^{16b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno o metilo. Un ejemplo no limitativo de este aspecto es la naftalen-1,8-dicarboxiamida que tiene la fórmula



15

Por ejemplo, si un compuesto benzo[de]-isocromen-1,3-diona (anhídrido 1,8-naftálico) se añade al PET, el tamaño molecular de la benzo[de]-isocromen-1,3-diona (anhídrido 1,8-Naftálico) es justo más pequeño que el volumen libre de PET a temperatura ambiente. Una resina de PET típica utilizada en botellas tiene un peso molecular de ~28.000. El volumen libre de PET a temperatura ambiente es de alrededor 1301 (Angstrom)³ (Referencia: Polyakova, A, et.al., Journal of Polymer Science: Parte B: Polymer Physics, Vol 39, páginas 1889-1899, año 2001). El volumen molecular de la benzo[de]-isocromen-1,3-diona (anhídrido 1,8-naftálico) y de la 1*H*-benzo[de]isoquinolin-1,3(2*H*)-diona (1,8-naftalimida) es 872 (Angstrom)³ y 889 (Angstrom)³ (Referencia: Lieh Nguyen Shok and G. A. Gol'der, Traducido de Zhurnal Strukturnoi Khimii, Vol. 11, N.º 5, páginas 939-940, Septiembre-Octubre 1970). Como se observa a partir de las cifras de volumen molecular, está claro que las moléculas de benzo[de]-isocromen-1,3-diona (anhídrido 1,8-naftálico) y de 1*H*-benzo[de]isoquinolin-1,3(2*H*)-diona (1,8-naftalimida) pueden ajustarse dentro del volumen libre de las cadenas individuales de PET y reducir el volumen libre del PET hasta en un 68 %. Esta reducción en el volumen libre debido a la incorporación de los aditivos descritos anteriormente incrementa la distancia de salto para la difusión de CO₂ a través del PET, lo que reduce la tasa de permeación de CO₂ e incrementa el período de conservación de las botellas de bebidas no alcohólicas carbonatadas (CSD) y de cerveza.

30

Existen diversos métodos para elaborar la composición. En un aspecto, la composición puede elaborarse mezclando el polímero de base con el absorbente de oxígeno y el compuesto. En otro aspecto, la composición puede elaborarse mezclando el polímero de base con el compuesto. En algunos aspectos, el polímero de base, el absorbente de oxígeno y el compuesto se mezclan por volteado en una tolva. Otros ingredientes opcionales pueden añadirse durante este proceso de mezclado o añadirse a la mezcla después del mezclado anteriormente mencionado o a un componente individual antes de la etapa de mezclado anteriormente mencionada.

35

Cuando se desea el procesamiento por fusión para la composición, la composición también puede elaborarse añadiendo cada ingrediente por separado y mezclando los ingredientes justo antes del procesamiento por fusión de la composición para formar un artículo. En algunas realizaciones, el mezclado puede ser justo antes de la zona de proceso por fusión. En otras realizaciones, pueden mezclarse previamente uno o más ingredientes en una etapa separada antes de reunir todos los ingredientes.

40

En algunos aspectos, el compuesto puede añadirse puro o en un vehículo (tales como líquido o cera) a una extrusora u otro dispositivo para fabricar el artículo, o el compuesto puede estar presente en un concentrado o vehículo con el absorbente de oxígeno, en un concentrado o vehículo con el polímero de base, o en un concentrado o vehículo con una combinación polímero de base/absorbente de oxígeno. Es deseable que la adición del compuesto no incremente sustancialmente la viscosidad intrínseca de la masa fundida en la zona de procesamiento por fusión. Por lo tanto, los compuestos pueden añadirse en dos o más etapas, tal como una vez durante la fase de fusión para la producción del polímero de base y nuevamente una vez más a la zona de fusión para elaborar el artículo.

45

50

La mezcla de masa fundida de polímero de base, absorbente de oxígeno y compuesto también puede prepararse añadiendo los componentes en la garganta de una máquina de moldeo por inyección que: (i) produce una preforma

55

que puede moldearse por soplado y estirado en la forma del envase, (ii) produce una película que puede orientarse en una película de envasado, (iii) produce una hoja que puede termoconformarse en una bandeja para alimentos, o (iv) produce un envase moldeado por inyección. La sección de mezclado de la extrusora debe ser de un diseño que produzca una combinación homogénea. Tales etapas de proceso funcionan bien para formar botellas de bebidas no alcohólicas carbonatadas, agua o cerveza, películas de envasado y bandejas termoconformadas. La presente invención puede emplearse en cualquiera de los procesos convencionales conocidos para producir un envase, película, bandeja, u otro artículo polimérico que puede beneficiarse de la absorción de oxígeno.

ARTÍCULOS

A partir de las composiciones divulgadas pueden prepararse diversos artículos. Por lo tanto, los artículos preparados a partir de las composiciones también tendrán la composición presente en el artículo. Los artículos adecuados incluyen contenedores y películas, tales como películas de hojas flexibles, bolsas flexibles, sacos, envases semirrígidos y rígidos tales como botellas (por ejemplo, botellas de PET) o combinaciones de los mismos. Las películas y bolsas flexibles típicas incluyen las utilizadas para envasar diversos productos alimenticios y pueden estar constituidas por uno o una gran variedad de capas para formar el material de envasado tipo película o bolsa en general. Las composiciones divulgadas pueden utilizarse en una, algunas o todas las capas de tal material de envasado.

Los artículos específicos incluyen preformas, envases y películas para el envasado de alimento, bebidas, cosméticos, productos farmacéuticos y productos para el cuidado personal, donde se necesita una alta barrera contra el dióxido de carbono o humedad u organoléptica. Ejemplos de envases de bebidas son botellas para contener agua y bebidas no alcohólicas carbonatadas, y la invención es particularmente útil en aplicaciones de botellas que contienen zumos, bebidas para deportistas, cerveza o cualquier otra bebida donde la pérdida de dióxido de carbono afecta de manera perjudicial el sabor, aroma, rendimiento (por ejemplo, degradación de vitaminas). Las composiciones también pueden ser útiles como hoja para termoconformado en envases rígidos y películas para estructuras flexibles (para suministrar una barrera organoléptica y contra humedad). Los envases rígidos incluyen bandejas y cubiertas para alimentos. Las composiciones también pueden utilizarse en la elaboración de envases para cosméticos y envases para productos farmacéuticos o dispositivos médicos.

Otros artículos adecuados incluyen artículos rígidos o semirrígidos que incluyen plástico, tales como los utilizados para zumos, bebidas no alcohólicas, así como bandejas o vasos termoconformados que normalmente tienen grosores en el intervalo de 100 a 1000 micrómetros. Las paredes de tales artículos pueden comprender capas únicas o múltiples de materiales. El artículo también puede tener la forma de una botella o lata, o una corona, tapa, revestimiento de corona o tapa, plastisol o junta (si la parte es de PET). Como revestimiento, la composición puede extruirse como una película junto con el propio artículo rígido, por ejemplo, por coextrusión, recubrimiento por extrusión, o un proceso de laminación por extrusión, con el fin de formar el revestimiento *in situ* durante la producción del artículo; o en otra alternativa puede adherirse por calor y/o presión, mediante un adhesivo, o mediante cualquier otro método adecuado (siempre y cuando el revestimiento esté constituido por PET).

Además de los artículos aplicables para envasar alimentos y bebidas, los artículos para envasar otros productos sensibles a dióxido de carbono también pueden beneficiarse de la presente invención. Tales productos pueden incluir el envasado en atmósfera modificada de frutas y verduras, dispositivos médicos y similares.

En un aspecto adicional, la composición puede utilizarse como mezcla básica para combinarse con un polímero o un componente que contiene polímero. En tales composiciones, la concentración del compuesto será suficientemente alta para hacer posible que el producto combinado final tenga cantidades adecuadas de estos componentes. La mezcla básica también puede contener una cantidad del polímero de base con el cual se combina la mezcla básica.

Los artículos pueden producirse mediante diversos métodos conocidos en la técnica. Generalmente, los artículos se preparan por métodos de procesamiento por fusión (es decir, una fusión de la composición). Tales procesos generalmente incluyen moldeo por inyección, moldeo por soplado y estirado, extrusión, termoconformado, moldeo por soplado y extrusión, y (específicamente para estructuras de capas múltiples) coextrusión y laminación utilizando capas de unión con adhesivo. La orientación, por ejemplo, por moldeo por soplado y estirado, del polímero puede utilizarse con poliésteres de ftalato debido a las ventajas mecánicas conocidas que resultan.

La zona de procesamiento por fusión para producir el artículo puede operarse bajo condiciones habituales efectivas para elaborar los artículos previstos, tales como preformas, botellas, bandejas, y otros artículos mencionados anteriormente. En un aspecto, tales condiciones son efectivas para procesar la masa fundida sin incrementar sustancialmente la viscosidad intrínseca de la masa fundida y son ineficaces en promover reacciones de transesterificación. En algunos aspectos preferidos, las condiciones de operación adecuadas efectivas para establecer una combinación física del polímero de base, componente orgánico oxidable y metal de transición son temperaturas en la zona de procesamiento por fusión dentro de un intervalo de aproximadamente 250 °C a aproximadamente 300 °C en un tiempo de ciclo total de menos de aproximadamente 6 minutos, y generalmente sin la aplicación de vacío y a una presión positiva que varía de aproximadamente 101,32 kPa (kilopascales) a

aproximadamente 6306,60 kPa. En algunas realizaciones, el tiempo de permanencia de la masa fundida en el tornillo puede variar de aproximadamente 1 a aproximadamente 6 minutos.

EJEMPLO 1

Una preforma de tereftalato de polietileno de 21,6 gramos que comprende compuestos como los divulgados en la presente memoria se preparó en una máquina de moldeo por inyección de 2 cavidades Husky LX 160 en condiciones de inyección estándar. La siguiente tabla (Tabla 1) compara los ejemplos de acuerdo con la presente divulgación con muestras que comprenden los compuestos divulgados y una muestra en la que la cafeína sustituye a los compuestos divulgados.

Tabla 1

Prueba N.º	PET ^{1,2}	Cafeína	benzo[de]-isocromen-1,3-diona	benzo[de]isoquinolin-1,3-diona
6821-1	Parastar 7000™	--	--	--
6696-2	Parastar 7000™	5 %	--	--
6696-4	Parastar 7000™	--	2.5 %	--
6696-3	Parastar 7000™	--	--	2.5 %
6821-2	Parastar 7000™	10 %	--	--
6821-4	Parastar 7000™	--	5 %	--
6821-3	Parastar 7000™	--	--	5 %

Parastar 7000 es una resina de PET comercializada, disponible en Eastman Chemical Co., Kingsport, Tennessee, EE.UU.

Las preformas se soplaron en un envase de 354,882 ml para bebida no alcohólica carbonatada (CSD) en la máquina de moldeo por soplado SBO 2/3 de Sidel. Las botellas de CSD de 354,882 ml se probaron a continuación para determinar la retención de CO₂ utilizando el Quantiperm Model 504 (fabricado por Quantiperm, LLC). Este instrumento permite la medición directa en tiempo real de la pérdida de CO₂ de botellas de plástico. Antes de probar, las botellas se llenan con agua carbonatada hasta 4,2 volúmenes de gas de CO₂ durante aproximadamente una semana en la fase de preacondicionamiento. Después de finalizar la fase de preacondicionamiento, el flujo de CO₂ a través de la pared de la botella está a una tasa sustancialmente constante. El instrumento Quantiperm mide esta tasa de pérdida en estado de equilibrio de forma rápida y directa. Las tasas de pérdida en tiempo real se combinan con la fuerza de impulso (presión parcial de CO₂ dentro de los envases) para hacer una estimación precisa del período de conservación de los envases carbonatados. Un factor de mejora de barrera (BIF) puede determinarse estableciendo una relación entre el tiempo que transcurre para que se produzca una pérdida de 20 % de CO₂ para el envase control y el envase de prueba.

Las Figuras 1, 2(a), y 2(b) muestran la pérdida de CO₂ en función del tiempo para las variables 6821-1, 6821-2, 6821-3 y 6821-4, medido con el Quantiperm Modelo 504. La adición de 5 % de benzo[de]isocromen-1,3-diona y 5 % de benzo[de]isoquinolin-1,3-diona a PET reduce la tasa de pérdida de CO₂, con un BIF de ~1,67X sobre PET. La variable 6821-2 no ofreció tanta mejora (BIF = 1,1X) como las Variables 6821-3 y 6821-4. Como se observa a partir de las Figuras 3, 6696-2 no ofreció un BIF sustancial sobre PET, pero 6696-3 y 6696-4 mostraron un rendimiento mejorado, con un BIF de ~1,2X.

EJEMPLO 2

Una preforma de PET de 35,5 gramos para una botella de cerveza ale de 473,176 ml que comprende compuestos como se divulgan en la presente memoria se preparó en una máquina de moldeo por inyección de 2 cavidades Husky LX 160 en condiciones de inyección estándar. La siguiente tabla (Tabla 2) compara los ejemplos de acuerdo con la presente divulgación con muestras que comprenden los compuestos divulgados.

Tabla 2

Prueba N.º	PET usado	Aditivo usado	% en peso de aditivo
8139-1 (Control)	Parastar 7000	Ninguno	
8139-2	Parastar 7000	ColorMatrix 80-561-1 Adyuvante del procesamiento	1 %
8139-3	Parastar 7000	ColorMatrix 80-561-1 Adyuvante del procesamiento	0,6 %
8139-4	Parastar 7000	Croda's Atmer 7150	5 %
8139-5	Parastar 7000	Techmer 13350	5 %
8139-6	Parastar 7000	Anhídrido 1,8-naftálico (benzo[de]-isocromen-1,3-diona)	5 %
8139-7	Parastar 7000	Anhídrido 1,8-naftálico	4 %
		ColorMatrix 80-561-1 Adyuvante del procesamiento	0,4 %

Las preformas se soplaron en botellas de cerveza de 473,176 ml en la máquina de moldeo por soplado SBO 2/3 de Sidel. El perfil de la zona de calentamiento de la preforma para SBO 2/3 se muestra en la Tabla 3 a continuación.

Tabla 3

Zona	% de potencia de la lámpara de 2000 W	Distancia de la bombilla desde el borde de soporte de la preforma (mm)	Horno 1 ON/OFF	Horno 2 ON/OFF	Horno 3 ON/OFF
1	98 %	7,5	ON	ON	ON
2	88 %	22,5	ON	ON	ON
3	46 %	37,5	OFF	ON	OFF
4	40 %	52,5	ON	ON	OFF
5	45 %	67,5	OFF	ON	ON
6	45 %	82,5	OFF	OFF	ON
7	51 %	97,5	ON	ON	ON

5 Las preformas se soplaron en un molde frío a 12,77 °C usando una barra elástica de 12 mm de diámetro, presión de aire de 40 bar y a una velocidad de la máquina de -1500 botellas/hora. El secado con calor de la preforma (mostrado en la Tabla 3) dio como resultado una INT de 39,44 °C cuando se mide con un termómetro infrarrojo apuntado a la zona 3 de la preforma que sale de la zona de calentamiento.

10 Las botellas de cerveza de 473,176 ml se prueban a continuación para determinar la retención de CO₂, la tasa de transmisión de O₂ (OTR) y la WVTR (tasa de transmisión de vapor de agua) para determinar el efecto de diversos aditivos sobre la permeación de gas.

15 Una breve descripción del aparato (Quantiperm Model 504) utilizado para medir la tasa de transmisión de CO₂ se muestra en el Ejemplo 1. Las Figuras 4 y 5 muestran la pérdida de CO₂ en función del tiempo para las variables 8139-1, 8139-2, 8139-3, 8139-4, 8139-5, 8139-6 y 8139-7, cuando se mide por Quantiperm Model 504. Para las botellas de cerveza, el período de conservación se determina midiendo el tiempo requerido para una pérdida del 15 % de CO₂ a partir de los niveles de carbonatación inicial. El período de conservación y BIF de CO₂ para diferentes variables se muestra en la Tabla 4 siguiente:

Tabla 4

Ejemplo 2, Prueba N.º	Período de conservación (semanas) medida por Quantiperm	BIF de CO ₂	OTR cc/env/día (medido por Iliop)	BIF de O ₂
8139-1 (CONTROL)	9	1X	0,0309	1X
8139-2	9	1X	0,0285	1,08X
8139-3	11	1,22X	0,0284	1,09X
8139-4	9	1X	0,0307	1X
8139-5	10	1,11	0,0296	1,04X
8139-6	13	1,44X	0,0199	1,55X
8139-7	14	1,56X	0,0208	1,49X

25 La adición de 4 % de benzo[de]isocromen-1,3-diona y 0,4 % de éster de ácido graso tal como el adyuvante del procesamiento ColorMatrix 80-561-1 al PET (Prueba 8139-7) reduce la tasa de pérdida de CO₂, con un BIF de ~1,56X sobre PET. La variable 8139-2 y 8139-4 no ofreció mejora alguna en la barrera contra el CO₂ (lo que indica que el uso de ésteres de ácidos grasos en sí mismos tiene un efecto insignificante sobre la reducción de la permeación de CO₂ a través de la botella de PET. La adición de 5 % de benzo[de]-isocromen-1,3-diona (anhídrido 1,8-naftálico) al PET (Prueba 8139-6) incrementó el período de conservación en 1,44X respecto a la botella de cerveza de PET Control. Este resultado es similar al resultado descrito en el Ejemplo 1.

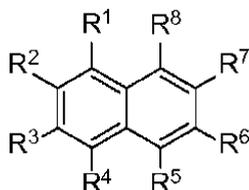
30 Además de las mediciones de la tasa de permeación de CO₂, las botellas del Ejemplo 2 se probaron para determinar las tasas de transmisión de O₂ (OTR) utilizando Iliop. Los datos de OTR muestran que la adición de benzo[de]-isocromen-1,3-diona (anhídrido 1,8-Naftálico) al PET (en la Prueba 8139-6 y 8139-7) dio como resultado una reducción de la OTR en conjunto con una reducción de la TR de CO₂ (como se observa a partir de un incremento en el período de conservación).

35 Aunque realizaciones particulares de la presente divulgación se han ilustrado y descrito, será obvio para los expertos en la materia que varios otros cambios y modificaciones pueden hacerse sin apartarse del espíritu y alcance de la divulgación. Por lo tanto se pretende cubrir, en las reivindicaciones adjuntas, todos los cambios y modificaciones semejantes que se encuentran dentro del alcance de esta divulgación.

REIVINDICACIONES

1. Una composición de polímero, que comprende:

- 5 a) un polímero de base; y
b) de aproximadamente 0,1 % a aproximadamente 10 % en peso de un compuesto que tiene la fórmula:



10 en la que R¹ a R⁸ se seleccionan cada uno independientemente de:

- 15 i) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
ii) alqueno C₂-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
iii) alquino C₂-C₁₂ lineal o ramificado sustituido o no sustituido;
iv) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;
v) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{OR}^{11}$;
en la que R¹¹ se selecciona de:
20 a) -H;
b) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido o haloalquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
c) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido o alquilenarilo C₇-C₂₀;

25 vi) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{N(R}^{12a}\text{)(R}^{12b}\text{)}$;
en la que R^{12a} y R^{12b} se seleccionan cada uno independientemente de:

- 30 a) -H;
b) -OR¹³;
R¹³ es hidrógeno o alquilo C₁-C₄ lineal;
c) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
d) arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;

35 vii) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{11b}\text{)]}_y\text{C(O)R}^{14}$;
en la que R¹⁴ se selecciona de:

- 40 a) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;
b) -OR¹⁵;
en la que R¹⁵ es hidrógeno, alquilo C₁-C₄ lineal sustituido o no sustituido, o arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido y
c) $-\text{N(R}^{16a}\text{)(R}^{16b}\text{)}$;
en la que R^{16a} y R^{16b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido o arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;

45 viii) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{OC(O)R}^{17}$;
en la que R¹⁷ se selecciona de:

- 50 a) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido; y
b) $-\text{N(R}^{18a}\text{)(R}^{18b}\text{)}$;
R^{18a} y R^{18b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido o arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;

55 ix) $-\text{[C(R}^{10a}\text{)(R}^{10b}\text{)]}_y\text{NR}^{19}\text{C(O)R}^{20}$;
en la que R¹⁹ se selecciona de:

- a) -H; y
b) alquilo C₁-C₄ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;

en la que R²⁰ se selecciona de:

- 60 a) alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido;

b) $-N(R^{21a})(R^{21b})$;

R^{21a} y R^{21b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno, alquilo C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico sustituido o no sustituido o arilo C₆ o C₁₀ sustituido o no sustituido;

5 x) $-[C(R^{10a})(R^{10b})]_yCN$;

xi) $-[C(R^{10a})(R^{10b})]_yNO_2$;

xii) $-[C(R^{10a})(R^{10b})]_ySO_2R^{22}$;

R^{22} es hidrógeno, hidroxilo, alquilo C₁-C₄ lineal o ramificado sustituido o no sustituido; arilo C₆, C₁₀, o C₁₄ sustituido o no sustituido; alquilenarilo C₇-C₁₅; heterocíclico C₁-C₉ sustituido o no sustituido; o heteroarilo C₁-C₁₁ sustituido o no sustituido; y

xiii) halógeno;

xiv) $-[C(R^{10a})(R^{10b})]_y(CH_2X_k)_hCH_jX_k$; en la que X es halógeno, el índice j es un número entero de 0 a 2, el índice k es un número entero de 1 a 3, $j + k = 3$; el índice j' es un número entero de 0 a 2, el índice k' es un número entero de 0 a 2, $j' + k' = 2$; el índice h es de 0 a 5;

R^{10a} y R^{10b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno o alquilo C₁-C₄; y

el índice y es de 0 a 5;

R^1 y R^8 pueden tomarse conjuntamente para formar un anillo de 6 miembros que contiene de 4 a 6 átomos de carbono y de 0 a 2 heteroátomos seleccionados de oxígeno, azufre o nitrógeno, en el que uno o más de los átomos de carbono pueden estar sustituidos o no sustituidos o ser una unidad carbonilo.

y en la que R^2 a R^7 son cada uno hidrógeno.

2. Una composición según la reivindicación 1, en la que R^1 y R^8 se seleccionan cada uno de ellos independientemente de:

i) alquilo, alqueno y alquino C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico;

ii) alcoxi, alquenoiloxi y alquinoiloxi C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico;

iii) haloalquilo, haloalqueno y haloalquino C₁-C₁₂ lineal, ramificado o cíclico;

iv) arilo C₆ o C₁₀;

v) alquilenarilo C₆ o C₁₀;

vi) $-(CR^{102a}R^{102b})_zOR^{101}$;

vii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zC(O)R^{101}$;

viii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zC(O)OR^{101}$;

ix) $-(CR^{102a}R^{102b})_zC(O)N(R^{101})_2$;

x) $-(CR^{102a}R^{102b})_zN(R^{101})_2$;

xi) halógeno;

xii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zCN$;

xiii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zNO_2$;

xiv) CH_jX_k ; en la que X es halógeno, el índice j es un número entero de 0 a 2, $j + k = 3$;

xv) $-(CR^{102a}R^{102b})_zSR^{101}$;

xvi) $-(CR^{102a}R^{102b})_zSO_2R^{101}$ y

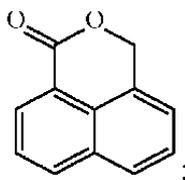
xvii) $-(CR^{102a}R^{102b})_zSO_3R^{101}$;

en la que cada R^{101} es independientemente hidrógeno, alquilo C₁-C₆ lineal, ramificado o cíclico, sustituido o no sustituido, fenilo o bencilo; R^{102a} y R^{102b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno o alquilo C₁-C₄ lineal o ramificado; el índice z es de 0 a 4.

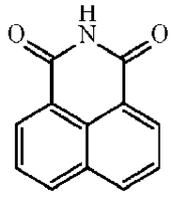
3. La composición según la reivindicación 1, en la que R^1 y R^8 pueden tomarse conjuntamente para formar un anillo de 6 miembros que contiene de 4 a 5 átomos de carbono y 1 o 2 heteroátomos seleccionados de oxígeno, azufre o nitrógeno, en el que uno o más de los átomos de carbono es una unidad carbonilo.

4. La composición según la reivindicación 1, en la que el compuesto se selecciona de:

i) benzo[de]isocromen-1(3H)-ona que tiene la fórmula:

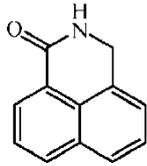


ii) 1H-benzo[de]isoquinolin-1,3(2H)-diona que tiene la fórmula:



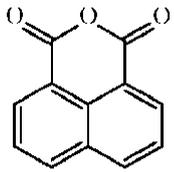
y
iii) 2,3-dihidro-1*H*-benzo[*de*]isoquinolin-1-ona que tiene la fórmula:

5



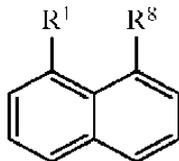
5. La composición según la reivindicación 1, en la que el compuesto es benzo[*de*]-isocromen-1,3-diona que tiene la fórmula:

10



6. La composición según la reivindicación 1, en la que el compuesto tiene la fórmula:

15



en la que R^1 y R^8 son cada uno de ellos independientemente:

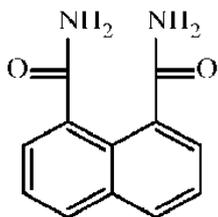
i) $-C(O)R^{14}$;

20

en la que R^{14} es $-OR^{15}$ o $-N(R^{16a})(R^{16b})$; R^{15} es hidrógeno o metilo; R^{16a} y R^{16b} son cada uno de ellos independientemente hidrógeno o metilo.

7. La composición según la reivindicación 1, en la que el compuesto es naftalen-1,8-dicarboxiamida que tiene la fórmula:

25



8. La composición según la reivindicación 1, en la que la composición comprende además un absorbente de oxígeno y en la que el absorbente de oxígeno es una amida *N*-alílica o amida *N*-bencílica.

30

9. La composición según la reivindicación 1, en la que el polímero de base comprende un poliéster.

10. La composición según la reivindicación 1, en la que el polímero de base comprende tereftalato de polietileno o un copolímero del mismo.

35

11. La composición de polímero de la reivindicación 1, en la que el polímero de base comprende polipropileno.
12. Una preforma que comprende la composición según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12.
- 5 13. Un artículo manufacturado que comprende la composición según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12.
14. El artículo según la reivindicación 13, en el que el artículo es un artículo monocapa.

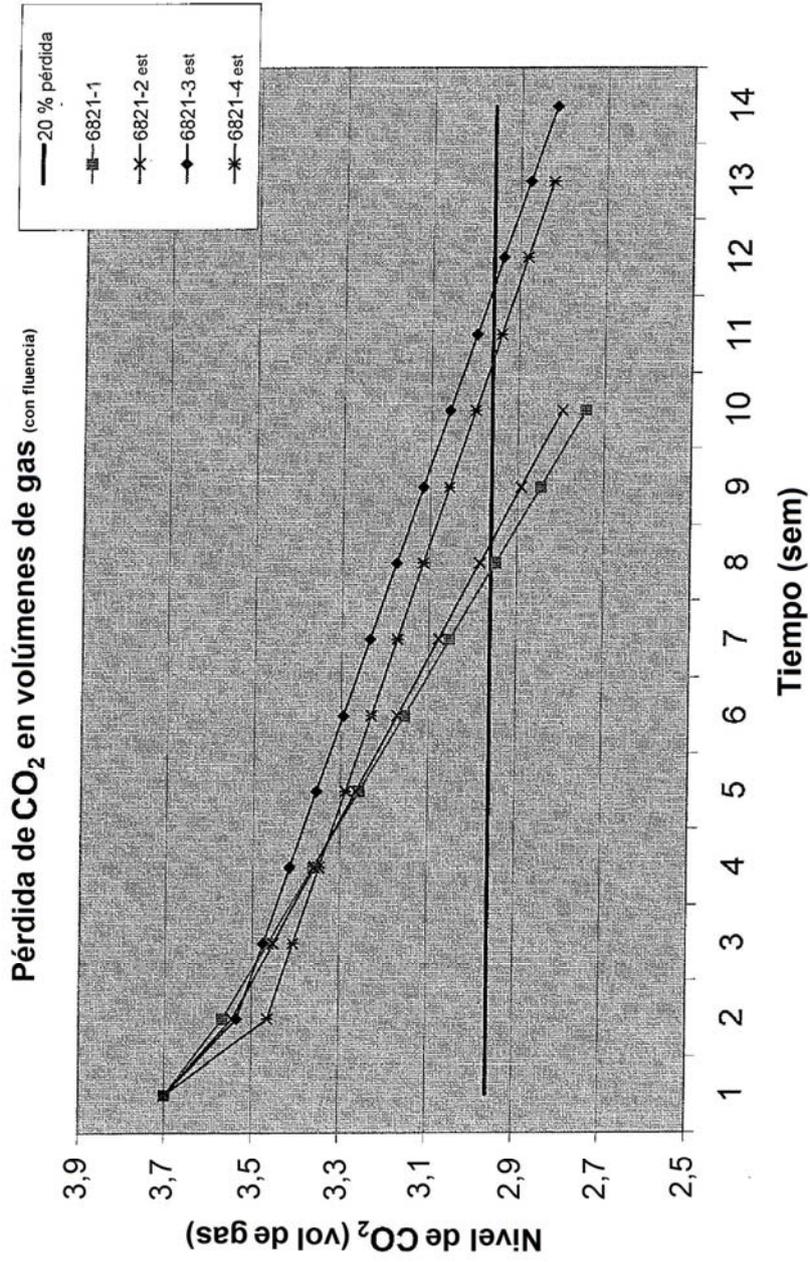


Fig.1

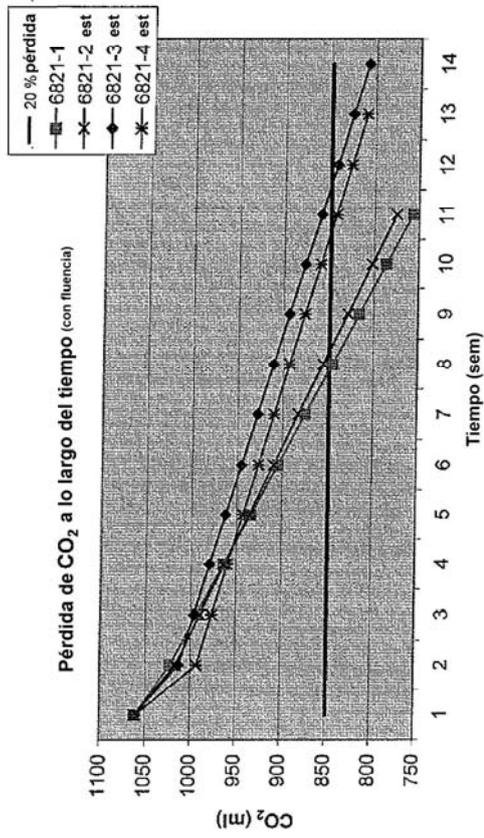


Fig. 2a

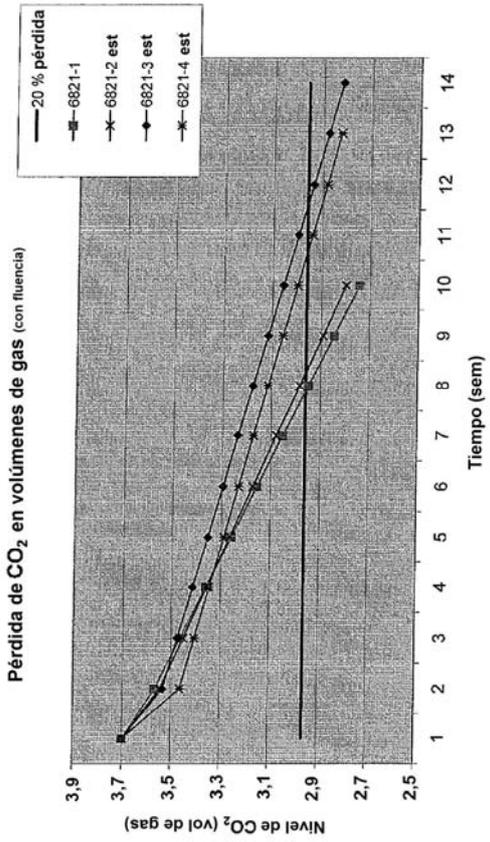


Fig. 2b

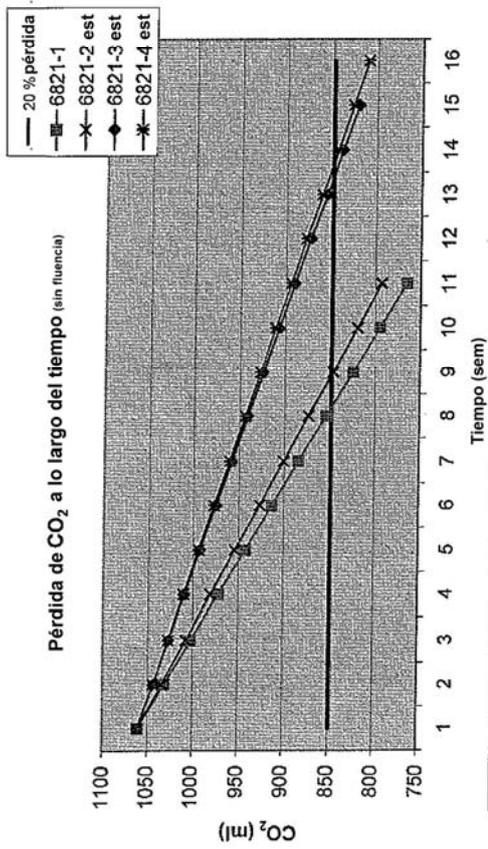


Fig. 3a

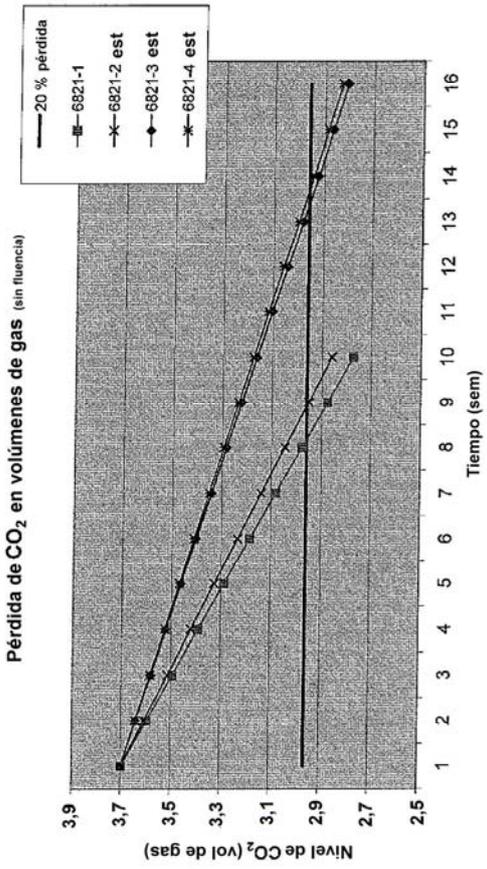


Fig. 3b

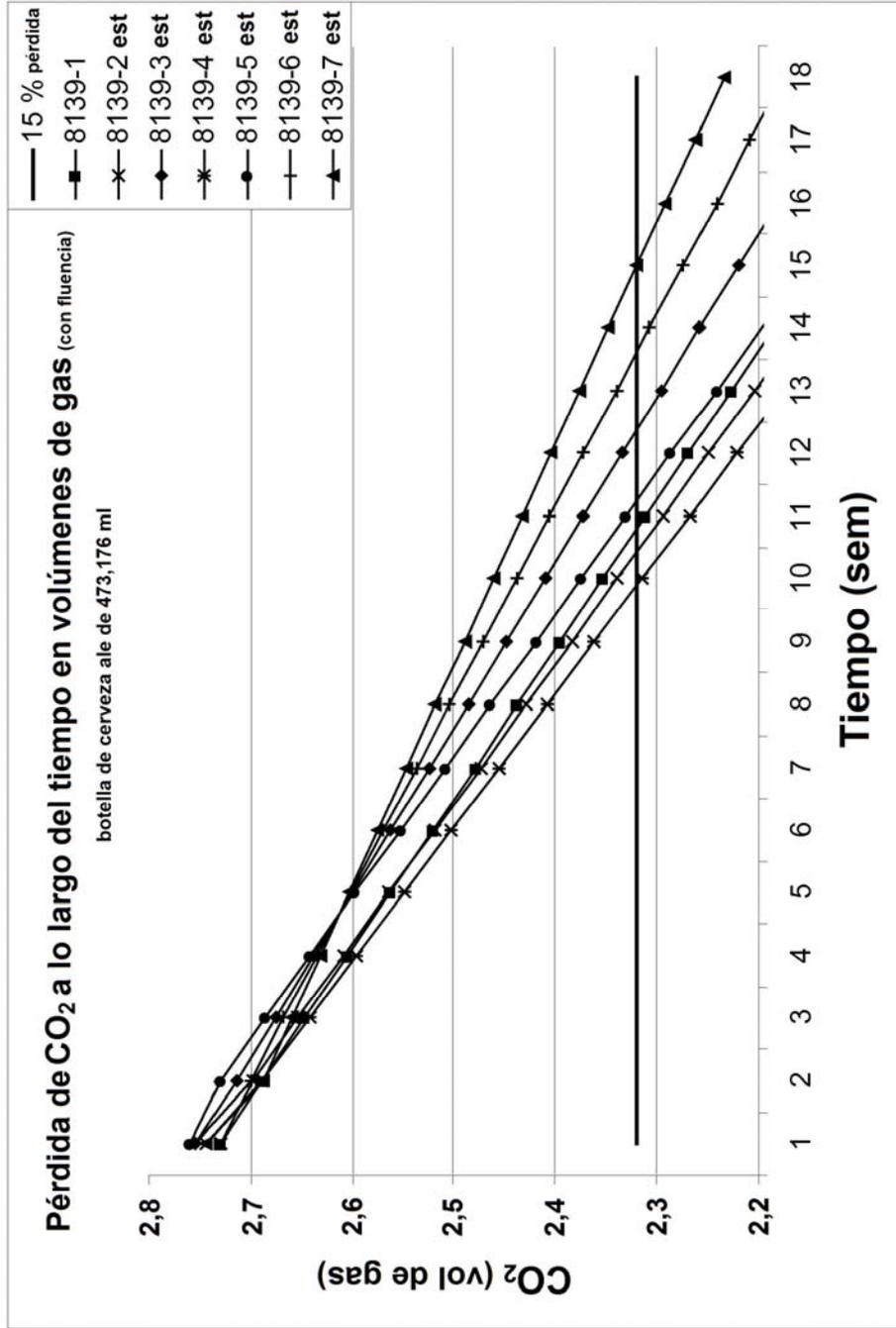


Fig. 4

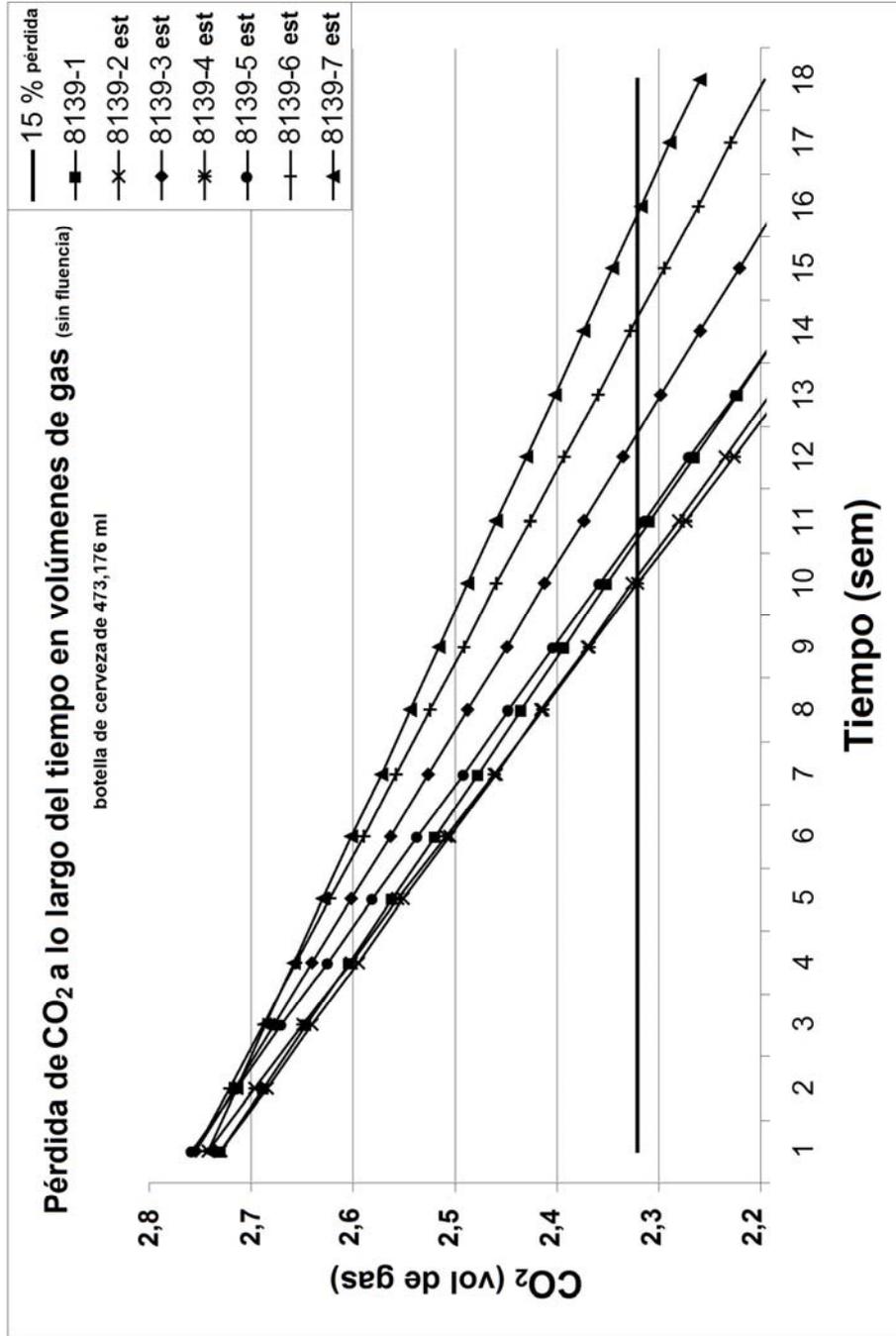


Fig. 5